

МНС

2018

**МОДЕЛИРОВАНИЕ
НЕРАВНОВЕСНЫХ СИСТЕМ – 2018**

**Красноярск
2018**

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

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ СИСТЕМ-2018

МАТЕРИАЛЫ
ДВАДЦАТЬ ПЕРВОГО ВСЕРОССИЙСКОГО СЕМИНАРА
5 – 7 октября 2018 года

Красноярск 2018

УДК 001.126 (571.51) (043)

М 74

Моделирование неравновесных систем: Материалы XXI Всероссийского семинара, / Под ред. М.Г. Садовского; отв. за вып. М.Ю. Сенашова; – Красноярск: Институт вычислительного моделирования Сибирского отделения Российской академии наук, 2018. –145 с.

В сборнике представлены материалы XXI Всероссийского семинара «Моделирование неравновесных систем» (МНС–2018), проходившего в городе Красноярске 5–7 октября 2018 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.

Редакционная коллегия:

Садовский Михаил Георгиевич – ответственный редактор

Сенашова Мария Юрьевна – ответственный за выпуск

© ИВМ СО РАН, 2018

© Коллектив авторов, 2018

ISBN 978-5-906455-13-0



9 785906 455130

РАЗРАБОТКА ПЕРЧАТКИ СУРДОПЕРЕВОДЧИКА

Айзенберг Н.М., Бывшев Е.С., Мальгин Г.Ю.

¹ ИКИТ, ФГАОУ ВО Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск

В настоящее время проблема коммуникации людей с ограниченными возможностями остается весьма актуальной. В мире насчитывается большое количество людей, страдающих нарушением слуха. Стоит отметить, что улучшения качества жизни у слабослышащих людей не наблюдается. При этом, изучение жестовых языков вызывает ряд трудностей, таких, например, как наличие весьма малого количества источников для его познания.

Если говорить о русском жестовом языке (РЖЯ), то для него существует всего лишь несколько словарей, ни один из которых не является полным и лингвистически осмысленным. Грамматика данного языка почти не описана. Систематично изучать русский жестовый язык начали только около десяти лет назад (рис. 1). У людей, использующих язык жестов на территории России, коммуникация с обычными людьми вызывает ряд затруднений. Возникает необходимость создать специальное устройство для предоставления глухонемым людям права на взаимодействие с остальным обществом и шансом установления связи со слышащими [3].

Таким образом, целью работы является разработка устройства, способного осуществлять перевод с РЖЯ на любой другой язык, тем самым оказать помощь в общении людям с ограниченными возможностями. На начальном этапе было решено создать прототип устройства, представляющий из себя перчатку на основе платформы Arduino Nano, оборудованную датчиками сгиба. В качестве датчиков сгиба было решено использовать датчики на основе фоторезистора и светодиода. Основные задачи, которые ставились на начальном этапе исследования:

- а) Изучить накопленный опыт по исследуемой проблеме;
- б) Определить оптимальные средства, необходимые для реализации проекта;
- в) Создать прототип устройства, способного осуществлять перевод с языка жестов;
- г) Проанализировать результаты, полученные в ходе работы.

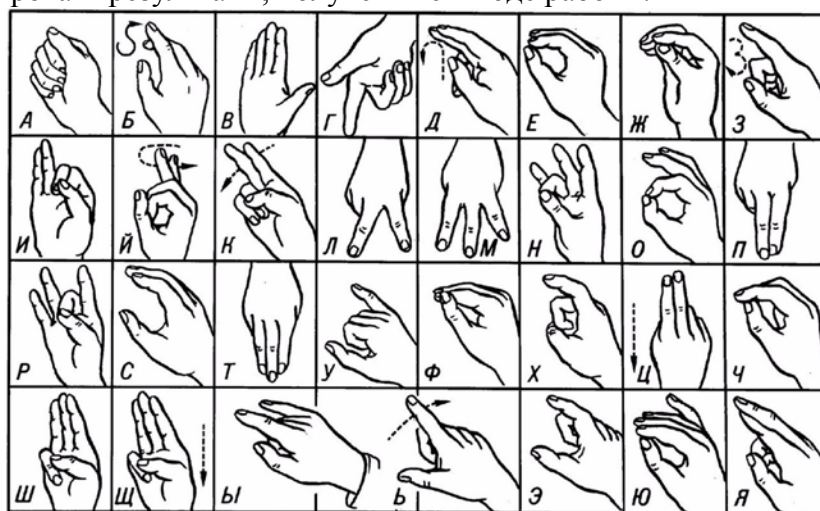


Рисунок 1 - Алфавит русского жестового языка.

Основными направлениями применения перчатки являются:

- улучшение процесса взаимодействия людей с ограниченными возможностями с внешним миром. Подключив устройство, например, к синтезатору речи, данный проект сможет предоставить таким людям возможность участия в общении и даже в публичных выступлениях. Человек сможет общаться с аудиторией на языке жестов, который будет конвертирован в речь.
- взаимодействие с бытовой техникой. Для того, чтобы сделать жизнь человека проще, создаются системы «умного дома», и в таких системах у человека есть возможность управлять техникой с помощью голоса. Наше устройство может быть применено в данной системе, и люди с ограниченными возможностями смогут общаться с техникой с помощью жестов.

В настоящее время существует несколько аналогов данного проекта, одним из которых является «The Language of Glove» (рис. 2).

Устройство основано на тензодатчиках, которые изготовлены из пьезорезистивного композиционного материала, содержащего частицы углерода, встроенные в гибкий материал. Маломощная печатная плата на перчатке преобразует девятизначный ключ в букву, а затем передает сигналы через Bluetooth на смартфон или экран компьютера. Датчики меняют свое электрическое сопротивление при растяжении или изгибе. Это позволяет им кодировать разные буквы алфавита английского языка, основываясь на положениях всех девяти суставов. Прямой или расслабленный сустав закодирован как «0», а согнутый - закодирован как «1». При подписании буквы перчатка создает девятизначный двоичный ключ, который переводится в эту букву. Например, код для буквы «А» (большой палец, все остальные пальцы скручены) равен «011111111», а код «В» (большой палец, все остальные прямые) - «100000000».

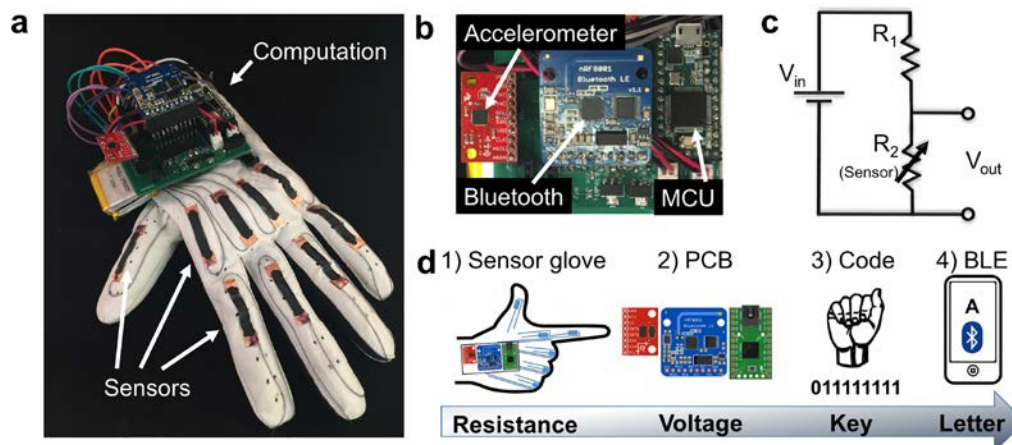


Рисунок 2 - а) Демонстрация устройства «The Language of Glove» б) Модули, используемые в перчатке (Акселерометр, Bluetooth-модуль), а также микроконтроллер в) Схема делителя напряжения д) Последовательность действий, которые выполняются при работе устройства

Перчатка способна преобразовать 26 букв, найденных на американском языке жестов, в текст с помощью смартфона или компьютера. Перчатка была создана с целью улучшения взаимодействия в виртуальной реальности, поскольку его функции распознавания жестов «более интуитивно понятны», чем использование джойстика и других существующих контроллеров. Стоимость такой перчатки составляет до 100 долларов [2].

Из отечественных аналогов можно отметить проект, разработанный российскими энтузиастами для ролевых игр по вселенной всеми известной саги о ведьмаке Анджея Сапковского. Разработка применяется для считывания ограниченного количества жестов, которые представляют собой определенные «магические знаки» по вселенной книги. Перчатка содержит 6 акселерометров для считывания информации о положении 5 пальцев и тыльной стороны руки. По сравнению с тензорезисторами, акселерометры имеют более низкую цену на рынке, потому разработчиками было решено использовать именно эти датчики. Вследствие такого решения в процессе разработки возник ряд проблем, связанных с распознаванием жестов. Одной из проблем является невозможность распознавания акселерометром сгиба пальца; только его положение - направление вверх или вниз [4].

Преимуществом нашего проекта перед вышеперечисленными аналогами является объединение достоинств каждого из них. С одной стороны, устройство будет относительно дешевым, с другой — будет использовать преимущества тензодатчика перед акселерометром.

Для тестирования подключения различных модулей и датчиков была выбрана платформа Arduino в виду своей доступности, простоты в обращении и невысокой цены. В начале тестирование элементов проводились с использованием платы Arduino Uno, однако в дальнейшем было решено использовать платформу Arduino Nano в виду того, что данная плата является полным аналогом Arduino Uno — также работает на чипе ATmega328P, но при этом имеет куда меньшие размеры.

Одним из основных компонентов устройства является датчик сгиба, необходимый для считывания информации о состоянии пальца. При разработке устройства был рассмотрен вариант использования тензодатчика FS-L-0095-103-ST, но из-за высокой стоимости было решено отказаться от использования данного датчика [1].

В виду этого было принято решение создать собственные датчики на основе светодиода и фоторезистора. Причинами данного решения были:

- низкая стоимость элементов;
- доступность элементов;
- минимальное количество элементов в датчике;

Датчик представляет собой силиконовую трубку длиной 12 см. С одной стороны трубки установлен фоторезистор, с другой — светодиод. Для того, чтобы свет от светодиода не рассеивался за пределы силиконовой трубки, а также чтобы исключить влияние окружающего света на фоторезистор, на силиконовую трубку накладывается изолирующая лента, а по краям слой термоусадки.

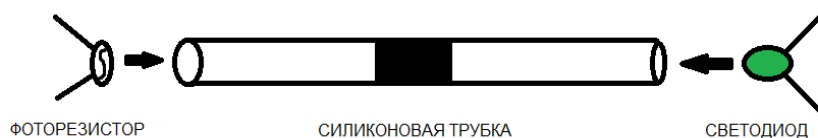


Рис. 3. Структурная схема датчика

Принцип датчика основывается на измерении напряжения на фоторезистивном элементе. При изгибе силиконовой трубки световой поток, излучаемый светодиодом, изменяется, вследствие этого изменяется и сопротивление фоторезистора. Изменение сопротивления регистрируется изменением напряжения на фоторезистивном элементе. Например, при изгибе силиконовой трубки, падающий свет на фоторезистор будет минимальным поэтому его сопротивление будет стремиться к максимальному значению,

но при разгибании, наоборот, оно постепенно будет стремиться к минимальному значению. Посредством этого можно установить диапазоны значений напряжения, которые будут характеризовать состояние пальца [5].

После того как были выбраны компоненты для устройства, был создан прототип устройства, способный распознавать состояния одного из пальцев. Затем для перчатки была написана программа в среде разработки Arduino IDE [1] для считывания замеренных датчиками данных напряжения на фоторезисторе и отображения их на экран монитора.

Прототип устройства состоит из перчатки, силиконовой трубки, которая содержит в себе фоторезистор и светодиод, подключенные к макетной плате посредством соединительных проводов типа «Папа-папа». Для корректной работы основных элементов были введены также дополнительные элементы в виде резисторов. Платформа Arduino Nano подключается к макетной плате, а также (посредством USB-провода) к персональному компьютеру.



Рис. 4. Прототип устройства для распознавания жестов

Конечное устройство определяет четыре положения фаланг пальца:

- а) Палец не согнут;
- б) Средняя фаланга пальца опущена (Состояние пальца: Полусогнут);
- с) Нижняя фаланга пальца опущена (Состояние пальца: 90 градусов по отношению к ладони);
- д) Средняя и нижняя фаланги пальца опущены (Состояние пальца: Согнут);

Визуальное представление положений можно увидеть на рисунке 5.

Таким образом, с помощью датчика конечное устройство производит замеры показаний состояния фоторезистора, а программа в свою очередь производит обработку данных и распознает с помощью диапазонов, в каком из четырех положений находится палец.

Для того, чтобы протестировать полученные датчики, было принято решение; провести ряд экспериментов, в ходе которых были определены прочность датчика, точность измерений, а также определены диапазоны напряжений, соответствующие положениям пальцев на рисунке 5.

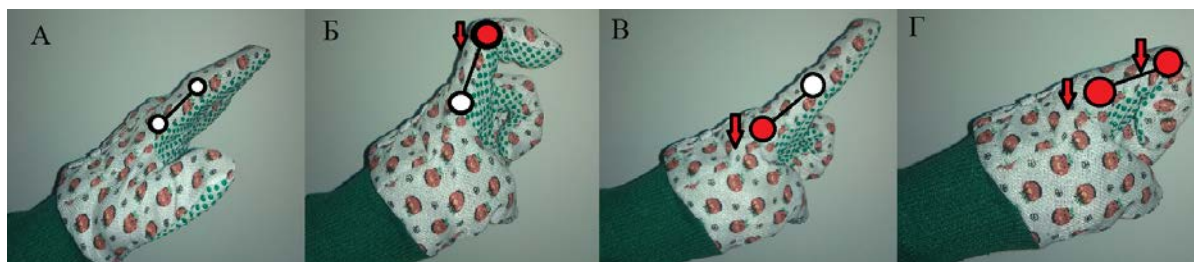


Рис. 5. Положения фаланг пальца А) Палец не согнут; Б) Полусогнут; В) 90 градусов по отношению к ладони; Г) Согнут полностью

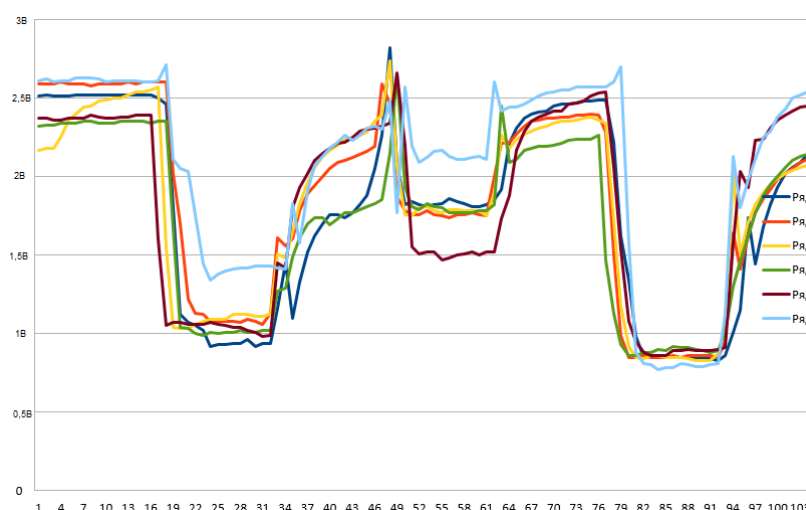


Рис. 6. Визуализация полученных результатов в виде графиков

Для определения диапазонов напряжений была написана программа. Эксперимент состоял из следующих действий: Каждый датчик тестировался по отдельности, устройство надевалось на руку, исходное положение – палец выпрямлен. После начала теста через определенные промежутки времени палец принимает значения, соответствующие рисунку 5. После окончания теста, программа обрабатывала данные и записывала их в файл. Далее эксперимент повторялся, по окончании тестов строились графики и определялись диапазоны напряжений для конкретных состояний фаланг пальца. Ниже представлены результаты шести экспериментов, в ходе которых были получены данные с датчика изгиба.

Полученные данные в ходе проведенных экспериментов были усреднены для того, чтобы определить форму сигнала, соответствующую каждому диапазону значений.

На графике заметно выделяются диапазоны, в которых фиксируется четыре заданных по условию состояния. В первом состоянии (Палец не согнут) напряжение на фоторезисторе близко 2.5В. Во втором состоянии (Палец полусогнут) напряжение равно 1.1В, а в третьем (90 градусов по отношению к ладони) и четвертом (Палец согнут полностью) состояниях оно равно 1.8В и 0.86В соответственно.

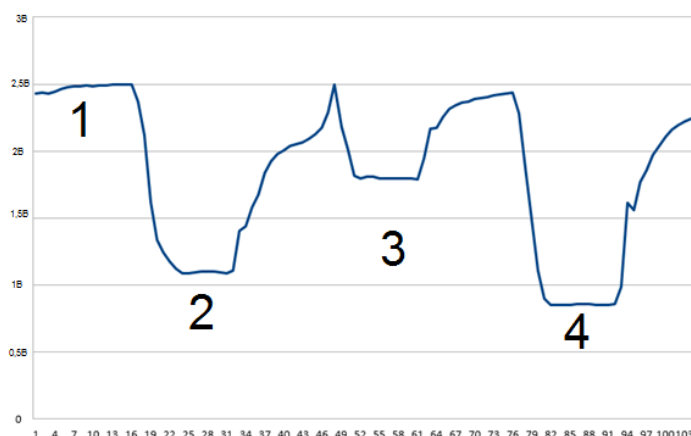


Рис. 7. Усредненные значения в виде графика.

Однако, после проведения ряда необходимых анализов устройства и его компонентов, по результатам было выявлено, что датчики не соответствуют поставленным к ним требованиям по следующим причинам:

- ненадежность;
- быстрый износ компонентов;
- нелинейность показаний.

В ходе тестов случилась поломка нескольких датчиков в виду ненадежности используемых элементов – фоторезистора и светодиода. Так, например, из-за сгоревшего светодиода или фоторезистора невозможно использовать перчатку в полной мере. Также в ходе частого использования устройства, была установлена быстрая изнашиваемость силиконовой трубки.

В виду выявленных недостатков разработанных датчиков, было решено продолжить исследования для поиска оптимального решения проблемы с измерительными компонентами устройства.

Список литературы

- 1.FS-L-0095-103-ST DATASHEET [Электронный ресурс]. — Режим доступа: [URL:http://files.amperka.ru/datasheets/FS-L-0095-103-ST.pdf](http://files.amperka.ru/datasheets/FS-L-0095-103-ST.pdf) (23.07.18)
- 2.The Language of Glove: Wireless gesture decoder with low-power and stretchable hybrid electronics [Электронный ресурс]. — Режим доступа: [URL:http://journals.plos.org/plosone/article?id=10.1371/journal.pone.0179766](http://journals.plos.org/plosone/article?id=10.1371/journal.pone.0179766) (23.07.18)
- 3.Лингвистика жестового языка [Электронный ресурс]. — Режим доступа: [URL:https://nplus1.ru/material/2016/04/13/jesture](https://nplus1.ru/material/2016/04/13/jesture) (23.07.18)
- 4.Магические жесты для электронщика [Электронный ресурс]. — Режим доступа: [URL:https://geektimes.ru/post/289005/](https://geektimes.ru/post/289005/) (23.07.18)
- 5.Фоторезистор. Network of Excellence Robotic & Mechanics [Электронный ресурс]. — Режим доступа: [URL:http://home.roboticlab.eu/ru/examples/sensor/photoresistor](http://home.roboticlab.eu/ru/examples/sensor/photoresistor) (23.07.18)

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОЙ УСТОЙЧИВОСТИ КОГНИТИВНЫХ СИСТЕМ

С.С. Анцыферов, К.Н. Фазилова, К.Е. Русанов
МИРЭА – Российский технологический университет,
Физико-технологический институт, каф. метрологии и стандартизации,
fazilova@mirea.ru

Введение

Одним из важнейших свойств систем когнитивных технологий является свойство неравновесной устойчивости, которое приобретает смысл отличный от традиционных технических систем, поскольку когнитивная система (КС) должна обладать способностью к достаточно быстрому изменению структурного построения, т.е. трансформации своей структуры. Перспективным для исследования устойчивости в самоорганизующихся системах является использование нелинейных математических моделей, отражающих динамику структурных изменений в системе [1-9]. Условия, при которых решается задача об устойчивости нелинейных систем могут быть определены с помощью метода А.М. Ляпунова. Для непрерывных систем метод требует построения скалярной функции Ляпунова и изучения ее свойств, а также свойств ее полной производной во времени.

Цель работы – разработка методологии моделирования неравновесной устойчивости систем когнитивных технологий.

Модель неравновесной устойчивости КС

Как установлено в [10-14], адекватной моделью неравновесной устойчивости КС может служить следующее нелинейное уравнение

$$\dot{H} = \frac{dH}{dt} = KH, \text{ где} \quad (1)$$

$$H = H_1 + H_2 = \left[-\sum_i P_i \log P_i \right] + \left[-\sum_i \sum_j P_{ij} \log P_{ij} \right] - \text{энтропия системы} \quad (2)$$

P_i - вероятность меры информативности i -го элемента;

P_{ij} - вероятность попарного взаимодействия.

$$K = \Delta I - \Delta JH, \quad (3)$$

ΔI – приращение интенсивности информационного потока на входе системы,

ΔJ – приращение интенсивности обработки информационного потока в системе;

ΔJH – параметр, характеризующий управление процессом формирования структуры, показатель функциональной организованности системы.

$$\begin{aligned} \dot{H} &= \Delta IH - \Delta JH^2 = -\Delta J \left(H^2 - \frac{\Delta I}{\Delta J} H \right) = \\ &= -\Delta J \left[H^2 - \frac{\Delta I}{\Delta J} H + \left(\frac{1}{2} \frac{\Delta I}{\Delta J} \right)^2 - \frac{\Delta I^2}{4\Delta J^2} \right] = -\Delta J \left[\left(H - \frac{\Delta I}{2\Delta J} \right)^2 - \frac{\Delta I^2}{4\Delta J^2} \right], \quad (4) \end{aligned}$$

Корни данного уравнения: $H_0 = 0$, $H_1 = \frac{\Delta I}{\Delta J}$.

H_0 и H_1 – точки устойчивости.

Когнитивная система может иметь два фазовых портрета (рис. 1), характеризующих устойчивое (кривая 1) и неустойчивое (кривая 2) функционирование системы.

Кривая 1 соответствует случаю, когда $\Delta I > 0$; $\Delta J > 0$, а кривая 2 случаю, когда $\Delta I < 0$; $\Delta J < 0$.

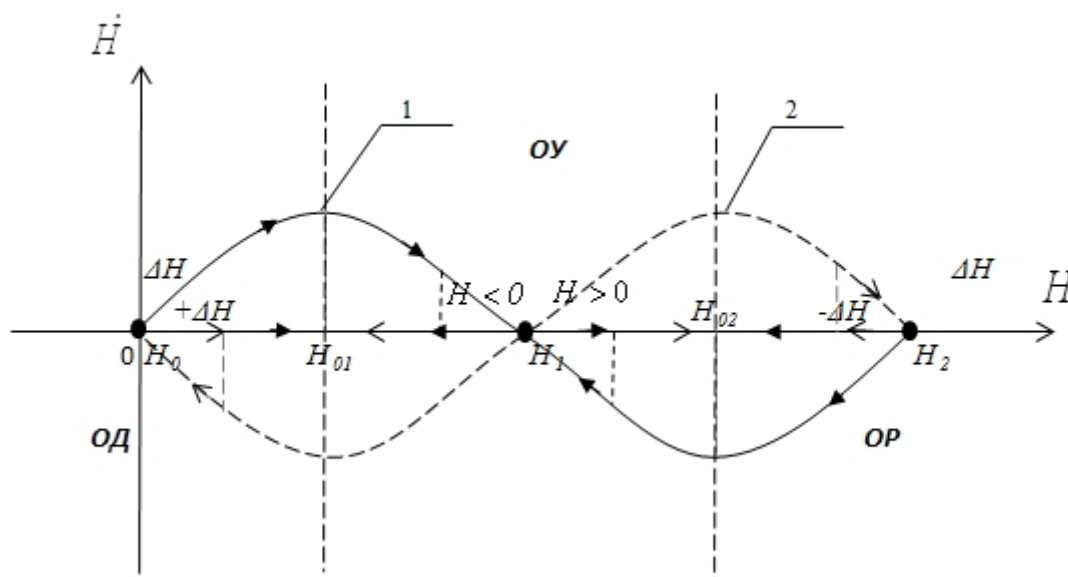


Рис. 1. Фазовые портреты функционирования системы

В случае устойчивого функционирования при $H_0 = 0$ система характеризуется полной определенностью, т.е. однозначно определены функции каждого структурного элемента (СЭ) и связи между ними, что в целом характерно для традиционных технических систем. При возникновении приращения информационного потока, в частности его семантического содержания, за счет реакции СЭ возникает приращение энтропии $+\Delta H$ и система переходит в режим адаптации. Согласно диаграмме устойчивого функционирования происходит «движение» от точки H_0 к H_1 , при этом на отрезке H_0H_{01} действует механизм положительной обратной связи.

В случае неустойчивого функционирования (кривая 2, рис. 1), при H_0 нарастание информационного потока сопровождается действием механизма отрицательной обратной связи, что приводит к возврату в исходную точку H_0 , («отказ» от решения новой задачи). При нахождении системы в точке H_2 также действует механизм отрицательной обратной связи («отказ» от решения каких-либо задач).

Модель функционирования КС

Будем полагать, согласно методам имитационного динамического моделирования (ИДМ) [15], что информационный поток поступает в систему с некоторым темпом RT , причем темп прямо пропорционален текущему уровню знаний (интеллекта) системы. В таком случае система сможет быть описана следующим уравнением:

$$LEV.K = LEV.J + DT.RT.JK, \quad (5)$$

где $LEV.K$ - величина уровня (интеллекта) в момент K ;

где $LEV.J$ - величина уровня (интеллекта) в момент J ;

$RT.JK$ - темп потока, поступающего в систему в течение интервала DT (от момента J до момента K).

Значение темпа на следующий интервал времени KL

$$RT.KL = C.LEV.K \quad (6)$$

Из этого уравнения следует, что темп постоянно увеличивается, т.к. он пропорционален уровню. Приращение уровня на каждый интервал времени DT также уве-

личивается, поскольку оно пропорционально темпу, т.е. значения темпа и уровня экспоненциально растут.

Представим данную ситуацию аналитически:

$$LEV.K - LEV.J = C \cdot DT \cdot LEV.J \quad (7)$$

при $DT \rightarrow 0$ получим:

$$d[LEV(t)] = C \cdot LEV(t) dt, \quad (8)$$

$$\text{или } d[LEV(t)] / LEV(t) = C \cdot dt \quad (9)$$

Заменяя t на τ и интегрируя в пределах от нуля до t , получим

$$\int_{LEV(0)}^{LEV(t)} \frac{d[LEV(\tau)]}{LEV(\tau)} = \int_0^t C d\tau, \quad (10)$$

$$\text{т.е. } LEV(t) = LEV(0) \cdot e^{ct} \quad (11)$$

Кривая экспоненциального роста характеризуется временной постоянной $T = 1/C$ и временем удвоения T_d . Временная постоянная – это время, за которое значение уровня увеличивается в e раз. Она показывает, как быстро происходит рост в системе с положительной обратной связью. Время удвоения T_d – это время, за которое начальное значение уровня увеличивается вдвое. Итак, изменение интеллектуального потенциала на отрезке H_0H_{01} происходит по экспоненте (кривая 1, рис. 2).

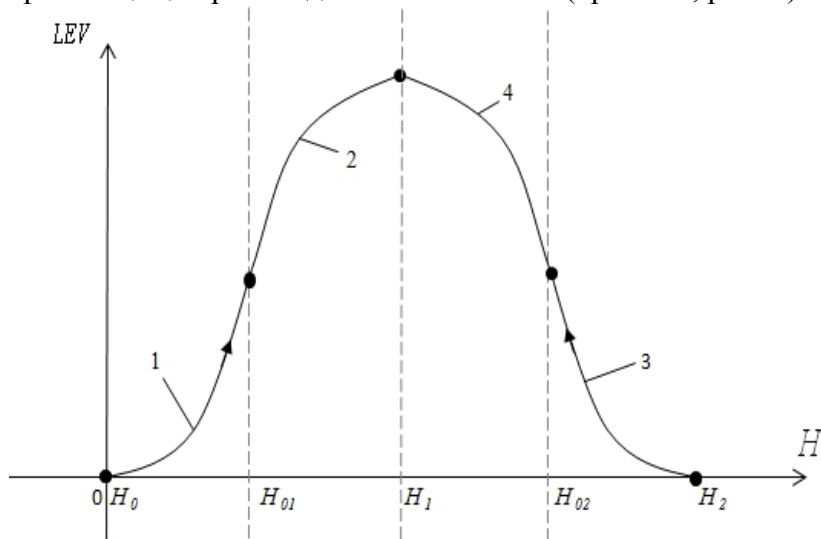


Рис. 2. Изменение интеллектуального потенциала

На отрезке $H_{01}H_1$ действует механизм отрицательной обратной связи.

При действии отрицательной обратной связи темп потока зависит от разности между фактическим и желаемым состоянием системы (потенциальный уровень интеллекта)

$$DISC.K = GL - LEV.K \quad (12)$$

Модель данного состояния описывается следующими уравнениями

$$LEV.K = LEV.J + DT \cdot RT \cdot JK, \quad (13)$$

$$RT.KL = C \cdot DISC.K, \quad (14)$$

$$LEV.K - LEV.J = DT \cdot C (GL - LEV.K) \quad (15)$$

При $DT \rightarrow 0$ получим:

$$\frac{d[LEV(t)]}{GL - LEV(t)} = C \cdot dt \quad (16)$$

Меняя t на T и интегрируя, аналогично предыдущему, в пределах от нуля до t , получим

$$LEV(t) = GL + [LEV(0) - GL]e^{-ct} = LEV(0) + [GL - LEV(0)] \cdot (1 - e^{-ct}) \quad (17)$$

Характеристикой поведения контура отрицательной обратной связи является временная постоянная $T = 1/C$. За время равное T , уровень увеличивается на $(1 - 1/e)$ разности между GL и достигнутым значением уровня

$$LEV(T) = LEV(0) + [GL - LEV(0)](1 - e^{-cT}) \approx LEV(0) + 0,632[GL - LEV(0)] = LEV(0) + A \quad (18)$$

За время $3T$ значение уровня становится $\approx 0,95GL$, т.е. за это время система с отрицательной обратной связью приближается к значению GL .

Действие отрицательной обратной связи приводит к тому, что нарастание уровня интеллектуального потенциала происходит по затухающей (кривая 2, рис. 2) и достигает своего потенциального значения в точке H_1 . В точке H_1 изменение интенсивности (семантического содержания) информационного потока сопровождается изменением энтропии ($H > 0$, либо $H < 0$), однако, действие механизма отрицательной обратной связи (при $H > 0, \dot{H} < 0$, при $H < 0, \dot{H} > 0$) возвращает систему в точку равновесия (H_1), то есть, система достигла «своего» уровня интеллектуального потенциала. Возможна иная ситуация, когда исходное состояние системы характеризуется точкой H_2 . Это состояние почти полной неопределенности, когда связи между элементами разорваны, а их функции не определены. В этом случае при появлении информационного потока СЭ «включаются» в работу, их функционирование приобретает циклический характер [16], происходит формирование связей, начинает действовать механизм положительной обратной связи, что приводит к уменьшению энтропии и «движению» системы от H_2 к H_1 . Изменение уровня интеллектуального потенциала происходит по кривым 3 и 4 (рис. 2).

Численное моделирование неравновесной устойчивости

Численное моделирование неравновесной устойчивости проведено согласно уравнению (1) и показано в таблице.

Кол-во АЭ	3		4		5		6	
P	H	$\dot{H}$	H	$\dot{H}$	H	$\dot{H}$	H	$\dot{H}$
$P=0,35$	1,44	-5,38	2,55	-3,97	3,99	-11,92	5,75	-27,25
$P=0,55$	1,29	-0,37	2,28	-2,9	3,58	-9,17	5,14	-21,29
$P=0,69$	1	0	1,8	-1,4	2,78	-4,95	4,00	-12,02
$P=0,75$	0,84	0,13	1,49	-0,75	2,34	-3,15	3,37	-8,01
$P=0,84$	0,57	0,24	1	0	1,59	-0,94	2,29	-2,95
$P=1$	0	0	0	0	0	0	0	0

Согласно численному моделированию могут происходить трансформации, связанные с изменением числа СЭ в составе системы, меры информативности каждого отдельного элемента, меры информативности их взаимосвязи (рис. 3)

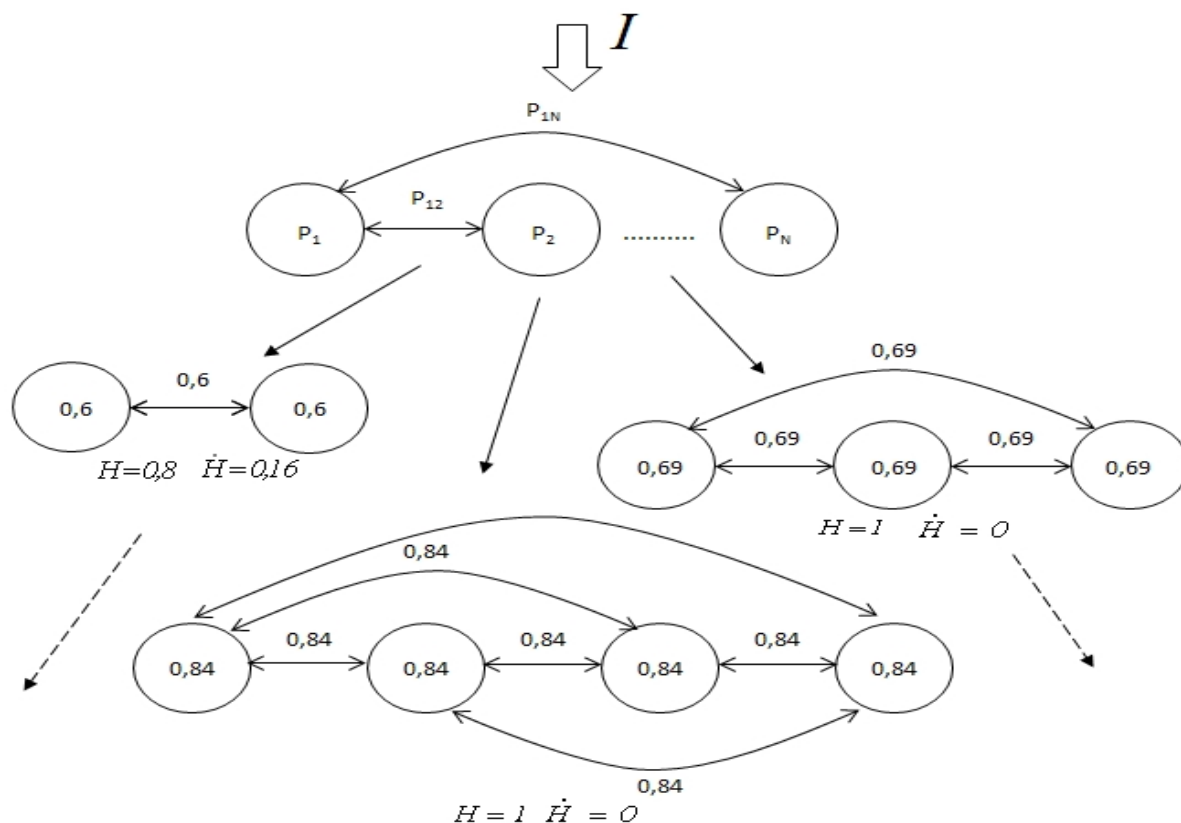


Рис.3. Трансформация структуры КС

Выводы

Предложена методология моделирования неравновесной устойчивости систем когнитивных технологий, включающая в себя

- * разработку модели неравновесной устойчивости когнитивных систем;
- * исследование свойств модели при различных соотношениях информационных потоков;
- * разработку имитационной динамической модели функционирования когнитивных систем, определяющей характер процессов обработки информации в системе;
- * численное моделирование модели неравновесной устойчивости, позволяющее определить показатели и сочетания структурных элементов, соответствующие состоянию устойчивого функционирования.

Список литературы

1. Анцыферов С.С. Метрология интеллектуальных систем // Искусственный интеллект. — 2008. — № 3. — С.18 – 27.
2. Анцыферов С.С. Повышение интеллектуального потенциала адаптивных информационно-распознающих систем // Искусственный интеллект. — 2010. — № 4. — С.330 – 336.

3. Анцыферов С.С. Общие принципы построения и закономерности функционирования интеллектуальных систем // Искусственный интеллект. — 2011. — № 3. — С.6 – 15.
4. Анцыферов С.С. Вопросы метрологического обеспечения интеллектуальных систем // Мир измерений. — 2012. — № 5. — С.46 – 51.
5. Анцыферов С.С. Метрологические основы формирования информационного пространства образов в интеллектуальных системах обработки // Искусственный интеллект. — 2012. — № 4(58). — С.283 – 291.
6. Анцыферов С.С., Русанов К.Е. Быстродействие интеллектуальных систем // Искусственный интеллект. 2013. № 4(62). С. 259 – 265.
7. Анцыферов С.С. Стандартизация показателей качества продукции когнитивных технологий // Научные технологии. — 2014. — Т.15. — № 7. — С.7 – 13.
8. Анцыферов С.С. Проблемы искусственного интеллекта // Проблемы искусственного интеллекта. — 2015. — № 0(1). — С.5 – 12.
9. Анцыферов С.С., Фазилова К.Н., Русанов К.Е. Показатели неравновесной устойчивости когнитивных систем // Проблемы искусственного интеллекта. — 2016. — № 2 (3). — С.4 – 11.
10. Анцыферов С.С., Фазилова К.Н., Русанов К.Е. Стандартизация показателей неравновесной устойчивости когнитивных систем // Научные технологии. — 2017. — № 5. — С.15 – 20.
11. Анцыферов С.С., Фазилова К.Н., Русанов К.Е. Определение показателей устойчивого функционирования нейроподобных систем // Материалы XXV Всероссийского семинара «Нейроинформатика, её приложения и анализ данных». — Красноярск: Институт вычислительного моделирования СО РАН. — 2017. — С.8 – 13.
12. Анцыферов С.С., Фазилова К.Н., Русанов К.Е. Имитационная динамическая модель когнитивных систем // Проблемы искусственного интеллекта. — 2017. — № 2(5). — С.32 – 39.
13. Анцыферов С.С., Фазилова К.Н., Русанов К.Е. Принципы функционирования и характеристики интеллектуальных систем обработки информации пространственно-временных полей // Проблемы искусственного интеллекта. — 2017. — № 4(7). — С.13 – 23.
14. Анцыферов С.С., Фазилова К.Н., Русанов К.Е. Оценка показателей устойчивого функционирования интеллектуальных систем с активными элементами // Сборник докладов конференции «Информатика и технологии. Иновационные технологии в промышленности и информатике» Физико-технологического института Московского технологического университета. — М.: МИРЭА. — 2018. — С.286 – 291.
15. Киндлер Е. Языки моделирования. — М.: Энергоатомиздат. — 1985. - 288 с.
16. Анцыферов С.С., Фазилова К.Н., Русанов К.Е. Принципы построения и функционирования интеллектуальных систем обработки информации пространственно-временных полей // Научные технологии. — 2018. — № 2. — С.36 – 45.

ПРИМЕНЕНИЕ В КАЧЕСТВЕ БИТОВ ИНФОРМАЦИИ В УСТРОЙСТВАХ РСМ ПАМЯТИ НАНАСПЛАВА Ag–Cu¹

Д.А.Башкова, Ю.Я.Гафнер

Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова,
bashkova.daria@yandex.ru

1. Введение

С развитием сферы электроники и вычислительной техники наблюдается тенденция в повышении спроса на энергонезависимую память, в которой ячейки памяти не только сохраняют технологическое состояние при отключении питания, но и способны обеспечить увеличение быстродействия устройств и уменьшение их габаритов. Таким образом, размеры элементов микросхем неизбежно смещаются в нанометровую область и становятся соизмеримы с размерами, характерными для электронов проводимости, что приводит к возникновению ряда специфических, фундаментальных проблем, обусловленных наблюдаемыми квантовыми явлениями. Помимо этого к элементам памяти применяется ряд требований, таких как высокая информационная плотность записи информации, быстродействие, энергоэффективность и низкая стоимость.

Перспективными в данном отношении являются следующие виды памяти: сегнетоэлектрическая (*Ferroelectric Random Access Memory, FRAM*), магниторезистивная (*Magnetoresistive Random Access Memory, MRAM*), память с изменением фазового состояния (*Phase Charge Memory, PCM*), память на базе программируемой металлизации ячейки (*Programmable Metallization Cell, PMC*) и резистивная память (*Resistive Random Access Memory, RRAM*).

В данной работе рассматривается тип памяти, основанной на изменении фазового состояния носителя, принцип действия которой базируется на явлении значительного изменения электрического сопротивления материала при фазовых переходах из кристаллического состояния в аморфное и обратно под воздействием температуры [1].

В настоящее время в качестве материала рабочего слоя РСМ памяти активно применяются халькогенидные сплавы $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$, GeSb_2Te_4 , обладающие в кристаллическом состоянии высокой отражающей оптической способностью и сопротивлением порядка 1 кОм [2]. Наиболее простая ячейка РСМ памяти (OUM ячейка) построена по типу 1T-1R и представляет собой систему, состоящую из слоя кристаллического халькогенида, верхнего электрода и резистивного нагревательного элемента. В процессе записи информации через резистивный элемент пропускают импульсный ток порядка 0,5 мА длительностью около 400 пс, который нагревает халькогенидный слой до температуры более 600 °С (выше температуры плавления). После прекращения действия тока за счет контакта с верхним металлическим электродом осуществляется быстрый (более 10^9 К/с) отвод тепла в окружающие слои [3]. За счет такой сверхбыстрой закалки рабочая область ячейки памяти переходит в аморфную фазу, характеризующуюся высоким сопротивлением (около 100 кОм) и низкой отражающей оптической способностью. Такое относительно непроводящее состояние слоя халькогенида принимают за логический «0». Для перевода материала в кристаллическое состояние через резистивный нагреватель пропускают импульсный ток длительностью порядка 50 нс. При этом температура рабочего слоя находится в диапазоне между температурой размягчения и точкой плавления материала. Данное проводящее состояние ячейки принимают за ло-

¹ Представляемая работа была выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, номера грантов 17-48-190320 и 18-42-190001.

гическую «1».

При минимизации технологических размеров элементов РСМ памяти возникает ряд проблем, связанных с их надежностью, например, электромиграция, снижение плотности тока в ячейках матрицы, возникновение напряжения материала в месте контакта с разогретым до температуры около 900 К халькогенидом [3]. Но, не смотря на данное обстоятельство, специалисты считают такой тип памяти перспективным. Это обусловлено тем, что ячейки РСМ памяти имеют малые размеры и обладают высоким ресурсом перезаписи (10^8), для которой не требуется стирание хранимой информации, что обеспечивает относительно быстроедействие (75 нс). Помимо вышеперечисленного данный тип памяти обладает высокой радиационной стойкостью, нечувствительностью к электрическим и магнитным полям, не требует применения высокотемпературных процессов при изготовлении, легко объединяется с кремниевыми логическими устройствами [4].

Типичный размер ячеек халькогенидных сплавов составляет порядка 100 нм. Однако еще в феврале 2008 года компания *Intel* совместно с итало-французской компанией *ST Microelectronics* представили первые функционирующие образцы РСМ-памяти, произведенные по 20 нм технологии, объемом 8 Гбит. В то же время в 2017 году компания *Toshiba* сделала заявление о возможности увеличения числа битов на кристалле путем создания памяти 3D QLC NAND, что расширило возможности стандартной флеш-памяти. При этом производство флэш-памяти NAND было технически ограничено на уровне 15 нм [5]. Становится очевидным, что для обеспечения конкурентоспособности РСМ памяти необходимо повысить существующую плотность записи информации с одновременным увеличением скорости доступа к ней, а это требует поиска новых технических решений.

Так из ряда химических соединений, из которых возможно создание рабочего слоя ячеек РСМ памяти, особый интерес представляют металлические нанокластеры малых размеров, т.к. они обладают относительно малой стоимостью синтеза и характеризуются высокой вероятностью получения наночастиц с требуемым распределением по размеру. Но здесь необходимо учитывать тот факт, что к таким частицам предъявляются строгие требования по размеру, форме, степени дефектности, стабильности и т.д., поскольку эти параметры существенно влияют на физические и химические свойства, как самих частиц, так и состоящих из них объемных материалов.

В связи с этим возникает необходимость более подробного изучения влияния различных факторов на стабильность и свойства металлических нанокластеров с последующей проработкой теорий по формированию, росту и образованию субструктуры таких частиц. Однако экспериментальное исследование столь малых объектов представляет определенную трудность. Одним из эффективных решений данной проблемы является использование методов компьютерного моделирования.

Учитывая вышесказанное, целью данной работы является изучение методами компьютерного моделирования возможности применения нанокластеров сплава Ag–Cu в качестве единичных битов информации в устройствах РСМ памяти.

2. Компьютерная модель

Материалы, применяемые в рабочем слое ячеек РСМ памяти, должны отвечать ряду требований: четко формировать кристаллическую и аморфную структуры в зависимости от темпа охлаждения, длительное время сохранять полученные конфигурации, а так же обладать относительно малыми размерами. Последнее условие порождает ряд существенных проблем при экспериментальном определении структуры кластеров. Например, уже при размере частиц менее 5 нм такой метод как дифракция на рентгеновских лучах не позволяет получить достоверные данные. Использование электрон-

ной микроскопии и мессбауэровской спектроскопии позволяет решить данную проблему лишь в редких случаях. Сюда же добавляются значительные затраты на синтез наночастиц и исследовательское оборудование. Эффективным выходом в сложившейся ситуации является использование методов компьютерного моделирования.

На сегодняшний день разработано множество методов для имитации поведения нанокластеров: метод молекулярной динамики (МД), классический метод Монте-Карло, *ab initio* и т.д. В данной работе моделирование нанокластеров сплава Ag–Cu проводилось с использованием метода молекулярной динамики, который на наш взгляд является наиболее адекватным при исследовании поведения нанокластеров ГЦК-металлов в процессах формирования их структур при охлаждении из начального расплавленного состояния с различными темпами отвода тепла. Силы межатомного взаимодействия определялись на основе модифицированного потенциала сильной связи TB-SMA, данные для которого были взяты из работы [6], где TB-SMA подход был доработан на случай исследуемого нами соединения серебра и меди. Температура в процессе моделирования определялась посредством средней кинетической энергии атомов, рассчитанной на основе скоростного алгоритма Верле с шагом по времени $h = 1$ фс.

Моделирование проводилось с использованием компьютерной программы MDNTP, разработанной Dr. Ralf Meyer (Universitat Duisburg, Germany).

3. Результаты и обсуждения

Моделирование производилось с использованием группы сферических кластеров с начальной ГЦК-структурой, полученных путем вырезания из идеальной кристаллической решетки серебра и последующей замены в них части атомов Ag атомами Cu в определенных процентных соотношениях. Затем данные кластеры, после прохождения обязательной процедуры термической релаксации, были ступенчато нагреты с использованием термостата Но́зе, до полного разрушения дальнего порядка в наночастицах.

Далее с использованием термостата Андерсона моделировалось плавное охлаждение кластеров сплава Ag–Cu с различной долей содержания меди из жидкой фазы до комнатной температуры с некоторыми фиксированными скоростями (соответствующими времени охлаждения $t = 0.5; 1.5; 2.5$ нс) с целью определения минимального размера кластера Ag–Cu, обладающего четким различием между аморфной и кристаллической структурами при разных темпах отвода тепловой энергии. Результаты моделирования представлены в таблице.

Как показывают экспериментальные и теоретические данные, добавление к нанокластерам даже одного примесного атома способно привести к существенным изменениям в термодинамике и процессах их структурообразования. Так и анализ результатов моделирования показывает, что даже незначительное добавление в кластер серебра примеси, ведет к появлению достаточно сильных отличий от данных, полученных для химически чистого металла.

Например, в случае нанокластеров серебра диаметрами $D = 2.0 - 8.0$ нм при времени охлаждения 0.5 нс вероятность формирования кристаллической структуры плавно понижается с ростом размера кластера и колеблется в диапазоне от 70 до 20%. В свою очередь сплав, полученный добавлением 20% атомов меди (три той же скорости охлаждения) демонстрирует формирование кристаллической структуры в интервале от 80 до 50%. А при темпе отвода тепла соответствующего времени охлаждения 2.5 нс кристаллическое строение наблюдается в 100% опытов на всем рассматриваемом размерном диапазоне наночастиц Ag–Cu. Таким образом, добавление в кластер серебра 20% атомов меди и более способствует стабилизации формирования кристаллической структуры.

При уменьшении времени охлаждения процент возникновения кристалличе-

ских структур снижается, однако даже при самом высоком темпе отвода тепловой энергии (время охлаждения $t = 0.5$ нс) часть имитируемых кластеров не обладает требуемой для РСМ ячеек аморфной структурой (в большинстве случаев вероятность наблюдения аморфной фазы не превышает 50%).

Таблица

Зависимость процента реализации аморфных и кристаллических структур нанокластера Ag–Cu от темпа отвода тепловой энергии при различных долях содержания меди в сплаве

Диаметр кластера, нм	Содержание Cu, %	Вероятность появления аморфной фазы, %			Вероятность появления кристаллической фазы, %		
		Время охлаждения t , нс			Время охлаждения t , нс		
		0,5	1,5	2,5	0,5	1,5	2,5
2,0	10	20	0	0	80	100	100
	20	20	0	0	80	100	100
	25	10	10	0	100	90	100
	30	10	0	0	90	100	100
	40	20	0	0	80	100	100
	50	10	0	0	90	100	100
4,0	10	80	40	30	20	60	70
	20	40	10	0	60	90	100
	25	20	20	0	80	80	100
	30	50	30	0	50	70	100
	40	40	10	0	60	90	100
	50	40	30	0	60	70	100
6,0	10	40	20	0	60	80	100
	20	50	20	0	50	80	100
	25	50	20	0	50	80	100
	30	50	30	0	50	70	100
	40	50	30	0	50	70	100
	50	50	10	0	50	90	100

На рисунке представлены типичные структурные конфигурации нанокластера Ag–Cu с процентным содержанием меди в сплаве равным 10% диаметрами 2.0 и 4.0 нм при времени охлаждения 0.5 нс.

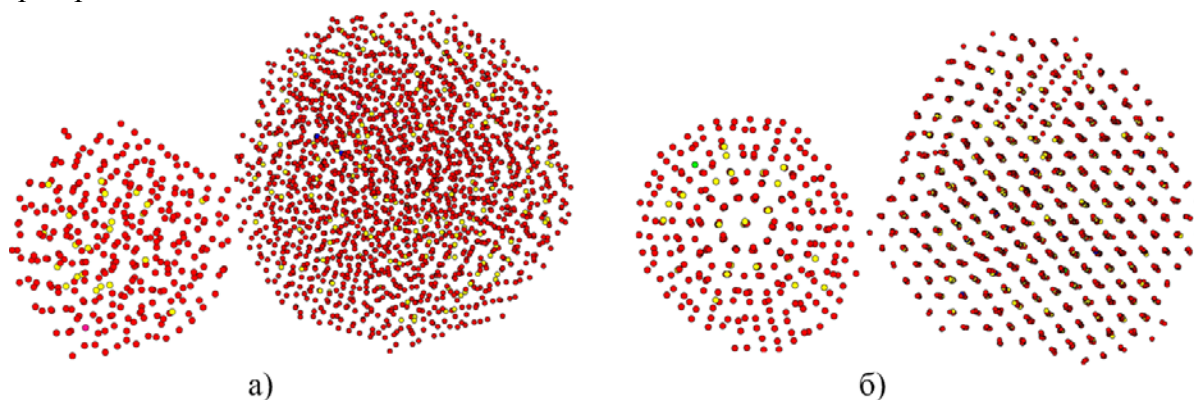


Рис. Структурные конфигурации нанокластера $\text{Ag}_{90}\text{Cu}_{10}$ ($D = 2.0 - 4.0$ нм; $t = 0.5$ нс): а – аморфные; б – кристаллические.

Исходя из всего вышесказанного по результатам моделирования нанокластеров сплава серебра и меди можно сделать вывод, что их использование в качестве компонентов ячеек РСМ памяти, по всей видимости, возможно, но для стабилизации аморфной конфигурации необходимо применять более высокий темп охлаждения, чем указанный ранее.

4. Заключение

Память, основанная на изменении фазового состояния носителя, предполагает использование в качестве материала рабочего слоя компонентов, обладающих ярко выраженными отличиями в структурных свойствах при различных темпах отвода тепловой энергии. Т.е. способностью четко формировать кристаллическую и аморфную фазовые конфигурации. Наиболее критичными являются такие параметры РСМ-материала как скорость фазового перехода и его стабильность. Не удивительно, что этим требованиям отвечает лишь ограниченный круг материалов. Создание ячеек РСМ памяти, обеспечивающих максимальную скорость фазового перехода, его устойчивость, а также большее количество циклов перезаписи и наименьшие энергетические затраты при операциях чтения и стирания информации представляет собой важную научную и практическую задачу. Изучение влияния ряда внешних факторов на стабильность формы и строения наночастиц позволяет оценить возможность применения нанокластеров в качестве отдельных битов информации устройств долговременной РСМ-памяти.

В представленной работе методом молекулярной динамики на основе модифицированного потенциала сильной связи TB-SMA были изучены процессы формирования структурных конфигураций в нанокластерах сплава Ag–Cu с различным процентным содержанием меди. Было показано, что при условии охлаждения из жидкой фазы возможна реализация различного внутреннего строения. В процессе моделирования весьма наглядно прослеживались роль размерных эффектов в формировании структур кластеров и влияние темпа скорости отвода тепловой энергии. Были определены некоторые критерии стабильности данных частиц и сделан вывод о том, что применение наносплава серебра и меди в устройствах памяти, основанных на изменении фазового состояния носителя, возможно, однако для стабилизации формирования аморфной структуры требуется применение более высоких темпов охлаждения.

Список литературы

1. Wong, H.-S.P., Raoux S., Kim S.B., et al. Phase change memory // *Proceedings of the IEEE*. – 2010. – V. 98. № 12. – P. 2201 – 2227.
2. Lee, B.S. Phase Change Materials: Optical and Electrical Properties of Phase Change Materials. / B.S. Lee, S.G. Bishop // New York: Springer Science+Business Media. – 2009. – P.189-194.
3. Максимов П. Память на фазовых переходах: проблемы и перспективы / П. Максимов // *Электронные компоненты*. – 2011. – №1. – С. 76 – 77.
4. Suri, M. Physical aspects of low power synapses based on phase change memory devices. / M. Suri, O. Bichler, D. Querlioz, B. Traoré, O. Cueto // *J. Appl. Phys.* – 2012. – V. 112. – P.054904.
5. Хэнди Д. Состояние и перспективы новых технологий памяти / Д. Хэнди // *Электронные компоненты*. – 2018. – №3. – С. 74 – 79.
6. Mazzone, G. Molecular-dynamics calculations of thermodynamic properties of metastable alloys. / G. Mazzone, V. Rosato, M. Pintore, F. Delogu, P.F. Demontis, and G.B. Suffritti // *Phys. Rev. B: Condens. Matter*. – 1997. – V. 55. – P.837 – 842.

УРАВНЕНИЯ КИНЕТИКИ ЯДЕРНОЙ НАМАГНИЧЕННОСТИ

Н.М.Богатов¹, А.С.Синицын²

¹Сибирский федеральный университет,

¹Кубанский государственный университет, bogatov@phys.kubsu.ru

²Кубанский государственный университет, Nj_1@inbox.ru

Методы обработки сигналов магнитно-резонансной томографии (МРТ) совершенствуются с целью решения новых задач медицинской диагностики, требующих более высокой точности контроля режимов работы томографа и создания новых алгоритмов анализа данных и изображений. Одной из таких задач является определение температуры в объеме тела [1 – 6].

Разнообразие методов построения тепловых изображений с помощью МРТ обусловлено многофакторностью влияния температуры на состояние живого объекта, что выражается в температурной зависимости измеряемых параметров: времени продольной (спин-решеточной) релаксации T_1 [2, 3], времени поперечной (спин-спиновой) релаксации T_2 [2, 3], намагниченности M_0 [3], связанной с протонной плотностью, коэффициента диффузии D [7], химического сдвига δ [4]. Сравнительный анализ различных методов проведен в работе [8]. Времена релаксации T_1 , T_2 зависят от индукции магнитного поля, эта зависимость для T_1 более выражена, чем для T_2 , поэтому в методике объемной термометрии, использующей измерение T_1 , следует учитывать влияние градиентного магнитного поля на T_1 [9, 10].

Теоретической основой анализа кинетики намагниченности среды во внешнем магнитном поле является феноменологическое уравнение Блоха [11]:

$$\frac{d}{dt} \vec{M}(t) = \gamma [\vec{M}(t), \vec{B}] - \frac{M_x(t)}{T_2} \vec{e}_x - \frac{M_y(t)}{T_2} \vec{e}_y - \frac{[M_z(t) - \bar{M}_z]}{T_1} \vec{e}_z, \quad (1)$$

где $\vec{M} = \{M_x, M_y, M_z\}$ – вектор макроскопической ядерной намагниченности, γ – гиромагнитное отношение, $\vec{B}$ – вектор индукции магнитного поля, $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$ – базисные вектора декартовой системы координат, в которой $\vec{e}_z \parallel \vec{B}$, $\bar{M}_z$ – равновесное значение компоненты M_z . Решение уравнения (1):

$$M_x(t) = (M_x^2(0) + M_y^2(0))^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{t}{T_2}\right) \sin(\omega t + \varphi), \quad (2)$$

$$M_y(t) = (M_x^2(0) + M_y^2(0))^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{t}{T_2}\right) \cos(\omega t + \varphi), \quad (3)$$

$$M_z(t) = \bar{M}_z \left(1 - \exp\left\{-\frac{t}{T_1}\right\}\right) + M_z(0) \exp\left\{-\frac{t}{T_1}\right\}, \quad (4)$$

где $\omega = \gamma B$, φ – начальная фаза, $\overline{M}_z$ – равновесное значение компоненты M_z . Из (2, 3) следует, что релаксация компонент M_x, M_y , поперечных направлению индукции магнитного поля, зависит от величины T_2 , то есть определяется спин-спиновым взаимодействием. Это противоречит физическому представлению, высказанному в [12], что релаксация поперечных компонент зависит от спин-решеточного, а также от спин-спинового взаимодействия.

Целью данной работы является вывод уравнений кинетики ядерной намагниченности и получение решения, в котором релаксация поперечных компонент зависит от спин-решеточного и спин-спинового взаимодействий.

Для системы, содержащей ядра одинаковых атомов, например, ядра водорода, используя методы квантовой статистики, получим систему уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} M_x(\vec{r}, t) = \omega M_y(\vec{r}, t) - \frac{1}{T_2} M_x(\vec{r}, t) + \frac{M_x(\vec{r}, t) M_z(\vec{r}, t) (M_z(\vec{r}, t) - \overline{M}_z(\vec{r}))}{T_1 (M_{z \max}^2 - M_z^2(\vec{r}, t))}, \\ \frac{\partial}{\partial t} M_y(\vec{r}, t) = -\omega M_x(\vec{r}, t) - \frac{1}{T_2} M_y(\vec{r}, t) + \frac{M_y(\vec{r}, t) M_z(\vec{r}, t) (M_z(\vec{r}, t) - \overline{M}_z(\vec{r}))}{T_1 (M_{z \max}^2 - M_z^2(\vec{r}, t))}, \\ \frac{\partial}{\partial t} M_z(\vec{r}, t) = -\frac{(M_z(\vec{r}, t) - \overline{M}_z(\vec{r}))}{T_1}. \end{cases} \quad (5)$$

Система уравнений (5) переходит в (1), если $T_1 \gg T_2$. В общем случае релаксация компонент M_x, M_y определяется обоими параметрами T_1, T_2 . Решение системы уравнений (5) для компонент M_x, M_y имеет вид

$$M_x(\vec{r}, t) = \exp\left\{-\frac{t}{T_2}\right\} \sqrt{M_{z \max}^2 - M_z^2(\vec{r}, t)} \sin(\omega t + \varphi), \quad (6)$$

$$M_y(\vec{r}, t) = \exp\left\{-\frac{t}{T_2}\right\} \sqrt{M_{z \max}^2 - M_z^2(\vec{r}, t)} \cos(\omega t + \varphi), \quad (7)$$

где $M_{z \max}$ – максимально возможное значение M_z . Для компоненты $M_z(\vec{r}, t)$ остается верной формула (4).

Отношение зависимостей (6) к (2) и (7) к (3) обозначим $A(\vec{r}, t)$,

$$A(\vec{r}, t) = \sqrt{1 + \frac{M_z^2(\vec{r}, 0) - \left(\overline{M}_z(\vec{r}) - (\overline{M}_z(\vec{r}) - M_z(\vec{r}, 0)) \exp\left\{-\frac{t}{T_1}\right\} \right)^2}{M_{z \max}^2 - M_z^2(\vec{r}, 0)}}}. \quad (8)$$

Из (8) следует, что $A(\vec{r}, 0) = 1$ для любых начальных значений $M_x(0), M_y(0), M_z(0)$,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} A(\vec{r}, t) = \sqrt{1 - \frac{\overline{M}_z^2(\vec{r}) - M_z^2(\vec{r}, 0)}{M_{z \max}^2 - M_z^2(\vec{r}, 0)}},$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} A(\vec{r}, t) < 1 \text{ при } M_z^2(\vec{r}, 0) < \overline{M}_z^2(\vec{r}),$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} A(\vec{r}, t) > 1 \text{ при } M_z^2(\vec{r}, 0) > \overline{M}_z^2(\vec{r}).$$

Пусть $M_z(0) = 0$, что соответствует 90° поворачивающему импульсу МРТ, тогда

$$A(\vec{r}, t) = \sqrt{1 - \frac{\overline{M}_z^2(\vec{r})}{M_{z \max}^2} \left(1 - \exp\left\{-\frac{t}{T_1}\right\}\right)^2}. \quad (9)$$

Значения индукции магнитного поля в МРТ таковы, что $\frac{\hbar\omega}{3k_B T} \ll 1$, где $\hbar$ – постоянная Планка, k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура. В немагнитной среде для температуры $T = 300$ К выполняется неравенство $\overline{M}_z(\vec{r}) \ll M_{z \max}$, тогда из (9) следует $A(\vec{r}, t) \approx 1$. Следовательно, при $M_z(\vec{r}, 0) = 0$ спин-решеточное взаимодействие дает пренебрежимо малый вклад в релаксацию поперечных компонент.

Пусть поворачивающий импульс МРТ обеспечивает соотношение $\overline{M}_z(\vec{r}) \ll |M_z(\vec{r}, 0)| < M_{z \max}$, тогда во временном диапазоне измерений

$$0 \leq t \ll T_1 \ln \frac{|M_z(\vec{r}, 0)|}{\overline{M}_z(\vec{r})}$$

$$A(\vec{r}, t) = \sqrt{1 + \frac{M_z^2(\vec{r}, 0) \left(1 - \exp\left\{-\frac{2t}{T_1}\right\}\right)}{M_{z \max}^2 - M_z^2(\vec{r}, 0)}}, \quad (10)$$

$$M_x(\vec{r}, t) \approx \exp\left\{-\frac{t}{T_2}\right\} \sqrt{1 - \frac{M_z^2(\vec{r}, 0)}{M_{z \max}^2} \exp\left\{-\frac{2t}{T_1}\right\}} M_{z \max} \sin(\omega t + \varphi), \quad (11)$$

$$M_y(\vec{r}, t) \approx \exp\left\{-\frac{t}{T_2}\right\} \sqrt{1 - \frac{M_z^2(\vec{r}, 0)}{M_{z \max}^2} \exp\left\{-\frac{2t}{T_1}\right\}} M_{z \max} \cos(\omega t + \varphi). \quad (12)$$

В этом случае релаксация поперечных компонент M_x, M_y определяется параметрами T_1, T_2 .

Обозначим ЭДС индукции в замкнутых контурах с векторами нормали $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$, соответственно, $\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z$.

$$\varepsilon_x \sim -\frac{\partial}{\partial t} M_x(t), \quad \varepsilon_y \sim -\frac{\partial}{\partial t} M_y(t), \quad \varepsilon_z \sim -\frac{\partial}{\partial t} M_z(t).$$

$$\varepsilon_x(t) \sim \exp\left\{-\frac{t}{T_2}\right\} \sqrt{1 - \frac{M_z^2(0)}{M_{z\max}^2} \exp\left\{-\frac{2t}{T_1}\right\}} M_{z\max} \times$$

$$\times \left[-\omega \cos(\omega t + \varphi) + \sin(\omega t + \varphi) \left(\frac{1}{T_2} - \frac{M_z^2(0) \exp\left\{-\frac{2t}{T_1}\right\}}{T_1 \left(M_{z\max}^2 - M_z^2(0) \exp\left\{-\frac{2t}{T_1}\right\} \right)} \right) \right], \quad (13)$$

$$\varepsilon_y(t) \sim \exp\left\{-\frac{t}{T_2}\right\} \sqrt{1 - \frac{M_z^2(0)}{M_{z\max}^2} \exp\left\{-\frac{2t}{T_1}\right\}} M_{z\max} \times$$

$$\times \left[\omega \sin(\omega t + \varphi) + \cos(\omega t + \varphi) \left(\frac{1}{T_2} - \frac{M_z^2(0) \exp\left\{-\frac{2t}{T_1}\right\}}{T_1 \left(M_{z\max}^2 - M_z^2(0) \exp\left\{-\frac{2t}{T_1}\right\} \right)} \right) \right], \quad (14)$$

$$\varepsilon_z(t) \sim \frac{M_z(0)}{T_1} \exp\left\{-\frac{t}{T_1}\right\}. \quad (15)$$

Из (13, 14) следует, что спин-решеточное взаимодействие замедляет спад значений $\varepsilon_x(t)$, $\varepsilon_y(t)$.

При $T_1 \leq T_2$ огибающие функции для $\varepsilon_x(t)$, $\varepsilon_y(t)$ имеет максимум. Если создать начальное значение $M_z(\vec{r}, 0) = -M_{z\max}$, то огибающие функции для компонент $M_x(\vec{r}, t)$, $M_y(\vec{r}, t)$ возрастают от 0 до максимума при $t \in [0, t_m]$, затем убывают вследствие спин-спинового взаимодействия. Решение уравнений (1) в этом случае дает $M_x \equiv 0$, $M_y \equiv 0$.

При комнатной температуре и значениях индукции магнитного поля, используемых в МРТ, для среды, содержащей ядра атомов водорода, время продольной (спин-решеточной) релаксации зависит от температуры и индукции магнитного поля. Таким образом, используя заданный градиент магнитного поля, можно определить внутреннюю температуру объекта

$$T \approx - \frac{\hbar \gamma}{2k_B \frac{\partial}{\partial B} \ln T_1(T, B)}.$$

Список литературы

1. Гуляев М.В. Магнитно-резонансная термометрия головного мозга крыс методом локальной ЯМР спектроскопии / М.В. Гуляев, С.К. Ханов, Д.Д. Наместникова и др. // Радиоэлектроника: электронный журнал. — 2013. — №10 URL: <http://jre.cplire.ru/jre/oct13/11/text.html>

2. Paliwal V. SSFP-Based MR Thermometry / V. Paliwal, El-Sharkawy AbdEl-Monem, X. Du, X. Yang, E. Atalar // *Magnetic Resonance in Medicine*, 2004, V.52, N.4, P.704–708.
3. Panych L.P. Effects Related to Temperature Changes during MR Imaging / L.P. Panych, M.I. Hrovat, A.R. Bleier, F.A. Jolesz // *J. Magn. Reson. Imaging*, 1992, V. 2, N. 1, P. 69–74.
4. Vitkin I.A. Magnetic resonance imaging of temperature changes during interstitial microwave heating: a phantom study / I.A. [Vitkin](#), J.A. Moriarty, R.D. Peters, M.C. [Kolios](#), A.S. [Gladman](#), J.C. Chen, R.S. [Hinks](#), J.W. Hunt, D.C. Wilson, A.C. [Easty](#), M.J. [Bronskill](#), W. [Kucharczyk](#), M.D. [Sherar](#), R.M. [Henkelman](#) // *Med. Phys.*, 1997, V. 24, I. 2, P. 269–277.
5. Волков А.А. Регистрация температурного поля методом магнитно-резонансной томографии / А.А. Волков, В.Н. Никифоров, Ю.А. Пирогов, А.В. Иванов, А.С. Прохоров // *Медицинская физика*, 2011, № 1, С. 75 – 81.
6. Волков А.А. Традиционные методы нагрева в применении к магнитно-резонансной термометрии / А.А. Волков, С.К. Какагельдыев, А.С. Прохоров, Ю.А. Пирогов // *Журнал радиоэлектроники*, 2012, № 1 URL: <http://jre.cplire.ru/iso/jan12/12/text.html>
7. Le Bihan D. Temperature mapping with MR imaging of molecular diffusion imaging: Application to hyperthermia / D. Le Bihan, J. Delannay, R.L. Levin//*Radiology*, 1989, V. 171, N. 3, P. 853–857.
8. Lüdemann L. Non-invasive magnetic resonance thermography during regional hyperthermia / L. Lüdemann, W. Wlodarczyk, J. Nadobny, M. Weihrauch, J. Gellermann, P. Wust // *Int. J. Hyperthermia*, 2010, V. 26, I. 3, P. 273–282.
9. Богатов Н.М. Влияние градиентного магнитного поля на магнитно-резонансные томографические изображения фантомов с различной температурой / Н.М. Богатов, А.С. Сеницын // Интернет-журнал «Науковедение». — 2014. — №4(23) URL:: <http://naukovedenie.ru/PDF/120TVN414.pdf>
10. Богатов Н.М. Определение температуры фантомов с помощью МРТ / Н.М. Богатов, С.А. Сеницын // *Современные проблемы физики, биофизики и инфокоммуникационных технологий*. — Краснодар: ЦНТИ. — 2014. — С. 45 – 59.
11. Bloch F. Nuclear Induction / F. Bloch // *Physics Review*. — 1946. — V.70. — P.460–473.
12. Фистуль В.И. Введение в физику полупроводников / В.И. Фистуль. — М.: Высш. шк., 1984. — 352 с.

ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ДИАГРАММЫ И ПЛОЩАДЬ ГОРИЗОНТАЛЬНОЙ ПРОЕКЦИИ ЛЮДЕЙ В ДИСКРЕТНО-НЕПРЕРЫВНОЙ МОДЕЛИ ДВИЖЕНИЯ ЛЮДЕЙ

Т.Б. Витова, Е.С. Кирик, А.В. Малышев

Институт вычислительного моделирования СО РАН,
vitova@icm.krasn.ru, kirik@icm.krasn.ru, amal@icm.krasn.ru

В работе рассматриваются фундаментальные диаграммы для дискретно-непрерывной модели движения людей [1-3], построенные для различных площадей горизонтальной проекции человека.

Фундаментальная диаграмма отражает зависимость величины потока от плотности потока или скорости от плотности потока и является одним из критериев оценки адекватности моделей движения людей. Исследование модели по фундаментальной диаграмме позволяет найти: критическую плотность потока, после которой движение практически невозможно; пропускную способность сечения при различных плотностях людского потока; плотность потока при максимальной пропускной способности сечения (при больших плотностях скорость потока замедляется). Эти данные помогают лучше понять процесс движения в модели и их можно сравнить с фундаментальными диаграммами, полученными по данным натурного эксперимента.

В реальности поток людей не однороден, как по скорости движения, так и по другим физическим данным [4]. При моделировании допускается однородность некоторых характеристик. В дискретно-непрерывной модели люди рассматриваются как несжимаемые круглые частицы с заданной площадью проекции (одинаковой для всех частиц или заданной индивидуально). В реальности форма проекции человека больше похожа на эллипс, площадь горизонтальной проекции индивидуальна, человеческие тела могут сжиматься (до определенного предела).

Скорость человека зависит от многих факторов (возраст, пол, эмоциональное и физическое состояние, вид пути), поэтому нет единой фундаментальной диаграммы. Но есть несколько фундаментальных диаграмм [4-6], с которыми принято сравнивать модельные результаты.

Цель работы: исследовать, как площадь горизонтальной проекции человека влияет на фундаментальную диаграмму в модели и сравнить полученные данные с общепринятыми фундаментальными диаграммами [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 м².

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 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;

$\mathbf{x}_i(t - \Delta t)$ – координата в предыдущий момент времени;

$\mathbf{e}_i(t)$ – направление движения;

$v_i(t)$ – скорость движения в направлении $\mathbf{e}_i(t)$.

Скорость движения зависит от плотности частиц $\rho_i^{\hat{\alpha}}(t)$ в направлении $e_i^{\hat{\alpha}}(t)$ и определяется по заранее заданному закону f [4-6]:

$$v_i(t) = v(\rho_i^{\hat{\alpha}}(t)) = f(\rho).$$

Отличительной особенностью представленной модели является возможность использования в качестве входного параметра необходимого закона изменения скорости от плотности $f(\rho)$.

Если вычисленный сдвиг $stepR = v_i(t) \Delta t$ не может быть осуществлен из-за наличия на пути движения других частиц, то он корректируется (уменьшается) до приемлемого $stepF \leq stepR$, т.е. корректируется координата нового положения частицы.

Постановка задачи

Расчётная область – прямой коридор $2 \times 50 \text{ м}^2$, рис. 1. На границы области накладываются периодические граничные условия: в области поддерживается постоянное количество частиц, тем самым обеспечивается постоянная плотность частиц. Такие условия наиболее приближены к условиям, в которых получают натурные данные.

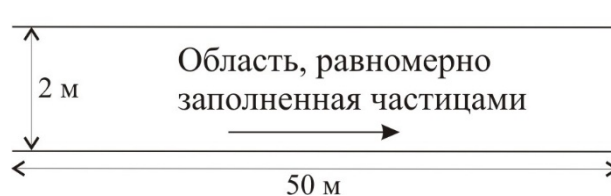


Рис. 1. Геометрия расчётной области

Плотность расположения частиц в расчётной области ρ определяется посредством задания определённого количества частиц N в расчётной области и $\rho = \frac{N}{ab}$, $[1/m^2]$, где произведение ab – площадь расчётной области (a – длина, b – ширина). Величина удельного потока $J_s(\rho) = v\rho = \frac{a}{T} \cdot \frac{M}{ab} = \frac{M}{Tb}$, T , $[c]$ – время прохождения M частиц через сечение (в данной работе $M = 1000$).

Плотность еще измеряют как $\rho' = \frac{\sum_{i=1}^N P_i}{ab}$, $[m^2/m^2]$. Данный способ представления плотности отражает долю занятого людьми пространства.

Фундаментальная диаграмма определяет зависимость величины потока от плотности потока $J_s(\rho)$ или скорости от плотности $v(\rho)$. На рис.2 представлен общий вид фундаментальной диаграммы и её основные точки:

$J_s^{\max}$ – максимальное значение удельного потока;

$\rho(J_s^{\max})$ – значение плотности при максимальном значении удельного потока;

$\rho_{\max}$ – максимальная плотность, после которой движение людей невозможно, то есть скорость и поток равны нулю.

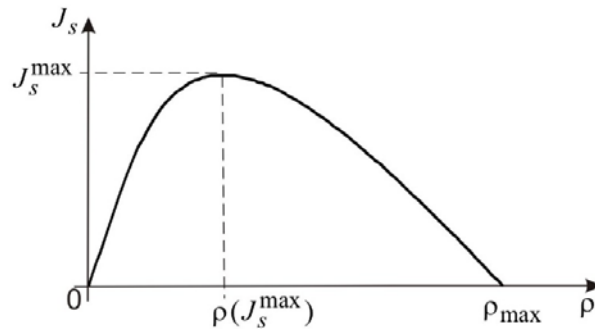


Рис. 2. Общий вид фундаментальной диаграммы

В начальный момент времени t_0 частицы расположены по всей расчётной области с заданной плотностью ρ .

Параметры модели: $k_S = 40$, $k_P = 5$, $k_W = 0$, $r = 4$ м. Скорость свободного движения $v_i^0 = 1,66$ м/с со стандартным отклонением $0,083$ м/с, $\Delta t = 0,25$ с.

Закон изменения скорости движения от плотности частиц $f(\rho) = v_i^0$. Т.е. здесь рассматривается специальная задача, когда на скорость движения частиц в модели не влияет какой-либо закон ([4-6]) изменения скорости от плотности. Теоретический расчётный шаг перемещения на новую позицию всегда максимален и $stepR = v_i^0 \Delta t$. На фактический шаг $stepF$ влияет только свободное пространство до ближайших частиц в выбранном направлении движения и $stepF \leq stepR$. Таким образом, будем рассматривать удельный поток, присущий модели, без привнесения других сил, действующих на скорость движения.

Задача: исследовать влияние площади горизонтальной проекции частиц P_i на фундаментальную диаграмму на примере простого прямого коридора без препятствий и поворотов, рис. 1. Специально рассматривается простой пример геометрии расчётной области, в котором проявляется лишь ограниченный набор явлений, присущих движе-

нию людей. Также данные натурных экспериментов для построения фундаментальных диаграмм получают преимущественно на прямых участках пути.

Результаты

Для каждой плотности ρ и площади проекции частиц P_i из списка $\{0,1 \text{ м}^2; 0,125 \text{ м}^2; 0,14 \text{ м}^2; 0,2 \text{ м}^2\}$ проведено 100 экспериментов, замерено время T , вычислено среднее время и с помощью него вычислен удельный поток $J_s(\rho)$. В рамках одного эксперимента всем частицам назначались одинаковые площади проекции. Площади проекции взяты из [4] и $0,1 \text{ м}^2$ – площадь горизонтальной проекции в летней одежде или школьника средней возрастной группы со школьной сумкой, $0,125 \text{ м}^2$ – взрослого человека в зимней одежде, $0,14 \text{ м}^2$ – школьника старшей возрастной группы со школьной сумкой, $0,2 \text{ м}^2$ – матери с ребенком или человека с большой сумкой. Радиусы частиц для $\{0,1 \text{ м}^2; 0,125 \text{ м}^2; 0,14 \text{ м}^2; 0,2 \text{ м}^2\}$ будут соответственно равны $\{0,18 \text{ м}; 0,2 \text{ м}; 0,21 \text{ м}; 0,25 \text{ м}\}$.

Фундаментальные диаграммы для каждой P_i представлены на рис. 3. Рис. 3а и рис. 3б отличаются единицами измерения плотности, т.к. «свободное пространство в потоке зависит не только от количества человек, но и от площади, занимаемой каждым из них...» [4]. Например, школьников младшего возраста на 1 м^2 можно поставить больше, чем взрослых людей, и при одинаковой плотности потока, выраженной в $1/\text{м}^2$, школьники будут чувствовать себя свободнее, чем взрослые люди. На рис. 3а дополнительно представлены кривые потоков из [4] (KhS) и [5] (WM) (скорость свободного движения $1,66 \text{ м/с}$).

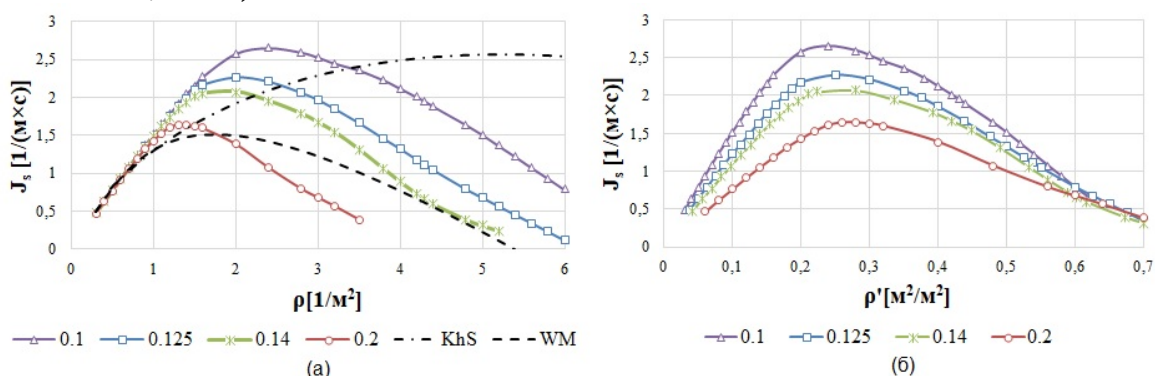


Рис. 3. Фундаментальные диаграммы для различных площадей горизонтальной проекции частиц

Получены некоторые ожидаемые результаты. Повышение P_i понижает значения $\rho_{\max}$, $J_s^{\max}$ и $\rho(J_s^{\max})$: чем толще люди, тем меньше их пройдет через сечение в единицу времени и максимальная плотность потока $\rho_{\max}$ будет уменьшаться.

От площади проекции частиц напрямую зависит величина $\rho_{\max}$. Можно посчитать теоретическую максимальную плотность потока как $1/r^2$ (r – радиус частиц). Теоретические максимальные плотности потока для площадей проекции из списка $\{0,1 \text{ м}^2; 0,125 \text{ м}^2; 0,14 \text{ м}^2; 0,2 \text{ м}^2\}$ будут соответственно равны $\{7,85 \text{ 1/м}^2; 6,28 \text{ 1/м}^2; 5,61 \text{ 1/м}^2; 3,93 \text{ 1/м}^2\}$. Фундаментальные диаграммы с рис. 3а соответствуют этим значениям.

До $\rho \approx 1 \text{ [1/м}^2]$ все фундаментальные диаграммы, построенные по модельным данным, совпадают (рис. 3а): плотность потока мала и не влияет на скорость движения. Также они на данном диапазоне совпадают с кривыми KhS [4] и WM [5].

При заполнении расчётной области на 60 % ($\rho' \approx 0,6$) площадь проекции не влияет на $J_s(\rho)$, рис. 3б. Так как в модели частицы рассматриваются как несжимаемые диски, то с дальнейшим увеличением плотности потока, движение в модели становится затруднительным. На 100 % заполнить расчётную область несжимаемыми круглыми частицами невозможно и необходимо еще свободное пространство для совершения шага. Надо отметить, что при меньших плотностях потока P_i значительно влияет на процесс движения. «Толстые» частицы идут медленнее, чем более «худые», им сложнее маневрировать в ограниченном пространстве.

Фундаментальные диаграммы, построенные по модельным данным ближе по форме к кривой WM [5]. Нет совпадения с кривой KhS [4]. Для кривой KhS наблюдаются высокие значения потока при больших плотностях (3 л/м^2 и более). Чтобы соответствовать этим данным необходимы дополнительные исследования и, возможно, площадь проекции частиц должна уменьшаться с увеличением плотности потока, т.е. частицы должны быть сжимаемыми.

Заключение

В работе рассмотрено влияние площади горизонтальной проекции частиц на вид фундаментальных диаграмм в дискретно-непрерывной модели движения людей. Площадь горизонтальной проекции частиц безусловно влияет на фундаментальную диаграмму в модели, изменяя максимальную плотность потока, после которой движение людей невозможно, максимальную величину удельного потока. Найдено, что при заполнении расчётной области частицами на 60% вид фундаментальной диаграммы не зависит от площади проекции.

Представление людей в виде круглых несжимаемых дисков с заданной площадью горизонтальной проекции всё-таки позволяет добиться соответствия с данными [5]. Но для данных [4] необходимы дополнительные исследования и разработка нового инструментария в модели: уменьшение площади горизонтальной проекции частиц в зависимости от плотности потока частиц.

Список литературы

1. Kirik E. On discrete-continuous stochastic floor field pedestrian dynamics model SIGMA.DC/ E. Kirik., T. Yurgel'yan, A. Malyshev // Proceedings of the International conference «Emergency evacuation of people from buildings – EMEVAC». – Warsaw: Belstudio. – 2011. – P. 155-161.
2. Kirik E. Fundamental diagram as a model input – direct movement equation of pedestrian dynamics / E. Kirik, A. Malyshev, E. Popel // Pedestrian and Evacuation Dynamics 2012. In: Weidmann, U., Kirsch, U., Schreckenberg, M. (eds.). – Springer, Cham. – 2014. – P. 691-703.
3. 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.
4. Холщевников В. В. Эвакуация и поведение людей при пожарах: учеб. пособие / В. В. Холщевников, Д. А. Самошин, А. П. Парфененко [и др.]. – М.: Академия ГПС МЧС России, 2015. – 262 с.
5. Weidmann U. Transporttechnik der Fussgänger. Transporttechnische Eigenschaften des Fussgängerverkehrs (Literaturauswertung)/ U. Weidmann. – Zurich: IVT, Institut für Verkehrsplanung, Transporttechnik, Strassen und Eisenbahnbau, 1992. – 110 p.
6. 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.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЛЬТРА ШУМА ФОНОКАРДИОГРАФА В СРЕДЕ MATLAB

Л.Р. Григорьян, Е.Г. Ляшко, А.Л. Григорьян,
Кубанский государственный университет,

leonmezon@mail.ru, elena_luashko12@mail.ru, ms.bucky@mail.ru

В процессе работы сердце издает множество звуковых эффектов, которые характеризуют процесс сокращения миокарда, движения створок, удары движущейся крови о стенки сосудов. Для регистрации и оценки этих звуков применяется ФКГ – фонокардиография [1].

Самым доступным способом определения звуков является аускультация, когда врач выслушивает сердце с помощью фонендоскопа. Однако не все звуковые волны можно уловить ухом, даже «вооруженным» этим простым прибором, и многое остается не услышанным. Для обнаружения разнообразных шумов был предложен метод фонокардиографии, когда звуки усиливаются с помощью микрофона, а характер звуковых волн анализируется по их графической записи.

В кардиологии ФКГ применяется совместно с электрокардиографией, тогда врач имеет возможность более точно определить время появления конкретного шума и его связь с сокращением определенных отделов сердца. Метод применим как для взрослых, так и для детей, в том числе новорожденных [2].

Практическое использование данного метода позволяет получить наиболее ценные диагностические сведения, в первую очередь, при принятии решения о природе врожденной или приобретенной болезни сердца, помогает в динамике следить за послеоперационным ходом операций, сделанных на сердце. Однако следует понимать, что фонокардиография полностью не заменяет аускультацию, а является ценным дополнением к аускультативному исследованию, она позволяет прояснить природу слышимых звуков сердца, а также дополнительные звуки и шумы.

Цель работы – исследование методов фильтрации при фонокардиографическом обследовании человека. В основе работы лежит полосовой метод фильтрации и подавления шумов окружающей среды.

В работе разработан алгоритм, реализующий программный цифровой фильтр, позволяющий провести цифровую фильтрацию исследуемого сигнала в частотном диапазоне от 1 до 2000 Гц и решить поставленную задачу фильтрации. Фильтр разработан на языке программирования «С» и предназначен для встраиваемых микропроцессоров.

Выбор цифрового фильтра был обусловлен следующими соображениями. Метод Бесселя даёт групповую задержку, являющуюся максимально плоской для постоянной составляющей, и фазовую характеристику, аппроксимирующую линейную фазовую характеристику. Фильтры Чебышёва отличаются резким спадом амплитудно-частотных характеристик в переходной полосе, но в полосе пропускания эти характеристики не являются плоскими. Эллиптические фильтры дают крутую переходную полосу ценой появления пульсаций в полосе пропускания и в полосе задержки. Фильтры Баттерворта отличаются наибольшей равномерностью АЧХ как в полосе пропускания, так и в полосе подавления. Поскольку на АЧХ отсутствуют пульсации (максимумы и минимумы), каждое значение коэффициента передачи появляется на конкретной частоте только один раз (монотонность характеристики фильтра), что в общем случае дает наименьшее искажения в выбранной полосе частот. Вот почему фильтр Баттерворта используется как оптимальный фильтр общего назначения, обладающий максимально плоскую АЧХ, умеренной фазовой нелинейностью и приемлемую переходную характеристику, и достаточно крутой спад АЧХ вне полосы пропускания.

Таким образом, характеристики фильтра Баттерворта максимально полно отвечают требованиям, предъявляемым к аппаратным методам обработки ФКГ [3].

Для разработки фильтра Баттерворта необходимо задать следующие параметры: частота среза ω_p , порядок фильтра N , неравномерность в полосе пропускания R_p , уровень подавления в полосе заграждения R_s . Эти параметры могут быть заданы на основе информации о характеристиках фильтра, а также на основе сведений о характеристиках сигнала и помех, также порядок фильтра обуславливает степень подавления помех, одновременно с увеличением порядка растут и амплитудно-фазовые искажения. Поэтому необходимо проведение моделирования выбранного фильтра в зависимости от частоты и порядка на реальных сигналах.

Для моделирования и исследования разработанного алгоритма фильтрации использовалась программная среда MatLab [4], в которой содержится большое количество хорошо апробированных программных моделей различных типов фильтров. Для моделирования цифровой фильтрации был создан фильтр с необходимыми параметрами (аналог разработанного цифрового фильтра на языке «С» для микропроцессора) и проведено его тестирование в зависимости от порядка фильтра. Одновременно в программе были реализованы необходимые звуковые эффекты: использован БИХ фильтр Баттерворта (нелинейная ФЧХ, необходимость проверки на устойчивость).

На рисунке 1 представлено общее окно вывода информации для изучения работы фильтра: на экран выводится амплитудно-частотная характеристика изначального и обработанного сигнала, и вид сигнала до и после фильтрации.

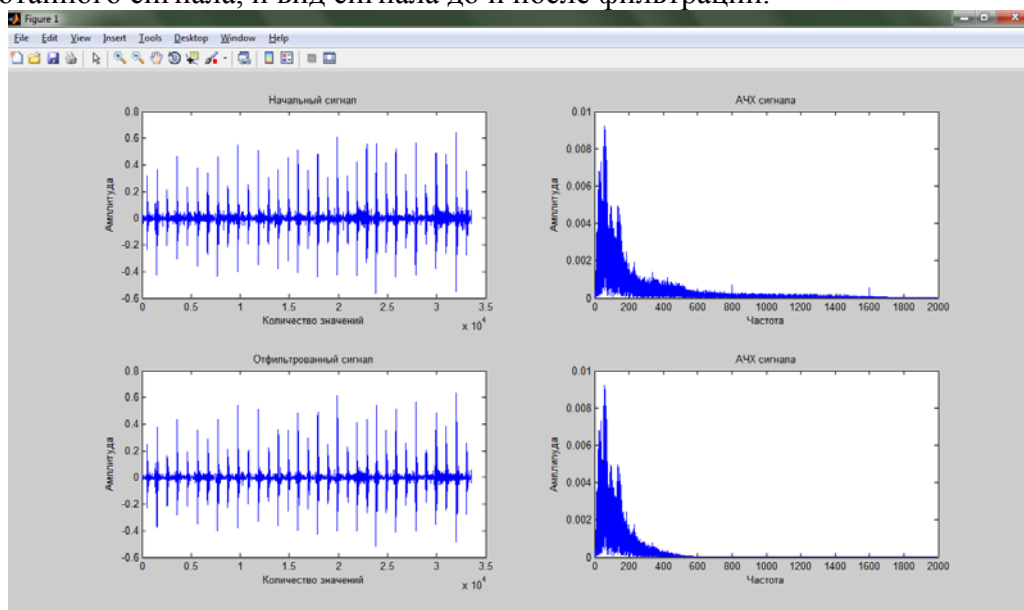


Рис1. Окно вывода информации для изучения работы фильтра.

В ходе изучения работы фильтра использовались записи фонокардиограммы реальных пациентов.

Рассмотрим подробно процесс моделирования фильтра и полученные результаты. В первом случае профильтруем сигнал полосовым фильтром Баттерворта 3 степени с полосой пропускания 1 – 300 Гц. Так как аппаратно-программный комплекс Фонокардиограф всегда включает в себя программный управляемый усилитель, предназначенный для усиления исследуемых сигналов в частотном диапазоне от 1 до 2000 Гц, комплекс включает в себя грубый фильтр подавления промышленной частоты (50 Гц), и на выходе перед цифровой обработкой имеем обработанный звуковой сигнал. Для

моделирования цифровой фильтрации использовался чистый звуковой сигнал без предварительной фильтрации 50 Гц, таким образом, нам необходимо проверить работу фильтра, позволяет ли он отфильтровать шум и изменяет ли фильтрация амплитуду зубцов сигнала, в том числе в области 50 Гц.

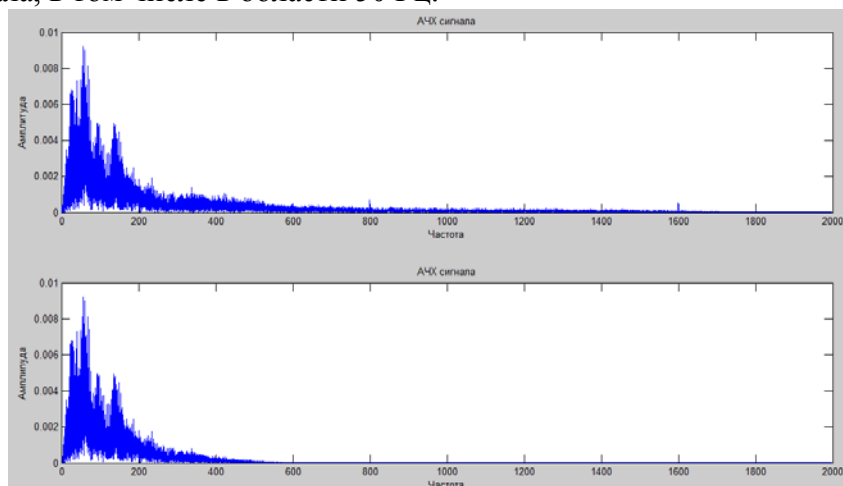


Рис.2. АЧХ сигнала №1 до и после обработки.

Для изучения работы фильтра используем необработанный сигнал №1 (не отфильтрованный). На рисунке 2 представлена амплитудно-частотная характеристика изначального и полученного сигналов: как мы видим, у изначального сигнала частота варьировалась в пределах 1600 Гц. На рисунке 3 изображены обработанный и отфильтрованный сигналы работы сердца.

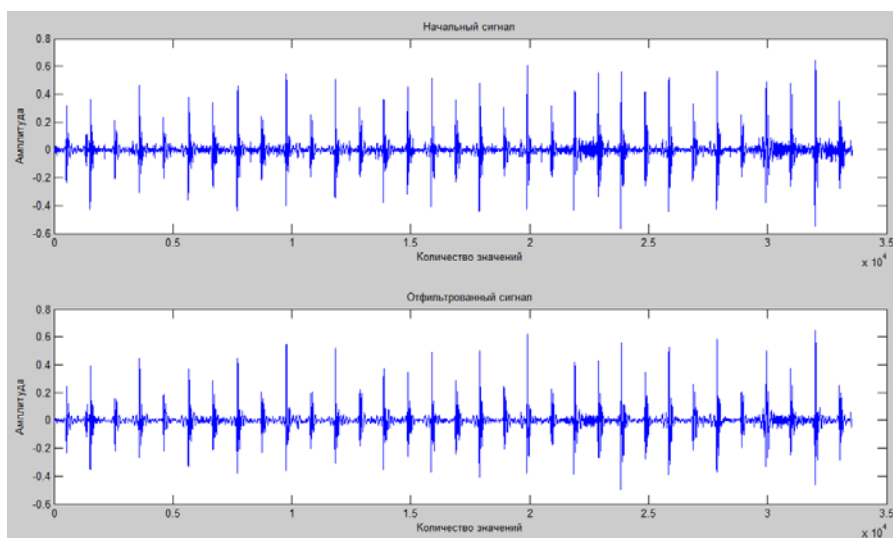


Рис.3. Изначальный сигнал №1 и отфильтрованный сигнал №1.

При детальном изучении рисунка 3 можно заметить, как изменился сигнал после фильтрации. Изменяя полосу пропускания фильтра, шаг и степень можно добиться разных результатов и применять фильтрацию индивидуально для каждого сигнала.

Обрабатываем этот же сигнал полосовым фильтром Баттерворта 5 степени. На рисунке 4 изображены изначальный и отфильтрованный сигналы.

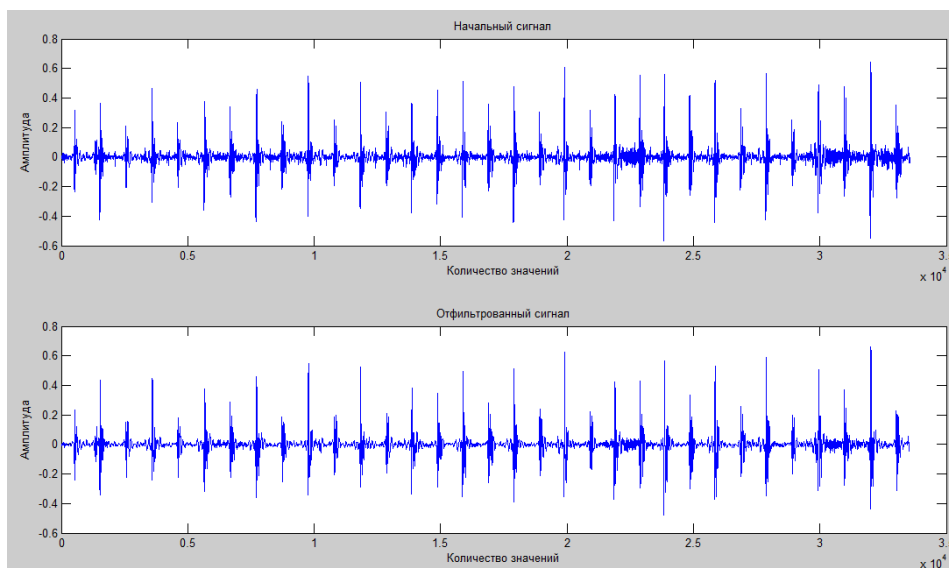


Рис.4. Изначальный отфильтрованный сигнал №1 полосовым фильтром Баттерворта 5 степени.

При детальном изучении рисунков 3 и 4 можно прийти к выводу, что фильтр с более высокой степенью позволяет лучше отфильтровать сигнал.

Рассмотрим фильтрацию обработанного сигнала №2. На рисунке 5 представлена АЧХ сигнала №2 до и после фильтрации. Как видно из рисунка 6, удалось обработать сигнал с помощью повторной фильтрации, что говорит о правильном подборе коэффициентов фильтра.

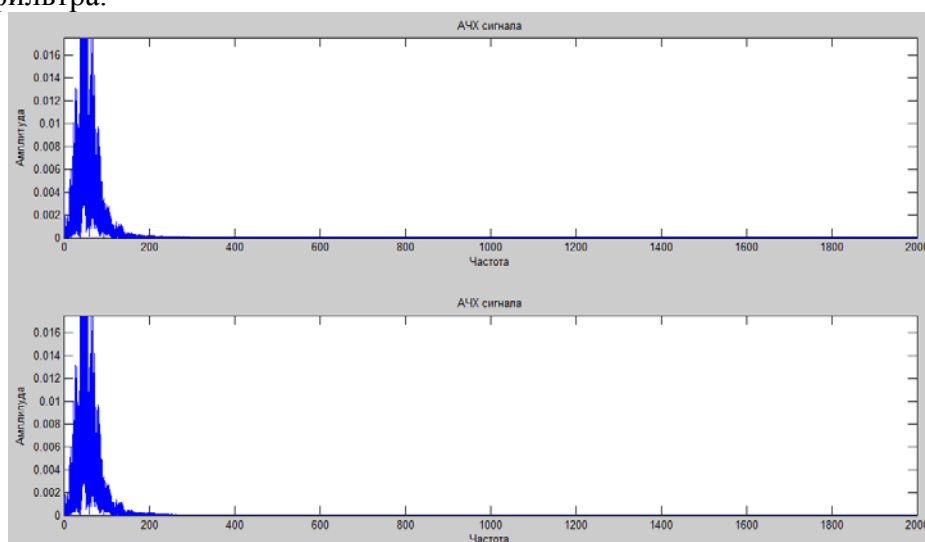


Рис.5. АЧХ сигнала №2 до и после фильтрации.

На рисунке 7 изображены результаты фильтрации сигнала №3, при прослушивании которого можно услышать шорох, возможно вызванный движениями человека. При обработке сигнала удалось избавиться от этого шума.

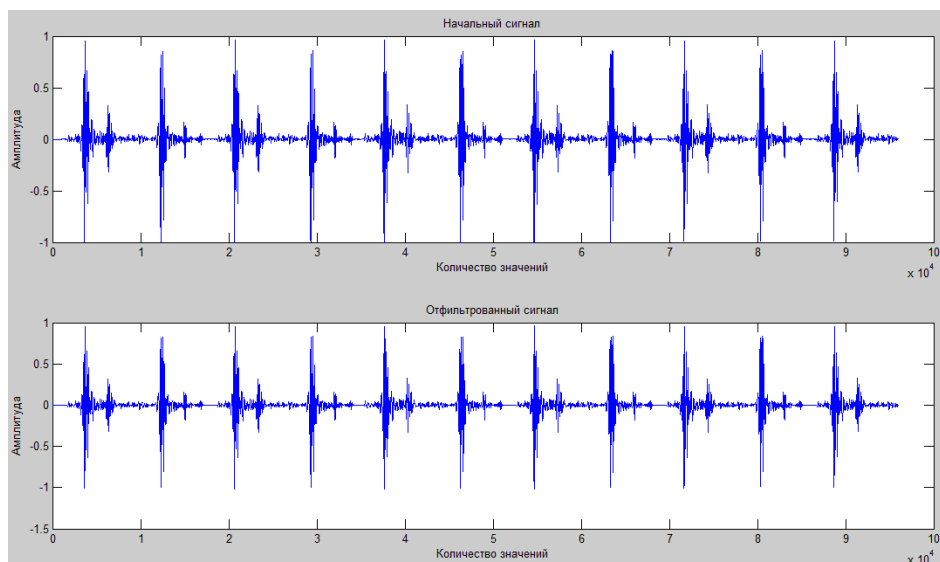


Рис.6. Изначальный и отфильтрованный сигнал №2.

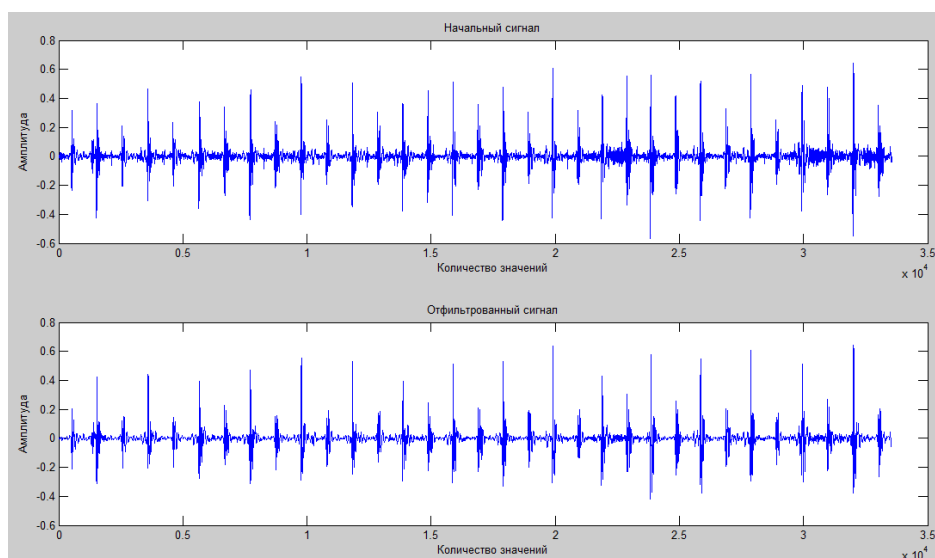


Рис.7. Изначальный и отфильтрованный сигнал №3.

Разработанный алгоритм промоделирован и протестирован в программе MatLab. Результаты показали, что разработанный алгоритм цифровой фильтрации для микропроцессора соответствует решению поставленной задачи, и позволяет в аппаратно-программных комплексах фонокардиографического исследования добиться оптимальной фильтрации шума с сохранением всей полезной звуковой информации.

Список литературы

1. Яковлев В. М. Аускультативно-фонокардиографическая диагностика сердца и сосудов / В. М. Яковлев, Р. С. Карпов. – Т.: Медицина, 1983. – С. 34–40.
2. Мустецов Н. П. Инструментальные методы медико-биологических исследований / Н. П. Мустецов. – Харьков: ХТУРЭ, 1999. – 176 с.
3. Основы цифровой обработки сигналов. Курс лекций: Учебное пособие / А. И. Соломина, Д. А. Улахович, С. М. Арбузов и др. – СПб.: БХВ Петербург, 2005. – 768с.
4. С.П. Иглин. Математические расчеты на базе Matlab. СПб.: БВХ Петербург 2005г. – 640 с.

СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ДАННЫХ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ РЕЖИМОВ РАБОТЫ РАДИОЭЛЕКТРОННОЙ АППАРАТУРЫ

В. В. Деревянко¹, Е. Д. Карпова¹, Д. А. Нестеров¹, Ю. В. Шанько¹

¹Институт вычислительного моделирования СО РАН, e.d.karepova@icm.krasn.ru

Существует, по крайней мере, две стратегии мониторинга состояния электронного оборудования для своевременного выявления, а возможно, и прогнозирования возникновения сбоев и отказов. Первая из них предполагает проведение непрерывного оперативного анализа поступающих данных со встроенных датчиков. Оперативный анализ требует быстрой и менее вычислительно- и ресурсозатратной обработки потока данных, позволяющей проводить оценку состояния системы «на лету» и выявлять отклонения, указывающие на возможное возникновения неисправностей. Оперативный анализ текущего состояния оборудования может проводиться на основе короткого ряда предшествующих измерений [1-2]. Такой подход может использоваться для автономной реакции системы при эксплуатации. Другая стратегия основана на использовании методов интеллектуального анализа данных для предварительного определения критериев штатной работы конкретного оборудования, наполнения базы знаний и создания системы мониторинга, использующей эту базу знаний для постоянной взвешенной совместной оценки группы измеряемых параметров [3-7]. База знаний в этом случае может быть весьма сложной структуры и использовать накопленные данные о поведении измеряемых параметров во время испытаний конкретного оборудования, штатной работы аналогов, внештатных ситуаций и поломок оборудования той же серии и многое другое.

Многолетний опыт тестирования электронного оборудования в космической промышленности показал, что 80% электромеханических отказов связано с различными термическими воздействиями на оборудование и примерно 20% отказов приходится на различные виды вибраций и ударное воздействие [8]. В связи с этим контроль тепловых режимов бортовой радиоэлектронной аппаратуры является важным способом повышения надежности космического аппарата.

В данной работе обсуждается построение способа надежного определения тепловых режимов работы силовых модулей для системы электропитания космического аппарата. Подход использует исходные данные о температуре, полученные во время экспериментов на многофункциональном лабораторном стенде, который имитирует работу блока радиоэлектронной аппаратуры (РЭА).

Лабораторный стенд представляет собой вакуумную камеру в которой укреплено теплоотводящее основание для установки макетов блоков РЭА (тепловых имитаторов), которое обеспечивает поддержку температуры в пределах ± 1 °С в диапазоне от минус 30 до +60 °С. Макет блока РЭА выполнен в виде прямоугольной алюминиевой рамки с наклеенной текстолитовой платой, на которую установлено 16 нагревателей VT1–VT16 (мощных транзисторов), имитирующих работу реальных радиоэлементов на силовом модуле. Тепло от греющихся при работе транзисторов отводится по рамке через плоскую нижнюю поверхность блока («пятку») к теплоотводящему основанию стенда. Конструкция макета и схема отвода тепла близки к реальным конструкциям модулей, входящих в состав бортовой РЭА. Лабораторный стенд оснащен средствами измерения теплофизических параметров с помощью тепловизора и температурных датчиков (термисторов RT1–RT31, термометров сопротивления TD1–TD4 и термопар ТС1–ТС6), расположенных на поверхности рамки и теплоотводящем основании. Схема размещения элементов на макете РЭА показана на Рис. 1А). Стенд обеспечивает работу

тепловых имитаторов в атмосферных условиях и в вакууме при давлении не выше $1.3 \cdot 10^{-3}$ Па (10^{-5} мм рт. ст.).

Бортовая РЭА может работать в нескольких штатных режимах. Каждый режим определяется фиксированным набором активных радиоэлементов, которые выделяют тепло, следовательно, можно говорить о соответствующих тепловых режимах работы РЭА (Рис. 1Б). В экспериментах на многофункциональном лабораторном стенде рассматривалось восемь различных режимов работы макета блока РЭА, включая режим, при котором мощность подавалась на все 16 транзисторов. Девятым считался режим, в котором все нагреватели выключены. В рамках одного режима на все активные транзисторы подавалась одинаковая мощность, которая варьировалась от эксперимента к эксперименту в пределах от 0,5 до 8 Вт.

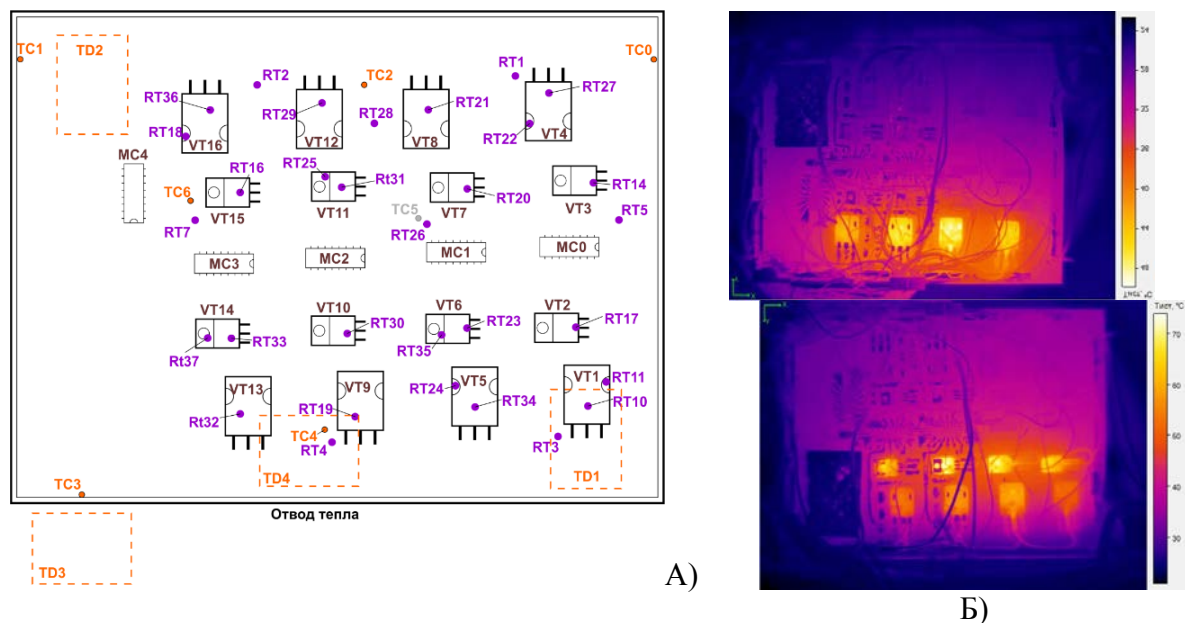


Рис. 1. Макет РЭА: А) схема размещения элементов; Б) примеры тепловых режимов работы (снимки тепловизором).

Для анализа мы располагали данными о 123 экспериментах в вакууме и 88 экспериментах в атмосфере. Некоторые из этих экспериментов (12 в вакууме и 13 в атмосфере) соответствовали нештатным ситуациям, при которых на транзистор, который должен быть активный подавалась не номинальная мощность или он был выключен совсем. Кроме того, в экспериментах варьировалась температура теплоотводящего основания и окружающей среды (для экспериментов в атмосфере).

Для анализа нам были доступны следующие данные: Q_k^i – мощность, подаваемая на k -й транзистор VT в i -м эксперименте; t_j^i – температура j -го термистора RT, t_{base}^i – температура теплоотводящего основания и t_{env}^i – температура окружающей среды (для экспериментов в атмосфере). Предполагается, что при эксплуатации РЭА информация о мощности и конфигурации нагревателей будет отсутствовать. Однако на этапе тестирования аппаратуры данные о подаваемых на каждый нагреватель мощностях была доступна.

Анализ выполнен в среде статистической обработки данных R [9]. Прежде всего, необходимо было оценить насколько достоверно по имеющимся данным режимы могут быть отделены друг от друга. Поскольку в рамках одного режима температуры

теплоотводящего основания и окружающей среды изменяются в широких пределах, значения измеренных температур не могут быть использованы напрямую для определения режима. Для кластеризации были рассчитаны псевдотемпературы $\tilde{t}_j^i$. Для этого из измеренных температур t_j^i было исключено влияние внешних факторов $\tilde{t}_j^i = t_j^i - a_j^{\text{base}} t_{\text{base}}^i - a_j^{\text{env}} t_{\text{env}}^i$, где величины a_j^{base} и a_j^{env} вычислены как коэффициенты линейной регрессии $t_j^i = f(t_{\text{base}}^i, t_{\text{env}}^i, Q_k^i)$. Затем полученные значения были нормализованы и использованы для кластеризации методом k-средних отдельно для экспериментов в вакууме и атмосфере. На Рис. 2 представлены проекции нормализованных псевдотемператур на плоскость, определенную первыми двумя главными компонентами. Точки, соответствующие одному режиму помечены одинаковым символом, обозначенным в легенде. Точки, соответствующие одному и тому же кластеру изображены одинаковым цветом. Из графиков видно, что тепловые режимы хорошо кластеризуются (только одна точка, отмеченная красной окружностью, не попала в свой кластер). Эта точка соответствует режиму в атмосфере, при котором все нагреватели были выключены. При кластеризации точка попала в кластер, соответствующий режиму, в котором активны транзисторы VT3, VT7, VT11, VT15 (Рис. 1А). Возможно, по крайней мере, три объяснения этой ситуации. Во-первых, данных от экспериментов в атмосфере меньше, чем в вакууме, и, возможно, недостаточно для устойчивой кластеризации. Во-вторых, процедура нормализации псевдотемператур не совсем физически корректна в случае режима, когда все транзисторы выключены. В-третьих, возможно, в этом случае факторы, влияющие на измеряемую температуру, плохо описываются линейной регрессией и, следовательно, ошибка при вычислении псевдотемпературы повлияла на результат кластеризации.

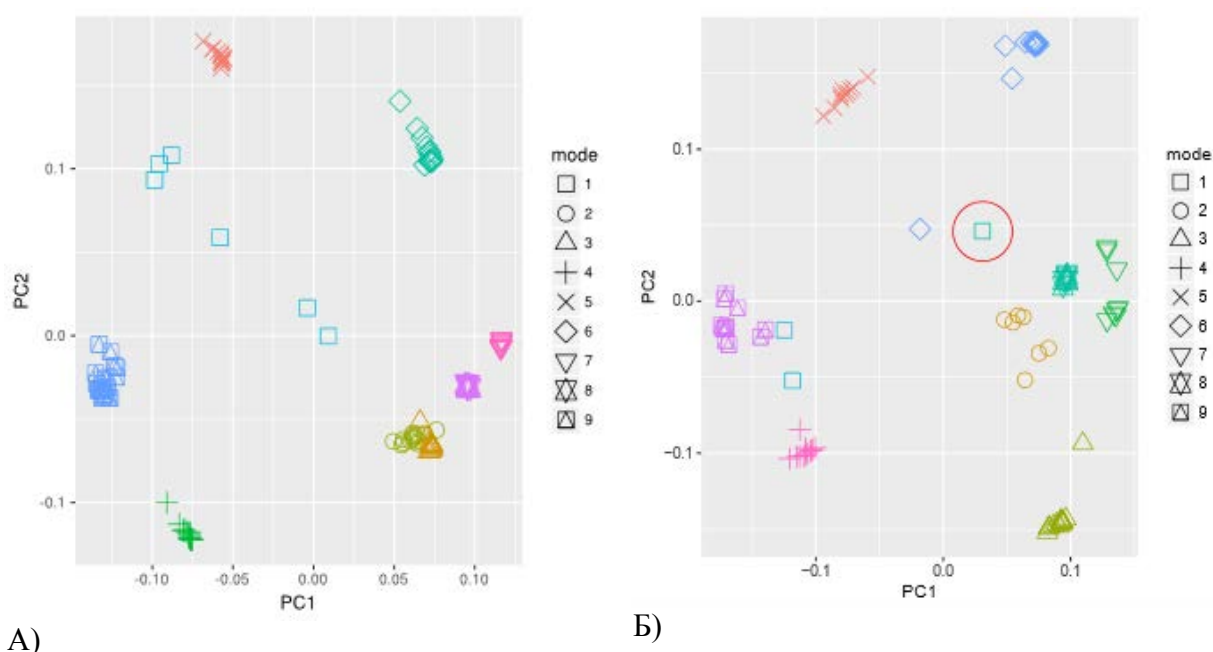


Рис. 2. Результат кластеризации методом k-средних: А) в вакууме; Б) в атмосфере.

Далее была решена задача классификации методом ближайшего центроида с евклидовым расстоянием с обучением на наборе из 100 экспериментов в вакууме и 68 экспериментов в атмосфере (случайная выборка 90% доступных экспериментов со

штатными режимами работы). Проверка осуществлялась на 23 экспериментах в вакууме и 20 экспериментах в атмосфере, включая эксперименты с внештатными ситуациями. Во всех 100% тестовых случаях тепловой режим был определен правильно. Следует отметить, что хотя данные, соответствующие экспериментам с внештатными ситуациями, были отнесены классификатором к правильным режимам, однако в этих случаях расстояние от соответствующей точки в пространстве признаков до центроида класса всегда было больше, чем расстояние от этого центроида до точек, соответствующих экспериментам с номинальным режимом.

Список литературы

2. Ruusunen M. Comparison of Three Change Detection Algorithms for an Electronics Manufacturing Process / M. Ruusunen, M. Paavola, M. Pirttimaa, K. Leiviskä // In: Proceedings 2005 IEEE International Symposium on Computational Intelligence in Robotics and Automation. Edited by H. Koivo. — IEEE Operations Center, Piscataway, USA. — 2005. — P. 679–683.
3. Dasu T. Robustness of Change Detection Algorithms / T. Dasu, S. Krishnan, G. M. Pomann // In: Advances in Intelligent Data Analysis X. Edited by Gama J., Bradley E., Hollmén J. — Lecture Notes in Computer Science. — V. 7014. — P. 125–137.
4. Mahantesh N. Integrated machine health monitoring: a knowledge base approach / N. Mahantesh, P. Aditya, and U. Kumar // Int. J. of System Assurance Engineering and Management. — 2014. — V. 5. — P. 371–382 (2014).
5. Spirkovska L. Inductive learning approaches for improving pilot awareness of aircraft faults / L. Spirkovska, D. Iverson, S. Pol, and A. Pryor // Technical report 20060017823, NASA. — 2005.
6. Roychoudhury I. Real-time monitoring and prediction of airspace safety / I. Roychoudhury, L. Spirkovska, M. Daigle, E. Balaban, S. Sankararaman, C. Kulkarni, S. Poll, and K. Goebel // NASA/TM-2015-218928, NASA Ames Research Center. — 2015. — E-print: <http://matthewjdaigle.com/pubs/Roychoudhury2015RealTime.pdf> (дата обращения: 04.09.2018)
7. Iverson D. Data mining applications for space mission operations system health monitoring // In: SpaceOps Conferences, AIAA, Heidelberg, Germany, E-print: <https://arc.aiaa.org/doi/abs/10.2514/6.2008-3212> (дата обращения: 04.09.2018)
8. Matthews B. Space Shuttle Main Propulsion System Anomaly Detection: A Case Study / B. Matthews, A. Srivastava, D. Iverson, B. Beil, and B. Lane // IEEE Aerospace and Electronic Systems Magazine. — 2011. — V. 26. — P. 4–13.
1. Steinberg Dave S. Vibration analysis for electronic equipment. — New York: A Wiley-Interscience publication, 2000. — 432 p.
9. R Core Team (2014). R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. E-print: <http://www.R-project.org/> (дата обращения: 04.09.2018).

О РАЗВИТИИ ВЗАИМОСВЯЗЕЙ МЕЖДУ РАВНОВЕСНОЙ И НЕРАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКАМИ

Каганович Б.М., Стенников В.А., Зароднюк М.С., Якшин С.В.
Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН,
thermo@isem.irk.ru, sva@isem.irk.ru, max@isem.irk.ru, s.yakshin@isem.irk.ru

С развитием науки и техники, усложнением решаемых научных задач резко усложняется и взаимодействие между отдельными дисциплинами. Обязательное объединение, интеграция различных направлений сопровождается неизбежными процессами дифференциации, разрыва связей внутри областей знания. Примером плодотворного совместного развития двух противоположных по способу проведения исследований теорий является изучение излучения на основе волновых и квантовых моделей. Планк вскоре после открытия им квантового закона излучения заявил, что его открытие никоим образом не опровергает теорию непрерывного электромагнитного поля Максвелла, что он просто придумал прием определения согласующихся с опытом уравнений излучаемой энергии и распределения частот в излучаемом поле. Эйнштейн, распространивший обнаруженные Планком квантовые закономерности на перемещение и поглощение света, говорил о невозможности вывода из факта, что мы пьем пиво кружками, заключения о его (пива) квантовом характере. Таким образом, создатели квантовой механики поддержали идею о неуничтожимости непрерывных моделей. Единство квантового и волнового моделирования было обосновано корпускулярно-волновой теорией Луи де Бройля.

К глубокому сожалению, наряду с бесспорными ценными ряд весьма вредных результатов был получен в ходе взаимодействия возникшей в середине XX века неравновесной термодинамики с зародившейся более чем на сто лет раньше классической равновесной. Связи этих термодинамик по характеру во многом оказались прямо противоположными связям обогащавших одна другую квантовой и волновой теорий. Конечно, в неравновесном моделировании были достигнуты многие важные результаты в изучении явлений самоорганизации. Удалось объяснить лазерное излучение, сверхпроводимость, возникновение турбулентных вихрей в жидкости, самоорганизующиеся химические реакции. Но приобретенные знания стали основой не для плодотворного взаимодействия между новым и уже обнаружившим свое неопределимое значение в развитии мировой науки равновесным направлением термодинамических исследований, а для «обвинений» последнего в непригодности в анализе возникающих в настоящее время задач. Конкретно, неприменимость равновесного моделирования утверждалась относительно явлений необратимости и самоорганизации.

Неубедительность таких утверждений напрашивается уже из объяснений и использования этого понятия основоположниками современной науки: Галилеем, Ньютоном, Эйлером, Д'Аламбером, Лагранжем. Согласно третьему ньютоновскому закону равенство действия и противодействия, т.е. равновесие между ними, соблюдается в любой момент любого движения. По словам выдающегося отечественного ученого А.Н. Крылова в уравнении равновесия механической системы Лагранжа содержится вся механика Ньютона. Общность, или, видимо даже точнее всеобщность, понятие равновесия может оказаться трудноотобразимой в виде строгого формализованного описания в случаях, когда на моделируемую систему действует множество различных по природе и разнонаправленных сил. Крупнейшей неудачей в равновесном описании

диссипативных макроскопических систем стали безрезультатные попытки классиков физики XIX века: Клаузиуса, Гельмгольца, Дж. Томсона, Больцмана, Планка, – вывести уравнение экстремальной траектории, распространяемое в отличие от известного уравнения Эйлера-Лагранжа на процессы с трением. Возникшие трудности и привели к включению в научные работы неравновесных аппроксимаций. Однако достижения в неравновесном моделировании не отрицают принципиальных возможностей равновесного подхода в устранении появившихся серьезных затруднений. Значительный опыт в равновесном анализе явлений необратимости к настоящему времени накоплен. Но в значительной мере в современной термодинамической литературе он оказался забытым, а иногда и искаженным.

В первую очередь надо написать о забвении уже упомянутых трудов Лагранжа. В его «Аналитической механике» [1], представляющей первое единое физико-математическое изложение теории равновесий еще в дотермодинамический период развития равновесного моделирования, содержались подсказки равновесных интерпретаций явлений необратимости. В целом [1] предназначалась, конечно, для изучения процессов в консервативных, подчиняющихся законам сохранения механических системах. Но выбранному для анализа закономерностей поведения, соблюдаемых в таких системах, уравнению был придан смысл равенства нулю дифференциала непотенциальной величины – работы. Являющиеся функциями траекторий непотенциальные переменные стали основными искомыми величинами в необратимой термодинамике. Выявление Лагранжем возможности придания этим величинам на достаточно малых отрезках движения свойств потенциалов и соответственно равновесности состояниям, которые этими свойствами обладают, обнаружило и допустимость равновесного описания необратимости в ничтожно малых областях пространства и времени. Поэтому встречающееся в математической литературе утверждение о применимости уравнения равновесия Лагранжа только при использовании потенциальных функций требует разностороннего критического переосмысления. Большие сложности, естественно, возникают при определении вида интегралов для процессов, в ходе которых меняются сами закономерности движения. Такие изменения как известно наблюдаются при перемещении от порядка к хаосу и в противоположном направлении. Но и для таких перемещений Эйлер и Лагранж своими выводами уравнения экстремальной траектории показали, что отдельные шаги, мгновения движения оказывается возможным описывать как состояния равновесия и искомой функции – действию приписывать свойства потенциала. Колоссальные применения уравнение Лагранжа нашло в установлении математических связей между закономерностями макромира. Здесь интегрирование не потребовалось, поскольку связи формулировались в виде дифференциальных уравнений. Колоссальность применений была подтверждена высказываниями двух классиков науки: Гиббса и Вальраса, – согласно которым, один из них на основе идей Лагранжа изложил классическую равновесную термодинамику, а другой – математическую экономику. Обе эти науки представляют объяснения закономерностей необратимых процессов.

Равновесный термодинамический анализ явлений необратимости начался с «Размышлений о движущей силе огня» Карно [2] и конкретно с использования предложенной им формулы коэффициента полезного действия теплового двигателя

$$\eta = (T_1 - T_2) / T_1,$$

где T_1 и T_2 – температуры нагревателя и холодильника соответственно. В формулу не входит переменная времени и следовательно η согласно Карно является функцией состояния. Функцией этого же равновесного состояния оказываются пропорциональные T_2 производства теплоты и энтропии. Таким образом, результатами проведенного автором «Размышлений» анализа стали методы оценок предельных показателей и полезного использования энергии, и необратимого загрязнения природы.

Кирхгоф [3] и Максвелл [4] выводами своих тепловых теорем показали сравнительную легкость проведения равновесного анализа необратимого движения в обязательно потенциальном одномерном пространстве переменных. В [3] задача токораспределения в плоской пластине круглой формы была решена с помощью представления этой пластины в виде условной одномерной электрической цепи. Другим важным результатом изложенных в [3] исследований стало установление факта, что изотермическому токораспределению в пассивной (без источников электродвижущих сил) цепи соответствует минимальное производство теплоты. Максвелл в [4] показал соблюдение при достижении этого минимума линейного закона Ома. Поскольку при изотермическом движении электрических зарядов теплота и энтропия однозначно связаны между собой тепловые теоремы Кирхгофа и Максвелла можно рассматривать как частные случаи открытой примерно через сто лет после их открытия теоремы Онсагера-Пригожина о минимуме производства энтропии [5].

Планк и Эйнштейн, использовавшие термодинамические модели в изучении излучения, молекулярной диффузии, опалесценции и других необратимых процессов создали и согласующуюся с теорией относительности релятивистскую термодинамику [6, 7]. Эта термодинамика была изложена ими на языке равновесий и ее описание включило формулировки математических связей с классическими механикой и термодинамикой. Проникновение равновесного моделирования в современную квантовую физику и теорию относительности не может не стать составной частью анализа областей его эффективного применения.

Эстафету в равновесном термодинамическом изложении физических проблем у Планка и Эйнштейна принял Ландау [8]. Его любимым приемом в моделировании процессов самоорганизации и деградации стало их представление в виде поддержания фазового равновесия между преобразуемыми друг в друга объектами при изменении какого-либо параметра. Так, объяснение явления сверхтекучести было дано на основе его описания в виде параллельного движения находящихся в равновесии нормального и сверхтекучего гелиев. Сверхпроводимость выводилась из условий равновесия между сверхпроводящими и обыкновенными слоями проводящей среды. В анализе процессов образования и излучения звезд рассматривалось равновесное взаимодействие ядра и оболочки звезды.

Положение во взаимодействии равновесного и неравновесного моделирований несколько улучшилось в последней трети прошлого века с развитием термодинамического анализа уравнений химической кинетики. Значительный вклад в него внесли А.Н. Горбань, В.И. Быков и Г.С. Яблонский [9, 10], длительное сотрудничество с которыми оказалось весьма полезным в проведении термодинамических исследований в ИСЭМ. У них был почерпнут опыт: математического согласования кинетики и термодинамики, микро- и макроописаний; термодинамического анализа траекторий релаксации к конечному равновесию в химических и биологических системах; интерпретации

решаемых задач с помощью функций Ляпунова, марковских случайных процессов, топологии и теории графов. Нашли применение идея Горбаня о переходе от поиска экстремумов функций на многограннике материального баланса к поиску на графе – термодинамическом дереве и положения развиваемой Горбанем с соавторами новой научной дисциплины – "Технологии моделирования". В отличие от [9, 10] в равновесном моделировании, развиваемом в ИСЭМ [11-14], основным инструментом стала термодинамика, а формулировки и приемы решения задач, заимствуемые из кинетики, явились обязательными дополнительными средствами, повышающими эффективность выполняемых вычислительных экспериментов. Другое важное отличие от методического подхода Горбаня заключается в широком использовании при моделировании на графах теории цепей.

Для преодоления трудностей, возникших в истории развития равновесного моделирования и связанных с "неописуемостью" необратимого движения, предложены два метода [12-14]. Первый из них основывается на отказе от использования общего "невыводимого" уравнения экстремальной траектории и переходе к ее пошаговому построению. Шаги принимаются конечными, но столь малыми, что делается допустимой предпосылка о стационарности моделируемого процесса и неизменности внутришаговых закономерностей. Нарращивание оптимальных результатов вычислений при переходе от одного шага к другому осуществляется методом динамического программирования, поиск экстремальных решений внутри шагов производится с помощью МЭПС. Второй метод представляет реализацию цепных моделей, изложение которых на языке термодинамики позволило одновременно использовать обладающего инвариантными многообразиями термодинамического и обязательного потенциального одномерного цепного пространств переменных. Возможности обоих методов были проверены как в термодинамическом анализе общих закономерностей диссипативных макроскопических систем, так и при решении конкретных физико-химических и технико-экономических задач.

В общем анализе на основе пошагового метода для отрезков стационарного движения прежде всего удалось установить математические связи между законами обратимых и необратимых процессов. Были раскрыты возможности формулировки критериев экстремальности во внутришаговом моделировании исходя как из принципа виртуальных перемещений Лагранжа, так и из второго закона термодинамики. Направления изменения термодинамических параметров (температуры, теплоты, энтропии) оказались соответствующими релятивистской термодинамике Планка, Эйнштейна. Проведенное цепное моделирование убедительно подтвердило обнаруженные уже Кирхгофом и Максвеллом сравнительные легкость и эффективность равновесного анализа в одномерном пространстве переменных. Термодинамические трактовки дополнительно выявили простоту включения в модель электрических и гидравлических цепей уравнений тепловых балансов. Плодотворность применения равновесного термодинамического моделирования в решении конкретных проблем развития и функционирования энергетики была проверена на примерах анализа: образования поллютантов при сжигании и переработке топлив, антропогенного загрязнителя атмосферы, транспорта энергоносителей, интегрированных энергетических систем. В исследованиях горения с наибольшей теплотой к настоящему времени удалось рассмотреть процесс образования оксидов азота при факельном сжигании канско-ачинского бурого угля. С помощью МЭПС и метода динамического программирования последовательно моделировались

три основных этапа данного процесса подготовки топливно-воздушной смеси и сжиганию, непосредственное горение, охлаждение движущейся смеси вследствие теплообмена с поверхностями нагрева. В анализе загрязнения атмосферы наряду с образованием и превращениями загрязнителей стала решаться задача их распределения в крупных территориальных регионах. Для ее решения использовались условные цепные модели. Было выявлено воздействие на процессы превращений поллютантов в атмосфере гидро- и ветроэнергетических установок. В моделировании транспорта энергоносителей и транспортной составляющей интегрированных энергосистем был выявлен ряд достоинств экстремальных, термодинамических модификаций цепных моделей, возможностей: единого физико-математического объяснения особенностей проводимых с их помощью вычислительных экспериментов и выбора способа их выполнения.

Даже при спорности отдельных из приведенных в докладе утверждений дальнейшее обсуждение отмеченных проблем взаимосвязей между равновесной и неравновесной термодинамикой, бесспорно, необходимо.

Список литературы

1. Лагранж Ж. Аналитическая механика / Ж. Лагранж. – М.–Л.: ГИТТЛ, 1950. – Т. 1. – 594 с.; Т.2 – 440 с.
2. Карно С. Размышления о движущей силе огня и машинах, способных развивать эту силу / С Карно // В: Второе начало термодинамики. Ред. А.К. Тимирязев. – М.–Л.: Гостехиздат, 1934. – С. 17–62.
3. Кирхгоф Г. Работы по электрическому току в проводящих средах / Г. Кирхгоф // Избранные труды. – М.: Наука, 1988. – с. 155–231.
4. Максвелл Д.К. Трактат об электричестве и магнетизме / Д.К. Максвелл. – М.: Наука, 1989. – Т.1. – 416 с.; Т. 2. – 432 с.
5. Пригожин И.Р. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур / И.Р. Пригожин, Д. Кондепуди. – М.: Мир, 2002. – 461 с.
6. Planck M. Zur Dynamik bewegten Systeme / M. Planck // Ann. Phys. – 1908. – Bd. 331, N.6. – S. 1–34.
7. Эйнштейн А. К квантовой теории / А. Эйнштейн // Собр. науч. тр. – М.: Наука, 1966. – Т. 3. – С. 328–335.
8. Ландау Л.Д. Собрание трудов / Л.Д. Ландау. – М.: Наука, 1969. – Т. 1. – 512 с.
9. Горбань А.Н. Обход равновесия: Уравнения химической кинетики и их термодинамический анализ / А.Н. Горбань. – Новосибирск: Наука, 1984. – 226 с.
10. Yablonsky G.S. Kinetic models of catalytic reaction / G.S. Yablonsky, V.I. Bykov, A.N. Gorban, V.I. Elokhin. – Amsterdam: Elsevier, 1991. – 400 p.
11. Каганович Б.М. Равновесная термодинамика. Проблемы и перспективы / Б.М. Каганович. – LAP Lambert Academic Publishing, 2015. – 239 с.
12. Каганович Б.М. Проблема незамкнутости термодинамики в системном энергетическом анализе / Б.М. Каганович, Н.И. Воропай, В.А. Стенников // Изв. Ан. Энергетика. – 2016. – № 5. – С. 57–66.
13. Каганович Б.М. Развитие моделей и методов теории цепей и их энергетических приложений / Б.М. Каганович, Н.И. Воропай, В.А. Стенников, Н.Н. Новицкий // Изв. АН. Энергетика. – 2017. – №6. – С. 24–32.

ИССЛЕДОВАНИЕ ОБЛАСТЕЙ ПОДГОТОВКИ СИЛЬНЕЙШИХ ЗЕМЛЕТРЯСЕНИЙ НА ОСНОВЕ АНАЛИЗА СПУТНИКОВЫХ ИЗМЕРЕНИЙ КОСМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ GRACE

В.Б. Кашкин¹, К.В. Краснощеков¹, Т.В. Рублева¹, М.А. Курако¹,
К.В. Симонов², А.Н. Мацулев²

¹Сибирский федеральный университет, *mkurako@gmail.com*

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

Введение

Исследование посвящено анализу особенностей изменения параметра EWH (Equivalent Water Height) над геоидом по спутниковым измерениям космической системы GRACE в сейсмоактивных районах сильнейших подводных землетрясений. В работе создан архив спутниковых данных GRACE. Выполнена интерпретация возмущённого состояния геосреды в области подготовки катастрофических землетрясений (2004-2013 гг.) по цифровым картам пространственного распределения параметра EWH.

Методы исследования гравитационного поля по спутниковым измерениям разработаны более 40 лет назад. Однако только в последние годы в современных космических гравиметрических миссиях таких как CHAMP (Challenging Mini-Satellite Payload, DLR, 2000-2010 гг.), GRACE (Gravity Recovery And Climate Experiment, NASA/DLR, 2002-2017 гг.) и GOCE (Gravity Field and Steady-State Ocean Circulation Explore, ESA, 2009-2013 гг.) реализовано непрерывное GPS-слежение за низкоорбитальными спутниками [1].

С помощью систем CHAMP, GRACE и GOCE были получены данные о гравитационном поле Земли с высокой точностью и высоким пространственным разрешением. Так, акселерометр спутника CHAMP имел точность $3 \cdot 10^{-9}$ м/с², что на порядок меньше точности прибора GRACE равного $1 \cdot 10^{-10}$ м/с² [2]. Архив данных, полученных с помощью аппаратуры спутника GOCE, содержит данные всего за 4 года. В то время как архив информации GRACE содержит спутниковые измерения за 15 лет, включая данные о пространственно-временных вариациях водных запасов.

В космическом проекте GRACE реализована технология «спутник-спутник» по схеме «низкий-низкий», суть которой состоит в измерении расстояний и скоростей изменения расстояния между ними. Два одинаковых спутника GRACE движутся на расстоянии 170-240 км друг за другом по круговой приполярной орбите с наклоном 89° [1]. Высота данной орбиты составляет около 450 км. На орбитальную плоскость каждого спутника влияют возмущающие ускорения, которые соответствуют первым производным гравитационного потенциала.

Аппаратура каждого из спутников системы GRACE состоит из: высокостабильного генератора частоты, микроволнового дальномера К-диапазона (K-Band Ranging system), GPS-приемника, астроблок, уголковые отражатели для лазерной локации, 2 акселерометра ACC и SuperSTAR.

Точность измерения расстояния между спутниками GRACE определяется дальномерами до 10 мкм, что позволяет получать данные о вариациях силы тяготения на основе методов дифференциальных измерений в системах с изменяемой геометрией расположения элементов [3]. Спутники пролетают над определенным участком Земли 1 раз в 30 дней, обеспечивая полное картирование земной поверхности.

В работе изучались особенности вариаций параметра эквивалентного уровня воды EWH над контуром геоида по спутниковым измерениям космической системы

GRACE в области подготовки сильнейших землетрясений для выявления связи с напряженно-деформированным состоянием геосреды.

В качестве объектов исследования выбраны сильнейшие подводные землетрясения с магнитудами [4]: $M=9.1$ (26 декабря 2004 г., около о. Суматра), $M=8.1-8.3$ (15 ноября 2006 г. и 13 января 2007 г., в районе о. Симушир), $M=8.8$ (27 января 2010 г., вблизи побережья Чили), $M=9.1$ (11 марта 2011 г., около восточного побережья о. Хонсю) и $M=8.3$ (24 мая 2013 г., недалеко от п-ова Камчатка в Охотском море).

1. Гравитационное поле и параметр EWN

Спутниковые измерения КС GRACE высоты водной поверхности по отношению к контуру геоида позволяют определять отклонение свободной поверхности моря от его среднего уровня по спутниковой трассе. Под геоидом понимается эквипотенциальная поверхность поля силы тяжести, которая соответствует среднему уровню моря в состоянии покоя [5]. Ежемесячные данные, полученные с сайта [6], содержат информацию об отклонении поверхности Мирового океана от геоида в единицах измерения эквивалентного уровня воды EWN (в см).

В основном параметр EWN используется для анализа динамической топографии океанов и уточнения параметров внешнего гравитационного поля Земли [7]. Метод разложения гравитационного потенциала Земли по сферическим функциям описан в [3, 5]. Этот метод представления потенциала используется при изучении гравитационного поля по возмущенному движению спутников.

Перераспределение воды в гидросфере происходит в тонком слое около поверхности Земли шириной всего в несколько километров. Массы между геоидом и водной поверхностью имеют постоянную плотность ρ_w равную 1000 кг/м^3 [8]. Рассчитывается EWN на основе гармонических коэффициентов моделей геопотенциала минус коэффициенты средней модели (EIGEN-6C) [7].

Это глобальная модель, исходными данными которой являются наземные гравиметрические измерения, лазерные траекторные наблюдения спутников LAGEOS (1985-2010 гг.), а также спутниковая информация КС GOCE и GRACE. В высокостепенной модели EIGEN-6C разложение геопотенциала происходит до степени порядка 1420, что соответствует 14-километровому пространственному разрешению [9]. Эквивалентный уровень воды (параметр EWN) находится из отношения поверхностной плотности $\Delta\sigma$ к плотности воды ρ_w :

$$EWN = \Delta\sigma / \rho_w.$$

2 Анализ результатов

На основе спутниковых данных GRACE [6] построены цифровые карты и трехмерные изображения пространственно-временного распределения параметра EWN с периодом в 30 суток. Пример карты в изолиниях за декабрь 2004 г. для области подготовки катастрофического землетрясения в районе о. Суматры представлен на рисунке 1, а. На рисунке 1, б показано изображение очаговой области этого землетрясения в виде 3D модели (за февраль 2005 г.). На рисунках 1, а и 1, б приведена шкала параметра EWN (в см). Представленные изображения на рисунке 1, полученные с помощью методов спутниковой альтиметрии, отображают особенности строения геосреды в период катастрофического события.

В работе более детально рассмотрена очаговая область сильного землетрясения, произошедшего у побережья Чили 27 февраля 2010 г., по данным геологической службы США имело магнитуду $M_w=8.8$ с координатами гипоцентра 35.91°S , 72.73°W и глубиной 35 км [4]. Отметим, что район исследования характеризуется частыми подводными землетрясениями. Похожие катастрофические события произошли в 2014 и 2015 годах.

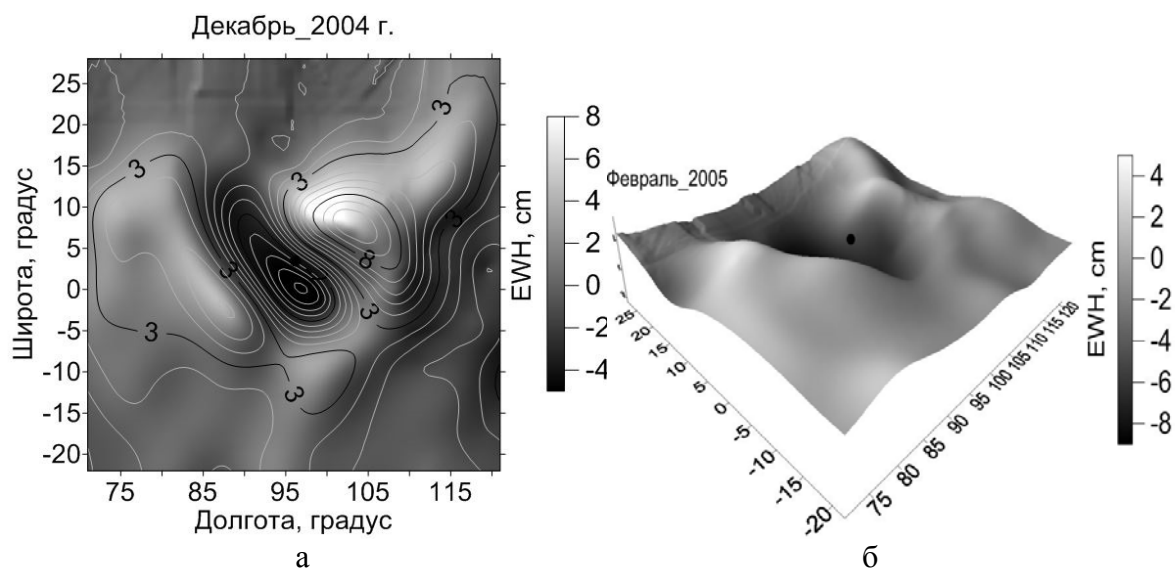


Рис. 1. Цифровая карта в изолиниях за декабрь 2004 г. (а) и 3D модель за февраль 2005 г. (б) распределения параметра EWN землетрясения в районе о. Суматра

На рисунке 2 показана цифровая карта в изолиниях пространственного распределения EWN для сейсмоактивного района вдоль побережья Чили за февраль 2010 г. в период подготовки и возникновения ожидаемого сильнейшего землетрясения по спутниковым данным GRACE. Точкой на рисунке 2 обозначен гипоцентр землетрясения. Можно увидеть аномальную область с повышенными значениями параметра EWN. Выявлено, что гипоцентр землетрясения расположен вблизи оси аномалии, которая ориентирована субмеридионально, на максимальных градиентах параметра EWN. Интерпретация направленности выявленной аномалии связана с геометрией зоны субдукции литосферных плит.

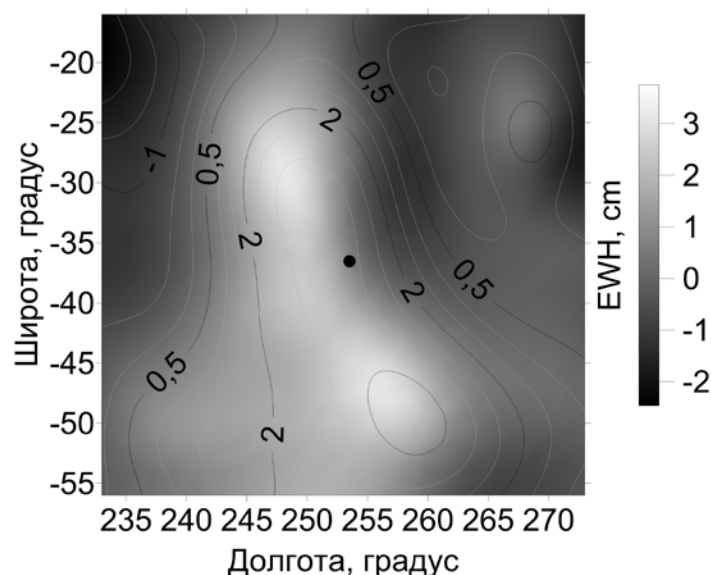


Рис. 2. Цифровая карта в изолиниях Чилийского землетрясения за февраль 2010 г.

Построен график изменения EWH в гипоцентральной точке за 5 месяцев до сейсмического события и 5 месяцев после катастрофического землетрясения с $M_w=8.8$ (рис. 3). Характерное изменение параметра EWH, приведенное на рисунке 3, показывает процесс подготовки сильнейшего землетрясения и его афтершоковую разрядку. За «0» на горизонтальной временной шкале на рисунке 3 принята дата рассматриваемого землетрясения. «Отрицательная часть» этой шкалы характеризует процесс подготовки сильнейшего землетрясения, «положительная часть» – афтершоковую активность. Вертикальная шкала на рисунке 3 отражает изменения параметра EWH, характеризуя резкое увеличение границы водной поверхности в процессе делатации. Под делатацией понимается разуплотнение верхних слоев геосреды и насыщения их водой.



Рис. 3. Динамика изменения параметра EWH с периодом 1 $T=30$ суток во время процесса подготовки сильнейшего землетрясения и его афтершоковой разрядки

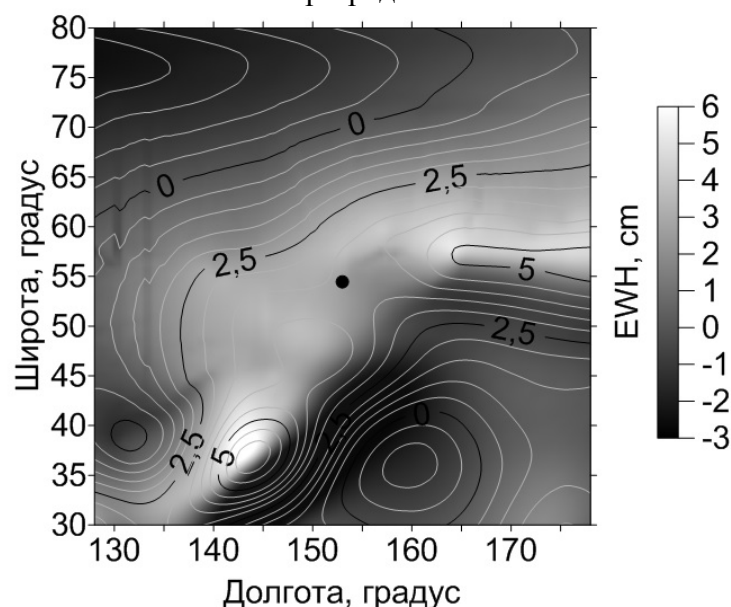


Рис. 4. Цифровая карта в изолиниях Охотского землетрясения за май 2013 г.

При глубинном землетрясении (Охотское море, май 2013 г.) в области подготовки наблюдалась зона повышенных значений EWH (рис. 4). Гипоцентр землетрясения располагался на глубине 602 км и на рисунке 4 он обозначен точкой. На

цифровой карте показано, что аномальная область с повышенными значениями параметра EWN ориентирована в направлении ЮЗ-СВ. Из рисунка 4 видно, что гипоцентр землетрясения расположен вблизи оси аномалии на максимальных градиентах параметра EWN. Важно отметить, что в отличие от субдукционных землетрясений, которые имеют выраженную линейную геоструктуру, глубинное событие характеризуется локализованной очаговой областью.

Заключение

В результате проведенных исследований сформирован архив спутниковых измерений GRACE, содержащий информацию о данных параметра EWN (эквивалентного уровня воды). Параметр EWN в период подготовки и релаксации сильнейших землетрясений изменяется над контуром геоида. Выполнен анализ данных GRACE для ряда областей процесса подготовки известных подводных землетрясений (2004-2013 гг.). Построены цифровые карты изменения EWN над геоидом в очаговых зонах изучаемых сильнейших землетрясений. Указанный параметр может служить основой для оценки геодинамических рисков возникновения разрушительных цунамигенных землетрясений для прибрежных сейсмоопасных территорий.

Список литературы

1. Observation of the System Earth from Space – CHAMP, GRACE, GOCE and Future Missions GEOTECHNOLOGIEN. Science Report. №. 20. Advanced Technologies in Earth Sciences / F. Flechtner, N. Sneeuw, W-D. Schuh (Eds.). — Berlin, Springer, 2014.
2. Гансвинд И.Н. Современные космические технологии изучения Земли как системы И.Н. Гансвинд // Электронные библиотеки. — 2017. — Т. 20. — № 1. — С. 39-49.
3. Кашеев Р.А. Современные методы спутниковой гравиметрии / Р.А. Кашеев. — Казань: Казан. ун-т. — 2015. — 45 с.
4. USGS. Latest Earthquakes [Электронный ресурс]: — Режим доступа: URL: <https://earthquake.usgs.gov/earthquakes/map>
5. Гофман-Велленгоф Б. Физическая геодезия / Б. Гофман-Велленгоф, Г. Мориц. — М.: Изд-во МИИГАиК. — 2007. — 420 с.
6. NASA. ftp PO.DAAC [Электронный ресурс]: — Режим доступа: URL: ftp://podaac-ftp.jpl.nasa.gov/allData/tellus/L3/ocean_mass/RL05/ascii/
7. Wouters B. GRACE, time-varying gravity, Earth system dynamics and climate change. Review Article Rep. / B. Wouters, J.A. Bonin, D.P. Chambers, R.E.M. Riva, I. Sasgen and J. Wahr // Prog. Phys. — 2014. — V. 77. — 41 p.
8. Wahr J. Time variability of the Earth's gravity field: Hydrological and oceanic effects and their possible detection using GRACE / Wahr J., Molenaar M., Bryan F., Wahr J., Molenaar M., Bryan F. // Journal of Geophysical Research: Solid Earth. — 1998. — V. 103. — № B 12. — P. 30205-30229.
9. Канушин В.Ф. Исследование современных глобальных моделей гравитационного поля Земли / В.Ф. Канушин, А.П. Карпик, И.Г. Ганагина, Д.Н. Голдобин, А.М. Косарева, Н.С. Косарев. — Новосибирск: СГУГиТ. — 2015. — 270 с.

ВЛИЯНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ РАЗЛИЧИЙ СИЛЬНЕЕ ВЛИЯНИЯ ТАКСОНОМИЧЕСКИХ РАЗЛИЧИЙ ДЛЯ ГЕНОВ СЕМЕЙСТВА *atp* МИТОХОНДРИЙ ГРИБОВ

А.И. Колесникова², В.Д. Федотовская², Т.О. Шпагина¹, М.Г. Садовский^{1,2}

¹Институт вычислительного моделирования СО РАН,

²Сибирский федеральный университет, ИФБиТ,

kolesnikova.denovo@gmail.com, viktoriia.fedotovskaia@gmail.com,

shpagusa@mail.ru, msad@icm.krasn.ru

Введение

Развитие методов секвенирования генетических последовательностей сделало доступным самый обширный материал для исследований. Доступные исследователю генетические материалы делают содержательной постановку вопроса о связи структуры и функции различных генетических последовательностей, а также о связи структуры этих генетических последовательностей и таксономии их носителей. С одной стороны, такая постановка вопроса не нова: подобного рода вопросы возникли сразу же с момента выяснения структуры ДНК; с другой стороны, от точности и строгости постановки зависит очень и здесь возможны разные варианты, каждый со своей спецификой, не сводимый один к другому.

Данная работа направлена на изучение связи в системе трёх объектов: структуры нуклеотидных последовательностей, функциональной роли этих нуклеотидных последовательностей и таксономии носителей упомянутых нуклеотидных последовательностей. Ранее подобная постановка использовалась для анализа связи структуры и таксономии на примере геномов хлоропластов [1 – 3] либо митохондрий [4]. Обсудим особенности постановки задачи подробнее.

В качестве генетического материала изучались нуклеотидные последовательности генов АТФаз митохондрий некоторых грибов. Митохондрии являются очень удобным объектом исследований, поскольку митохондрии из организмов разных видов тем не менее имеют одну и ту же функции, и это постоянство более чем велико. Кроме того, размер геномов митохондрий грибов сравнительно невелик ($\approx 10^6$ п.н.), что также делает их удобным объектом исследований. Поскольку целью нашей работы было изучение связи структуры, функции и таксономии на уровне отдельных генов (а не геномов в целом), постольку те нуклеотидные последовательности, которые были использованы в работе, не превышали по длине 3000 п.н.

Под структурой в рамках настоящей работы мы будем понимать частотный словарь триплетов, определяемый по последовательности гена. Точнее, мы будем рассматривать два типа частотных словарей, отличающихся величиной шага считывания. Дадим более строгое определение. Пусть $\mathfrak{Z}$ — нуклеотидная последовательность генома митохондрии того или иного гриба. Мы будем полагать, что геном идеален: в нём нет иных символов, кроме тех, которые составляют его алфавит $\aleph = \{A, C, G, T\}$, и аннотация генома исчерпывающе описывают любой его участок. На основе аннотации выделим в геноме последовательность L длиной M , соответствующую тому или иному гену. В рамках настоящей работы выделялись последовательности L генов АТФаз (*atp6*, *atp8* и *atp9*) в двух вариантах: в форме гена, содержащегося в ДНК (то есть, с включением интронов) и в форме зрелой мРНК, где все интроны были исключены.

Частотные словарь толщины 3 строились двумя способами. Вообще, под частотным словарем $W_{(3,t)}$ толщины 3 будем понимать список всех троек $\omega = v_1 v_2 v_3$ идущих

поряд нуклеотидов, выделяемых в последовательности L окном считывания длиной 3 нуклеотида, перемещающимся вдоль по L с шагом в t нуклеотидов. В настоящей работе рассматривались словари $W_{(3,t)}$ с $t=1$ и $t=3$; впредь мы их будем обозначать W_3 и $\overline{W}_3$, соответственно. Для построения частотного словаря необходимо каждый триплет $\omega \in W_3$ ($\omega \in \overline{W}_3$, соответственно) снабдить его частотой. Частота f_ω — это отношение числа копий n_ω данного слова к общему числу всех триплетов N , где N — сумма всех n_ω :

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

Для исследования были использованы данные, содержащиеся в открытом доступе в базе NCBI-банка. Был отобран 214 геномов митохондрий различных грибов пяти отделов. С помощью программы CLC из всех геномов выделялись фрагменты, соответствующие генам семейства *atp*; при этом выделение делалось в двух формах: в форме собственно гена (т.е. с включением в последовательность интронов) и в форме CDS (последовательности, не содержащей интронов). Затем каждая из последовательностей преобразовывалась в частотные словари двух типов — W_3 и $\overline{W}_3$, соответственно, с помощью *ad hoc* программы. Далее с помощью программы *VidaExpert* (<http://bioinfo-out.curie.fr/projects/vidaexpert/>) анализировалось распределение точек (частотных словарей) в пространстве частот триплетов.

Методы кластеризации

Переход от последовательностей к частотным словарям позволяет использовать средства анализа многомерных данных, в частности — различные методы кластеризации данных и их визуализации. В рамках настоящей работы использовалось два метода кластеризации: линейный (метод динамических ядер) и нелинейный (метод упругих карт). Опишем кратко каждый из них.

Метод динамических ядер является классическим методом классификации; она строится с помощью линейных делителей, минимизирующих суммарные расстояния от точек, составляющих класс, до плоскостей, делящих множество на классы; исчерпывающее описание может быть найдено, например, в [5]. Кроме метода динамических ядер, мы активно использовали визуализацию и кластеризацию данных на основе упругих карт. Кратко опишем эту процедуру.

На первом шаге найдём первую и вторую главные компоненты для множества данных и построим на них как на осях плоскость. Выделим в этой плоскости подмножество (обычно квадрат) такого размера, чтобы все данные проектировались внутрь этого квадрата. Затем найдём все проекции точек (частотных словарей, в нашем случае) на этот квадрат.

На третьем шаге соединим каждую точку данных с её проекцией математической пружиной; такая пружина обладает бесконечной растяжимостью и её свойства не меняются по мере растяжения. На четвёртом шаге разрешим исходно жёсткой поверхности квадрата изгибаться и растягиваться; иными словами, заменим исходный квадрат на эластичную мембрану, которая может деформироваться и отпустим всю систему так, чтобы она достигла конфигурации, соответствующей минимуму общей энергии деформации. Важным ограничением в такой процедуре является сохранение топологии исходного множества: эластичную мембрану нельзя разрывать и склеивать.

На пятом шаге переопределим положение каждой точки исходного множества на деформированной мембране, а именно, найдём ортогональную проекцию каждой точки. Наконец, удалим все математические пружины, позволив мембране занять исходное положение и стать снова плоским квадратом. Получившаяся конструкция и будет называться упругой картой с данными [6].

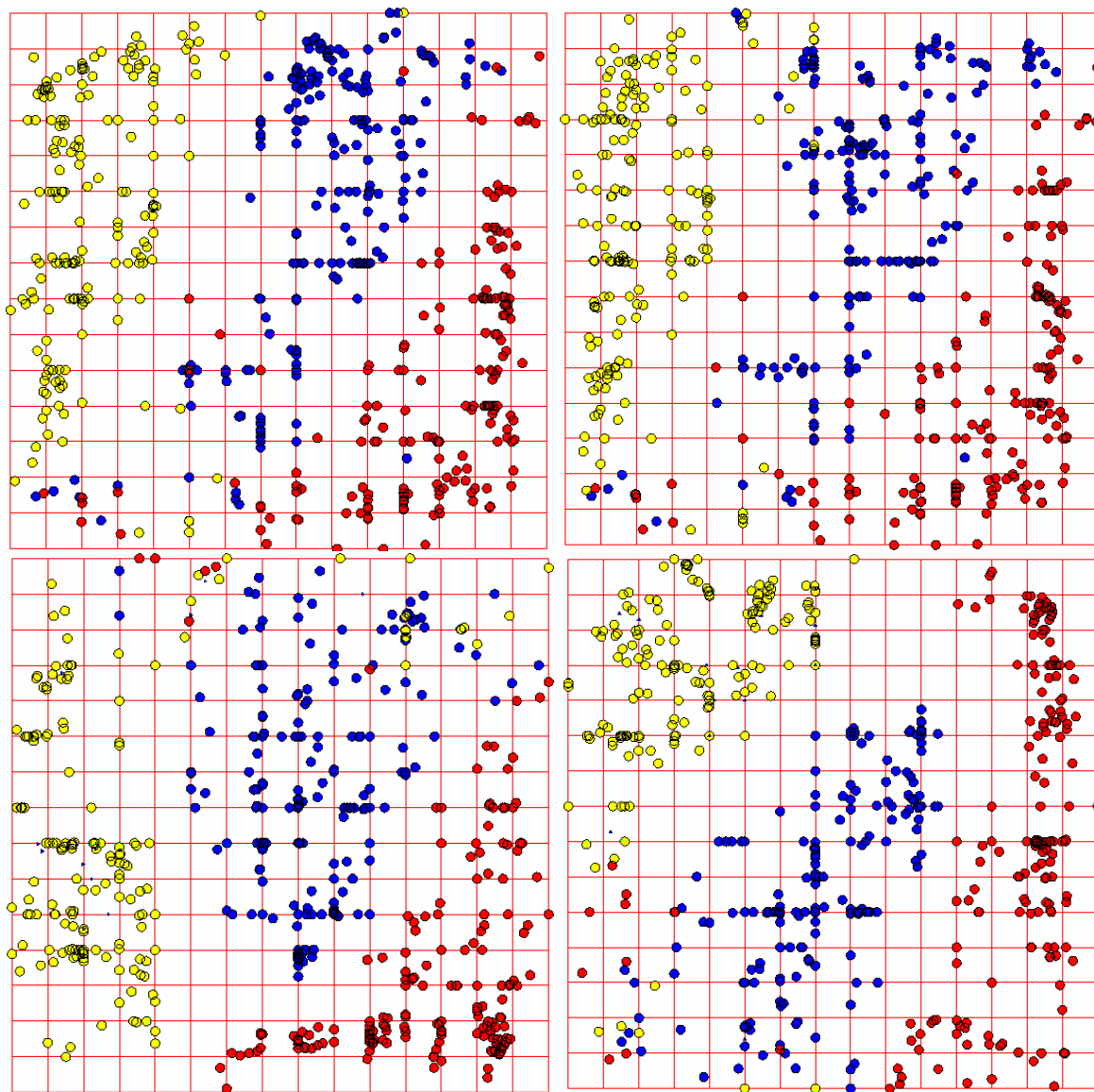


Рис. 1. Распределение генов *atp6* (синие кружки), *atp8* (красные кружки) и *atp9* (жёлтые кружки) на упругой карте для словаря W_3 (вверху), последовательностей CDS (слева) и последовательностей генов (справа), а также для словаря W_1 (внизу), последовательностей CDS (слева) и последовательностей генов (справа).

Результаты и обсуждение

Было проанализировано четыре типа баз данных: для словарей W_3 и $\bar{W}_3$, каждый из которых вычислялся для последовательностей генов и CDS последовательностей. Распределение генов визуализировалось с помощью программы *VidaExpert*. На рисунке 1 слева показано распределение всех генов семейства АТФаз митохондрий для 214 видов

грибов. Аналогично, справа на этом рисунке показано распределение тех же генов АТ-Фаз для случая подсчёта частот триплетов со сдвигом рамки считывания на один нуклеотид. На каждом из этих рисунков цветом выделены соответствующие гены АТФаз: *atp6*, *atp8* и *atp9*; маркировка типа генов при этом одинакова на обоих рисунках. Из Рис. 1 хорошо видно, что кластеры, явным образом выделяемые методом упругих карт по локальной плотности, содержат одинаковые гены (вне зависимости от формы последовательности). Картина локальной плотности для всех четырёх случаев (словари W_3 и $\overline{W}_3$, гены и CDS) показаны на Рис. 2.

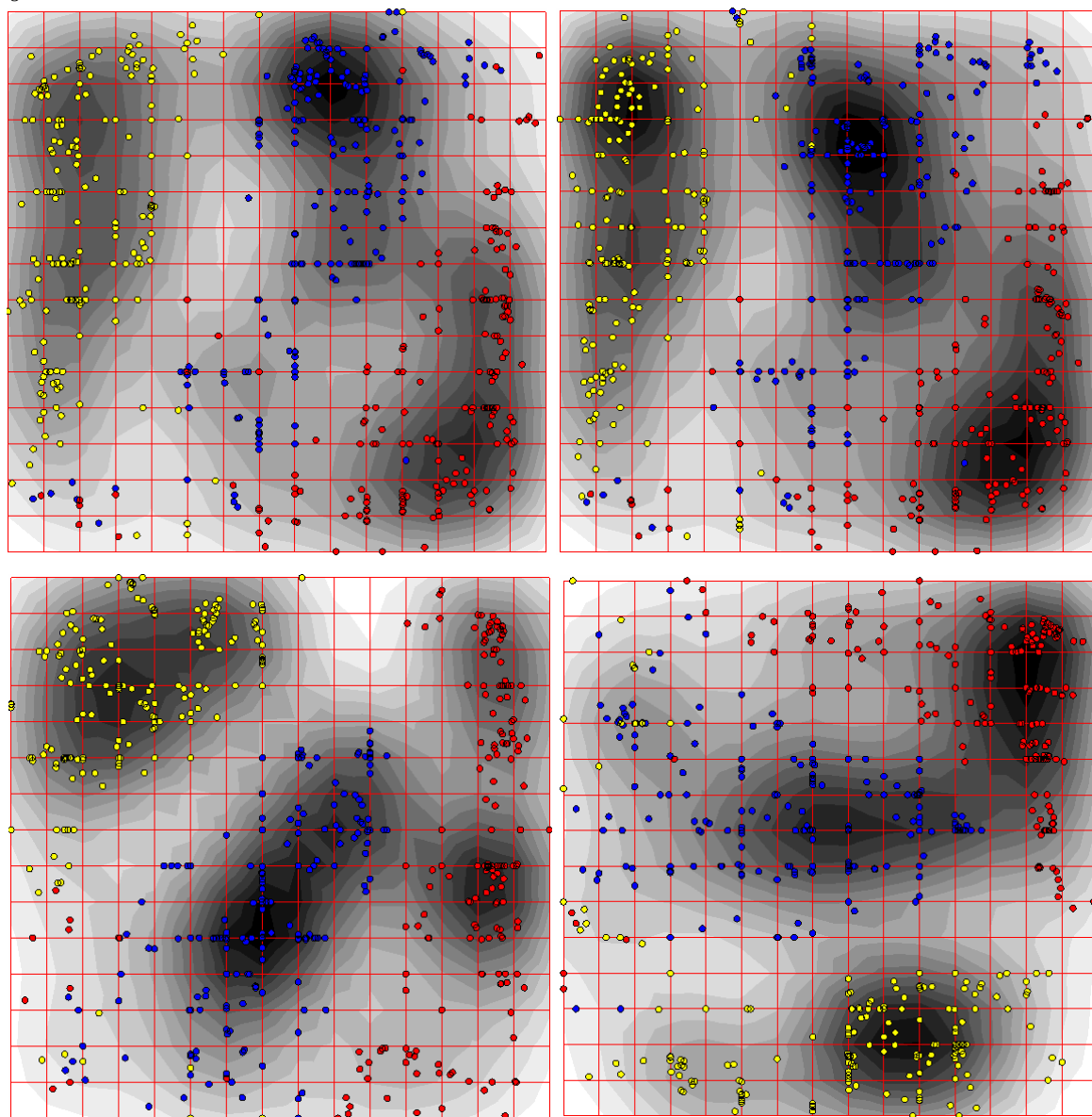


Рис. 2. Распределение локальной плотности на упругой карте, обозначения те же, что и на Рис. 1.

Подчеркнём, что в отличие от ситуации, описанной в [1 – 3], где изучались три частотных словаря вида $\overline{W}_3$, для трёх последовательных положений стартового нуклеотида рамки считывания, мы рассматривали лишь единственный словарь, соответствующий тому старту, который обеспечивает трансляцию. Как видно из приведённых ре-

зультатов, различия между картиной распределения, порождаемой словарём W_3 и словарём $\bar{W}_3$, весьма малы — по-видимому, ими можно пренебречь для целей дальнейшего анализа и не проводить построения кластеризации для словарей $\bar{W}_3$. Такое малое различие в картинах кластеризации для этих двух случаев может означать, что различия в статистических свойствах нуклеотидных последовательностей, соответствующих кодирующим и не кодирующим участкам генома, гораздо сильнее, чем различия в статистических свойствах словарей типа $\bar{W}_3$, отличающихся стартовым положением рамки считывания в кодирующей области.

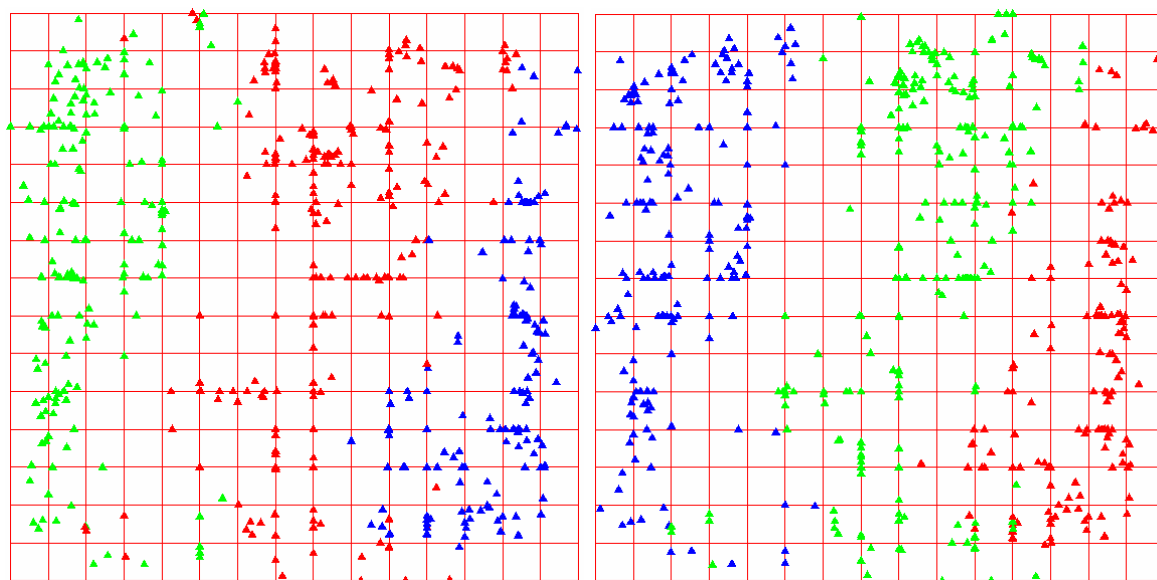


Рис. 5. Примеры классификации методом динамических ядер. Слева CDS последовательности, справа — гены; цветом выделены классы, выделяемые методом динамических ядер.

Перейдём теперь к рассмотрению классификации точек, соответствующих генам АТФаз, получаемым методом динамических ядер; данный метод исчерпывающе описан в литературе, см., напр., [5]. При построении классификации объектов этим методом необходимо иметь в виду следующие обстоятельства, которые оказывают существенное влияние на получаемую картину классификации: её устойчивость и различимость (число выделяемых классов). Поясним сказанное. Метод динамических ядер начинает построение классификации со случайного распределения точек по K классам; в силу этого нет никакой гарантии того, что ряд последовательных реализаций метода всегда будет определять в результате одну и ту же конфигурацию точек при распределении их по кластерам. Один из подходов к решению проблемы устойчивости классификации — выявить те точки, которые устойчиво (например, не менее чем в 80 % всех реализаций метода) попадают в один и тот же кластер и те, которые меняют своё положение в классификации (так называемые волатильные точки). В ходе нашей работы мы проверяли устойчивость классификаций.

Вторая проблема — различимость классов. Может случиться такое, что метод строит внешне хорошую классификацию, однако классы, выделяемые методом, не являются различимыми: они слишком близко располагаются в пространстве частот друг к другу. Проверка различимости состоит в сравнении расстояния между центроидами классов с радиусами этих классов. Самое сильное условие различимости состоит в том,

что расстояние между классами должно быть не меньше суммы радиусов соответствующих классов, самое слабое — в том, что расстояние между центроидами должно быть не меньше большего из двух радиусов. В нашей работы мы не проверяли различимость классов.

Построение классификации методом динамических ядер показало, что классификация с удовлетворительной устойчивостью строится при делении на два и на три класса; построение классификаций с бóльшим числом классов даёт весьма мало устойчивую картину распределения. Устойчиво классифицировались словари W_3 ; построение классификации для словарей $\overline{W}_3$ давал неустойчивую, хотя и интересную картину: с примерно равными частотами в серии построений наблюдались классификации, в которых классы выделялись так, что объединяли в себя гены одного вида, любые попарные сочетания генов и, наконец, вырожденную классификацию, состоящую фактически из одного класса. Такое отличие классификаций, наблюдаемых для словарей двух разных типов, заслуживает дальнейшего изучения.

По нашим наблюдениям, классификация методом динамических ядер частотных словарей триплетов генов АТФаз митохондрий грибов на два класса давала устойчивое разбиение на два класса. Аналогично, разбиение на три класса давало устойчивое разбиение на три класса. Увеличение числа классов (т.е. четыре класса и выше) приводило к заметному падению устойчивости наблюдаемой классификации: и доля волатильных точек, и их конфигурации были очень изменчивы.

Заключение

Основной результат настоящей работы состоит в следующем: функциональные различия в генах, даже принадлежащих одному семейству (конкретно — генам АТФаз митохондрий грибов) оказываются «сильнее» влияния таксономии. Это означает, что построение классификации без учителя по семейству генов на основе исключительно их триплетного состава приводит к разбиению по классам, при котором превалирующим фактором различия классов является функция соответствующих генов, а не их принадлежность к тому или иному виду.

Список литературы

1. Садовский М.Г., Сенашова М.Ю., Малышев А.В. Восьмикластерная структура геномов хлоропластов наземных растений // ЖОБ. 2018, т.79(2), С.124 – 134.
2. Садовский М.Г., Сенашова М.Ю., Малышев А.В. Chloroplast Genomes Exhibit Eight-Cluster Structuredness and Mirror Symmetry // LNBI, vol.10813, 2018, pp.186 – 196.
3. Садовский М.Г., Сенашова М.Ю., Путинцева Ю.А. Eight Clusters, Synchrony of Evolution and Unique Symmetry in Chloroplast Genomes: The Offering from Triplets. В: Chloroplasts and Cytoplasm: Structure and Functions (ser. Cell Biology Research Progress), Eds. Carl Dejesus and Lourdes Trask, 2018, Nova Science Publishers, Inc., N.-Y., pp.25 – 95.
4. Садовский М.Г., Путинцева Ю.А., Чернышова А.И., Федотова В.С. Genome structure of organelles strongly relates to taxonomy of bearers // LNBI, vol.9043, Part II, 2015, pp.481 – 490.
5. Фукунага К. Введение в статистическую теорию распознавания образов. М.: Наука, 1979. — 368 с.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНОЙ СКОРОСТНОЙ МОДЕЛИ ГРУНТОВОЙ ТОЛЩИ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ ВЕРТИКАЛЬНОГО СЕЙСМИЧЕСКОГО ПРОФИЛИРОВАНИЯ

В.А.Миронов^{1,2}

¹Красноярский филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института вычислительных технологий СО РАН – Специальное конструкторско-технологическое бюро «Наука» (СКТБ «Наука» ИВТ СО РАН)

²НП «Экологический центр рационального освоения природных ресурсов», *vasyakun@mail.ru*

Вертикальное сейсмическое профилирование (ВСП) – метод скважинной сейсморазведки, с помощью которого изучают особенности волнового поля во внутренних точках грунтовой толщи, который является также частью комплекса методов сейсмического микрорайонирования (СМР) [1]. Одной из задач метода ВСП является определение скоростных характеристик геологического разреза по вертикальным годографам – графикам зависимости времени прихода полезной волны с глубиной.

Неверное определение значений скоростей распространения упругих волн и мощностей скоростных слоев является распространенной проблемой при выполнении работ по СМР, которая приводит впоследствии к некорректной оценке сейсмической опасности. Используемые в настоящее время методы обработки данных ВСП базируются на субъективной интерпретации исходных данных, и не обеспечивают необходимой однозначности и точности получаемых результатов. Поэтому, для повышения точности и надежности полученных результатов необходимо разработать методы менее зависимые от субъективных факторов.

Суть метода заключается в регистрации упругих механических колебаний, распространяющихся в геологической среде, помещенными в скважину сейсмоприемниками от источника, расположенного на поверхности. Результатом являются сейсмограммы – записи волнового поля от каждого пункта возбуждения. По полученным сейсмограммам определяют время регистрации первых вступлений полезных волн и в результате получают вертикальные годографы от каждого пункта возбуждения волн.

В общем случае, определение скоростной модели грунтовой толщи по данным ВСП заключается в следующем. Вертикальный годограф усредняется прямыми линиями (отрезками). Интервал глубин, соответствующий каждому прямолинейному отрезку, характеризуется постоянным значением скорости распространения в нем упругих волн и может рассматриваться как однородный слой. Скорость в таком слое называется пластовой скоростью, а величина ее определяется по угловому коэффициенту соответствующего прямолинейного участка [2].

Для определения оптимальной скоростной модели грунтовой толщи на основе данных ВСП разработана следующая методика, где входными данными являются вертикальные годографы от каждого пункта возбуждения волн. Вначале годографы, значения которых по времени на каждой глубине регистрации выходит за рамки значения 2σ (удвоенного значения величины стандартного отклонения), исключаются из рассмотрения. Вычисляется среднее значение времени на каждой глубине, и данная зависимость времени от глубины является в дальнейшем рабочей. Выполняется вычисление интервальной скорости, которое осуществляется по разности времен пробега к двум соседним сейсмоприемникам и разности расстояния между ними. Интервальная скорость необходима для расчёта стандартного отклонения скорости в пределах выделенных слоев и для визуального отображения полученной информации. Также задаются

глубины реальных геологических границ. Далее задается первая допустимая квадратичная ошибка, которая допускается при выделении прямых отрезков на вертикальном годографе. Первым значением задается 0,01 и далее с шагом 0,001 до значения 0,2.

Считаем, что первые три точки принадлежат одному скоростному слою (порядок точек идет от самой ближней к поверхности по глубине, до самой дальней), при этом точка k является первой в скоростном слое, а рассматриваемая – четвертая точка (точка j). Выполняем расчет квадратичной ошибки модельной точки построенной по МНК от реальной по формуле 1:

$$\sigma^2_j = (H_j - (t_j \cdot a + b))^2, \quad (1)$$

где H_j – глубина на точке j ;

t_j – время на точке j ;

a, b – коэффициенты, полученные по методу наименьших квадратов (МНК) для прямой, построенной от точки k до точки $j-1$.

Если рассчитанная квадратичная ошибка меньше допустимой ошибки, то эта точка является продолжением скоростного слоя и рассматривается уже следующая точка, а коэффициенты a и b , рассчитываются по МНК уже для четырех точек. Если рассчитанная квадратичная ошибка больше допустимой ошибки, то эта точка и две следующие являются новым скоростным слоем, поэтому производим расчет пластовой скорости выделенного скоростного слоя по формуле 2:

$$V_{пл} = \frac{H_{j-1} - H_k}{t_{j-1} - t_k}, \quad (2)$$

где H_{j-1}, H_k – глубины точки k и точки $j-1$;

t_{j-1}, t_k – время на точке $j-1$ и k .

После этого, переменным j и k присваиваются новые значения порядковых точек на вертикальном годографе, а именно $k = j$, $j = k + 3$. После перебора всех точек на годографе рассчитывается стандартное отклонение интервальных скоростей относительно вычисленных пластовых скоростей в выделенных слоях. В конце производится расчет стандартного отклонения разности заданных геологических границ и границ выделенных скоростей относительно нуля по формуле 3:

$$\sigma = \left(\frac{\sum \Delta H_i^2}{n-1} \right)^{1/2}, \quad (3)$$

где $\sum \Delta H_i^2$ – сумма разностей расстояний между ближайшими глубинами скоростных слоев и геологических границ;

n – количество разностей геологических и выделенных скоростных границ.

Расчет по формуле 3 выполняется для численной оценки сходимости границ, чем меньше значение – тем больше сходимость. После задается новое значение допустимой квадратичной ошибки, и методика начинает работать заново по всем точкам годографа. Таким образом, мы имеем, целый набор вариантов распределения скорости с глубиной. Полученные статистические данные позволяют обоснованно выделить прямолинейные участки на вертикальном годографе по данным ВСП. Предложенная методика определения скоростей распространения упругих волн на вертикальных годографах проводилась и разрабатывалась в пакете математического моделирования MATLAB. Блок-схема разработанной методики обработки данных ВСП представлена на рисунке 1.

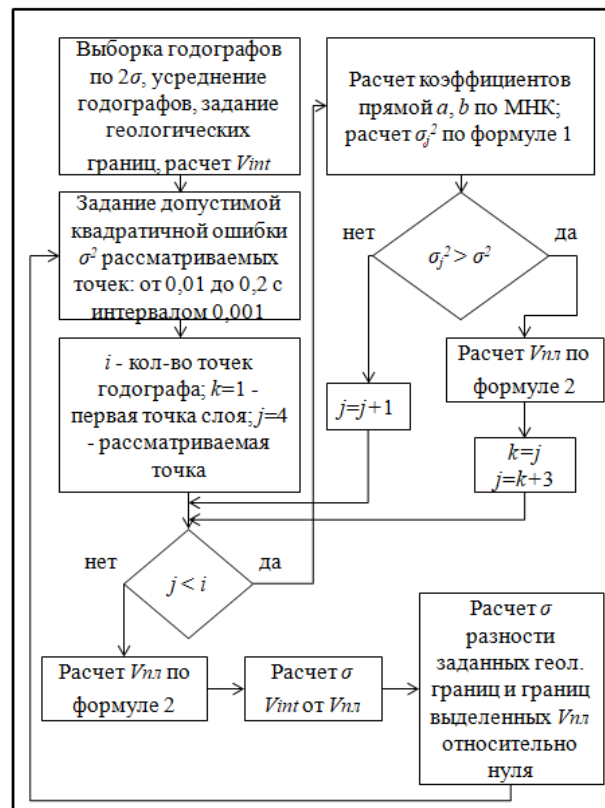


Рис.1. Блок-схема разработанной методики обработки ВСП

На рисунке 2 изображены графики выделенных скоростных слоев на усредненном вертикальном годографе и график распределения скорости с глубиной, полученные в результате обработки данных ВСП по предложенной методике. Величина допустимой квадратичной ошибки составила 0,037 при минимальном значении численной оценки сходимости границ 1,291, полученном по формуле 3.

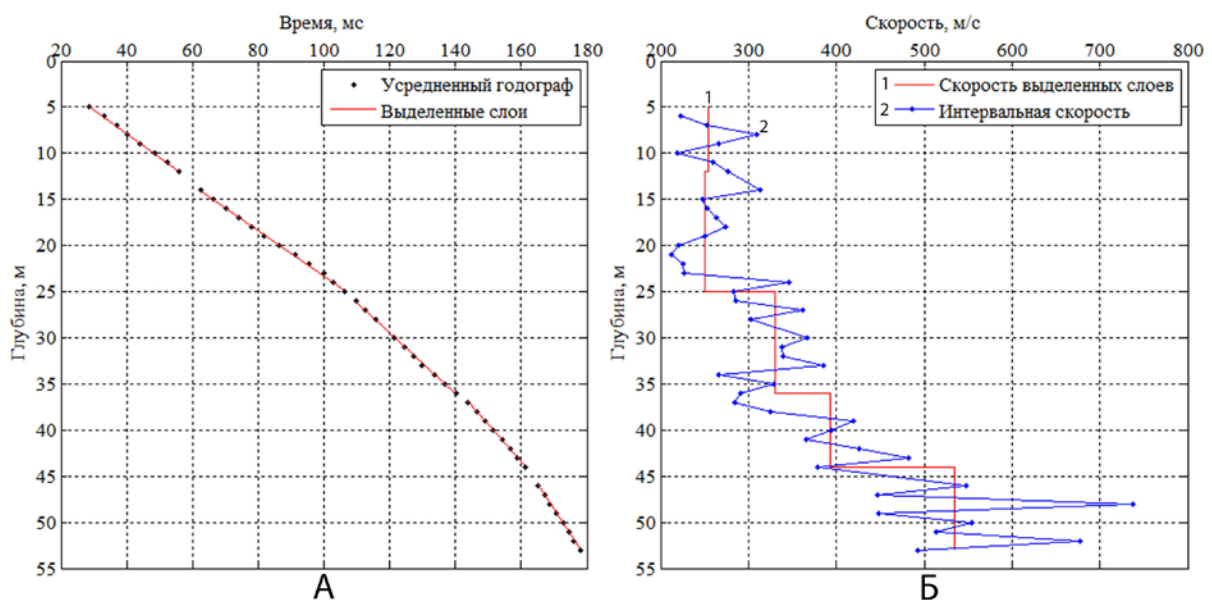


Рис.2. Выделенные скоростные слои на вертикальном годографе (А) и график распределения скорости с глубиной (Б)

В таблице представлены модельные и реальные данные. Совпадение полученных скоростных границ с геологическими границами в пределах разрешающей способности по глубине разработанной методики (2 метра, при расстоянии между сейсмоприемниками в 1 метр), говорит о высокой достоверности полученных результатов.

Таблица

Таблица, содержащая модельные и геологические параметры скоростных слоев

№ слоя	Глубина от, м	Глубина до, м	Скорость, м/с	σ скорости, м/с	Геологическое описание
1	5	13	255	32	от 6,5 до 14,0 м суглинок пластичный голубовато-серый
2	14	25	250	41	от 14,0 до 19,4 м суглинок пластичный буровато-серый; от 19,4 до 25,5 м глина темно-серая
3	26	36	330	39	от 25,5 до 35,0 м суглинок легкий твердый
4	37	45	393	62	от 35,0 до 48,3 м суглинок легкий твердый с прослоями песка
5	46	53	535	76	от 48,3 до 60 м суглинок тяжелый твердый

Значения скорости распространения упругих волн используются в большинстве расчетных методах сейсмического микрорайонирования. Поэтому от точности и надежности определение скоростей распространения упругих волн напрямую зависит корректность оценок сейсмической опасности полученных на стадии СМР.

Список литературы

1. Баянов, А.С. Вертикальное сейсмическое профилирование нефтяных и газовых скважин: учебное пособие / А.С. Баянов, В.П. Меркулов, Д.Ю. Степанов. — Томск: Изд-во ТПУ, 2009. — 100 с.
2. Алешин, А.С. Континуальная теория сейсмического микрорайонирования: научное издание / А.С. Алешин. — М.: Научный мир, 2017. — 302 с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ КОНДЕНСАТА ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ

А.В. Попов

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова,
кафедра современных специальных материалов, Popov.Barnaul@mail.ru

Впервые о конденсате возбужденных состояний (КВС) или Ридберговской материи упоминается в работе [1]. В экспериментальных работах [2] и [3] было обнаружено значительное снижение работы выхода электрона до 0,2 эВ и высокая электропроводность при образовании кластеров из атомов цезия в ридберговских состояниях. Похоже, что существование изолированной области метастабильной неидеальной плазмы [4] не является исключительным свойством одного лишь цезия [5]. В [6] отмечено, что атомы щелочных металлов при энергиях возбуждения, близких к энергии ионизации, достигают размеров ($10^{-6} - 10^{-5}$) см и могут образовать метастабильный конденсат при плотности атомов $\sim (10^{17} - 10^{18}) \text{ см}^{-3}$. В [7] упоминается о кластерах КВС углеводородов и о водородных слоях конденсата возбужденных состояний на поверхности. В работе [8] экспериментально исследована возможность образования конденсата возбужденных атомов в газовом разряде аргона при добавлении в него паров натрия. Однако, несмотря на достаточно обширную экспериментальную составляющую исследований в данном направлении, теоретическое описание отсутствует. В первую очередь, это связано с фундаментальной проблемой описания самих возбужденных состояний.

Один из способов описания возбуждений заключается в использовании многочастичной теории возмущений, позволяющей учесть все взаимодействия между частицами. Данная теория дает адекватные результаты в случае, если возмущения малы. Если же возмущения велики, то возникает ряд трудностей технического характера. При этом остается открытым вопрос и об учете сплошного спектра в задаче на собственные значения энергии электронов. До сих пор отсутствуют четкие критерии, позволяющие ограничить бесконечный набор дискретных состояний и континуум. Одной из простейших моделей многочастичной теории твердого тела является модель свободного электронного газа с взаимодействием между электронами (ВСЭГ) или теория фермижидкости. Основные результаты теории ВСЭГ отражены в классических работах Куинна, Ферреля [9] и Риччи [10], интересен обзор Эченике [11] по улучшению данной теории. Следует отметить, что Куинн, Феррель и Риччи впервые изучили электронную динамику, используя собственно – энергетический формализм многочастичной теории. В этом формализме скорость затухания возбужденного состояния (обратное время жизни) определяется мнимой частью собственной энергии электрона. В рамках этого формализма эволюция системы описывается при помощи одночастичной функции Грина [12]. Для функции Грина системы с обычным кулоновским взаимодействием между электронами существует строгое уравнение движения, включающее двухчастичную функцию Грина [13], однако решение этого уравнения в настоящее время невозможно. Формально точная система уравнений, позволяющая получить самосогласованное решение для функции Грина была получена Хедином. Тем не менее, уравнения Хедина крайне сложны, их точное решение невозможно даже для свободного электронного газа. Одним из простейших для программирования и конкретных расчетов методов, является GW-метод. Однако первый итерационный шаг, приводящий к GW-приближению и его модификациям, не дает надежного описания электронной структуры для многих материалов [14-16]. Второй итерационный шаг приводит, как правило, к еще меньшему согласию результатов вычислений с экспериментальными данными.

Трудоемкая реализация этих подходов остается основным сдерживающим фактором для их широкого применения.

Теорема Хоэнберга-Кона [17] позволила обосновать теорию функционала электронной плотности для точного описания свойств основного состояния системы взаимодействующих частиц. На основе этой теории были разработаны несложные в реализации методы расчета электронной структуры различных материалов. Возникающие здесь трудности определяются в основном тем, что вид точного функционала не известен [18]. Современные попытки построить *ab initio* функционал не дают ожидаемых результатов вычислений. [19]. Многоконфигурационное приближение и здесь дает результаты, лучше описывающие экспериментальные данные. Однако расчеты, выполненные в рамках этого чрезвычайно слабо сходящегося приближения, оказываются настолько трудоемкими, что применяются для вычисления свойств систем с небольшим числом электронов [20].

Таким образом, проблема расчета возбужденных состояний многоэлектронных систем на сегодняшний день полностью не решена, требуется дальнейшее развитие теории в этом направлении. При этом определенные надежды связываются с применением математического аппарата теории несамосопряженных операторов [21]. Например, в квантовой оптике при использовании комплексных показателей преломления, в квантовой теории поля при рассмотрении РТ-симметричных систем, и даже в тех случаях, когда используется формализм квантовой механики при описании проблем, связанных с классической статистической механикой или диффузией в биологических системах [22]. В ряде случаев введение комплексных потенциалов позволяет существенно упростить численные расчеты и избежать интерференционных эффектов, вызванных отражением волновых пакетов, распространяющихся от края сетки. Однако при исследовании электронной структуры вещества несамосопряженные операторы пока не получили распространения.

Определенные успехи в преодолении выше обозначенных трудностей моделирования уже достигнуты. Предложена оригинальная количественная методика описания электронных возбужденных состояний многоатомных систем в полях большой мощности, позволяющая оценивать время распада возбужденных состояний в рамках единой схемы. [23]. Обнаружен ряд новых явлений, таких как энергетический коллапс атомов, аномальное расщепление и перемешивание энергетических состояний. Показана принципиальная возможность существования долгоживущих метастабильных состояний в бериллии [24], магнии [25], кальции [26], а также осуществлен поиск Ридберговской материи. Показано, что кальций является наиболее подходящим из этих рассматриваемых элементов кандидатом для образования Ридберговской материи [27]. Получено аналитическое решение спектральной задачи для атома водорода в рамках предложенного подхода [28]. Предложен оригинальный метод описания и расчета электронной структуры кластера при его малом взаимодействии с окружающими кластерами в случае, когда пренебречь этим взаимодействием нельзя [29], позволивший существенно сократить численные расчеты при учете вклада сплошного спектра. На примере бериллия показано, что образование кристалла происходит через образование ряда метастабильных возбужденных кластеров. Предложен способ вычисления неравновесной функции распределения в рамках зонной теории [30]. На примере металлического лития показано, что предложенная методика зонных вычислений, учитывающая только орбитальные возбуждения, позволяет в рамках единого подхода вычислить не только спектр электронов, но и неравновесную функцию распределения электронных возбуждений, следовательно, описать и кинетические свойства материала. [31].

Таким образом, предложенная методика описания электронных возбуждений позволяет в равной степени удовлетворительно описывать поведение как отдельных атомов, так и их комплексов в полях любой мощности, в том числе и полях, сравнимых по интенсивности с полями в самих атомах. Более того, при описании такого поведения атомов остается неважной природа внешнего воздействия: это могут быть тепловые, вакансионные, примесные, электромагнитные и др. возбуждения. А разработанная методика позволяет не только предсказывать существование метастабильных возбужденных состояний системы, но и оценивать время жизни рассматриваемой системы в данном состоянии, что дает прекрасную возможность для осуществления поиска новых форм конденсата возбужденных состояний.

Список литературы

1. Маныкин Э.А. О коллективном электронном состоянии в системе сильновозбужденных атомов / Э.А. Маныкин, М.И. Ожован, П.П. Полуэктов // Доклады Академии наук СССР. — 1981. — Т. 260. — № 5. — С.1096-1098.
2. Holmlid L. Rydberg Matter – a Long-Lived Excited State of Matter / L. Holmlid, E.A. Manykin // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1997. — Т. 111. — № 5. — С.1601-1610.
3. Ярыгин В.И. Экспериментальное изучение возможности образования конденсата возбужденных состояний вещества (Ридберговской материи) / В.И. Ярыгин, В.Н. Сидельников, И.И. Касиков, В.С. Миронов, С.М. Тулин // Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики. — 2003. — Т. 77. — № 6. — С.330-334.
4. Holmlid L. Stimulated laser Raman processes in low-density Rydberg matter: Wave number and intensity blueshifts / L. Holmlid // Phys. Rev. A. — 2000. — V. 63. — P.13817.
5. Норман Г.Э. Ридберговское вещество как метастабильное состояние сильно неидеальной плазмы / Г.Э. Норманн // Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики. — 2001. — Т. 73. — № 1. — С.13-16.
6. Ярыгин В.И. Экспериментальное изучение возможности образования конденсата возбужденных состояний вещества (Ридберговской материи) / В.И. Ярыгин, В.Н. Сидельников, И.И. Касиков, В.С. Миронов, С.М. Тулин // Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики. — 2003. — Т.77. — № 6. — С.330-334.
7. Holmlid L. Rydberg Matter – a Long-Lived Excited State of Matter / L. Holmlid, E.A. Manykin // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1997. — Т.111. — №5. — С.1601-1610.
8. Маныкин Э.А. О возможности образования конденсата возбужденных атомов в условиях газового разряда / Э.А. Маныкин, В.Б. Ошурко, А.Н. Федоров // Журнал технической физики. — 2011. — Т.81. — вып. 3. — С. 5-9.
9. Quinn J.J. Electron Self-Energy Approach to Correlation in a Degenerate Electron Gas / J.J. Quinn, Ferrell R.A. // Physical Review. — 1958. — Vol. 112. — P. 812-827.
10. Ritchie R.H. Interaction of Charged Particles with a Degenerate Fermi-Dirac Electron Gas / R.H. Ritchie // Physical Review. — 1959. — Vol. 114. — P. 644-654.
11. Echenique P.M. Theory of inelastic lifetimes of low-energy electrons in metals / P.M. Echenique, J.M. Pitarke, E.V. Chulkov, A. Rubio // Chemical Physics. — 2000. — Vol. 251. — P. 1-35.
12. Абрикосов А.А. Методы квантовой теории поля в статистической физике. 2-е изд. испр. и доп.-е изд. / А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский — Москва : Добросвет. 1998. — 513 с.
13. Mahan G. D. Many-Particle Physics 2nd ed. / G.D. Mahan — New York: Plenum Press, 1990.

14. Aryasetiawan F. The GW method / F. Aryasetiawan, O. Gunnarsson // Reports on Progress in Physics. — 1998. — Vol. 61. — P. 237-312.
15. Aulbur W.G. Quasiparticle Calculations in Solids / W.G. Aulbur, L. Jönsson, J.W. Wilkins. // Solid State Physics. — 1999. — Vol. 54. — P. 1-218.
16. Aryasetiawan F. in Strong Coulomb Correlations in Electronic Structure Calculations. / F. Aryasetiawan — Amsterdam : Gordon and Breach, 2000.
17. Hohenberg P. Inhomogeneous Electron Gas / P. Hohenberg, W. Kohn // Physical Review. — 1964. — Vol. 136. — P. B864–B871.
18. Сарры А.М. К теории функционала плотности / А.М. Сарры, М.Ф. Сарры // Физика твердого тела. — 2012. — Т. 54. — № 6. — С. 1237-1243.
19. Ипатов А.Н. Расчет возбужденных состояний молекул при помощи метода теории функционала плотности с орбитально-зависимым неабатическим обменным ядром / А.Н. Ипатов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 2010. — Т. 137. — С. 226-240.
20. Fischer C.F. Advanced multiconfiguration methods for complex atoms: I. Energies and wave functions / C.F. Fischer, M. Godefroid, T. Brage, P. Jönsson, G. Gaigalas // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2016. — V. 49. — N.18. — P.182004.
21. Jagau T-C. Extending Quantum Chemistry of Bound States to Electronic Resonances / T-C. Jagau, K.B. Bravaya, A.I. Krylov // Annual Review of Physical Chemistry. — 2017. — V. 68. — P. 525-553.
22. Moiseyev N. Non-Hermitian Quantum Mechanics. / N. Moiseyev. — Cambridge University Press, 2011. — 394 p.
23. Попов А.В. Решение спектральной задачи для электронов в атоме, учитывающей ширину энергетических уровней / А.В. Попов // Оптика и спектроскопия. — 2002. — Т. 93. — № 1. — С. 5-7.
24. Popov A.V. Search of Rydberg Matter: Beryllium / A.V. Popov // Computational Materials Science. — 2006. — V. 36. — P. 217-220.
25. Попов А.В. Конденсат возбужденных состояний в магнии / А.В. Попов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 2005. — Т. 128. — № 2. — С. 227-232.
26. Попов А.В. Конденсат возбужденных состояний в кальции / А.В. Попов // Физика плазмы. — 2006. — Т. 32. — № 4. — С. 362-367.
27. Popov A.V. Search for Rydberg matter: Beryllium, magnesium and calcium / A.V. Popov // Czechoslovak Journal of Physics. — 2006. — V. 56. — Is. 2. — P. B1294-B1299.
28. Попов А.В. Применение несамосопряженных операторов для описания возбуждений на примере атома водорода / А.В. Попов // Известия Алтайского государственного университета. — 2012. — Т. 2. — № 1(73). — С. 154-157.
29. Попов А.В. Конденсация кластеров бериллия / А.В. Попов // Физика твердого тела. — 2008. — Том 50. — № 4. — С. 759-764.
30. Попов А.В. Вычисление неравновесной функции распределения в рамках зонной теории / А.В. Попов // Известия высших учебных заведений. Физика. — 2012. — Т. 55. — № 12. — С. 62-67.
31. Попов, А. В. Применение несамосопряженных операторов для описания электронных возбуждений в металлическом литии / А. В. Попов // Кристаллография. — 2016. — Т. 61. — № 1. — С. 5-9.

АТОМАРНЫЙ ЛИТИЙ В ПОТОКЕ ИНЕРТНОГО ГЕЛИЯ

А.В. Попов, В.А. Попов

Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова,
pva379@mail.ru

Использование атомных пучков обеспечивает высокую скорость генерации кластеров требуемой структуры и размеров, быструю их доставку к месту получения материала с заранее заданными свойствами [1]. При этом цепь сложных неравновесных процессов сильно зависит от внешних условий и режимов генерации, для управления которой часто используется инертный газ в качестве буферного. Описать такие сильно неравновесные процессы можно опираясь на теорию несамосогласованных операторов, собственные значения которых являются комплексным. Если речь идет об уравнении Шредингера, то мнимая часть собственных значений имеет смысл ширины энергетических уровней [2]. Идея учитывать ширину атомных уровней, видимо, впервые использовалась в [3] при вычислении возбужденных волновых функций в атоме водорода. Описание возбужденных состояний многоэлектронных атомов изложено в [4], кластеров – в [5]. Применим эту идею для вычисления энергетической структуры атомных пучков лития в потоке инертного гелия. С этой целью рассмотрим многоэлектронную систему в адиабатическом приближении. Полную энергию всех электронов представим в виде суммы

$$\mathcal{E}_T = \mathcal{E}_K + \mathcal{E}_N + \mathcal{E}_E + \mathcal{E}_C + \mathcal{E}_X + \mathcal{E}_L, \quad (1)$$

содержащей кинетическую энергию электронов:

$$\mathcal{E}_K = \sum_i^{\text{occ}} \int \psi_i^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \psi_i(\mathbf{r}) d^3r, \quad (2)$$

потенциальную энергию кулоновского электрон-ядерного взаимодействия:

$$\mathcal{E}_N = - \sum_i^{\text{occ}} \int \psi_i^*(\mathbf{r}) \sum_I \frac{Z_I e^2}{|\mathbf{r} + \mathbf{a}_I|} \psi_i(\mathbf{r}) d^3r, \quad (3)$$

потенциальную энергию кулоновского взаимодействия электронов:

$$\mathcal{E}_E = \sum_i^{\text{occ}} \int \psi_i^*(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}) \int \frac{\rho(\mathbf{r}') e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' d^3r, \quad (4)$$

потенциальную энергию кулоновского взаимодействия ядер:

$$\mathcal{E}_C = \frac{1}{2} \sum_{I,J} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\mathbf{a}_I - \mathbf{a}_J|}, \quad (5)$$

энергию обменного взаимодействия электронов в приближении Хартри-Фока:

$$\mathcal{E}_X = e^2 \sum_i^{\text{occ}} \sum_{i'}^{\text{occ}} \iint \psi_i^*(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}') \psi_{i'}^*(\mathbf{r}) \psi_{i'}(\mathbf{r}') \frac{d^3r' d^3r}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (6)$$

Здесь

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i^{\text{occ}} |\psi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (7)$$

– электронная плотность в кластере, представляющая собой сумму по всем занятым состояниям с номерами i . Последнее слагаемое в выражении для полной энергии (1) представим в виде:

$$\mathcal{E}_L = \sum_i^{\text{occ}} \int \psi_i^*(\mathbf{r}) \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{u + iv}{r^2} \right) \psi_i(\mathbf{r}) d^3r. \quad (8)$$

Волновую функцию разложим по полному набору функций $\{\varphi_n(\mathbf{r})\}$:

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \sum_{j,n} C_{ij} \left(\mathbf{S}^{-1/2} \right)_{jn} \varphi_n(\mathbf{r}). \quad (9)$$

Здесь $\mathbf{S}$ – матрица интегралов перекрытия отлична от единичной, если функции $\varphi_n(\mathbf{r})$ не ортонормированы. В качестве $\varphi_n(\mathbf{r})$ выберем функции гауссового типа [6, 7]:

$$\varphi_n(\mathbf{r}) = \left(\frac{2\alpha_n}{\pi} \right)^{3/4} \exp(-\alpha_n |\mathbf{r} - \mathbf{a}_n|^2), \quad (10)$$

где $\mathbf{a}_n$ – вектор, указывающий положение атома относительно выбранной системы координат. Важно, что функции p -, d -, f -, ... -симметрии легко получить через функции s -симметрии (10) дифференцированием по компонентам вектора $\mathbf{a}_n$. Эта идея лежит в основе аналитических вычислений и матричных элементов. Имея это ввиду, будем далее акцентировать внимание лишь на получение матричных элементов s -симметрии.

Необходимым условием существования минимума функционала полной энергии (1) является обращение в нуль его первой вариации. В схеме Рутана решение этой задачи сводится к отысканию вариационных коэффициентов C_{ij} , входящих в (9).

Чтобы решить полученную систему уравнений, необходимо в явном виде вычислить матричные элементы. Для состояний s -симметрии представим в следующем виде матричный элемент интегралов перекрытия:

$$S_{12} \equiv \int \varphi_1^*(\mathbf{r}) \varphi_2(\mathbf{r}) d^3r = \left(\frac{2\sqrt{\alpha_1\alpha_2}}{\alpha_1 + \alpha_2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\alpha_1\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} |\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2|^2 \right), \quad (11)$$

матричный элемент оператора кинетической энергии:

$$K_{12} \equiv \int \varphi_1^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \varphi_2(\mathbf{r}) d^3r = S_{12} \frac{\alpha_1\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \left(6 - \frac{4\alpha_1\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} |\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2|^2 \right), \quad (12)$$

матричный элемент электрон-ядерного взаимодействия:

$$\begin{aligned} N_{12} &\equiv -e^2 \sum_i Z_i \int \varphi_1^*(\mathbf{r}) \varphi_2(\mathbf{r}) \frac{d^3r}{|\mathbf{r} - \mathbf{a}_i|} = \\ &= -e^2 \left(\frac{2\sqrt{\alpha_1\alpha_2}}{\alpha_1 + \alpha_2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\alpha_1\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} |\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2|^2 \right) \sum_i Z_i \frac{\text{erf}(R_i \sqrt{\alpha_1 + \alpha_2})}{R_i}. \end{aligned} \quad (13)$$

Здесь $\text{erf}(x)$ – функция ошибок аргумента x ,

$$\mathbf{R} \equiv \frac{\alpha_1 \mathbf{a}_1 + \alpha_2 \mathbf{a}_2}{\alpha_1 + \alpha_2} - \mathbf{a}_i. \quad (14)$$

Матричный элемент кулоновского электрон-электронного взаимодействия s -симметрии запишем в виде

$$E_{1234} \equiv e^2 \int \varphi_1^*(\mathbf{r}) \varphi_2(\mathbf{r}) \varphi_3^*(\mathbf{r}') \varphi_4(\mathbf{r}') \frac{d^3r' d^3r}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = e^2 S_{12} S_{34} \frac{\text{erf}(R\sqrt{\beta})}{R}, \quad (15)$$

где

$$\mathbf{R} \equiv \frac{\alpha_1 \mathbf{a}_1 + \alpha_2 \mathbf{a}_2}{\alpha_1 + \alpha_2} - \frac{\alpha_3 \mathbf{a}_3 + \alpha_4 \mathbf{a}_4}{\alpha_3 + \alpha_4}, \quad (16)$$

$$\beta \equiv \frac{(\alpha_1 + \alpha_2)(\alpha_3 + \alpha_4)}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4}. \quad (17)$$

Матричный элемент квадрата момента импульса представим в виде:

$$M_{12} = \int \varphi_1^*(\mathbf{r}) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \varphi_2(\mathbf{r}) d^3r =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{\alpha} \left(\frac{2\sqrt{\alpha_1\alpha_2}}{\pi} \right)^{3/2} \exp(-\alpha_1 a_1^2 - \alpha_2 a_2^2) \frac{\text{erf}(i\sqrt{\alpha}a)}{ia}. \quad (18)$$

Здесь

$$\mathbf{a} = \frac{\alpha_1 \mathbf{a}_1 + \alpha_2 \mathbf{a}_2}{\alpha}, \quad \alpha = \alpha_1 + \alpha_2. \quad (19)$$

Заметим, что использование матричных элементов (18) возможно, если много-электронная задача обладает центральной симметрией при $\mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2 = 0$. В случае много-центральной задачи, например для кластера, матричные элементы квадрата момента импульса можно вычислить по формуле:

$$L_{12} = \sum_{ijn} (\mathbf{S}^{1/2})_{1n} \sum_k B_{nk}^+ \Lambda'_k B_{ki} (\mathbf{S}^{-1/2})_{ij} M_{j1}. \quad (20)$$

В (20) B_{ki} имеют смысл элементов собственных векторов сферического оператора Лапласа. Матричные элементы сферического оператора Лапласа, вычисленные на функциях s-симметрии (10), представим через проекции векторов $\mathbf{a}_1$ и $\mathbf{a}_2$ на оси декартовой системы координат:

$$\Lambda_{12} = \int \varphi_1^*(\mathbf{r}) \Delta \varphi_2(\mathbf{r}) d^3r = -4S_{12} \left(\frac{\alpha_1 \alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \right) (a_{1x} a_{2x} + a_{1y} a_{2y} + a_{1z} a_{2z}) +$$

$$+ 4S_{12} \left(\frac{\alpha_1 \alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \right)^2 \left(|a_{1x} a_{2y} - a_{2x} a_{1y}|^2 + |a_{1x} a_{2z} - a_{2x} a_{1z}|^2 + |a_{1y} a_{2z} - a_{2y} a_{1z}|^2 \right) \quad (21)$$

Λ'_k – изменение k -го собственного значения сферического оператора Лапласа в (20) запишем через Λ_k – k -ое собственное значение этого оператора:

$$\Lambda'_k = (l_k + x + iy)(l_k + x + iy + 1) - \Lambda_k, \quad l_k = \sqrt{0.25 + \Lambda_k} - 0.5. \quad (22)$$

Выражение для полной энергии кластера представим через выше определенные матричные элементы:

$$\mathcal{E}_T = \sum_{n,m} (K_{nm} + N_{nm} + L_{nm} + F_{nm}) U_{nm} + \mathcal{E}_C. \quad (23)$$

Здесь матричные элементы

$$U_{nm} = \sum_k^{\text{occ}} \sum_{i,j} C_{ki}^+ C_{kj} \left(\mathbf{S}^{-1/2} \right)_{in} \left(\mathbf{S}^{-1/2} \right)_{jm}, \quad (24)$$

$$F_{nm} = K_{nm} + N_{nm} + L_{nm} + \sum_{i,j} (2E_{nmij} - X_{nimj}) U_{ij} \quad (25)$$

необходимы для самосогласованного поиска решений алгебраической проблемы на собственные значения в матричной форме:

$$\mathbf{FC} = \mathbf{ESC}, \quad (26)$$

где $\mathbf{E}$ – диагональная матрица собственных значений, $\mathbf{C}$ – собственные векторы, $\mathbf{F}$ – матрица с элементами (25), $\mathbf{S}$ – матрица интегралов перекрытия с элементами (11).

Задачу (26) мы решали численно в базисе функций гауссового типа (10), используя 18 функций в разложении по $l=0$ и 12 функций – в разложении по $l=1$. Оценки показали, что базис такой длины вполне пригоден при решении уравнений (26) методом Ру-

тана для лития и гелия, если $|x| < 0.03$ и $|y| < 0.03$, т.к. увеличение длины этого базиса не меняет требуемой точности всех значений, приведенных ниже для обсуждения.

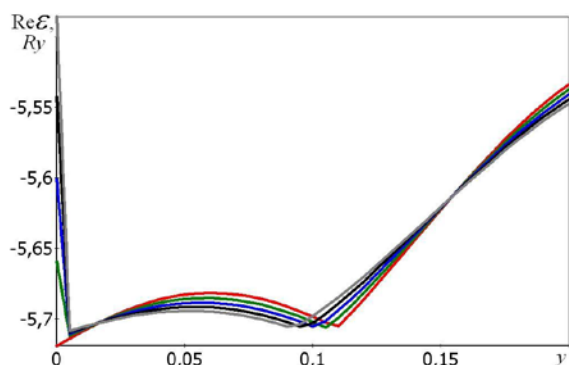


Рис.1. График зависимости действительной части полной энергии $\text{Re } \mathcal{E}$ атома гелия от параметра y при $x = 0, 0.005, 0.01, 0.015, 0.02$.

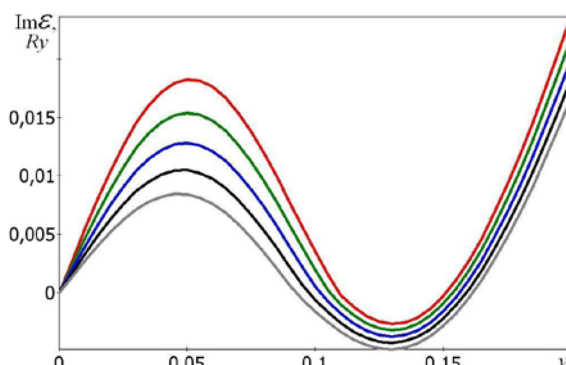


Рис.2. График зависимости мнимой части полной энергии $\text{Im } \mathcal{E}$ атома гелия от параметра y при $x = 0, 0.005, 0.01, 0.015, 0.02$.

Результаты самосогласованных вычислений, приведенные на рис.1, показывают, что действительная часть полной энергии возбужденного атома всюду выше энергии его основного состояния при $x = y = 0$. Мнимая часть полной энергии атома гелия как функция параметра y для пяти значений параметра $x = 0, 0.005, 0.01, 0.015, 0.02$ изображена на рис.2. Заметим, что модуль этой величины есть вероятность распада возбуждения в единицу времени. Наиболее интересными здесь являются неограниченно долго живущие состояния с $\text{Im } \mathcal{E} = 0$. Кроме основного состояния при $x = y = 0$, к таковым относятся возбужденные состояния вблизи $y = 0.1$ и $y = 0.15$ (см. рис.2). Отметим, что и мнимая часть спектральных линий одноэлектронных состояний 1s-симметрии обращается в нуль при этих же значениях параметров x и y . Действительная часть этих же спектральных линий незначительно убывает с ростом параметра y . Следовательно, можно утверждать, что в гелии, в принципе, возможно существование неограниченно долго живущих возбуждений, соответствующих значениям $y = 0.1$ и $y = 0.15$, например, в результате столкновения с каким-либо атомом. В качестве такого атома возьмем литий.

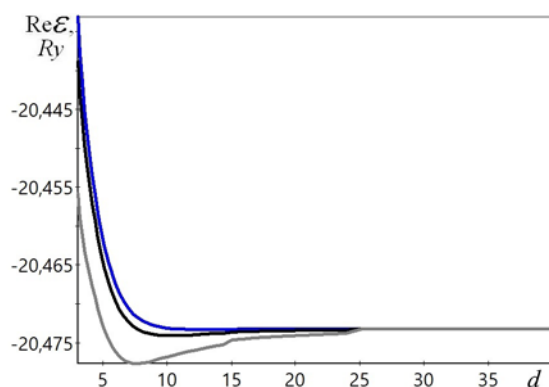


Рис.3. График зависимости действительной части полной энергии $\text{Re } \mathcal{E}$ от расстояния d (в боровских радиусах) между атомами Li и He при $x = 0$ и $y = 0, \pm 0.0001, \pm 0.0002$.

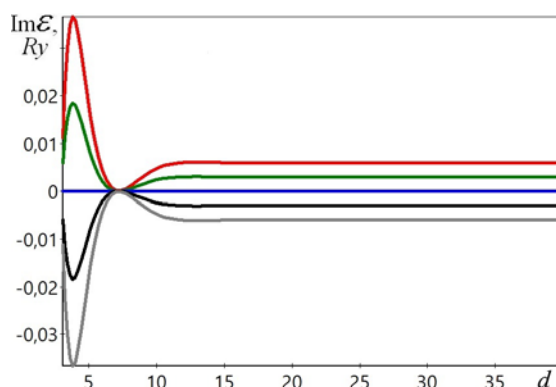


Рис.4. График зависимости мнимой части полной энергии $\text{Im } \mathcal{E}$ от расстояния d (в боровских радиусах) между атомами Li и He при $x = 0$ и $y = 0, \pm 0.0001, \pm 0.0002$.

Результаты расчетов, представленные на рис.3, показывают, что полная энергия двухатомной системы $Li-He$ достигает минимума, тем более глубокого, чем больше интенсивность возбуждения, из представленных на рис.3 при значении параметра $y = \pm 0.0002$. При тех же расстояниях порядка семи боровских радиусов мнимая часть полной энергии $Im \mathcal{E} = 0$ (см. рис.4). Следовательно, можно утверждать, что двухатомная система $Li-He$ может существовать неограниченно долго в условиях внешних возбуждений при расстояниях порядка семи боровских радиусов. При снятии возбуждений система $Li-He$ распадается на отдельные атомы, в отличие от системы $Li-Li$, для которой результаты расчета полной энергии приведены на рис.5 и рис.6.

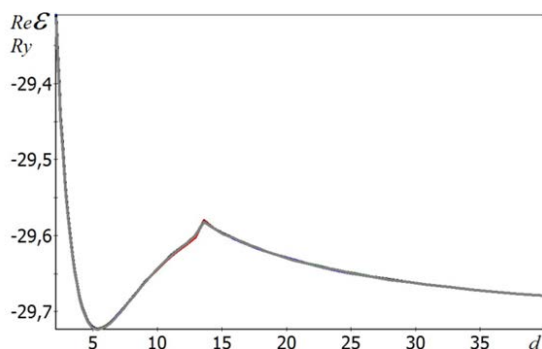


Рис.5. Действительные части полных энергий двух атомов лития в зависимости от d – расстояния между ними в боровских радиусах. Здесь, все линии при $x = 0$ и $y = 0, 2 \cdot 10^{-5}, 4 \cdot 10^{-5}, 6 \cdot 10^{-5}, 8 \cdot 10^{-5}$ практически совпадают.

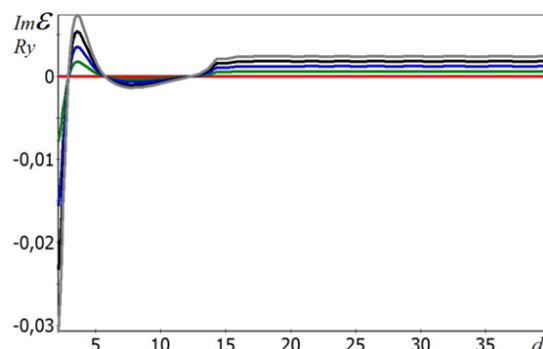


Рис.6. Мнимые части полных энергий двух атомов лития в зависимости от d – расстояния между ними при $x = 0$ и $y = 0, 2 \cdot 10^{-5}, 4 \cdot 10^{-5}, 6 \cdot 10^{-5}, 8 \cdot 10^{-5}$. Здесь, линия с большим отклонением от прямой $Im \mathcal{E} = 0$ соответствует большему значению параметра y .

Результаты расчетов, представленные на рис.5, показывают, что действительная часть полной энергии двухатомной системы $Li-Li$ достигает очень глубокого минимума, почти не зависящего от параметра возбуждения y при расстоянии между атомами порядка шести боровских радиусов. При этих расстояниях между атомами лития мнимая часть полной энергии $Im \mathcal{E}$ обращается в нуль (см. рис.6), т. е. система $Li-Li$ является долгоживущей. $Im \mathcal{E} = 0$ и при расстоянии между атомами порядка 13 боровских радиусов (см. рис.6). Однако, если снять возбуждения, при таком расстоянии система $Li-Li$ быстро переходит в долгоживущее состояние с расстоянием между атомами порядка шести боровских радиусов, либо распадается на два атома.

Полученные нами данные позволяют предполагать, что если интересующий нас атом лития поместить в поле двух, трех, или большего числа атомов, то может образоваться кластер, стабильный по энергии и с продолжительным временем жизни при примерно таких же расстояниях между атомами. Для проверки этого предположения мы вычислили полную энергию трех атомов лития как функцию расстояния между ними при $x = 0$ и еще меньших значениях параметра $y = 0, 2 \cdot 10^{-6}, 4 \cdot 10^{-6}, 6 \cdot 10^{-6}, 8 \cdot 10^{-6}$. Результаты расчетов, представленные на рис.7, показывают, что действительная часть полной энергии качественно ведет себя так же, как и для двух атомов (см. рис.5). Мни-

мая часть полной энергии электронов, изображенная на рис.8, обращается в нуль примерно при таких же значениях расстояний между атомами, что и в системе Li_2 .

Таким образом, атомы лития в потоке инертного гелия образуют вполне устойчивые двух-, трех- и, вполне возможно, многоатомные кластеры, содержащие только атомы лития. Показано, что могут образовываться системы $Li-He$, устойчивые в условиях внешних возбуждений, однако, быстро теряющие гелий при снятии этих возбуждений.

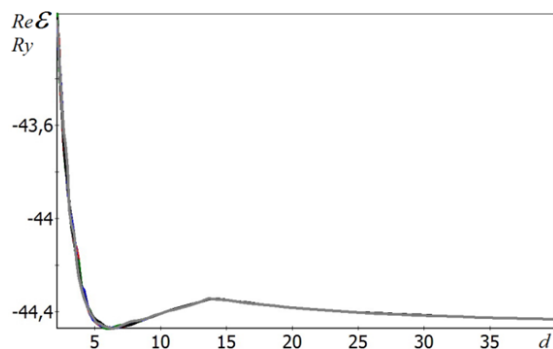


Рис.7. Действительные части полных энергий трех атомов лития в зависимости от d – расстояния между ними в боровских радиусах. Здесь, все линии при $x = 0$ и $y = 0, 2 \cdot 10^{-6}, 4 \cdot 10^{-6}, 6 \cdot 10^{-6}, 8 \cdot 10^{-6}$ практически совпадают.

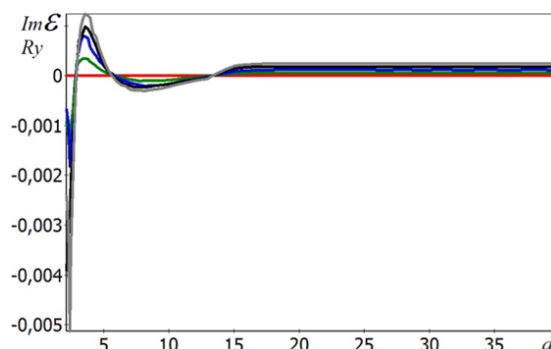


Рис.8. Мнимые части полных энергий трех атомов лития в зависимости от d – расстояния между ними при $x = 0$ и $y = 0, 2 \cdot 10^{-6}, 4 \cdot 10^{-6}, 6 \cdot 10^{-6}, 8 \cdot 10^{-6}$. Здесь, линия с большим отклонением от прямой $Im E = 0$ соответствует большому значению параметра возбуждения y .

Список литературы

1. Смирнов Б.М. Генерация кластерных пучков / Б.М. Смирнов // Успехи физических наук. — 2003. — Т. 173. — № 6. — С. 609-648.
2. Попов В.А. О ширине спектральных линий / В.А. Попов, П.Ю. Гуляев, Б.В. Семкин // Ползуновский вестник. — 2012. — № 2/1. — С. 21-25.
3. Янавичус А. Водородные волновые функции, учитывающие ширину уровня / А. Янавичус, В. Шучуров // Литовский физический сборник. — 1968. — Т. 8. — № 1-2. — С. 47-51.
4. Попов А.В. Решение спектральной задачи для электронов в атоме, учитывающей ширину энергетических уровней / А.В. Попов // Оптика и спектроскопия. — 2002. — Т. 93. — № 1. — С. 5-7.
5. Попов А.В. Конденсат возбужденных состояний в магнии / А.В. Попов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 2005. — Т. 128. — № 2. — С. 227-232.
6. Huzinaga S. Gaussian-type functions for polyatomic systems. I / S. Huzinaga // J. Chem. Phys. — 1965. — V. 42. — N4. — PP. 1293-1302.
7. Wachters A. J. H. Gaussian basis set for molecular wave functions containing third-row atoms / A. J. H. Wachters // J. Chem. Phys. — 1970. — V. 52. — N3. — PP. 1033-1036.

УПРАВЛЯЕМЫЙ ТРАНСПОРТ ИОНОВ В НАНОПОРИСТЫХ МЕМБРАНАХ С ПРОВОДЯЩЕЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ

И.И. Рыжков, А.С. Вяткин, В.О. Кучерявый

Институт вычислительного моделирования СО РАН, Красноярск, rii@icm.krasn.ru

Процессы мембранного разделения смесей широко используются в химической, топливно–энергетической, медицинской и пищевой отраслях промышленности [1,2]. Селективные свойства мембраны определяются физико-химическим взаимодействием компонентов смеси с мембраной и между собой. Разнообразие возможных взаимодействий наиболее ярко проявляется в мембранах с размером пор в нанометровом диапазоне (1–100 нм). Одним из современных направлений является разработка «активных» мембран, которые способны влиять на транспортные свойства целевых компонентов посредством внешнего воздействия. В случае заряженных компонентов в качестве такого воздействия может выступать электрическое поле, создаваемое проводящей поверхностью пор [3,4].

Известно, что селективность мембран по отношению к ионам в растворе может быть охарактеризована разностью потенциалов между двумя резервуарами с различными концентрациями электролита, разделенными мембраной, в отсутствие тока. Эту разность также называют равновесным мембранным потенциалом [1]. Она возникает за счет равновесия Доннана между диффузионными и электрическими силами на границе мембрана/раствор, а также за счет диффузионного потенциала, связанного с различной скоростью диффузии ионов разных знаков. В последнем случае в порах мембраны возникает электрическое поле, стремящееся выровнять скорость движения ионов. В работах [5,6] теоретически и экспериментально было показано, что в порах с проводящей поверхностью это электрическое поле поляризует стенки пор, перераспределяя заряд на них. Это вызывает увеличение концентрации катионов (анионов) в области отрицательного (положительного) заряда стенки. В результате на границах мембрана / раствор возникают потенциалы Доннана, которые приводят к существенному увеличению мембранного потенциала (на порядок и более) по сравнению со случаем диэлектрической поры.

В данной работе теоретически исследуется влияние внешнего потенциала, приложенного к проводящей поверхности нанопоры, на равновесный мембранный потенциал.

Будем рассматривать мембрану в виде массива цилиндрических пор длины L_p и радиуса R_p , которые соединяют два резервуара с бинарным 1–1 электролитом с концентрациями C_L и C_R . Поток и транспорт ионов описываются моделью пространственного заряда, полученной из уравнений Навье-Стокса, Нерста-Планка и Пуассона [7]. Введем характерные масштабы радиальной R_p и осевой L_p длины, концентрации $C_0 = 1$ мМ, электрического потенциала $R_g T / F$, плотности ионных потоков $D_- C_0 / L_p$, скорости D_- / L_p , давления $C_0 R_g T$ и поверхностной плотности заряда $\varepsilon \varepsilon_0 V_T / R_p$. Здесь $D_{\pm}$ – коэффициенты диффузии катионов и анионов и $\varepsilon \varepsilon_0$ – диэлектрическая постоянная.

В модели пространственного заряда потенциал φ , концентрации ионов $c_{\pm}$ и давление p представляются в виде

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

Функция ψ является решением уравнения Пуассона

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \psi(r, z)}{\partial r} \right) = \frac{c_v(z)}{\lambda^2} \sinh(\psi(r, z)), \quad (1)$$

с граничным условием осевой симметрии $\partial \psi / \partial r(0, z) = 0$ и условием на поверхности поры

$$\frac{\partial \psi}{\partial r}(1, z) = \sigma_s \quad (\text{постоянный поверхностный заряд } \sigma_s) \quad (2)$$

$$\text{или } \varphi(1, z) = \varphi_s - \phi_v(z) \quad (\text{постоянный поверхностный потенциал } \varphi_s). \quad (3)$$

Здесь $\lambda = \sqrt{\varepsilon \varepsilon_0 R_g T / 2 F^2 C_0} / R_p$ – безразмерная длина Дебая. Виртуальные переменные ϕ_v , c_v , p_v находятся как решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\left(\frac{dp_v}{dz}, \frac{d\mu_v}{dx}, \frac{d\phi_v}{dz} \right)^T = L(\bar{v}, \bar{j}, \bar{i})^T, \quad (4)$$

где $\bar{v}$ – объёмный поток (скорость), $\bar{j} = \bar{j}_+ + \bar{j}_-$ – поток ионов, $\bar{j} = \bar{j}_+ - \bar{j}_-$ – ионный ток (все потоки являются безразмерными и усреднёнными по поперечному сечению), в то время как L – симметричная 3×3 матрица, коэффициенты $L_{ij}(z)$ которой вычисляются с помощью решения $\psi(r, z)$ [5–7]. Мембранный потенциал измеряется при нулевом ионном токе ($\bar{i} = 0$) и равных давлениях в обоих резервуарах (для простоты полагаемых равными нулю). В этом случае система уравнений (4) принимает вид

$$\frac{dp_v}{dz} = L_{11}\bar{v} + L_{12}\bar{j}, \quad \frac{1}{c_v} \frac{dc_v}{dz} = L_{12}\bar{v} + L_{22}\bar{j}, \quad \frac{d\phi_v}{dz} = L_{13}\bar{v} + L_{23}\bar{j}. \quad (5)$$

Граничные условия для виртуальных переменных в модели пространственного заряда записываются так:

$$\begin{aligned}z = 0: & \quad p_v = -2c_L, & c_v &= c_L, & \phi_v &= 0, \\ z = 1: & \quad p_v = -2c_R, & c_v &= c_R, & \phi_v &= \Delta\varphi.\end{aligned} \quad (6)$$

Здесь $\Delta\varphi$ – безразмерная разность потенциалов между резервуарами (мембранный потенциал). Заметим, что потоки $\bar{v}$ и $\bar{j}$, потенциал φ_s , а также величина $\Delta\varphi$ заранее неизвестны и должны быть определены в процессе решения. Виртуальный потенциал $\phi_v(z)$ находится путем решения задачи (5), (6) с коэффициентами $L_{ij}(z)$, которые, в свою очередь, зависят от решения $\psi(r, z)$ задачи (1), (3). В связи с этим задача является существенно нелинейной. Алгоритм ее решения, предложенный авторами, подробно описан в [6].

На рис. 1 (а) показана зависимость мембранного потенциала от поверхностной плотности заряда поры для случая равных коэффициентов диффузии ионов. При $\sigma > 0$ ($\sigma < 0$) мембранный потенциал отрицателен (положителен), что соответствует селективности относительно аниона (катиона). С ростом абсолютной величины σ кривые мембранного потенциала приближаются к линиям, соответствующим идеальной анион (катион) селективности. Последние описываются формулами

$$\Delta\Phi_I^\pm = \pm \frac{R_g T}{F} \ln \frac{C_L}{C_R} \quad (7)$$

и показаны черными линиями на рис. 1. Заметим, что кривые, которые соответствуют плотностям заряда с одинаковой абсолютной величиной и противоположными знаками, являются симметричными относительно прямой $\Phi = 0$. Если коэффициенты диффузии ионов различны, то симметричность кривых нарушается, см. расчет для водного раствора NaCl на рис. 1 (b) Это связано с дополнительным вкладом диффузионного потенциала в мембранный потенциал. В частности, в незаряженной поре ($\sigma = 0$) мембранный потенциал является отрицательным, так как $D_+ < D_-$ для раствора NaCl.

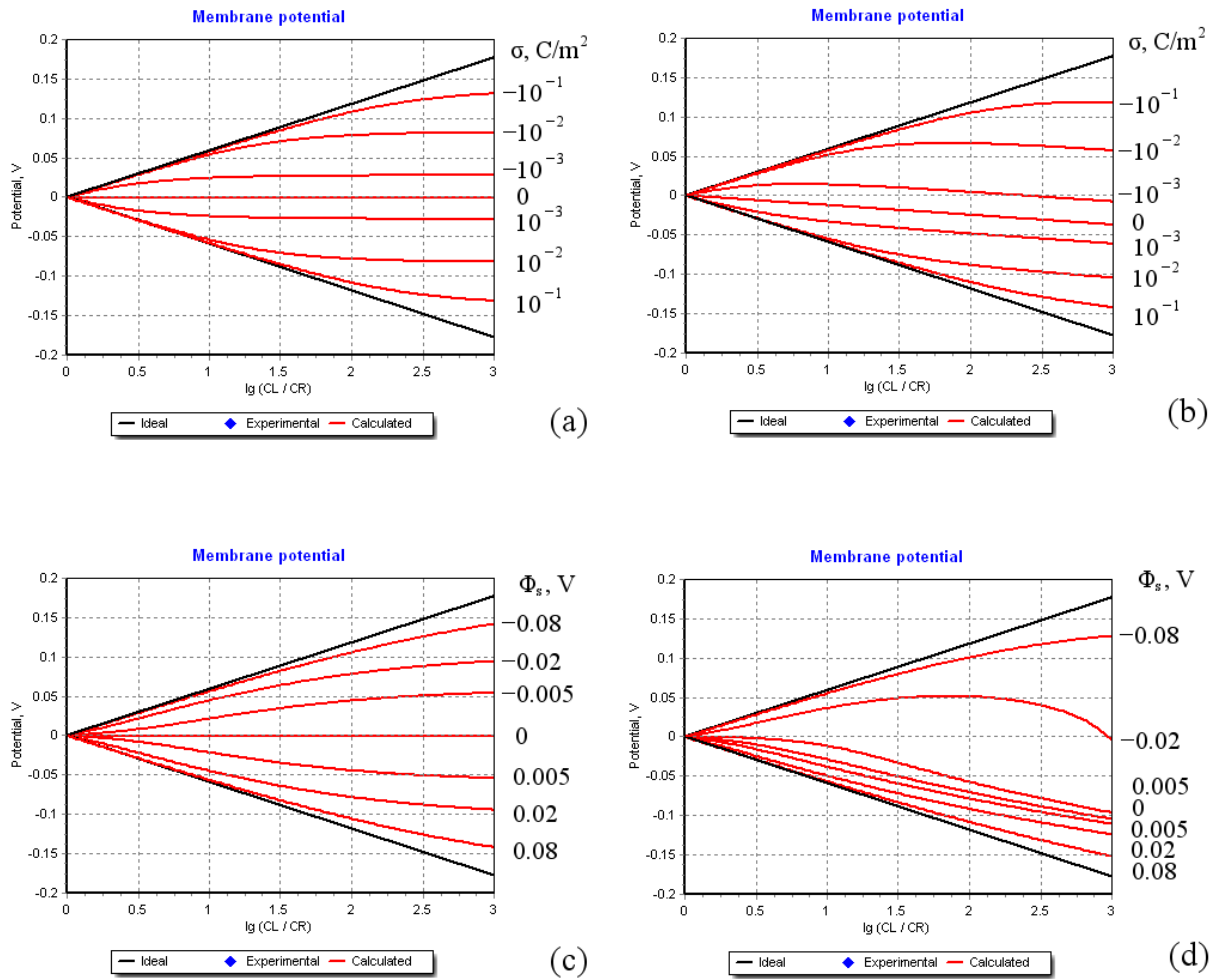


Рис. 1. Мембранный потенциал для поры с различными значениями поверхностного заряда (a,b) и поверхностного потенциала (c,d). Случай $D_+ / D_- = 1$ (a, c), водный раствор NaCl с $D_+ / D_- = 0.65$ (b, d). $C_R = 1$ mM, $R_p = 8$ нм.

Рассмотрим теперь случай поры с постоянным потенциалом Φ_s на поверхности. Если коэффициенты диффузии ионов одинаковы, то кривые мембранного потенциала

для положительных и отрицательных значений Φ_s симметричны относительно прямой $\Phi = 0$, рис. 1. (с). В случае различных коэффициентов диффузии наблюдается резкое нарушение указанной симметрии, см. расчет для раствора NaCl на рис. 1. (d). Это связано с существенным усилением вклада диффузионного потенциала в мембранный потенциал за счет поляризации проводящей поверхности поры электрическим полем и появления соответствующего индуцированного заряда на ней. Таким образом, при малых значениях потенциала Φ_s диффузионный потенциал дает значительный вклад в мембранный потенциал, однако с ростом Φ_s этот вклад ослабевает: кривые, соответствующие $\Phi_s = \pm 0.08$ В практически совпадают на рис. 1 (с) и (d).

Зависимость мембранного потенциала от потенциала, приложенного к поверхности поры, показан на рис. 2 (а) при фиксированных концентрациях в левом и правом резервуарах. При одинаковых коэффициентах диффузии ($D = D_+ / D_- = 1$) пора является анион-селективной при $\Phi_s > 0$ и катион-селективной при $\Phi_s < 0$. С ростом абсолютной величины Φ_s значения мембранного потенциала приближаются к линиям $\Delta\Phi_I^\pm$, соответствующим идеальной селективности. Для раствора KCl с $D = 0.96$ кривая немного

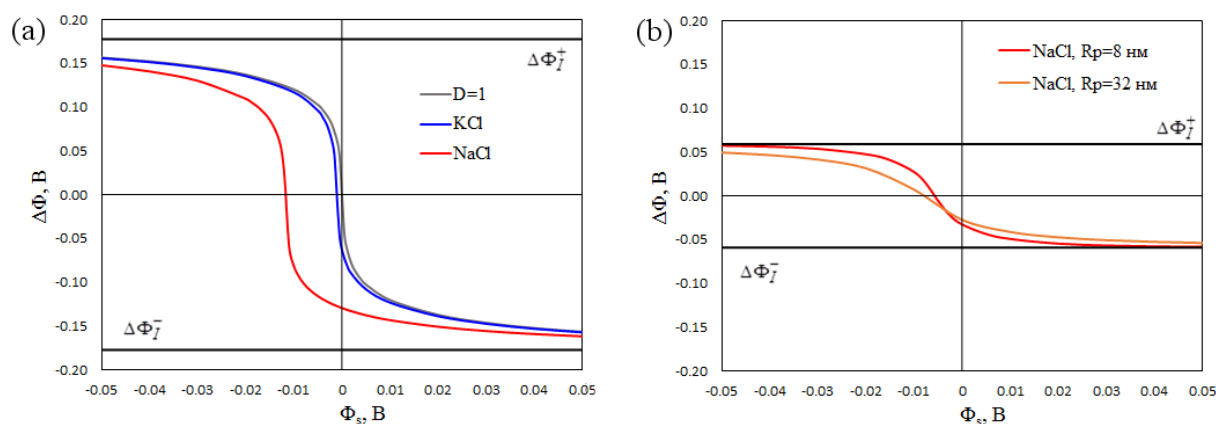


Рис. 2. Зависимость мембранного потенциала от потенциала поверхности поры для $D_+ / D_- = 1$ и водных растворов KCl и NaCl. $C_L = 100$ мМ, $C_R = 0.1$ мМ, $R_p = 8$ нм (а). Водный раствор NaCl при $C_L = 1$ мМ, $C_R = 0.1$ мМ (б). Линия $\Delta\Phi_I^+$ ($\Delta\Phi_I^-$) характеризует мембранный потенциал идеальной катион- (анион-) селективной мембраны.

смещается влево за счет вклада диффузионного потенциала. В растворе NaCl с $D = 0.65$ это смещение значительно больше за счет усиления диффузионного потенциала наличием индуцированного заряда. На рис. 2 (б) показаны аналогичные зависимости при меньшем контрасте концентраций. Видно, что увеличение радиуса поры приводит к уменьшению мембранного потенциала (и снижению селективности) за счет менее плотного перекрытия двойных электрических слоев.

Представленные результаты расчетов качественно согласуются с экспериментальными данными [3,4,8]. Однако, значения потенциалов, приложенных к проводящей поверхности мембраны, в эксперименте значительно больше (на порядок). Это, по-видимому, связано с довольно сильным падением потенциала в плотной части двойного электрического слоя. Мембранный потенциал, наблюдаемый в эксперименте, определяется значением потенциала на границе диффузионной части двойного электрического слоя. Данное предположение подтверждается моделированием распределения потенциала и концентраций ионов вблизи поверхности, заряд которой формируется как за счет внешнего источника электронов (в нашем случае эту роль играет потенциостат), так и за счет адсорбции / десорбции ионов из раствора [9]. В указанной работе было показано, что потенциал диффузионной части двойного электрического слоя примерно на порядок меньше, чем потенциал, приложенный к поверхности электрода. Это объясняет полученные результаты и свидетельствует о необходимости использования более полной модели с учетом указанных эффектов для объяснения экспериментальных данных.

Список литературы

1. H. Strathmann, Introduction to Membrane Science and Technology, Wiley-VCH, Weinheim, Germany, 2011.
2. Волков В.В., Мchedlishvili Б.В., Ролдугин В.И., Иванчев С.С., Ярославцев А.Б. Мембраны и нанотехнологии. Российские нанотехнологии. 2008. Т. 3. № 11–12. С. 67–99.
3. M. Nishizawa, V.P. Menon, C.R. Martin, Metal nanotubule membranes with electrochemically switchable ion-transport selectivity, Science, 1995. V. 258, p. 268.
4. C.R. Martin, M. Nishizawa, K. Jirage, M. Kang, S.B. Lee. Controlling ion-transport selectivity in gold nanotubule membranes. Adv. Mater. 2001, V. 13, 1351.
5. Ryzhkov I.I., Lebedev D.V., Solodovnichenko V.S., Shiverskiy A.V., Simunin M.M. Induced-charge enhancement of diffusion potential in membranes with polarizable nanopores. Physical Review Letters, 2017. V. 119, 226001.
6. Ryzhkov I.I., Lebedev D.V., Solodovnichenko V.S., Minakov A.V., Simunin M.M. On the origin of membrane potential in membranes with polarizable nanopores. Journal of Membrane Science, 2018. V. 549. P. 616–630.
7. Peters B.B., Van Roij R., Bazant M.Z., Biesheuvel P.M. Analysis of electrolyte transport through charged nanopores, Phys. Rev. E, 2016. V. 93, 053108.
8. Lebedev D.V., Shiverskiy A.V., Simunin M.M., Solodovnichenko V.S., Parfenov V.A., Bykanova V.V., Khartov S.V., Ryzhkov I.I. Preparation and ionic selectivity of carbon-coated alumina nanofiber membranes, Petroleum chemistry, 2017. V. 57 (4), P. 306–317.
9. J. Duval, J. Lyklema, J.M. Kleijh, H.P. van Leeuwen. Amphifunctionally electrified interfaces: coupling of electronic and ionic surface-charging process. Langmuir, 2001. V. 17. P. 7573–7581.

РАЗРАБОТКА СТРУКТУРЫ БАЗЫ ДАННЫХ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ МЕДИЦИНСКОЙ ЭКСПЕРТНОЙ СИСТЕМЫ, УЧИТЫВАЮЩЕЙ ЗАВИСИМОСТИ «СТРУКТУРА-СВОЙСТВО» ЛЕКАРСТВЕННЫХ СОЕДИНЕНИЙ²

Г.А. Самигулина¹, З.И. Самигулина²

¹Институт информационных и вычислительных технологий,
лаб. «Интеллектуальные системы управления и прогнозирования»,
galinasamigulina@mail.ru

²Казахстанско-Британский Технический Университет, Факультет Информационных
Технологий, ***zarinasamigulina@mail.ru***

В настоящее время новейшие интеллектуальные экспертные системы успешно реализуются в различных прикладных областях на основе современных информационных технологий. Особенно актуальны вопросы разработки медицинских экспертных систем оценивающих влияние лекарственных соединений на организм человека [1], анализ баз данных (БД) дескрипторов на токсичность [2] и взаимодействие лекарств с другими препаратами. Накопленные знания экспертов (специалистов в области медицины) позволяют формировать расширенные БД для диагностики и дифференцированного лечения пациентов. В процессе функционирования экспертной системы возникает необходимость обработки большого количества клинических данных, представляющих собой зачастую неточную и противоречивую информацию. Для решения подобных проблем хорошо зарекомендовали себя интеллектуальные системы [3], широко применяющиеся для разработки экспертных систем медицинского назначения.

В работе [4] представлен обзор интеллектуальных и экспертных медицинских систем для решения задач диагностики, лечения и прогнозирования при различных клинических сценариях. Рассматривается применение новейшего технического оборудования для создания «умных больниц», например систем архивирования изображений и связи (PACS, Picture Archiving and Communication System) и радиологических информационных систем (RIS, Radiology Information System), использование интеллектуальных меток для отслеживания пациентов и мобильного медицинского оборудования, а также применение «умной» одежды для наблюдения за беременными женщинами, детьми, пожилыми людьми и людьми с физическими недостатками. За счет того, что программно-аппаратные платформы, реализующие данные технологии не всегда совмещаются друг с другом, а обмен и обработка медицинской информацией являются важными задачами, то в системах здравоохранения используется биомедицинская онтология, позволяющая интегрировать и поддерживать связь между различными приложениями. Рассматривается применение методов искусственного интеллекта и мультиагентных систем в медицине. Статья [5] посвящена разработке медицинской экспертной системы диагностики поражений шейки матки путем идентификации кольпоскопических изображений на основе искусственного интеллекта. Авторами проанализировано 140 изображений с отличительными признаками: поверхность, цвет, текстура и т.д. для постановки диагноза, установленного врачом-специалистом для нормального состояния, воспалительного процесса, незрелой метаплазии и т.д. Эффективность работы экспертной системы достигает 75,75%. В исследованиях [6]

² Работа выполнена по гранту КН МОН РК на тему: «Разработка и анализ баз данных для информационной системы прогнозирования зависимости «структура-свойство» лекарственных соединений на основе алгоритмов искусственного интеллекта» (2018-2020 гг.).

рассматриваются вопросы создания нечеткой экспертной системы для диагностики сердечных заболеваний. Разработана большая база правил, включающая в себя почти все сердечные заболевания, а также реализован удобный пользовательский интерфейс и доступ в программный продукт MATLAB. В работе [7] представлена методика анализа данных экспертной системы при пульсовой диагностике на основе Байесовского подхода. Исследования [8] посвящены диагностике некоторых сердечных заболеваний (стенокардия и инфаркт миокарда) с помощью компьютеризированной экспертной системы. Предлагаемая методология состоит из четырех этапов: первый этап – опрос симптомов пациентов, второй этап – сбор и исследование анализов пациента, третий этап – диагностика пациента на основе полученных данных, четвертый этап – определение соответствующего лекарства или рекомендаций для лечения пациента (ступенчатая терапия). Для разработки данной экспертной системы применялись программные продукты CLIPS, PROLOG и Visual PROLOG. В работе [9] рассматривается экспертная QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship) система для прогнозирования коэффициента биоконцентрации в соответствии с регламентом Европейского союза по производству и обороту химических веществ REACH (European Regulation on Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals). Исследования [10] посвящены разработке экспертной системы, основанной на генетическом алгоритме и адаптивной нейронечеткой системе (GA-ANFIS) для прогнозирования количественной зависимости «структура-активность» (QSAR) ингибиторов катепсина К. Нейронечеткая система использовалась для построения нелинейной QSAR модели, а генетический алгоритм для выбора дескрипторов, ответственных за ингибирующую активность катепсина К в исследуемых соединениях. В статье [11] разработана QSTR (Quantitative Structure-Taste Relationship) экспертная система для прогнозирования степени сладости молекул. Набор данных состоял из 649 сладких и несладких молекул, которые описывались молекулярными дескрипторами и фингер-принтами (Extended-Connectivity Fingerprints, ECFPs). Для моделирования применялись методы PLS-DA (Partial Least Squares-Discriminant Analysis) и N-ближайшего соседа. Работа экспертной системы была проверена с помощью процедуры Монте-Карло и показала удовлетворительные результаты по сравнению с современными моделями. Предложенная модель QSTR может быть использована для более глубокого понимания взаимосвязи между молекулярной структурой и сладостью при разработке новых подсластителей.

Большое количество экспертных систем было разработано для проведения лабораторных исследований с целью планирования и мониторинга экспериментов, а также интерпретации тестовых данных. Данные разработки вызывают особый интерес при междисциплинарных исследованиях в биологии, биохимии, фармакологии и т.д. [12]. На базе Стенфордского университета создана экспертная система MOLGEN (Molecular Genetics), предназначенная для проведения экспериментов по молекулярной генетике. При Гарвардском университете была образована компания Lhasa, которая вела разработки для анализа данных при синтезировании сложных органических молекул. Познее Lhasa представила экспертную систему DEREK под Windows для прогнозирования токсичности и дедуктивной оценки рисков на основе базы знаний. Другая программа от Lhasa называется METEOR, в которой используются знания экспертов для прогнозирования метаболических реакций.

Так же разработан ряд экспертных систем для синтеза химических веществ (SECS, SYNCHEM, RESY, CICLOPS, CAMEO), для прогнозирования токсичности веществ (TOX-MATCH, HazardExpert, Tox-tree, Top-Kat, BfR/BgVV System), метаболизма

(COMPACT, MetabolExpert, XENO), биологического распада (BESS, CATABOL, UMBBD, META, PPS) и т.д [13].

В области прогнозирования биологической активности наиболее полной экспертной системой является Apex-3D [12]. Данная система предназначена для исследования соотношений «структура-активность». Программное обеспечение позволяет создавать трехмерные SAR (Structure - Activity Relationship) и QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship) модели, которые могут использоваться для решения задачи классификации и прогнозирования. Экспертная система Apex-3D разделена на несколько модулей, выполняющих следующие функции: Computational Chemistry Module – вычисление квантово-химических, атомных и молекулярных индексов и выполнение кластеризации; Data Management Module – система управления внутренней базой данных, хранение 3D структур, структурных параметров и сведений об активности; Frame System – представление химической информации в виде фреймов с помощью встроенного языка ChemLisp; Rule Management Module – редактирование и управление правилами, хранящимися в базе знаний системы; Inductive Inference Module – формирование правил на основе структуры данных, интерактивное построение 3D моделей QSAR, статистическая оценка данных и т.д.; Deductive Inference Module – прогнозирование биологической активности; Query Generator – генератор запросов.

Таким образом, разработка экспертных систем медицинского назначения на основе современных методов искусственного интеллекта является актуальной задачей.

Постановка задачи исследований формулируется следующим образом: необходимо разработать структуру базы данных интеллектуальной медицинской экспертной системы, учитывающей зависимости «структура-свойство» лекарственных соединений для персонифицированной медицинской диагностики на основе экспертных оценок и подхода искусственных иммунных систем [14].

Разработанная структура базы данных (Рис.) состоит из двух крупных модулей. Модуль 1: Информация о химических соединениях (Chemical compounds information) – модуль содержит сведения о химических веществах, такие как: название компонента, спецификация SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System) для упрощенного представления молекул, международный текстовый химический идентификатор InChi (International Chemical Identifier), химическая формула, классификаторы мировых хранилищ химической информации (PubChem, DrugBank, ChemSpider и т.д.), сведения о 2D и 3D структурах, молекулярная масса. В разделе дополнительной информации представлены клинические данные и АТС код (Anatomical Therapeutic Chemical Classification System). Данный блок дополнен базой данных молекулярных дескрипторов веществ, состоящих из 24 наименований, таких как: топологические дескрипторы, молекулярные дескрипторы Рандика, 2D индексы автокорреляции, физико-химические дескрипторы, квантово-химические дескрипторы, дескрипторы молекулярных полей и т.д. Всего для каждого вещества около 2 000 наборов данных. Так же база данных содержит экспертные сведения, например, о продолжительности действия вещества, его токсичности или взаимодействия с другими химическими соединениями. Модуль 2: Персональные данные пациентов (Personal data of the patients) – данный модуль предназначен для сбора персональных данных о пациенте (фамилия, имя, отчество, адрес, телефон, номер документа удостоверяющего личность, дата рождения, группа крови и т.д.). Дополнительно содержится информация о медицинском страховании, типе полиса и его номер.

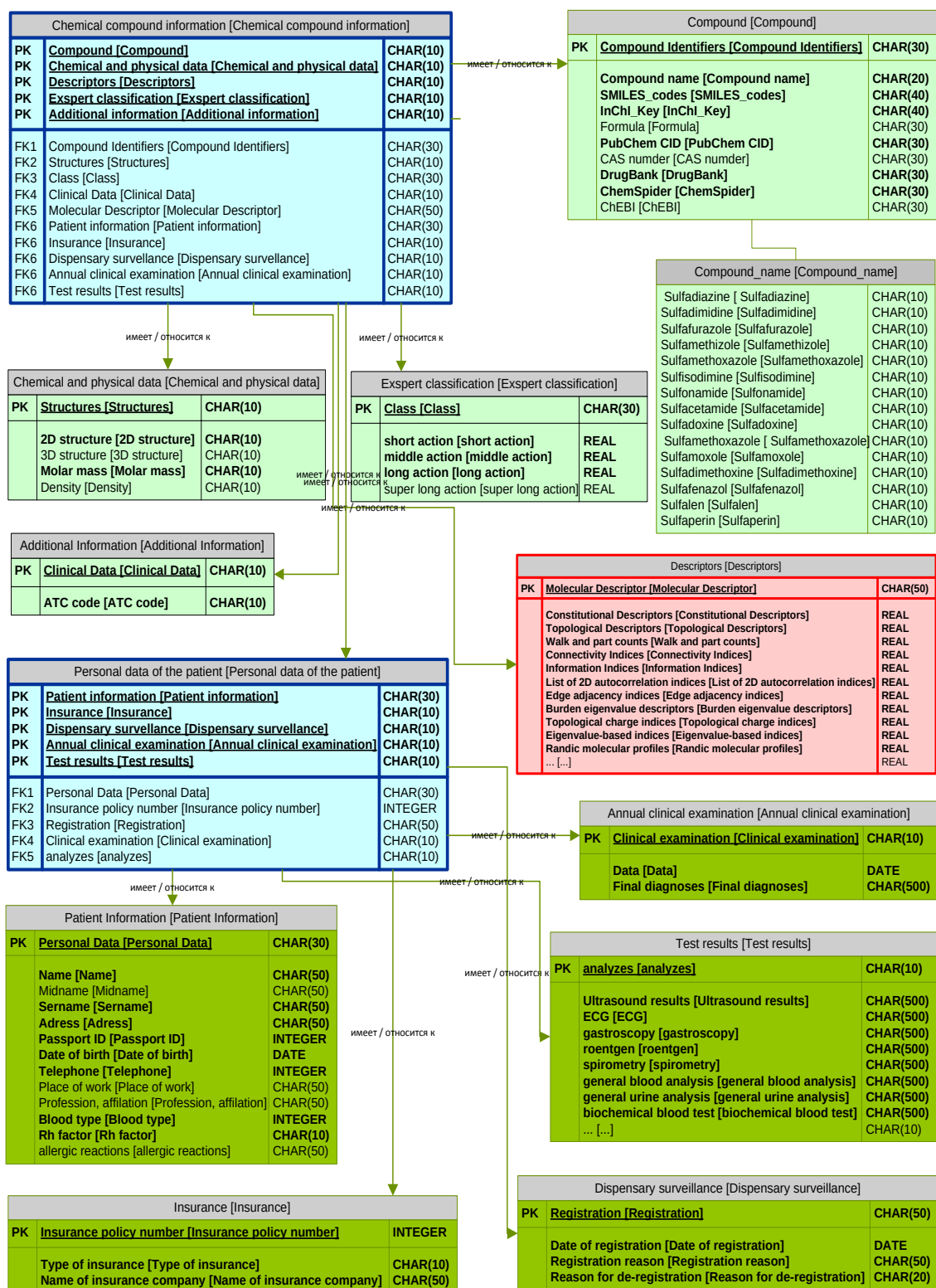


Рис.

Фрагмент структуры базы данных интеллектуальной медицинской экспертной системы, учитывающей зависимости «структура-свойство» лекарственных соединений.

Заполняются сведения о дате и причине постановки пациента на учет и данные о ежегодной клинической диспансеризации, дата проведения и конечные диагнозы пациента. В базу данных включены результаты последних анализов (УЗИ, ЭКГ, рентген грудной клетки, общий анализ крови, общий анализ мочи, биохимический анализ крови и т.д.). Данный модуль необходим для составления полной клинической

картины о пациенте с целью дальнейшего анализа влияния химических веществ на организм.

Прогнозирование зависимости «структура-свойство» химических соединений и их влияние на организм человека осуществляется с помощью иммунносетевого моделирования [14]. По результатам формирования базы данных молекулярных дескрипторов вещества делается предварительная обработка с целью выделения информативных дескрипторов на основе современных методов искусственного интеллекта, таких как Random Forest [15], алгоритмов роевого интеллекта [16] и т.д. Результаты анализа заносятся в базу данных и осуществляется прогнозирование биологической активности с помощью искусственных иммунных систем.

Список литературы

1. Ерёмин В.В., Горожанина Ю.А. Проектирование экспертной системы диагностики на базе нечеткой логики // Современные научные исследования и инновации. – 2017. – №6. – 17 с.
2. Fielding K., Long A., McSweeney N., Payne M., Smoraczewska E. Expert Systems - The Use of Expert Systems in Drug Design-Toxicity and Metabolism // Drug Design Strategies: Quantitative Approaches. – UK., 2012. – Vol. 11. – P. 279-311.
3. Zhao C., Jain A., Hailemariam L., Suresh P., Akkisetty P., Joglekar G., Venkatasubramanian V., Reklaitis G., Morris K., Basu P. Toward intelligent decision support for pharmaceutical product development // Journal of Pharmaceutical Innovation. – Springer, 2006. – Vol. 1. – №1. – P.23-35.
4. Schatz C., Schneider F. Intelligent and Expert Systems in Medicine – A Review // XVIII Congreso Argentino de Bioingeniería SABI. – 2011. – P. 1-10.
5. Barrera I., Lara E., Estrada C., Zagal D. Diagnosis of Medical Images Using an Expert System // Advances in Artificial Intelligence – IBERAMIA. – Springer, 2010. – P. 144-152.
6. Sikchi Sm., Sikchi Su., Ali M. Design of fuzzy expert system for diagnosis of cardiac diseases //International Journal of Medical Science and Public Health. – 2013. – Vol. 2. - №1. – 56-61.
7. Grif M., Ayush Y. Data analysis of expert systems by pulse diagnosis //11th International Forum on Strategic Technology (IFOST). – 2016. – P. 328 – 332.
8. Soltan R.A., Rashad M.Z., El-Desouky B. Diagnosis of Some Diseases in Medicine via computerized Experts System // International Journal of Computer Science & Information Technology. – 2013. – Vol. 5.- №5. – P. 79-90.
9. Grisoni F., Consonni V., Vighi M., Villa S., Todeschini R. Expert QSAR system for predicting the bioconcentration factor under the REACH regulation //Environmental research. – Elsevier, 2016. - №148. – P. 507-512.
10. Shahlaei M., Madadkar-Sobhani A., Saghaie L., Fassihi A. Application of an expert system based on Genetic Algorithm-Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System (GA-ANFIS) in QSAR of cathepsin K inhibitors //Expert Systems with Applications. – Elsevier, 2012. - №39. – P.6182-6191.
11. Rojas C., Todeschini R., Ballabio D., Mauri A., Consonni V., Tripaldi P., Griso F. A QSTR-Based Expert System to Predict Sweetness of Molecules //Frontiers in Chemistry. – 2017. – Vol.5. – №53- P. 1-12.
12. Hemmer M. Expert system in chemistry research. –CRC Press, 2008. – 418 p.
13. Hirst J. Knowledge-based expert systems in chemistry. – UK, 2009. – 211 p.
14. Самигулина Г.А., Самигулина З.И. Разработка технологии иммунносетевого моделирования для компьютерного молекулярного дизайна лекарственных препаратов. КПИС МЮ РК. –Астана, 2011. - № 473. -23 с.
15. Samigulina G.A., Samigulina Z.I. Immune network Technology on the Basis of Random Forest Algorithm for Computer-Aided Drug Design //Bioinformatics and Biomedical Engineering. – Springer, 2017. - №10208. – P. 50-61.
16. Samigulina G.A., Massimkanova Zh. A. Construction of optimal immune network model based on swarm intelligence algorithms for computer-aided design of new drugs //Optimization Problems and Their Applications, OPTA-2018. – Omsk, 2018.

БЫСТРЫЙ АЛГОРИТМ ВЕРНЬЕРА ПОИСКА ДЛИННЫХ ПОВТОРОВ В ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЯХ ДНК С ОГРАНИЧЕННОЙ ПЛОТНОСТЬЮ ОШИБКИ

С.П. Царев¹, М.Ю. Сенашова², М.Г. Садовский²

¹Сибирский федеральный университет,

²Институт вычислительного моделирования СО РАН,

sptsarev@mail.ru, msen@icm.krasn.ru, msad@icm.krasn.ru

1. Введение

Поиск общих строк в двух или нескольких символьных последовательностях является очень востребованной задачей в биоинформатике и современной молекулярной биологии [1, 2]. Проблема далека от завершения, несмотря на длинную историю [3–5]. В общем, проблема заключается в следующем: даны последовательности символов $T_1, T_2, \dots, T_k$ из некоторого конечного алфавита, необходимо найти все возможные общие подстроки (т. е. когерентные подпоследовательности) имеющиеся в последовательности T_i , возможно, с некоторыми несовпадениями. Далее мы сосредоточимся на четырехбуквенном алфавите $\mathcal{A} = \{A, C, G, T\}$.

В настоящее время используются два подхода к проблеме: первый – поиск точно совпадающих подстрок, а второй – поиск двух подстрок с некоторыми допустимыми погрешностями. Второй подход более востребован в различных приложениях. Тем не менее, поиск точных совпадений по-прежнему имеет большое значение.

Ранее был разработан новый алгоритм быстрого поиска общих подстрок в двух или нескольких символьных последовательностях [6]. Алгоритм был первоначально реализован для поиска точно совпадающих строк, однако он может быть обобщен для поиска подстрок с некоторыми погрешностями. Алгоритм «грубой силы» поиска общих строк подразумевает сравнение полных списков достаточно длинных строк, во всех последовательностях. Алгоритм [6] для поиска точно совпадающих подстрок намного быстрее по сравнению с алгоритмом поиска «грубой силы»; он основан на простой идее прореженных словарей и использует классическую шкалу Верньера, см. например [13].

В данной работе мы модифицировали калибровочный алгоритм Верньера, представленный в [6], так что он позволяет приблизительно совместить подстроки. Действительно, оригинальная версия алгоритма поддерживает толерантный поиск с ошибкой для конкретного вида ошибки, а именно мутации: изменения символов в некоторых положениях, которые не повлияли на взаимное позиционирование других частей последовательности.

Здесь мы приводим модификацию калибровочного алгоритма Верньера, который расширяется на случай ошибок типа удаления и вставки. Теоретически доказана корректность алгоритма, а также приведены некоторые результаты вычислительных экспериментов, показывающие его высокую скорость и эффективность для анализа генетических последовательностей.

Введем некоторые понятия и определения. $T_1, T_2, \dots, T_k$ составляют множество последовательностей из четырехбуквенного алфавита $\mathcal{A} = \{A, C, G, T\}$. $S_j, 1 \leq j \leq k$ – общие части (подстроки), такие что $S_j \subset T_j$ и $l_j = l(S_j) = |S_j|, 1 \leq j \leq k$ – длины этих «общих» подстрок. Подстроки $S_j \subset T_j$ не могут быть идентичными, и если

это произойдет, то они должны быть *приближенно согласованы*; точное определение этого приближенного соответствия см. ниже в разд. 3 (мы принимаем классическое определение расстояния редактирования для измерения несоответствия подстроки [7, 8]). Точно так же они могут варьироваться по длине, но вариация не должна быть слишком большой. Частотный словарь $W(q, t)$ это множество подстрок фиксированной длины q в последовательности T , таких что окно заданной длины q движется вдоль последовательности T с шагом t ; подробности см. в [6, 9, 11].

В статье представлен новый алгоритм, допускающий погрешности, для поиска общих строк в символьных последовательностях и для всех трех типов погрешностей (это мутация, вставка и удаление). В разделе 2 кратко описана предыдущая версия нашего алгоритма, предназначенная для поиска точно совпадающих подстрок, поскольку он является основой нового алгоритма. В разделе 3 приведено описание нового алгоритма с возможностью использования любого типа погрешностей в сопоставляемых строках. В заключение, в разделе 4 приведены некоторые вычислительные эксперименты, доказывающие эффективность и осуществимость метода и его реализации.

2 Быстрый алгоритм поиска Верньера для точного соответствия

Для лучшего объяснения нашего нового алгоритма поиска приближенного соответствия, мы кратко рассмотрим алгоритм поиска точного соответствия, представленный в [6].

Предположим, что существуют две последовательности T_1 и T_2 каждая из которых имеет общую подстроку S (здесь S одна и та же в двух последовательностях), а N – нижняя граница ожидаемой длины S .

Шаг 1. Учитывая конечную длину N , выберите как можно большую k , и m (на практике m варьируется от 20 до 50, см. подробности в [6]), таким образом, чтобы $N \geq n(n-1) + m - 1$.

Шаг 2. Вычисляем два словаря $W_{m,k}^{[1]}$ и $W_{m,k-1}^{[2]}$ для последовательностей T_1 и T_2 соответственно. Любая подстрока длины m в этих словарях является тегом, мы также сохраняем позиции тегов в словарях. Эта конструкция реализует алгоритм калибровки Верньера, подробно описанный в [6].

Шаг 3. Найдем идентичные теги в словарях $W_{m,k}^{[1]}$ и $W_{m,k-1}^{[2]}$ (например используя лексикографическую сортировку) и их позиции. Если существует общая подстрока S , такая что $S \subset T_1$ и $S \subset T_2$, причем k выбирается надлежащим образом (как описано выше), то должны быть такие идентичные теги в словарях $W_{m,k}^{[1]}$ и $W_{m,k-1}^{[2]}$ (см. теорему 1 из [6]).

Шаг 4. Начиная с позиций общих тегов в T_i , расширяем подстроки посимвольно вправо и влево, на каждом шаге проверяя совпадают ли добавленные символы.

Подробности этой процедуры см. в [6]. Следует подчеркнуть, что алгоритм представленный в [6], поддерживает поиск с погрешностями, допускающий только мутации. Ниже мы обобщаем его для случая погрешностей вставки и удаления.

3 Новый калибровочный алгоритм Верньера для погрешностей типа вставки/удаления

Здесь мы вводим новый метод поиска примерно совпадающих повторяющихся подстрок длины N в последовательности символов T (или, как вариант, приблизи-

тельно совпадающих подстрок в нескольких символьных последовательностях T_i), обобщающий подход Верньера, описанный в разделе 2. Ключевая идея (аналогичная работе [6]) состоит в том, чтобы заменить анализ полного словаря $W_{m,1}$ (где каждый символ в последовательность T дает начало тегу, т.е. подстроке длины m) к анализу соответственно прореженного словаря W_{m,t_s} с переменным шагом t_s , который дает значительно меньшее количество записей. Сначала дадим необходимые определения.

Определение 1. Для двух строк S_1, S_2 будем называть их преобразование фиксированной серией с мутацией одного символа (замена какого-либо символа другим из того же алфавита), удаления символа и вставки символа, преобразующие S_1 в S_2 и имеющие минимально возможное общее количество мутаций, удалений и вставок (это общее число является стандартным расстоянием редактирования [7, 8]).

Как только преобразование из S_1 в S_2 зафиксировано, мы можем отследить те позиции символов в S_1 , которые остаются неизменными при редактировании. Это приводит к частичному отображению S_1 в S_2 , которое задает соответствие таких совпадающих символов в S_1 и S_2 . Назовем это соответствие *картой совпадений* $M_{S_1, S_2} : S_1 \rightleftharpoons S_2$. Это частичное отображение из S_1 в S_2 и из S_2 в S_1 . Пример такой карты совпадений показан на рисунке 1.

Иногда карта совпадений при преобразовании S_1 в S_2 может иметь очень длинные точно совпадающие подстроки и все удаления / вставки / мутации могут быть центрированы в некоторых относительно коротких частях подстрок S_1, S_2 . Таким образом, можно не различать этот случай и случай, когда на самом деле есть две пары (приблизительно) совпадающих подстрок $S_{11} \subset S_1, S_{12} \subset S_2$ и $S_{21} \subset S_1, S_{22} \subset S_2$ с нулевым (или очень маленьким) расстоянием редактирования, которые иногда расположены близко друг к другу. Чтобы избежать таких сомнительных ситуаций, мы ограничиваем преобразования редактирования: предположим, что локальная плотность изменений ограничена снизу заданным неотрицательным числом $\delta < 1$ ($\delta = 0$ означает точное соответствие):

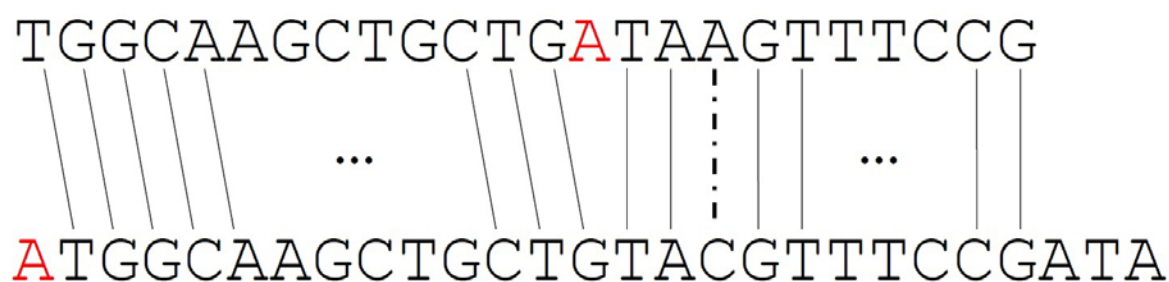


Рис. 1. Карта совпадений. Жирным шрифтом в ячейках выделены удаления/вставки; пунктирная линия показывает мутацию.

Определение 2. Для двух данных приблизительно совпадающих строк S_1 и S_2 , карты совпадений $M_{S_1, S_2} : S_1 \rightleftharpoons S_2$ и целого числа m , будем называть локальной ошибкой m -плотности этой карты совпадений минимальное неотрицательное число $\delta < 1$ такое, что любая подстрока $s \subset S_1$ длины не менее m и любая M_{S_1, S_2} , соответ-

ствующая подстроке $\hat{s} \subset S_2$ имеет не более чем $d = \delta \cdot \text{length}(s)$ несоответствий (мутаций, удалений, вставок).

Заметим, что если подстрока $s \subset S_1$ начинается с символа (или нескольких символов) которые удалены или вставлены в соответствующем преобразовании из S_1 в S_2 , M_{S_1, S_2} -соответствующая подстрока $\hat{s} \subset S_2$ может определяться несколькими способами. Мы проверяем все возможные $\hat{s}$ для локальной ошибки m -плотности, ограниченной δ . На самом деле это означает следующий очевидный факт: если удаления/вставки сосредоточены вокруг некоторой позиции, остальная часть m -окрестности этого местоположения должна иметь намного более низкую m -плотность ошибок.

3.1 Общее описание алгоритма поиска длинных повторов Верньера с ограниченной локальной плотностью ошибки. Идея модифицированного калибровочного алгоритма Верньера

Основная проблема, решаемая нашими новыми алгоритмами:

для заданных параметров N (целое число) и δ (неотрицательное действительное число, $\delta < 0.5$), требуется найти все пары подстрок S_k длины по крайней мере N в одной или нескольких символьных последовательностях T_i , которые отличаются не более чем на расстояние редактирования $d = \delta \cdot \max(\text{length}(S_k))$, с локальной ошибкой ν -плотности $\leq \delta$, для некоторого подходящего ν .

Идея поиска примерно совпадающих подстрок (включая удаления и вставки) с использованием относительно коротких тегов и соответствующих прореженных словарей (мы называем его калибровкой Верньера на T_i) основывается на следующей простой конструкции. Предположим, что у нас есть две последовательности символов T_1, T_2 с двумя приблизительно совпадающими подстроками $S_1 \subset T_1, S_2 \subset T_2$ длины $\geq N$ с локальной ошибкой m -плотности $\leq \delta$.

Расположим (виртуальные) метки поверх строки T_1 с шагом k (выберем $k = \lfloor \sqrt{N} \rfloor$ для простоты), как показано на рис.2, аналогично описанной стандартной калибровке Верньера в разделе 2. Затем поместим $k+1$ (виртуальные) метки с шагом 1 в T_2 , начиная с позиции 1, другую серию меток $k+1$ с шагом 1, разместим начиная с позиции $N-k$, следующую серию меток $k+1$ с шагом 1, разместим начиная с позиции $2(N-k-1) + 1$, и т. д., как показано на рис.2.

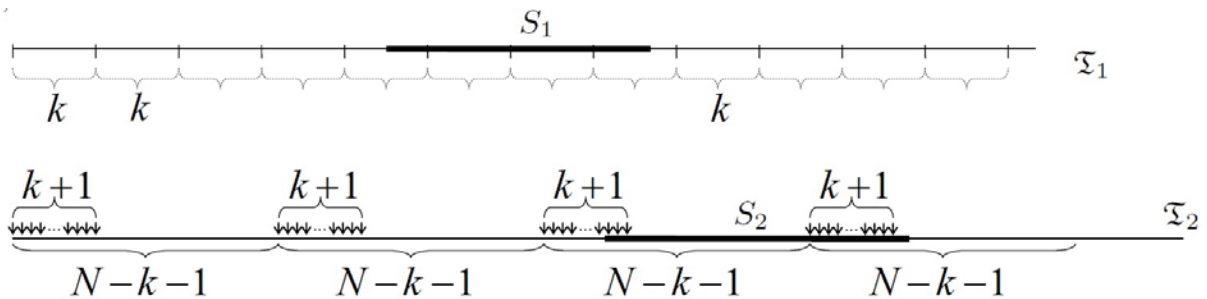


Рис. 2. Позиции тегов для нашего алгоритма приближенного подстрочного совпадения.

Теперь мы можем сформировать прореженные словари: $\tilde{W}_m^{[1]}$ построенные для

подстрок длины m (такие подстроки называются тегами), начиная с отмеченных позиций в первой строке T_1 (на самом деле это $W_{m,k}^{[1]}$ с постоянным шагом k), а второй словарь $\tilde{W}_m^{[2]}$ с переменным шагом, выбирая подстроки длины m , начиная с отмеченной позиции во второй строке T_2 (фактически это части полного словаря $W_m^{[1]}$; с шагом 1, но только с $(k+1)$ последовательными позициями, повторяющимися с шагом $N-k-1$ между частями). Размеры этих словарей приблизительно в $k = \sqrt{N}$ раз меньше, чем полные словари $W_{m,1}^{[1]}$ и $W_{m,1}^{[2]}$.

Как видно из рис.2, по крайней мере, одна полная серия $k+1$ маркеров попадает внутрь $S_2 \subset T_2$. Тогда соответствующая карта $M_{S_1, S_2} : S_1 \rightleftharpoons S_2$ передаст эту партию в ту часть S_1 , которая будет включать по меньшей мере одну метку в T_1 (они были взяты с шагом k), если соответствующая отмеченная позиция не была удалена путем редактирования или она будет очень близко к такой отметке, если удаления/вставки были расположены в положениях, близких к отмеченному в T_1 . Затем соответствующие метки в T_1, T_2 (точки входа в $\tilde{W}_m^{[1]}, \tilde{W}_m^{[2]}$) будут приблизительно соответствовать локальной k -плотности δ или близкой к ней. Поэтому, используя некоторый подходящий метод поиска для приближенных совпадений точек входа в $\tilde{W}_m^{[1]}, \tilde{W}_m^{[2]}$ (например, метод, описанный в [12]), мы можем найти такие совпадающие зародышевые метки для дальнейшего расширения в соответствующие подстроки S_1, S_2 способом, описанным более подробно ниже.

Теперь мы дадим более точное описание процесса выбора тегов, соотношение между параметрами N, k, m и δ и доказать правильность первого этапа (создание словарей $\tilde{W}_m^{[1]}, \tilde{W}_m^{[2]}$ с приблизительно совпадающими тегами, если есть приблизительно совпадающие $S_i \subset T_i$).

Теорема 1. Если есть приблизительно соответствующие подстроки $S_1 \subset T_1, S_2 \subset T_2$ длины N или более с локальной ошибкой ν -плотности δ , $\nu = \min(m, k)$, тогда приблизительно совпадающие теги (подстроки длины m) можно найти в словаре $\tilde{W}_m^{[1]}$ (полученном с использованием постоянного шага k для последовательности T_1) и в словаре $\tilde{W}_m^{[2]}$ (полученном из T_2 в соответствии с приведенным выше неформальным описанием и строгим описанием ниже) соответственно, с локальной ошибкой m -плотности δ (то есть с расстоянием редактирования не более $d = \delta \cdot m$ между приблизительно совпадающими тегами) при условии что $N \geq (k+1) \cdot (1+\delta) + m - 1$.

3.2. Алгоритм

Шаг 1. Учитывая интересующую нас длину N и δ , выберем подходящие k и m такие, что $N \geq (k+1) \cdot (1+\delta) + m - 1$.

Шаг 2. Если у нас есть две последовательности ДНК для анализа, создаем словари $\tilde{W}_m^{[1]}, \tilde{W}_m^{[2]}$, как описано в подразделе 3.1. В противном случае (для одного или больше двух последовательностей ДНК, если мы хотим, найти приблизительно соответствующие подстроки внутри символьных последовательностей) создать для каждой

последовательности ДНК словарь с переменным шагом: сначала находим метки длины m , начинающиеся с позиций $1, k+1, 2k+1, \dots$, а затем добавить к этому словарю группы $(k+1) \cdot (1+\delta)$ последовательных меток длины m , которые начинаются в позициях $1, N - (k+1) \cdot (1+\delta) - m + 1, 2(N - (k+1) \cdot (1+\delta) - m) + 1$ и т. д. Добавляем позиции выбранных меток в словарь для дальнейшего расширения.

Шаг 3. Проверяем, есть ли приблизительно соответствующие теги ввода (с учетом верхней границы локальной m -плотности) в словарях, используя подходящий внешний алгоритм.

Шаг 4. Строим расширение найденных повторяющихся меток (используя их позиции, хранящиеся в словарях), как описано в разделе 3.1.

Шаг 5. Составляем список всех помеченных расширений с их позициями в T_i .

Дополнительные технические сведения. Для поиска примерно совпадающих тегов на шаге 3 в нашей текущей реализации мы используем бесплатное программное обеспечение [12]. На самом деле существует множество алгоритмов и методов для поиска приближенного соответствия; можно варьировать алгоритм, используемый на этом этапе, в соответствии с целями конкретного эксперимента (см. раздел 5).

Стратегии расширения на шаге 4. Если $\delta = 0$, то применяется простой поиск точных совпадений и метод расширения, описанный в [6]. Если $\delta > 0$, то продолжаем расширение, даже если сравниваемые символы вокруг него нарушают установленное ограничение локального или глобального уровня ошибок d ; здесь могут быть полезны разные стратегии расширения. Например, можно не ограничивать уровень плотности ошибок для расширения или подсчета, но ограничить общее число ошибок глобально и/или их глобальную плотность относительно общей длины отмеченных расширений (не останавливаясь, как только локальная ошибка m -плотности будет превышена).

Обработка символов N, W и т. д. В доступных в настоящее время базах данных ДНК встречаются результаты с неточным распознаванием нуклеотидов, они отмечены буквами вне стандартного нуклеотидного алфавита $\mathcal{A} = \{A, C, G, T\}$. Могут применяться несколько стратегий в зависимости от проблемы, решаемой исследователем: рассматривать символы N, W и т. д. как мутации; рассматривать их как возможные совпадения (не распознанные секвенсором ДНК) и сохранить расширение без добавления 1 в счетчик ошибок; это может привести к очень длинным расширениям тегов, в основном состоящих из N , поэтому нужно проверить результаты расширения или применить дополнительные критерии остановки при расширении; резать последовательности ДНК на более мелкие куски, которые не содержат N и запускать наш алгоритм на полученных кусках. На практике это приводит к тысячам отдельных фалов в большинстве случаев. Наши эксперименты показывают, что это не является проблемой для нашей реализации.

4. Результаты экспериментов.

Чтобы оценить эффективность предложенного алгоритма, мы провели несколько вычислительных экспериментов.

Чтобы проверить наиболее сложный шаг 3 (раздел 3.2), были выполнены два типа вычислительных экспериментов с программной реализацией алгоритма, описанного в [12]. Первый (раздел 4.1, эксперимент 1) касается вопроса о осуществимости метода с помощью некоторого свободно распространяемого программного обеспечения и оценки его времени выполнения для некоторых типичных последовательностей. Основная цель этого эксперимента – оценить общее время выполнения программы, а так же время, необходимое как для создания и сжатия хэш-таблицы, так и для выполнения одного

запроса. Вторым эксперимент (раздел 4.1, эксперимент 2) решает вопрос о выполнимости и эффективности используемого программного обеспечения для запросов пакетного режима; мы подсчитали время, необходимое для разработки хеш-таблицы, и время, необходимое для поиска совпадающих слов в словаре. Оба эксперимента показали разумные результаты, доказали целесообразность метода и удобство использования свободно распространяемого программного обеспечения [12].

Раздел 4.2 показаны результаты этапа 4 расширения нашего нового алгоритма.

4.1. Поиск совпадений с погрешностями.

Чтобы искать общие теги с незначительными несоответствиями, мы использовали бесплатное программное обеспечение <http://code.google.com/p/compact-approximate-string-dictionary/> I. Chegrane and D. Belazzougui [12]. Он обеспечивает поиск заданной строки в имеющемся словаре с двумя или меньшими несоответствиями. Удаление символа, вставка символа или мутация символа являются допустимыми погрешностями для этого программного обеспечения. Чтобы получить решение, разработчики программного обеспечения заменили точное хеширование линейным зондированием, удалили все пустые записи в хеш-таблице и использовали сравнение строк.

Эксперимент 1. Обработка отдельных запросов. Чтобы проверить время одного запроса и память, необходимую для обработки запроса, мы использовали следующие данные. Первой оригинальной последовательностью символов была последовательность ДНК XIV хромосомы человека. По этой последовательности были созданы два словаря по алгоритму, описанному в разд. 3.1 и 3.2; для первого использовались теги длиной $m = 50$, а для второго использовались теги длиной $m = 30$ (с меньшим шагом k). Первый словарь содержал 1.7×10^3 записей, а второй - 1.7×10^6 записей.

При первом запуске был использован запрос CTGAATCAACCAACCACCTGAAGCTGTCCC с двумя мутациями символов. Время работы составило 80.341 секунд, а программное обеспечение возвратило 34 строки с двумя погрешностями. Точных совпадений и строк с одной погрешностью обнаружено не было. Создание хеш-таблицы и сжатие составило 80.071 секунд, точный поиск занял 0.241 секунды, поиск с одной погрешностью 0.241 секунды, а поиск с двумя погрешностями 0,029 секунд.

Во втором запуске мы использовали ту же строку из словаря с одной вставкой и одним удалением. Время поиска составило 93,458 секунды. Программное обеспечение вернуло две строки с двумя погрешностями. Опять же, ни точных совпадений, ни строк с одной погрешностью обнаружено не было. Создание хэш-таблицы и сжатие заняли 93.022 секунды, поиск точных совпадений занял 0,065 секунды, а поиск с двумя погрешностями составил 0,072 секунд. При работе программы использовалось около 3 Гб памяти.

Для словарей, содержащих 50 символов, также было сделано два запуска. Мы использовали реальную строку

CAAGCCACCATACCCAGACATGATGGTCTTTGAAGAAGCGGCCAGTGAAG с двумя мутациями в качестве запроса. Время работы составило 17,617 секунд, а программное обеспечение вернуло исходную строку, указав два несоответствия. Хэш-таблица и сжатие заняли 17,600 секунд, точный поиск соответствий 0,000 секунд, поиск строк с одной погрешностью занял 0,001 сек, а с двумя погрешностями 0,016 секунд. Аналогично, строка с одним удалением и одной вставкой в качестве запроса обрабатывалась 19.386 секунд. Программное обеспечение нашло 67 строк с двумя погрешностями. Создание хэш-таблицы и сжатие заняли 19.341 секунд, поиск точного соответствия занял 0,000 секунд, поиск с одной погрешностью занял 0,004 секунды, а с двумя по-

грешностями 0.041 секунды. Для работы программы потребовалось около 0,5 Гб памяти.

Эксперимент 2. Обработка запросов в пакетном режиме. Мы искали примерно совпадающие теги с одной или двумя погрешностями из одного и того же словаря в пакетном режиме, с созданием хэш-таблицы и сжатием. Запускался цикл запросов для поиска приближенных совпадений с последовательной подачей всех тегов из словаря. Запросы нашли 528 строки с одной погрешностью и 55 302 с двумя погрешностями, соответственно. Первый этап (создание и сжатие хэш-таблицы) занял 17,453 секунды, пакетный поиск одиночных погрешностей занял 6,906 секунд, а для двух погрешностей поиск занял 497,070 секунд.

Кроме того, мы использовали два генома бактерий для создания словарей (это *Streptomyces bingchenggensis* BCW-1, ACCP002047 в EMBL-банке, длиной 11 936 683 нуклеотидов и *Мухосoccus stipitatus* DSM 14675, ACCP004025 в EMBL-банке, длиной 10 350 586 нуклеотидов). Были созданы два словаря, оба из которых содержат теги длиной 20 для каждого генома. Все теги были помечены номерами их позиций в пределах последовательности. Словари состоят из 119 376 и 109 568 записей, соответственно. Мы использовали первый словарь для создания хеш-таблицы, а второй для пакетных запросов, таким образом организовав поиск приближенных совпадений в двух геномах. Для этих словарей после пакетных запросов было найдено несколько точных совпадений; 36 строк с одной погрешностью и 802 строки с двумя погрешностями. Всего время запуска составило 36,612 секунд, включая 2.056 секунды на создание хеш-таблицы и сжатие и 34,566 секунды на пакетный поиск.

4.2. Расширение найденных приблизительно совпадающих тегов

Здесь мы приводим только результаты этапа 4 (п. 3.2) для бактериальных геномов *Streptomyces bingchenggensis* и *Мухосoccus stipitatus*. После расширения мы получили 4 точных совпадения подстрок длины 52, 54 и 67 (две пары совпадений для этой длины). Используя все найденные приблизительно совпадающие теги и установив глобальную плотность ошибки $\delta = 0.25$ мы получили более 40 примерно совпадающих подстрок длиной от 50 до 1006 символов.

Вышеприведенные эксперименты показывают, что модифицированный алгоритм Верньера, предложенный в этой статье является выполнимым и может использоваться на практике.

5 Обсуждение и заключение.

В настоящей работе мы представляем принципиально новый алгоритм быстрого поиска приблизительно совпадающих подстрок. Разрежение словарей, типичное для обоих алгоритмов, дает преимущество в скорости выполнения алгоритма, поскольку он пропускает огромное количество сравнений и проверок совпадений подстрок.

Метод, описанный в [6], и тот, который представлен здесь, отличаются схемой расположения тегов. Первый метод подразумевает, что теги расположены почти равномерно; схема разбивки гарантирует, что всегда существует тег, попадающий внутрь общей строки, безотносительно к местоположению этой строки в последовательности. Второй метод, наоборот, предполагает, что теги должны быть расположены двумя противоположными способами: в первой последовательности теги распределяются однородно по последовательности, а во второй максимально плотные группы тегов должны были расположены вдоль последовательности очень редко.

Реализация приблизительного поиска в значительной степени зависит от заданного уровня ошибок, который необходимо настроить. Описание метода, приведенное в разд. 3.2 фиксирует параметр, который является средним локально допустимым уровнем ошибок (это параметр δ в п. 3.1) в подстроках при сравнении. Формально можно

ожидать, что параметр может быть настроен почти произвольно, и метод все еще будет работать правильно.

Формальная правильность не имеет смысла, если δ достаточно велико: действительно, любые две строки могут считаться равными, если позволить произвольное число погрешностей. В нашей статье мы выбираем параметр $\delta < 0.5$. Дальнейший рост этого параметра может давать любые две подстроки, которые не могут быть различимы.

Мы полагаем, что предложенный алгоритм с правильным выбором параметра (k , m и δ) будет очень эффективным для использования в больших геномных базах данных.

Список литературы.

1. G. H. Gonnet. Some string matching problems from Bioinformatics which still need better solutions. *Journal of Discrete Algorithms*, 2(1):3-15, 2004.
2. I. Alsmadi, M. Nuser. String Matching Evaluation Methods for DNA Comparison. *Int. J. of Advanced Sci. and Technology*, 47:13–32, 2012.
3. S. F. Altschul, W. Gish, W. Miller, E. W. Meyers, and D. J. Lipman. Basic local alignment search tool. *Journal of Molecular Biology*, 215(3):403–410, 1990.
4. W. Pearson and D. Lipman. Improved tools for biological sequence comparison. *PNAS, USA*, 85: 2444–2448, 1988.
5. Maier D. (1978) The Complexity of Some Problems on Substrings and Supersequences. *J. ACM (ACM Press)* 25(2): 322–336.
6. S. P. Tsarev, M. G. Sadovsky. New Error Tolerant Method for Search of Long Repeats in DNA Sequences. In: Boton-Fernandez M., Martin-Vide C., Santander-Jimenez S., Vega-Rodriguez M. (eds) *Algorithms for Computational Biology. LNCS*, 9702:171–182. Springer, Cham, 2016.
7. V. I. Levenshtein. Binary codes capable of correcting deletions, insertions, and reversals. *Soviet Physics Doklady*. 10(8): 707–710, 1966.
8. R. R. Martin. On the computation of edit distance functions. *Discrete Mathematics*, 338(2):291-305, 2015.
9. Bugaenko N. N., Gorban A. N., Sadovsky M. G. (1998) Maximum entropy method in analysis of genetic text and measurement of its information content. *Open Systems & Information Dyn.* 5(2): 265-278.
10. Sadovsky M. G. Comparison of real frequencies of strings vs. the expected ones reveals the information capacity of macromolecules. *J. of Biol. Physics*, 29, 23 (2003).
11. Sadovsky M. G. Information capacity of nucleotide sequences and its applications. *Bulletin of Math. Biology*. 68, 156 (2006).
12. Chehrane I., Belazzougui D. Simple, compact and robust approximate string dictionary. *arXiv:1312.4678v2 [cs.DS]*. 2014.
13. https://en.wikipedia.org/wiki/Vernier_scale

ОБЪЯСНЕНИЕ ПОВЕДЕНИЯ СИСТЕМ НА БАЗЕ ДИС-ТЕХНОЛОГИИ EXPLANATION OF SYSTEM CONDUCT ON THE BASE OF DIS-TECHNOLOGY

В.П.Сизиков¹, В.И. Разумов²

¹Омский государственный университет путей сообщения, v_p_sizikov@mail.ru

²Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, razumovvi@omsu.ru

1. Введение. В интеллектуальной культуре с 19 в. по настоящее время конкурируют две установки. Одна связана с идеями О. Конта о подходе к социальным наукам как к социальной физике. Вторая восходит к последователям И. Канта В. Дильтею, Г. Риккерт, утверждавшим о принципиальной несовместимости наук о Природе и наук о Духе. Будем исходить из предположения о том, что ограниченность двух этих подходов базируется на общей для интеллектуальной культуры вещественно-энергетической парадигме, которая не адекватно отражает реальность и нуждается в замене на информационно-полевую парадигму [1]. В русле становления информационно-полевой парадигмы формируется теория динамических информационных систем (ДИС, ТДИС), а затем и ДИС-технология как системная методология, с их приложениями в области моделирования [2].

С помощью ТДИС и ДИС-технологии удаётся развить адекватную версию системного подхода, что предусматривает представление любого объекта как ДИС определённого вида. Это позволяет строить модели объектов любого типа, а также выявлять в них неоднородности, качественные переходы, определяющие поведение этих объектов и выраженные на языке имитационных моделей. В основном используются модели в форме ДИС-компьютеров (ДИС-*К) как ДИС с наиболее полным системным потенциалом, сочетающим структурный уровень через номологическую базу, файл которой расположен по адресу [<http://thoughttring.com/ViewForm.aspx?id=421>], и функциональный уровень через процесс информационного функционирования (ПИФ).

В данной работе рассмотрим эффекты зомби и конкуренции в социальной и физической системах. Демонстрируемые здесь примеры, в частности, подбор комбинаций элементов и величин, носят условный характер, но они позволяют выявить системные закономерности, причём такие, что проявляются в природе и в обществе. Есть основания полагать, что представляемый здесь подход окажется полезным для контроля, оценки, предсказания различных физических и социальных событий.

2. Кто такие конкуренты и зомби? За основу берётся модель в ранге ДИС-*К D как специфического орграфа с двумя типами рёбер, причём все рёбра в нём настроены на обеспечение взаимодействия между вершинами, а суммарный объём ресурса принимается равным 1 как условной единице. И началом для работы с ПИФ этой модели является задание значений её функциональных параметров.

Как в любой ДИС, каждой вершине v ДИС-*К D сопоставляются величины актива $r(v)$, пассива $q(v)$ и уровня трансформации $\lambda(v)$ пассива в актив в этой вершине. При этом обязательно $0 \leq r(v) + q(v) \leq 1$, $0 \leq \lambda(v) \leq 1$. Величина $\lambda(v)$ ассоциирует с властью элемента v в ДИС D , так как отражает объём накоплений ресурса в v для того, чтобы принять решение пустить его далее в общий оборот. Допускается случай, когда $\lambda(v)=0$, и тогда элемент v ассоциирует с *зомби*, не принимающим никаких решений. Впрочем, актуального принятия решений на месте элемента v может не быть и при до-

статочном малом значении $\lambda(v)$. Условимся и в таких случаях с $\lambda(v) \approx 0$ относить элемент v к зомби, а в ситуациях $\lambda(v)=0$ говорить об *идеальном* зомби. Далее, надо определиться с величинами $f_d(v_i, v_j)$, $f_c(v_j, v_i)$ проводимости ведущего и контролирующего рёбер, передающих ресурс из вершины v_i в вершину v_j . На условиях взаимодействия для этого каждой вершине v сопоставляются величины мотивации $a(v)$ актива и $b(v)$ пассива, а уж по ним автоматически определяются $f_d(v_i, v_j)=a_{ij}[r(v_j)+q(v_j)]$, $f_c(v_j, v_i)=b_{ij}[r(v_j)+q(v_j)]$, где $a_{ij}=[a(v_i)a(v_j)]^{0,5}$, $b_{ij}=[b(v_i)b(v_j)]^{0,5}$. Здесь обязательно $0 \leq a(v) \leq 1$, $0 \leq b(v) \leq 1$, причём случай $a(v)=b(v)=0$ будет означать, что вершина v , по сути, исключена из модели, т.е. на деле в качестве модели может выступить и часть ДИС-*К.

Специфика каждого ДИС-*К такова, что набор всех вершин модели можно поделить на три непересекающихся блока V_0 , V_1 , V_2 таких, что в ПИФ происходит перераспределение ресурса по кругообороту $V_0 \rightarrow V_1 \rightarrow V_2 \rightarrow V_0$ – из каждой вершины одного блока в каждую вершину следующего за ним блока. В частности, перемещение ресурса из блока V_0 в блок V_2 возможно через любую из вершин блока V_1 , и этот момент делает вершины блока V_1 *конкурентными* друг другу в осуществлении ПИФ, что, конечно, справедливо для вершин также блоков V_0 и V_2 .

Оказывается, что феномены зомби и конкуренции привносят в поведение ПИФ модели в ранге ДИС-*К D серии существенных особенностей. Причём эти особенности не имеют никакого отношения к представлениям о конкуренции в рамках традиционного бизнеса, имеющего целью максимальное извлечение прибыли.

3. Основные закономерности по функционированию. В принципе, не исключаются случаи, когда уровни трансформации и величины мотивации могут меняться буквально от акта к акту в ПИФ ДИС. Это, однако, не уменьшает актуальности случаев, в которых эти величины остаются неизменными на протяжении практически неограниченного срока. Пусть для начала величины мотивации $a(v)$ актива и $b(v)$ пассива не зависят от вершины v в модели. Обозначим при этом $R_i = \sum \{r(v) | v \in V_i\}$, $Q_i = \sum \{q(v) | v \in V_i\}$, $\Lambda_i = \sum \{\lambda(v) | v \in V_i\}$ ($i=0,1,2$). Тогда основу составит следующая теорема.

Теорема 1. *В графике ПИФ ДИС-*К D при условии, что величины мотиваций не зависят от вершин, для величин R_i и Q_i ($i=0,1,2$) справедливы те же закономерности и оценки, что и для триады, вершины которой представляют блоки V_0 , V_1 , V_2 с активами R_i , пассивами Q_i и уровнями трансформации Λ_i , соответственно. В частности, есть риски обречения системы – такой риск возможен при условии, что $\Lambda_0 + \Lambda_1 + \Lambda_2 > 1$, а также при условии наличия блока исключительно из идеальных вершин-зомби, когда, например, $\Lambda_2 = 0$ и при этом дополнительно $2\Lambda_0 + \Lambda_1 > 1$. Также максимизации проявлений актива в блоке, например, V_2 способствует выполнение условия $\Lambda_1 > \Lambda_0 + \Lambda_2$. Добавляются ещё следующие закономерности для активов и пассивов у отдельных вершин в каждом блоке V_i ($i=0,1,2$): если в V_i есть вершина, отличная от зомби, то средняя величина ресурса в графике ПИФ в каждой вершине $v \in V_i$ установится в главном пропорциональной величине уровня трансформации $\lambda(v)$, в частности, все идеальные вершины-зомби в V_i «выпадут» из ПИФ; если V_i состоит только из вершин-зомби, не обязательно идеальных, то график ПИФ в каждой вершине $v \in V_i$ представится исключительно активом и будет изменяться пропорционально величине исходного объёма ресурса $r(v)+q(v)$.*

Описанные закономерности будут, конечно, искажены в случаях, когда величины мотивации $a(v)$ актива и $b(v)$ пассива могут изменяться от вершины к вершине в

модели. Однако появляются серии новых закономерностей, которые тоже можно выразить в форме специальной теоремы.

Теорема 2. *Локальное увеличение величины $b(v)$ мотивации пассива в вершине-зомби v , а также величины $a(v)$ мотивации актива в произвольной вершине v , способствует уменьшению средней величины актива $r(v)$ в вершине v и увеличению такового в последующих за v вершинах в ПИФ ДИС-*К D. Даже локальное увеличение величины $b(v)$ мотивации пассива в вершине v , отличной от зомби, как и глобальное увеличение величины $a(v)$ мотивации актива, способствует увеличению частоты оборота ресурса в ПИФ ДИС-*К D.*

Принимая во внимание приведённые теоремы, обратимся к примерам по их использованию. Главный момент состоит в том, что закономерности, отражённые в этих теоремах, несут системные основания, и не имеют прямого отношения к представлениям о конкуренции в рамках традиционного бизнеса, имеющего целью максимальное извлечение прибыли.

4. Примеры по использованию основных закономерностей в обществе. Так, результат теоремы 2, связанный с локальным увеличением величины $a(v)$ мотивации актива, соответствует бытовому факту агитации или рекламирования в бизнесе покупки того или иного материала. Мотивированный элемент как бы дарует часть своего актива следующему за ним элементу-продавцу в форме денег на покупку материала. В свою очередь, величина $b(v)$ мотивации пассива у элемента, отличного от зомби, соответствует проявлению инвестирования в районе этого элемента, так что рост его показателя естественным образом увеличивает оборот ресурса в целом.

Результатам же теоремы 1 не находится таких простых ситуаций из традиционных представлений о торговле и бизнесе. Хотя эти результаты имеют неприятную и даже катастрофическую окраску, в реальности они, как правило, не находят здравых объяснений, их причины остаются не раскрытыми, а то и вовсе извращёнными. Обратимся к паре примеров, ассоциированных с развитием СССР.

В первом примере представим СССР моделью в ранге ДИС-*К уровня 2, имеющего 9 вершин. При этом вершинам сопоставим части СССР на территориальном языке следующим образом: v_0 – европейская часть России; v_1 – Сибирь; v_2 – восток России; v_3 – Белоруссия; v_4 – Республики Закавказья; v_5 – Украина и Молдавия; v_6 – Республики Средней Азии; v_7 – Республики Прибалтики; v_8 – Казахстан. Здесь для образца уместно взять $V_0=\{v_0, v_5, v_7\}$, $V_1=\{v_1, v_3, v_8\}$, $V_2=\{v_2, v_4, v_6\}$, а также $\lambda(v_0)=0,3$, $\lambda(v_5)=0,01$, $\lambda(v_1)=\lambda(v_3)=\lambda(v_7)=\lambda(v_8)=0,001$, $\lambda(v_2)=\lambda(v_4)=\lambda(v_6)=0$. Другими словами, власть была сосредоточена в европейской части СССР, тогда как в остальных местах не полагалось и «рта раскрывать», последнее особенно касалось востока России, Республик Закавказья и Республик Средней Азии, представленных в модели как идеальные зомби.

На первый взгляд подумается, что в указанных условиях больше всего страданий и нищеты достаётся идеальным элементам-зомби с $\lambda=0$, на порядок лучше оказываются у элементов с $\lambda=0,001$, очень неплохо у элемента с $\lambda=0,01$ и превосходно в самом властном месте с $\lambda=0,3$. На деле наиболее бедными будут элементы v_5 и v_7 , получая в среднем ресурса на уровне величин их λ , наиболее богатым и впрямь окажется самый властный элемент v_0 , однако не сильно будут отставать от него по относительной величине и все остальные элементы, включая и элементы-зомби. Более конкретно, примем в модели $a(v)=b(v)=0,5$ при всех v , а также следующее начальное распределение активов

и пассивов по её вершинам: $r(v_0)=0,01$; $r(v_1)=q(v_1)=r(v_2)=r(v_4)=r(v_8)=0,1$; $r(v_3)=r(v_7)=0,02$; $r(v_5)=q(v_5)=0,2$; $r(v_6)=0,05$; все прочие $q(v)=0$. Произведя расчёт ПИФ при указанных выше значениях $\lambda(v)$, в результате получим следующие средние значения активов и пассивов в вершинах модели: $r(v_0)=0,23$; $r(v_1)=0,241$; $r(v_2)=r(v_4)=0,093$; $r(v_3)=0,032$; $r(v_5)=0,008$; $r(v_6)=0,046$; $r(v_7)=0,001$; $r(v_8)=0,113$; $q(v_0)=0,137$; $q(v_5)=0,005$; $q(v_7)=0,001$; $q(v_1)=q(v_2)=q(v_3)=q(v_4)=q(v_6)=q(v_8)=0$. Из этих данных явно видно, что самый богатый изначально элемент v_5 переместился на место, наоборот, самого бедного, а самый бедный изначально элемент v_0 переместился на место самого богатого, уступив по активу место лишь элементу v_1 , занимавшему изначально второе место по богатству. Впрочем, в факте превосходства по активу элементу v_1 здесь явно повезло, поскольку блок V_1 , в котором он состоит, на деле оказался из элементов-зомби, сохранив в нём первоначальные отношения богатства. Однако такого могло и не случиться.

Повторим описанную процедуру, осуществив в модели следующую замену: $\lambda(v_1)=\lambda(v_3)=\lambda(v_8)=0,01$, которая уже не позволит блоку V_1 оказаться из элементов-зомби. В результате получим следующие средние значения активов и пассивов в вершинах модели: $r(v_0)=0,228$; $r(v_1)=r(v_3)=r(v_8)=0,127$; $r(v_2)=r(v_4)=0,094$; $r(v_5)=0,008$; $r(v_6)=0,047$; $r(v_7)=0,001$; $q(v_0)=0,136$; $q(v_1)=q(v_3)=q(v_8)=0,002$; $q(v_2)=q(v_4)=q(v_6)=0$; $q(v_5)=0,005$; $q(v_7)=0,001$. Как видно, теперь явно лидером по богатству оказывается элемент v_0 , тогда как элементы из блока V_1 поделили между собой ресурс на равных в соответствии с равенством своих властей, отражённом в их значениях $\lambda(v)$.

Независимо от того, насколько адекватным является приведённое распределение частей СССР по блокам V_0 , V_1 , V_2 , вряд ли справедливо будет отрицать факты того, что какие-то из республик могли испытывать явное ущемление в своих дарованиях, а какие-то, наоборот, могли наслаждаться, невзирая на свою беззаботность. Иное дело, что причина таких фактов была, скорее, не осознана из-за отсутствия адекватных системных научных проработок. И этот момент может служить основанием таких событий, как распад СССР. Кстати, он же даёт объяснение, как, на удивление кое-кому, могла при «культе личности» происходить индустриализация СССР.

Возьмём модель, устроенную на принципах ДИС-*К, в которой блок V_0 состоит всего лишь из одного элемента v_0 , блок V_1 – из нескольких элементов $\{v_1, \dots, v_m\}$, как и блок V_2 – $\{v_{m+1}, \dots, v_{m+n}\}$, где $m \geq 2$, $n \geq 2$. В этой модели можно соотнести блок V_0 с личностью Сталина, блок V_1 – с высшими управленцами, блок V_2 – с народом. И на примере этой модели, учитывая приведённые выше результаты, нет проблем добиться благоприятных показателей ПИФ на месте каждого элемента. Причём, для достижения такого момента достаточно, чтобы все элементы имели малые, но всё-таки отличные от нуля, значения $\lambda(v)$ уровней трансформации, пребывая как зомби, но не идеальные. А при условии $\Lambda_1 > \Lambda_0 + \Lambda_2$ и вовсе можно ожидать высоких показателей актива в блоке V_2 .

Главным недостатком данной модели является то, что в ней неизменны отношения средних значений ресурса в вершинах – более бедному так и суждено вечно оставаться более бедным, несмотря на приличный рост в рамках малого своего значения $\lambda(v)$ уровня трансформации и соответствующей этому сложности решаемых им задач. Чтобы затронутая переменная оказалась возможной, необходимо уйти от ситуации с

зомби, и тогда всё начнёт определяться сравнением величин $\lambda(v)$ в каждом из блоков V_1, V_2 . В принципе, однако, возможно и очень даже благоприятно устраивать каждым элементом v регулярные временные увеличения значения $\lambda(v)$ с последующим продолжительным его уменьшением обратно почти до нуля. Чередование таких процедур делает возможным каждому элементу регулярно в определённые сроки пребывать и трудиться в условиях с достаточно полным объёмом ресурса. Успехи очевидны. Не исключено, что именно так организовано на протяжении суток функционирование живого организма.

К недостатку приведённой модели уместно отнести и то, что в блоке V_0 имеется лишь один элемент v_0 . Ведь в какое-то время Сталину нужно было отдыхать, что соответствует установке $\lambda(v_0)=0$. В такое время, как отмечено в теореме 1, возникает риск обречения системы при достижении условия $2\Lambda_1 + \Lambda_2 > 1$, т.е., в принципе, достаточно было бы высокой жажды власти у управленцев, которая не могла бы привести к обречению при $\lambda(v_0) > 0$, но вполне может к этому привести при $\lambda(v_0)=0$. Во избежание случая с обречением имеет смысл пополнить блок V_0 ещё хотя бы одним элементом w_0 , неким доверительным по отношению к v_0 , и при этом обязательно $\lambda(w_0) > 0$ в периоды, когда $\lambda(v_0)=0$. Именно такой момент на деле и использовался. Впрочем, аналогичная проблема с рисками обречения была бы и в случаях, когда $m=1$ или $n=1$. Так что факт наличия конкурентов выступает, в определённом смысле, спасением для системы.

Вероятно, однако, что ситуация, когда обеспечение ресурсом производится пропорционально сложности решаемых задач или поочерёдно во времени, устраивала далеко не всех, особенно демократически настроенных лиц, а это приводило к конфликтам, к искусственно провоцируемым доносам и их печальным последствиям. Тем более что в нормальных условиях необходимости в большом значении $\lambda(v_0)$, т.е. власти у Сталина, не возникает. И тот факт, что причину всех бед старались прописать в «культе личности Сталина», служит ещё одним свидетельством отсутствия адекватных системных научных проработок.

5. Примеры по использованию основных закономерностей в физике. Здесь сразу надо принимать во внимание, что все рёбра в модели настроены на обеспечение взаимодействия между вершинами. Поэтому многие привычные физические процедуры неизбежно останутся в стороне, в принципе, не блистая оригинальностью.

Величина $a(v)$ мотивации актива в вершине v модели ассоциирует с величиной давления в соответствующем месте, и сведения теоремы 2 вполне согласуются с физическими фактами, что рост величины давления в каком-то месте приводит к оттоку актива как свободного ресурса из этого места в соседние районы. Аналогично, величина $b(v)$ мотивации пассива в вершине v модели ассоциирует с величиной всасывания в соответствующую локальную зону, наоборот, с пониженным давлением. Так что сведения теоремы 2 вполне согласуются с физическими фактами, что рост величины всасывания в локальную зону приводит к увеличению скорости перераспределения ресурса в среде в целом на примере ветров, циклонов.

Под результаты же теоремы 1 соответствующие физические ситуации не столь просты и очевидны. Во-первых, в ней исследуемый объект считается однородным, и

это означает, что перемены в рамках ограниченного объекта требуют работы на микроуровне. Во-вторых, даже в случаях однородного объекта часто возможны ситуации, когда почти весь его ресурс надолго сосредоточивается в одном элементе, оставляя практически без ресурса всё остальное, однако это вовсе не значит, что объект буквально стягивается в точку. В-третьих, для описания перемен нужны качественно-новые представления о движении, основу которых составляют перемещения ресурса, а не самих объектов. В связи с этим традиционные толкования явлений часто оказываются далеки от сути, и найти такие толкования под конкретный результат весьма трудно.

Так, особую оригинальность в теореме 1 представляет качественный переход в законе распределения ресурса независимо в каждом из блоков V_0 , V_1 , V_2 модели, ассоциирующий с проявлениями становления или, наоборот, отключения феномена зомби в однородной среде. В рамках ДИС-технологии с информационным подходом к движению первый случай означает, что распределение ресурса по элементам соответствующего блока в ПИФ протекает без участия в них сил, а во втором – с участием сил. Однако природа таких сил традиционного толкования не имеет. В рамках же ДИС-технологии рост величины $\lambda(v)$ в вершине v означает факт всё большего охлаждения объекта в районе элемента v , так что отмеченный качественный переход, по сути, выявляет природу традиционного фазового перехода в среде при её охлаждении.

Более конкретно, случай, когда все элементы в блоке являются идеальными зомби, можно отнести к плазменному состоянию, случай с неидеальными зомби – к газовому состоянию, случай с уходом от зомби – к жидкому состоянию, случай с $\Lambda_0 + \Lambda_1 + \Lambda_2 > 1$, подающий риски на обречение, но всё-таки оставляющий возможность выживать – к твёрдому состоянию, а при утере выживания – к состоянию тёмной материи. Качественный переход в теореме 1 соответствует переходу между газовым состоянием и жидким. Однако этим оригинальность не исчерпывается. Дело в том, что переход в теореме 1 затрагивает блоки V_0 , V_1 , V_2 независимо друг от друга, и вполне возможно, когда часть из этих блоков будет практически вечно пребывать в газовом или даже плазменном состоянии, а остальные в жидком, причём контраст здесь может доходить до случаев, когда на смену жидкому состоянию приходит твёрдое. Интересно, в каком при этом состоянии пребывает сам объект в целом? Или традиционные представления об объекте ограничиваются лишь одним из трёх составляющих его блоков, и, значит, явно не системны? И не теряются ли вслед за этим многие фокусы Природы?

Интересен ещё и такой момент, что при газовом состоянии перестраивающийся блок может содержать элементы в ранге идеальных зомби, т.е. перемешиваться с плазменным состоянием. Стоит, однако, начаться переходу в жидкое состояние, как центры таких идеальных зомби уходят в небытие, т.е. происходит, своего рода, поглощение плазмы образующейся жидкостью. Так, в самом деле, происходит уменьшение числа элементов в перестраивающемся блоке, или уходящие элементы как-то остаются в памяти объекта и могут восстановиться при обратном переходе? С системных позиций верен, скорее, момент с памятью, иначе пришлось бы говорить о разрушении объекта как системы при любом переходе. Вот так приходим к необходимости считать память неотъемлемым атрибутом любого объекта как системы.

Как видно, здоровый системный подход, в том числе понятие процесса-системы с заложенным в нём кругооборотом ресурса [2], принципиально меняет представления об объектах, их природе. Традиция с линейными процессами неизбежно кладёт в основу идеологию разрушения, а вслед за этим и невозможность адекватного восприятия и использования реальности и физической, и социальной.

6. Заключение. Идеи развития информационного подхода в направлении объяснения физических явлений развивались в направлении кибернетики – гомеостатике [3]. Преимущество данного подхода и с учётом его развёртывания на базе ТДИС и в ДИС-технологии состоит в возможности расширения предметных границ физики до объектов социальных и гуманитарных исследований. Также в усовершенствовании нуждается подход к моделированию физических объектов. Это начинается с формирования универсального представления объекта в русле информационно-полевой парадигмы [1] через понятие реального объекта.

Удалось показать, что эффекты зомби и конкуренции имеют место и в социальных, и в физических системах, это отражено в теоремах 1, 2. Анализ примеров с фазовыми переходами и агрегатными состояниями вещества позволяет более обоснованно универсализировать понятие эволюции, распространить его на области неживой природы. С помощью этого, в частности, удалось выяснить, что настройка параметра уровня трансформации $\lambda(v)$ в вершине графа, представляющего данный объект, позволяет прогнозировать, по какому из сценариев, предусмотренных для ПИФ ДИС, пойдёт развитие системы.

Список литературы

1. Разумов В.И. К новой парадигме закона / В.И. Разумов, В.П. Сизиков // Вестник Омского ун-та. – 2012. – № 2. С. 213–219.
2. Разумов В.И. Приложения информационных основ синтеза систем: ДИС-развёртки и парадигма закона. Монография [Электронный ресурс] / В.И. Разумов, В.П. Сизиков. Электронное издание № 33934. № гос. регистр. 0321304636, ФГУП НТЦ «Информрегистр». – Омск. 2014.
3. Gorsky Y. Danger of development of a global catastrophe and the need for new information concepts / Y. Gorsky, V. Razumov, A. Teslinov // Kybernetes. The International Journal of Systems and Cybernetics. – Volume 28, Numbers 8 and 9. – 1999. pp. 929–938.

КИНЕТИЧЕСКИЕ КРИТИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ ДЛЯ СМЕСИ ИЗОТОПОВ СВЕРХТЕКУЧЕГО ГЕЛИЯ ВБЛИЗИ АБСОЛЮТНОГО НУЛЯ¹

В.Н. Удодов

Хакасский государственный университет имени Н.Ф. Катанова, Институт естественных наук и математики, кафедра математики и методики преподавания математики, Россия, Хакасия, г. Абакан, пр. Ленина, д. 90, 655017 udodov@khsu.ru

Предложены новые значения кинетических (динамических) критических индексов для смеси изотопов ^3He и ^4He сверхтекучего гелия для случая равенства критической температуры нулю. Показано, что динамический индекс y для смеси изотопов гелия при температуре, равной нулю, может быть существенно больше обычного значения. Получены также новые формулы для динамического индекса z , который может быть в два раза больше классического значения. Результаты согласуются с гипотезами динамического и статического скейлинга и могут быть проверены экспериментально (или путем численных расчетов) для смеси сверхтекучих изотопов гелия вблизи абсолютного нуля около критической точки расслоения, когда основной вклад в теплоемкость дают фермиевские возбуждения.

Введение

Гипотеза подобия (скейлинга) и критические индексы лежат в основе современной теории критических явлений и фазовых переходов (ФП) [1-16]. Оказывается, можно получить некоторые соотношения между динамическими и статическими (термодинамическими) критическими индексами путем распространения на кинетические явления гипотезы статического скейлинга [4]. В классических работах считалось, что критическая температура положительна. Однако, в последние десятилетия значительное внимание привлекали так называемые квантовые ФП [5, 6, 8], для которых температура ФП $T_C = 0$. В данной работе получены новые следствия гипотезы динамического подобия при равенстве нулю температуры ФП для многокомпонентного параметра порядка для смеси изотопов сверхтекучего гелия.

Динамические критические индексы для многокомпонентного параметра порядка

Дадим сначала определения динамических (кинетических) критических индексов y и z [4] для времени релаксации параметра порядка τ

$$\tau \propto (-\varepsilon)^{-y}, \quad \varepsilon \rightarrow -0, \quad k = 0, \quad y > 0, \quad (1)$$

где $k = 2\pi/\lambda$ – волновое число, λ – длина волны,

$$\varepsilon = T - T_C, \quad (2)$$

$$\tau \propto k^{-z}, \quad \varepsilon = 0, \quad z > 0. \quad (3)$$

Рассмотрим системы, в которых параметр порядка имеет несколько компонент η_i , но эффективный гамильтониан (термодинамический потенциал) зависит (в однородной системе) только от суммы их квадратов [4]. Другими словами, если рассматривать параметр порядка η_i как вектор, то эффективный гамильтониан не зависит от его направления [4]. Примером является чисто обменный изотропный гейзенберговский ферромагнетик, энергия которого не зависит от направления вектора намагниченности (в нулевом магнитном поле), который является трехкомпонентным параметром порядка [4]. Другой пример – сверхтекучий гелий-4, у которого роль параметра порядка η играет волновая функция конденсата (Φ – фаза конденсата Эйнштейна атомов ^4He) [4, 16]

$$\eta = (n_0)^{1/2} e^{i\Phi}, \quad (4)$$

где n_0 – плотность конденсата Эйнштейна атомов гелия. Эта комплексная функция представляет собой совокупность двух независимых величин (вещественная и мнимая части), но энергия однородной жидкости зависит только от квадрата модуля (двухкомпонентный параметр порядка) [4]

Рассмотрим сверхтекучий гелий-4 [4], когда мягкой модой является второй звук. Закон дисперсии этих колебаний в сверхтекучей фазе имеет вид [4]

$$\omega = u_2 k, \quad (5)$$

$$u_2 = \left(\frac{TS^2 \rho_s}{C_p \rho_n} \right)^{1/2}, \quad (6)$$

u_2 – скорость второго звука, S – энтропия, C_p – теплоемкость единицы объема жидкости, ρ_s (ρ_n) – плотность сверхтекучей (нормальной) компоненты. При приближении к точке перехода $T \rightarrow T_c$ плотность ρ_s стремится к нулю по закону [4, 9]

$$\rho_s \propto (T_\lambda - T)^{\frac{2-\alpha}{3}} = (-\varepsilon)^{\frac{2-\alpha}{3}}, \quad (7)$$

где α – критический индекс теплоемкости [1-4]:

$$C_p \propto |\varepsilon|^{-\alpha}.$$

(7) верно для трехмерного пространства, при произвольной размерности d найдем

$$\rho_s \propto (-\varepsilon)^{\frac{(2-\alpha)(d-2)}{d}} (T_c > 0). \quad (8)$$

Закон стремления к нулю скорости u_2 зависит от знака индекса α .

Если $\alpha \leq 0$, то теплоемкость стремится к конечному пределу [4], тогда из формулы (6) найдем [4]

$$u_2 \propto |\varepsilon|^{\frac{((2-\alpha)(d-2))(2d)}{d}} \propto \omega, \quad \alpha \leq 0, \quad T_c = T_\lambda > 0. \quad (9)$$

Рассмотрим случай $\alpha < 0$, что соответствует многим системам при низких температурах, в частности, жидкому гелию-4, для которого [4, 9, 16]

$$\alpha \approx -(0.025 \pm 0.005) < 0. \quad (10)$$

Согласно более новым данным [10] $\alpha \approx -0.012 < 0$.

Применим теперь гипотезу динамической масштабной инвариантности, согласно которой вблизи точки ФП закон дисперсии должен иметь форму [4]

$$\omega = k^z f(k\xi).$$

Далее аналогично [4] можно показать (в [4] $d = 3$), что для сверхтекучей фазы верна формула

$$\nu(z-1) = ((2-\alpha)(d-2))/(2d), \quad T_c > 0 \quad (\alpha \leq 0). \quad (11)$$

Известна формула, следующая из гипотезы статического скейлинга [1-3, 12]

$$2-\alpha = d\nu, \quad (T_c > 0), \quad (12)$$

где d – размерность пространства. Из последних двух формул получим [4] (в [4] $d = 3$)

$$z = \frac{d}{2} \quad (\alpha \leq 0, \quad T_c > 0). \quad (13)$$

Известно, что в сверхтекучей смеси изотопов ^3He и ^4He критическая температура (как температура расслоения) может стремиться к нулю [9]. В этом случае найдем для нулевой критической температуры [12]

$$\nu d = 1 - \alpha = r, \quad T_c = 0, \quad T > 0. \quad (14)$$

Эта формула справедлива для любых равновесных ФП.

Случай равенства нулю температуры ФП, что возможно для квантовых ФП, требует отдельного рассмотрения. В чистом сверхтекучем гелии ^4He при низких температурах основную роль играют фононы [11]. Ситуация меняется при добавлении изотопа ^3He , атомы которого являются фермионами [11, 13, 14]. При концентрации этого легкого изотопа c более 1% основную роль в тепловых свойствах при температуре, стремящейся к нулю, играют ферми-возбуждения, что подтверждается экспериментально [11, 13, 14]. Это приводит к следующим зависимостям от температуры [3, 11] для энтропии и теплоемкости вблизи критической точки расслоения

$$S = C_p \propto T^1 \propto \varepsilon^{-\alpha} = T^{-\alpha}, \quad T \rightarrow T_C = 0, ,$$

откуда следует, что в этом случае критический индекс теплоемкости для равновесных (или почти равновесных) состояний стремится

$$. \alpha = -1, T \rightarrow T_C = 0 \quad (15)$$

Учтено, что при $T_C = 0$

$$\varepsilon = T - T_C = T > 0 . \quad (16)$$

Согласно фазовой диаграмме температура расслоения смеси изотопов гелия $T_C = 0$ при $c \approx 6\%$ [9, 13], тогда можно найти кинетические критические индексы z и y . Для смеси изотопов He близко к точке ФП верны формулы [11, 13]

$$u_2^2(c, T) \cong \frac{\rho_s}{\rho_n} \left[\frac{-2}{\sigma} \left[\frac{\partial T}{\partial \sigma} \right]_{c,p} + c^2 \frac{\partial}{\partial c} \left(\frac{Z}{\rho} \right) \right], \quad (17)$$

где σ – энтропия единицы массы, c – концентрация ^3He ;

$$\bar{\sigma} = \sigma - c \frac{\partial \sigma}{\partial c}; \quad \frac{Z}{\rho} = \mu_3 - \mu_4 ,$$

μ_3 (μ_4) – химический потенциал гелия 3 (гелия 4). Для слабого идеального раствора ^3He в ^4He второе слагаемое в скобке (11) примет вид [11, 13]

$$c^2 \frac{\partial}{\partial c} \left(\frac{Z}{\rho} \right) \cong \frac{k_B T c}{m_3} ,$$

где m_3 – масса атома ^3He . При низких температурах в растворе изотопов гелия основную роль играют ферми-возбуждения и энтропия σ пропорциональна T ($c \approx 6\%$) [11, 13], откуда следует, что

$$\bar{\sigma} \propto T^1. \quad (18)$$

Для квадрата скорости второго звука получим

$$u_2^2(c, T) \cong \frac{\rho_s}{\rho_n} \left[A(c) T^2 + \frac{k_B T c}{m_3} \right], \quad (19)$$

что качественно верно при температурах

$$0,1\text{K} < T < 0,6\text{K} , \quad (20)$$

когда вырождение ферми-бозе жидкости еще не наступило [13] и можно не учитывать ротоны. При понижении температуры в этом интервале скорость второго звука стремится к нулю (не достигая его), однако при $T < 0,1\text{K}$ ($c \approx 6\%$) наступает вырождение и $u_2 \approx \text{const}$ [13], хотя сверхтекучести изотопа ^3He еще нет, однако смесь изотопов сверхтекучая.

Из общих соображений нельзя сказать, какое слагаемое в скобке доминирует в (19) при температурах (20). Если доминирует первое слагаемое, то при $T_C = 0$ получим

$$\nu(z-1) = \frac{\nu(d-2)}{2} + 1 ,$$

откуда

$$z = (1/\nu) + d/2 \quad (T_C = 0) . \quad (21)$$

Из (14) и (15) найдем для критического индекса корреляционной длины

$$\nu = \frac{2}{d} \quad (T \rightarrow T_C = 0) , \quad (22)$$

что дает максимальное значение индекса

$$z = d \quad (T \rightarrow T_C = 0) . \quad (23)$$

Этот результат в два раза больше обычного значения для многокомпонентного параметра порядка и для реальной смеси изотопов гелия вблизи абсолютного нуля (около критической точки расслоения) должно быть $z=3$.

Если доминирует второе слагаемое в скобке (19), то

$$\nu(z-1) = \frac{\nu(d-2)}{2} + 1/2 \quad (24)$$

и индекс z равен

$$z = \frac{3}{4}d \quad (T \rightarrow T_C = 0) . \quad (25)$$

Таким образом, следует ожидать, что для реальной смеси изотопов гелия вблизи критической точки расслоения при $T_C = 0$ кинетический индекс z заключен в интервале

$$\frac{9}{4} \leq z \leq 3 \quad (T \rightarrow T_C = 0, d = 3) . \quad (26)$$

Для кинетического индекса y из гипотезы динамического скейлинга [4] найдем для смеси изотопов сверхтекучего гелия

$$y = z\nu, \quad \frac{3}{2} \leq y \leq 2, \quad T \rightarrow T_C = 0, \quad d = 3 . \quad (27)$$

Эти результаты согласуются с гипотезами статического и динамического скейлинга и верны, если состояния близки к равновесным.

Заключение

Доказано, что некоторые следствия гипотезы динамического скейлинга справедливы только при $T_C > 0$. Если критическая температура равна нулю, то соотношения динамического скейлинга, содержащие критический индекс теплоемкости, меняют свой вид. Однако это не говорит о нарушении гипотезы скейлинга. Предложены новые формулы для индексов z и y , справедливые для ФП с многокомпонентным параметром порядка η_i (когда свободная энергия зависит только от модуля $|\eta_i|$) при изменении температуры и $T_C = 0$. Эти результаты могут быть проверены экспериментально для смеси сверхтекучих изотопов ^3He и ^4He при температурах, близких к абсолютному нулю около критической точки расслоения. Следует ожидать, что динамические индексы y и z существенно (в полтора-два раза) увеличиваются по сравнению с классическими значениями при $T_C \rightarrow 0$, то есть, зависимость времени релаксации от температуры и волнового числа становится значительно сильнее, чем для обычного изотопа ^4He при положительной критической температуре. Найдены также критические индексы теплоемкости и корреляционной длины для смеси изотопов сверхтекучего гелия при $T \rightarrow T_C \rightarrow 0$:

$\alpha = -1$, $\nu = \frac{2}{3}$. Таким образом, предсказан новый класс универсальности при низких температурах.

Остается открытым вопрос о том, как повлияет на полученные результаты сверхтекучесть изотопа $He-3$, наблюдаемая (в чистом $He-3$) при $T_C \approx 0,0026 K$ [11, 13, 14].

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. Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 10. Физическая кинетика / Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский. — М., Наука, 1979. — 528 с.
5. Rechester A.B. Contribution to the theory of second-order phase transitions at low temperatures / A.B.Rechester // Soviet physics JETP. — 1971. — Т.33. — № 2. С.782 – 796.
6. Sachdev S. Quantum phase transitions / S.Sachdev. — New Haven, USA, Yale University, 1999. — 488 p.
7. Абрикосов А.А. Основы теории металлов / А.А.Абрикосов. — М., ФИЗМАТЛИТ, 2009. — 598 с.
8. Sereni J.G. Searching for a Quantum Critical Point in Rh doped ferromagnetic $Ce_{2.15}Pd_{1.95}In_{0.9}$ / J.G.Sereni, M.Giovannini, M.Gormez Berisso, A.Saccone // Journal of Physics: Conference Series. — 2012. — Т.391. — С.012062.
9. Паташинский А.З. Флуктуационная теория фазовых переходов. / А.З.Паташинский, В.Л.Покровский. — М., Наука, 1982. — 382 с.
10. Погорелов А.А. О критических индексах для λ -перехода в жидком гелии / А.А.Погорелов, И.М.Суслов // Письма в ЖЭТФ. — 2007. — Т.86. — Вып.1. — С. 41-47.
11. Халатников И.М. Теория сверхтекучести / И.М. Халатников. — М.: Наука, 1971. — 320 с.
12. 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.
13. Есельсон Б.Н. «Звук» в сверхтекучей жидкости / Б.Н. Есельсон, М.И. Каганов, Э.Я. Рудавский, И.А. Сербин // УФН. — 1974. — Т. 112, в. 4. — С. 591-636. DOI: [10.3367/UFNr.0112.197404b.0591](https://doi.org/10.3367/UFNr.0112.197404b.0591).
14. Леггетт Э.Дж. Сверхтекучий ^3He : ранняя история глазами теоретика / Э.Дж. Леггетт // УФН. — 2004. — Т. 174, №11, С. 1256-1268. DOI: [10.3367/UFNr.0174.200411h.1256](https://doi.org/10.3367/UFNr.0174.200411h.1256).
15. Муртазаев А.К. Критические свойства фрустрированных спиновых систем на слоистой треугольной решетке / А.К.Муртазаев // УФН. — 2008. — Т. 178. — №9. — С. 1001-1006.
16. Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 9. Статистическая физика. Ч. 2 / Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский. — М., Наука, 1978. — 448 с.

АЛГОРИТМЫ ОБНАРУЖЕНИЯ ГРАНИЦ НА НИЗКО-КОНТРАСТНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЯХ КОМПЬЮТЕРНОЙ ТОМОГРАФИИ

Ю.А. Хамад¹, С.В.Кириллова¹, М.А. Курако¹, К.В. Симонов², Т.В. Черепанова³

¹Сибирский федеральный университет, y.albayati8@gmail.com

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

³НУЗ «Дорожная клиническая больница на ст. Красноярск», Grakova@list.ru

Введение

Медицинская визуализация – быстроразвивающаяся отрасль современной медицины. Методы обработки изображений играют важную роль в диагностике и выявлении заболеваний и мониторинге пациентов с этими заболеваниями. Сбор или запись результатов компьютерной томографии (КТ) может помочь прояснить подозрения об аномалиях. Диагностика на основе КТ широко используется медицинских исследованиях [1].

Сегментация изображения представляет собой процесс извлечения области интереса и играет жизненно важную роль в анализе медицинских изображений анатомических органов и аномалий, таких как опухоль. Границы объекта интереса в КТ являются важной информацией, которая может помочь врачам понять проблему. Граница представляет собой контур объекта, т.е. это граница между объектом и фоном. Обнаружение и выделение особенностей положения и конфигурации границы на изображениях КТ может помочь поставить более точный диагноз.

Для эффективного ведения и прогноза пациента важна точная идентификация поражений организма. Однако, обнаружение поражений на низко-контрастных КТ-изображениях даже для опытных врачей может быть затруднительным и не лишенным ошибок, т.к. поражения часто являются проблематичными для отделения от нормальных окружающих структур. Снизить дозу облучения пациента, сохраняя при этом высокое качество изображение, является главной задачей в компьютерной томографии [2].

1. Алгоритмы обработки изображений

Границы в изображении являются важнейшими элементами, и их анализ и обнаружение являются основной задачей в обработке изображений. Действительно, определение и локализация границ – задача первого уровня в различных приложениях, таких как 3D-реконструкция, распознавание образов, сжатие изображений, улучшение и восстановление [1].

В работе изучаются границы объектов, которые отличаются яркостью или цветом одного пикселя на пиксель ближайших соседей. Чем выше яркость, тем более заметны различия в объекте. Границы важны при распознавании объектов содержащихся в изображении и представляющих интерес. Основные методы обнаружения границ в изображениях используют операторы Превитта, Собеля, Робертса, Лапласиан и Кирша [3-4].

Известно, что многомасштабные методы, основанные на вейвлетах, были успешно применены к анализу и обнаружению границ [5-6]. В тоже время для обработки геометрических структур в двухмерных данных в [7] был предложен, а затем отработан в [8] новый метод, использующий так называемые комплексные шиарлеты, для обнаружения границ. В таких случаях становятся очевидными следующие ограничения вейвлет-подхода (и других традиционных детекторов границ):

- Дифференциация при различении близких границ. Изотропное гауссовское фильтрование приводит к тому, что границы, расположенные близко, размываются в одну кривую.

- Плохая угловая точность. При наличии резких изменений кривизны или пересечении кривых изотропное гауссовское фильтрование приводит к неточному обнаружению ориентации границы.

Это означает обнаружение углов и переходов. Для решения этих проблем необходимо учитывать анизотропность граничных линий и кривых. Например, в [9] предлагается заменить масштабируемый набор изотропных гауссовских фильтров на управляемые и масштабируемые анизотропные гауссовские фильтры.

Также методы предварительной обработки могут быть настроены различными способами. Ни один из этих типов методов не работает хорошо с обнаружением линии. В работе показано, что предлагаемый подход хорошо работает для обеих задач: определения линии и обнаружения границ в зашумленных реальных данных. Кроме того, он также дает информацию о локальной геометрии объекта.

2. Вычислительная методика обработки изображений

В работе представлена вычислительная методика обработки изображения на основе шварц-преобразования. Этот детектор границ обеспечивает лучшие результаты, чем обычные детекторы, такие как алгоритмы Sobel, Perwitt, Roberts, Canny и LOG. Обнаружение границ в зашумленных изображениях является решающей проблемой, и предлагаемый детектор границ использует медианный фильтр.

Алгоритмы протестированы на различных КТ-изображениях и проверены с точки зрения оценок PCD, PND, PFA, FOM, чувствительности и точности. Алгоритмы разработаны в MATLAB 2016 [10]. Общая точность и точность обнаружения достигли 98 %. Для каждого снимка среднее время выполнения составляло 12,30 мс, что обеспечивает выполнение вычислительных процедур в режиме реального времени.

Опишем некоторые детали вычислительной методики. В методах бинаризации к изображению применяется фильтр яркости для получения бинарного изображения, в котором «flame and non-flame» пиксели, как надеемся, будут иметь различные значения. Тогда контур является границей между двумя областями. Методы приближения градиента включают в себя многочисленные хорошо известные подходы от метода Кэнни [11] до методов на основе вейвлетов [12-14] и также на основе шварц-преобразования [15-16]. Основная идея заключается в том, что после некоторой предварительной обработки, такой как сглаживание с гауссовым ядром, аппроксимируется градиент образа пикселя.

В этом исследовании обнаружение границ на КТ-изображениях выполнено с использованием выделенного зеленого канала изображения и медианной фильтрации. Затем мера, представленная в предыдущем подразделе, дает значение от 0 до 1. Таким образом, для того, чтобы получить двоичное решение о том, находится ли пиксель на границе или линии, должна применяться схема порогового значения. Значение порога непосредственно задается пользователем, хотя, конечно, могут быть использованы более продвинутые методы, такие как гистерезис, который используется в методе Кэнни. Затем, после пороговой схемы, применяется процедура прореживания, в частности, *thinning option of binary morph (bw)* в MATLAB Image Processing Toolbox.

При обнаружении границ уже имеем оценку ориентации, судя по направлению наибольших нечетно-симметричных коэффициентов. Это дает довольно хорошее приближение касательного направления границы. Чтобы улучшить результат, используем два метода в совокупности. А именно, рассматриваем не только

наибольший коэффициент, но еще и два коэффициента, которые соседствуют с ним по параметру сдвига и считаем их образцами точек выпуклой вниз параболы, чтобы оценить, где «истинное» максимальное значение. Для этого используем методы извлечения субпиксельных экстремумов, предложенные в [1]. Кроме того, вычисляется переход между направлениями сдвига и направлениями вращения.

Известно, что качество изображений, полученных на медицинских устройствах, может влиять на результат обработки (анализа) при решении диагностических медицинских проблем. В большинстве случаев полученные изображения (или наборы изображений) имеют заметный шум, вызванный технологическими особенностями работы устройств. Учитывая это, предлагаем следующую процедуру обработки медицинских изображений. По исходным данным полученные изображения преобразуются в оттенки серого цвета. Затем выполняются следующие этапы вычислений:

1. Извлечение зеленого канала изображения.
2. Применение фильтра для уменьшения шума (применяется медианный фильтр)
3. Применение вещественнозначного четно-симметричного шварцшпата при различных параметрах.
4. Переключение переменных и вычисление шварцшпата с помощью преобразования Гильберта.
5. Вычисление значений основных расчетных функций для определенных значений их аргументов на каждом пикселе.
6. На каждом пикселе выполняется оценивание предпочтительного направления возможной границы / линии.
7. На каждом пикселе выполняется вычисление оценки границы / линии, на основе сравнения значения четно- и нечетно-симметричных коэффициентов сдвига в предпочтительном направлении. При определении линии также оценивается толщина линии.
8. Учитывается порог оценки границы / линии.
9. Выполняется процедура утончения границы.

3. Экспериментальное исследование

В настоящей работе для оценки предложенной вычислительной методики использовались КТ-изображения пациентов. Всего для экспериментального исследования отобрано 15 изображений. Медицинские КТ-изображения характеризуются различными местоположениями и различными типами патологий (опухоли головного мозга).

Чтобы показать, что предлагаемая методика обладает хорошей способностью обнаружения границ и помехоустойчивостью, были проведены следующие исследования. Первый этап заключалось в сравнении предлагаемого метода с классическими подходами, такими как операторы Робертса, Прюитта, Собеля, LoG (лапласиан гауссиана) и детектор границ Кэнни. Для сравнения были взяты изображения, в которых влияние шума было наименее выраженным. Все расчеты производились с учетом эталонных карт, сформированных экспертом. Все эксперименты реализованы в MATLAB 2016.

Для оценки надежности и корректности построения контурной карты патологии головного мозга, полученной по предложенному способу. При этом использовались следующие параметры: доля обнаруженных граничных пикселей (PCD), доля не обнаруженных граничных пикселей (PND), показатель ошибочно определенных

пикселей в качестве граничных (PFA), показатель качества (FOM), чувствительность (Sensitivity) и точность (Accuracy).

Эти параметры, в основном, зависят от значений величин TP, TN, FP, FN и RECnt. Параметр TP – это количество пикселей, правильно идентифицированных как граница патологии, TN – количество пикселей, правильно определенных в качестве фона, FP – количество пикселей, ошибочно идентифицированных как граница опухоли, FN – количество пикселей, ошибочно определенных в качестве фона, RECnt – количество пикселей границ в эталонной карте, созданной экспертом.

В таблице 1 показано сравнение нескольких методов формирования контурного представления (контурной карты) опухоли головного мозга для исходного набора изображений.

Таблица 1

Сравнение контурных карт, созданных различными методами обнаружения границ для модельных изображений.

Model Image	Method	P _{CD}	P _{ND}	P _{FA}	FOM	Sensitivity	Accuracy
Image 1	Proposed method	0.9830	0.0409	0.0169	0.9725	0.9933	0.9600
	Classic Canny	0.6156	0.1450	0.3843	0.9717	0.9388	0.8092
	Prewitt	0.3274	0.0961	0.6725	0.8787	0.9112	0.7730
	Roberts	0.2688	0.1136	0.7311	0.8296	0.9024	0.7029
	Sobel	0.3276	0.1000	0.6723	0.8821	0.9107	0.7661
	LoG	0.3649	0.2412	0.6350	0.9339	0.8987	0.6020
Image 2	Proposed method	0.8905	0.0501	0.1094	0.9646	0.9800	0.9466
	Classic Canny	0.5678	0.2536	0.4321	0.9556	0.9143	0.6912
	Prewitt	0.2730	0.0704	0.7269	0.8254	0.9004	0.7949
	Roberts	0.1574	0.0698	0.8425	0.7303	0.8860	0.6927
	Sobel	0.2744	0.0754	0.7255	0.8338	0.8999	0.7843
	LoG	0.3417	0.2547	0.6582	0.9268	0.8859	0.5729

Предложенная вычислительная методика позволяет получить контурную карту объекта интереса с большей точностью в среднем на 7-10%. Также предложенный подход демонстрирует более низкий процент пикселей, которые ошибочно определены как граница.

Заключение

В работе представлена методика обнаружения границ на основе шпирлет преобразования в медицинской системе обработки изображений. Входное изображение подвергается предобработке для удаления шума с помощью медианного фильтра. Медианный фильтр эффективнее всего удаляет шум КТ-изображений с ядром 3 x 3. И затем для определения границ применяется шпирлет преобразование. Результат шпирлет преобразования соединяется с результатом применения детектора границ Кэнни. Предлагаемая вычислительная методика дает хороший результат, который

обеспечивает высокое качество изучаемого изображения. Таким образом, показано, что оценка границ на основе шварлетов хорошо работает на зашумленном изображении. В будущем предполагается применить разработанный подход к большему набору клинических данных.

Список литературы

1. Ziou D. Edge Detection Techniques An Overview / D. Ziou, S. Tabbone // International Journal of Pattern Recognition and Image Analysis. — 1998. — Vol. 8(4). — P. 537–559.
2. Yang Chen. Improving abdomen tumor low-dose CT images using dictionary learning based patch processing and unsharp filtering / Yang Chen, Fei Yu, Limin Luo, Christine Toumoulin // 35th Annual International Conference of the IEEE EMBS. — 2013.
3. Baoming Q. An Adaptive Algorithm for Grey Image Edge Detection Based on Grey Correlation Analysis // Baoming Q., Liu J. and Yufan Y. // 12th International Conference on Computational Intelligence and Security. — 2016. — P. 470–474, 2016.
4. Hailong Huang. Application of Multiple Order Morphology Transformation on Edge Detection for Liver CT Image / Hailong Huang, Jie Guo. // IEEE. — 2014.
5. Tu C.L. Analysis of Singularities From Modulus Complex Wavelets / C.L. Tu, W.L. Hwang and J. Ho // IEEE Transactions Inf. Theory. — 2005. — Vol. 51. — № 3. — P. 1049–1062.
6. Li J. A Wavelet Approach to Edge Detection. Masters Thesis. — Sam Houston State University, 2003.
7. Reisenhofer R. The complex shearlet transform and applications to image quality assessment. Master's thesis. — Technische Universität, Berlin. — 2014.
8. King E.J. Shearlet-based edge detection: flame fronts and tidal flats / King E.J., Reisenhofer R, Kiefer J, Lim W-Q, Li Z., Heygster G. In: Tescher AG (ed) // Applications of digital image processing XXXVIII, society of photo-optical instrumentation engineers (SPIE), conference series. — 2015. — Vol. 9599.
9. Geusebroek J. Fast Anisotropic Gauss Filtering / J. Geusebroek, A.W.M. Smeulders, J. van de Weijer // IEEE Trans. Image Process. — 2003. — Vol. 8. — P. 938–943.
10. MATLAB version 7.10.0. — Natick, Massachusetts: The Math Works Inc. — 2017.
11. Canny J. A computational approach to edge detection / Canny J. // IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. — 1986. — Vol. 8(6). — P. 679–698.
12. Mallat S. Singularity detection and processing with wavelets / Mallat S., Hwang, W.L. // IEEE Trans. Inf. Theory. — 1992. — Vol. 38. — P. 617–643.
13. Mallat S. Characterization of signals from multiscale edges / Mallat S., Zhong S. // IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell. — 1992. — Vol. 14. P. 710–732.
14. Storath M. Amplitude and sign decompositions by complex wavelets – Theory and applications to image analysis, PhD thesis. — Technische Universität München. — 2013.
15. Yi S. A shearlet approach to edge analysis and detection / Yi S., Labate D., Easley G.R., Krim H. // IEEE Transactions on Image Processing. — 2009. — Vol. 18(5). — P. 929–941.
16. Kutyniok G. Adaptive directional subdivision schemes and shearlet multiresolution analysis // Kutyniok, G., Sauer T. // SIAM J. Math. Anal. — 2009. — Vol. 41. — P. 1436–1471.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ КАВИТАЦИОННОЙ ОБЛАСТИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ УЛЬТРАЗВУКОВЫХ КОЛЕБАНИЙ В ВЫСОКОВЯЗКИХ И НЕНЬЮТОНОВСКИХ ЖИДКИХ СРЕДАХ³

В.Н.Хмелёв, Р.Н.Голых, А.В. Шалунов, Р.А. Лопатин, В.Д. Минаков

Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ, romangl90@gmail.com

Жидкие и жидкодисперсные среды, характеризующиеся значительной вязкостью (неотверждённые полимерные наноструктурированные материалы, лакокрасочные композиционные составы, смолы), получают все более широкое распространение в промышленности. Использование таких сред в качестве сырья позволяет придать уникальные свойства конечному продукту (высокая прочность полимерных композиционных материалов, превышающая прочность стали; биоцидные свойства лакокрасочных покрытий; биотоплива, аналогичные по свойствам традиционному бензину и дизельному топливу, на основе целлюлозы и т. д.). Это можно достичь путём модификации физико-химической структуры жидкостей. Многочисленными лабораторными исследованиями [1-3] доказано, что наиболее перспективным способом модификации физико-химической структуры исходных высоковязких жидких или жидкодисперсных сред с целью улучшения свойств и характеристик конечного продукта является ультразвуковое (УЗ) кавитационное воздействие.

Однако, несмотря на положительные результаты лабораторных исследований, УЗ кавитационная обработка высоковязких жидких сред, которые в ряде случаев могут быть неньютоновскими (с зависимостью вязкости от скорости сдвига), в промышленности практически не реализована из-за малого объёма и сосредоточенности кавитационной зоны вблизи поверхности УЗ излучателя.

При этом для формирования кавитационной зоны, с объёмом необходимым для промышленной обработки жидкостей, оказываются недостаточными даже интенсивности УЗ колебаний (более 70 Вт/см²), близкие к пределу теоретической прочности волноводов-излучателей. А разработанные на сегодняшний день многозонные рабочие инструменты с развитой поверхностью излучения не обеспечивают решения проблемы сосредоточенности кавитационной зоны вблизи излучающей поверхности. Поэтому наиболее перспективным подходом к увеличению объёма формируемой кавитационной зоны является оптимизация условий УЗ воздействия (геометрии технологического объёма), обеспечивающих возникновение стоячих волн. При образовании стоячих волн происходит сложение первичной и отражённой волны, что позволяет не менее чем 2-кратно усилить амплитуду УЗ давления (интенсивность УЗ колебаний) во всей области жидкости и, следовательно, увеличить объём зоны развитой кавитации.

Для выявления оптимальных условий УЗ воздействия необходимо решить ряд частных задач:

1. Разработать феноменологическую модель формирования кавитационной области в неньютоновской жидкости, позволяющую определять форму и размеры кавитационных зон в жидкой среде при различных режимах развития кавитации.
2. С использованием разработанной модели определить размеры технологических объёмов, обеспечивающие увеличение объёма формируемой кавитационной области при УЗ обработке жидкостей.

³ Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-79-00094).

3. Экспериментально исследовать условия формирования кавитационной области для подтверждения полученных теоретических результатов.

Для решения первой задачи была разработана модель формирования кавитационной области в неньютоновской жидкости, которая описана далее.

«Строительным» кирпичиком модели кавитационной области является обобщённое уравнение динамики кавитационного пузырька в неньютоновской жидкости (с учётом её сжимаемости), приведённое в работе исследователей [4-5]:

$$R \frac{\partial^2 R}{\partial t^2} \left(1 - \frac{\partial R}{C} \right) + \frac{3}{2} \left(\frac{\partial R}{\partial t} \right)^2 \left(1 - \frac{\partial R}{3C} \right) = H \left(1 + \frac{\partial R}{C} \right) + \frac{\partial H}{\partial t} \frac{R}{C} \left(1 - \frac{\partial R}{C} \right) - \frac{1}{\rho_\infty} \left(1 + \frac{\partial R}{C} \right) J - \frac{1}{\rho_\infty} \frac{R}{C} \frac{dJ}{dt}; \quad (1)$$

$$J = \int_R^\infty \left(\frac{\partial \tau_{rr}}{\partial r}(r) + \frac{3\tau_{rr}}{r}(r) \right) \partial r;$$

где $\tau_{rr}\left(r, R, \frac{\partial R}{\partial t}\right)$ – радиальная компонента тензора вязких напряжений жидкости, Па, R – мгновенный радиус кавитационного пузырька, м, H – энтальпия жидкости, $\text{м}^2/\text{с}^2$, C – локальная скорость звука в жидкости, $\text{м}/\text{с}$, ρ_∞ – равновесная плотность сплошной жидкости, $\text{кг}/\text{м}^3$, r – расстояние от центра кавитационного пузырька, м.

Функция $\tau_{rr}\left(r, R, \frac{\partial R}{\partial t}\right)$ определяется тремя характеристиками реологических свойств жидкости: начальная вязкость μ_0 (Па·с), показатели консистенции K (Па·с $^{N+1}$) и нелинейности N . При этом в зависимости от реологических свойств, которые оказывают основное влияние на кавитационный процесс, жидкости подразделяются на *линейно-вязкие* (вязкость не зависит от скорости сдвига, $N=0$), *псевдопластические* (вязкость уменьшается с ростом скорости сдвига, $N<0$) и *дилатантные* (вязкость увеличивается с ростом скорости сдвига, $N>0$).

Предложенный подход к решению уравнения (1), основанный на независимом рассмотрении фаз расширения и схлопывания пузырька, позволяет на первом этапе определить зависимость радиуса пузырька $R(t, I)$ от времени t и интенсивности УЗ колебаний I . На следующем этапе с использованием уравнения коалесценции и дробления кавитационных пузырьков [6-8] определяется стационарная концентрация $n_\infty(I)$ и мгновенное объёмное содержание пузырьков $\delta(t, I) = \frac{4}{3} \pi R^3(t, I) n_\infty(I)$ в зависимости от времени и интенсивности УЗ колебаний.

На основании полученных данных (объёмное содержание кавитационных пузырьков), производится нахождение распределения интенсивностей на основании решения волнового уравнения (2):

$$\Delta \left(\sqrt{2\rho c I(\mathbf{x})} e^{i\varphi(\mathbf{x})} \right) + \frac{\omega^2}{c_0^2} \left(1 - \frac{\rho_0 c_0^2 \bar{\delta}_1 \left(\sqrt{2\rho c I(\mathbf{x})} e^{i\varphi(\mathbf{x})} \right)}{\sqrt{2\rho c I(\mathbf{x})} e^{i\varphi(\mathbf{x})}} \right) \sqrt{2\rho c I(\mathbf{x})} e^{i\varphi(\mathbf{x})} = 0; \quad (2)$$

где I – интенсивность УЗ колебаний, $\text{Вт}/\text{м}^2$, φ – фазовый сдвиг колебаний звукового давления в жидкости, ω – круговая частота первичного УЗ поля, с^{-1} , c_0 – скорость звука в сплошной жидкости, $\text{м}/\text{с}$, ρ_0 – равновесная плотность сплошной жидкости, $\text{кг}/\text{м}^3$, ρ – плотность кавитирующей жидкости, $\text{кг}/\text{м}^3$, c – скорость звука в кавитирующей жидко-

сти, м/с, $\overline{\delta_1}(\sqrt{2\rho c I(\mathbf{x})}e^{i\varphi(\mathbf{r})})$ – комплексная амплитуда изменения объёмного содержания кавитационных пузырьков относительно среднего значения, $\mathbf{x}$ – радиус-вектор точки жидкости, м.

Распределение интенсивностей УЗ колебаний, найденное на основании уравнения (2) при известной геометрии УЗ излучателя и технологического объёма, позволяет однозначно установить распределение кавитационных зон в объёме обрабатываемой жидкости.

Это достигается путём анализа выявленной функциональной зависимости радиуса кавитационного пузырька $R(t,I)$ от времени t и интенсивности УЗ колебаний I . Далее в зависимости от поведения кавитационного пузырька с течением времени в каждой точке жидкости (согласно функциональной зависимости $R(t,I)$) при найденном распределении интенсивностей $I(\mathbf{x})$ устанавливаются формы и положения кавитационных зон в технологическом объёме, соответствующих следующим режимам:

- 1) *режиму отсутствия кавитации*, в котором нет схлопывания пузырьков (скорость движения стенок пузырька не превышает скорость звука в сплошной жидкости – 1500 м/с);
- 2) *режиму зарождающейся кавитации* – схлопывание пузырьков происходит с малыми амплитудами давления ударных волн (менее $20 \cdot 10^5$ Па), и ускорение физико-химических процессов в жидкостях под воздействием УЗ является ничтожно малым;
- 3) *режиму развитой кавитации* – схлопывание пузырьков происходит с максимальными амплитудами давления ударных волн ($20 \cdot 10^5 \dots 80 \cdot 10^5$ Па); в качестве критерия режима развитой кавитации принято наличие разрушения алюминиевой фольги толщиной 9 мкм под воздействием кавитации;
- 4) *режиму вырождающейся кавитации* – интенсивность схлопывания пузырьков существенно снижена по сравнению с режимом развитой кавитации, и пузырьки, как правило, совершают радиальные колебания без схлопывания в течение 2-х периодов первичной УЗ волны и более с момента начального расширения;
- 5) *режиму вырожденной кавитации* – схлопывание пузырьков отсутствует, и они совершают радиальные колебания в окрестности большого радиуса (не менее 300 мкм) [9].

На рис. 1а-в приведены формы и обозначены размеры кавитационных зон в плоскости симметрии УЗ излучателя, соответствующие пяти выше обозначенным режимам развития кавитации, для различных интенсивностей УЗ воздействия в неограниченном объёме без отражателей. Вязкость модельной жидкости – 100 мПа·с, модельный УЗ излучатель – поршневого типа (диаметр рабочего инструмента – 40 мм). Из рис. 1а-в видно, что начиная с $16,25$ Вт/см² для модельной жидкости дальнейшего увеличения зоны развитой кавитации не происходит. Это означает снижение КПД УЗ обоработки при превышении интенсивностью УЗ воздействия оптимального значения. Поэтому необходимо создавать условия для оптимального распределения УЗ давления, например путем создания рабочих объёмов с отражающими поверхностями (рис. 1г-д).

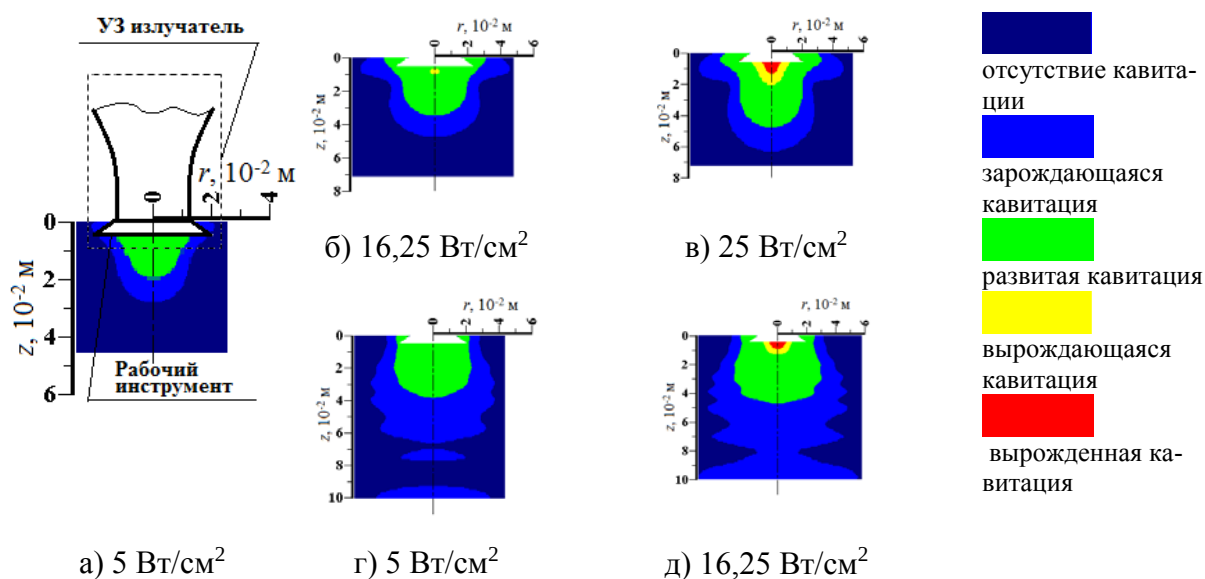


Рис. 1. Распределение кавитационных зон в жидкости с вязкостью 100 мПа·с для различных интенсивностей УЗ воздействия, создаваемых вблизи излучающей поверхности (r – расстояние от акустической оси излучателя, z – протяжённость кавитационной зоны)

Как следует из рис. 1г-д, зона развитой кавитации при наличии отражающей стенки увеличивается более чем на 0,5 см по протяжённости, и значительно увеличивается по ширине (в 1,2...1,3 раза), что свидетельствует о возможности увеличения объёма зоны развитой кавитации в 1,3...1,4 раза за счёт сложения падающей и отражённой волны.

Очевидно, что существует оптимальное расстояние, при котором объём зоны развитой кавитации будет максимальным. Сосредоточенность зоны развитой кавитации вблизи излучающей поверхности без отражающей границы обусловлена высоким коэффициентом поглощения УЗ волн в кавитирующей жидкости, превышающим 20 дБ/м.

На рис. 2а-в приведены зависимости оптимального расстояния от реологических свойств жидкостей. Наличие оптимального расстояния, при котором полезный объём (в котором присутствует развитая кавитация) максимален, также проиллюстрировано приведенной на рис. 2г зависимостью объёма зоны развитой кавитации от расстояния между излучающей поверхностью и отражающей границей (вязкость модельной жидкости 100 мПа·с, интенсивность УЗ воздействия – 11,25 Вт/см²).

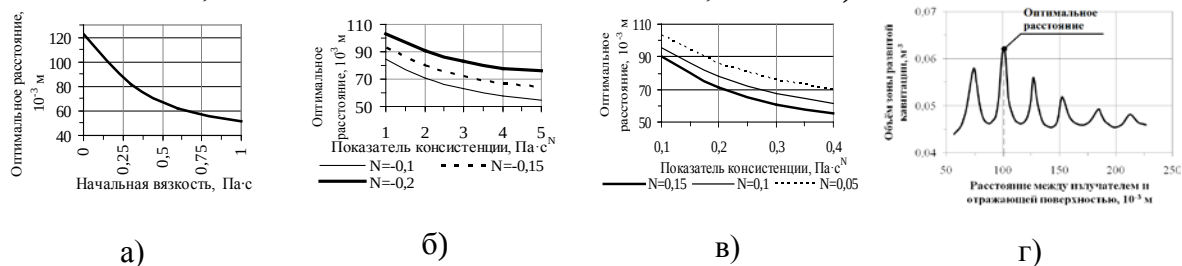


Рисунок 2 – Зависимости оптимального расстояния между излучающей поверхностью и отражающей границей от показателей, характеризующих реологические свойства жидкостей: а) линейно-вязкие; б) дилатантные; в) псевдопластические; и зависимость объёма зоны развитой кавитации от расстояния (г)

Для подтверждения полученных зависимостей, был проведен ряд экспериментов, заключавшихся в определении объема формируемой кавитационной зоны в зависимости расстояния между излучателем и отражающей границей.

Экспериментальные исследования проводились с использованием стенда, приведенного на рис. 3.



Рис. 3. Экспериментальный стенд для выявления зависимости объема зон развитой кавитации от расстояния между излучателем и отражающей границей

Экспериментальное определение объема зоны развитой кавитации производилось на основании оценки эрозионной активности кавитационной области по разрушению тестовых образцов алюминиевой фольги (толщиной 9 мкм).

Полученные сравнительные теоретические и экспериментальные значения максимально достигаемого объема зоны развитой кавитации и оптимальных расстояний между излучателем и отражающей поверхностью для различных по реологическим свойствам жидкостей сведены в табл. 1.

Таблица 1

Экспериментальные значения объемов зоны развитой кавитации и оптимальных расстояний между излучателем и отражающей поверхностью

Наименование жидкости	Экспериментальные значения объема зоны развитой кавитации, 10^{-3} м^3		Значения оптимальных расстояний между излучающей поверхностью и отражающей границей		
	При оптимальном расстоянии между излучателем и отражателем	Без отражателя	Экспериментальные, $L_E, 10^{-3} \text{ м}$	Теоретические, $L_T, 10^{-3} \text{ м}$	Относительная погрешность, $ L_T - L_E \cdot 100 / L_E, \%$
Вода	0,062576	0,057227	123	120	2,5
Масло	0,04044	0,0319	102	90	13,3
Эпоксидная смола ЭД-5	0,032212	0,021382	69	60	15

Полученные результаты (табл.1) подтверждают возможность увеличения объема зоны развитой кавитации до 52% (например, для эпоксидной смолы ЭД-5 с начальной вязкостью не менее 0,8 Па·с) путём оптимизации расстояния между излучателем и отражающей границей при неизменной интенсивности воздействия. При этом согласно

табл. 1 погрешность между теоретическими и экспериментальными значениями оптимального расстояния не превышает 15%, что свидетельствует об адекватности предложенной модели.

Таким образом, предложенная модель формирования кавитационной области позволила исследовать влияние условий распространения и отражения УЗ колебаний на совокупный объём, занимаемый зоной наиболее эффективного кавитационного воздействия, и разработать конструкции технологических камер, обеспечивающих повышение эффективности УЗ обработки. Модель позволила установить оптимальные расстояния между границей технологического объема и излучателем, обеспечивающие увеличение объёма зоны развитой кавитации более чем на 50%. Показано, что оптимальные расстояния находятся в диапазоне от 50 до 125 см, и уменьшаются при увеличении вязкости жидкости.

Проведённые экспериментальные исследования подтвердили адекватность предложенной модели формирования кавитационной области и возможность увеличения объёма зоны развитой кавитации путём оптимизации расстояния между излучающей поверхностью и отражающей границей.

Список литературы

1. Huang, Y.D. Influence of ultrasonic treatment on the characteristics of epoxy resin and the interfacial property of its carbon fiber composites / Y.D. Huang, L. Liu, J.H. Qiu, L. Shao // *Composit. Sci. Techn.* 2002. – Vol.62. – P.2153.
2. Низина, Т.А.. Оптимизация свойств наномодифицированных эпоксидных композиционных материалов / Т.А. Низина, П.А. Кисляков // *Строительные материалы*. – № 9. – 2009. – С.78-80.
3. Time, R.W. Cavitation Bubble Regimes in Polymers and Viscous Fluids / R.W. Time, A. H. Rabenjafimanantsoa // *Annual transactions of the Nordic rheology society*. – 2011. – Vol. 19. – 12 p.
4. Brujan, E.A. Bubble dynamics and cavitation in non-newtonian liquids / E.A.Brujan, P.R. Williams // *Rheology reviews*. – The British Society of Rheology, 2005. – pp. 147-172.
5. Bretz, N. Numerical simulation of ultrasonic waves in cavitating fluids with special consideration of ultrasonic cleaning / N. Bretz, J. Strobel, M. Kaltenbacher, R. Lerch // *IEEE Ultrasonics Symposium*, 2005. – P. 703-706.
6. Хмелев, В. Н. Повышение эффективности ультразвукового воздействия на гетерогенные системы с несущей жидкой фазой высокой вязкости / В. Н. Хмелев, Р.Н. Голых, А.В. Шалунов, С.С. Хмелев // *Южно-Сибирский научный вестник*. – Бийск: БТИ АлтГТУ. – 2013. – №2. – С. 10-15.
7. Khmelev, V.N. Determination of ultrasonic effect mode providing formation of cavitation area in high-viscous and non-newtonian liquids // V.N. Khmelev, R.N. Golykh, A.V. Shalunov, K.A. Karzakova / *15th International Conference of Young Specialist on Micro/Nanotechnologies and Electron Devices EDM`2014: Conference Proceedings*. – Novosibirsk: NSTU, 2015. – P. 203-207.
8. Хмелев, В.Н. Выявление режимов ультразвукового воздействия, обеспечивающих формирование кавитационной области в высоковязких и неньютоновских жидкостях / В.Н. Хмелев, А.В. Шалунов, Р.Н. Голых, С.С. Хмелев // *Южно-Сибирский научный вестник*. – 2014. – №1(5). – С. 22–27.
9. Хмелёв, В.Н. Исследование процесса взаимодействия кавитационных пузырьков с границей раздела «жидкость-газ» для выявления режимов, обеспечивающих максимальное увеличение поверхности контакта фаз / В.Н. Хмелев, Р.Н. Голых, А.В. Шалунов, В.А. Нестеров, А.В. Шалунова, Е.В. Ильченко // *Научно-технический вестник Поволжья*, 2014. – № 6. – С. 362-364.

АНАЛИЗ ИЗДАТЕЛЬСКИХ НАУЧНЫХ ПРОЕКТОВ ПО ОБЛАСТИ ЗНАНИЯ "ФИЗИКА, АСТРОНОМИЯ", ПОДДЕРЖАННЫХ РОССИЙСКИМ ФОНДОМ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Р.А. Чиженкова

Институт биофизики клетки РАН, chizhenkova@mail.ru

Введение

В настоящее время признано, что фундаментальная наука обладает первостепенной значимостью для политического и экономического благополучия государств [3-5, 9, 10, 14] и общества в целом. Но даже для развития самих прикладных наук требуется осуществление фундаментальных разработок и познание мира, в котором мы живем. Поскольку в принципе фундаментальная наука не может обладать "самоокупаемостью", возникла необходимость ее поддержки, в связи с чем в середине XX-го века возникла идея организации специальных фондов для поддержки научных коллективов и отдельных ученых [4, 7].

Российский Фонд Фундаментальных Исследований (РФФИ) был создан в 1992 г. [1]. Материалы относительно 20-летнего юбилея РФФИ отражены в специальном выпуске журнала "Вестник РФФИ". Тем не менее, в открытых публикациях не был сделан анализ научных направлений проектов, поддержанных Фондом, что послужило причиной проведения наших библиометрических исследований [12, 13].

Среди видов конкурсов, проводимых РФФИ, несомненно, основным является конкурс инициативных (т.е. исследовательских) проектов [12, 13]. Однако помимо проведения самих исследований существует также необходимость публикации их результатов. Поэтому дополнительно был создан конкурс издательских проектов. Конкурс издательских проектов, как и инициативных, касался 8 областей знания.

Суммарные материалы по результатам конкурсов издательских научных проектов по всем областям знания уже были опубликованы в наших работах [12, 13]. Настоящие исследования посвящены детальному библиометрическому анализу издательских проектов по области знания "Физика, астрономия", поддержанных РФФИ в течение 20-летнего периода.

Материалы и методы

Представленные здесь сведения основываются на данных, опубликованных в Информационных бюллетенях (ИБ) РФФИ, выходящих раз в год и освещающих итоги прошедшего конкурса, что позволяет рассмотреть количественные данные его результатов по разным областям знания.

Для каждого года выделялись количественные сведения относительно конкурсов издательских проектов по всем областям знания, в том числе и по области "Физика, астрономия", в виде чисел выделенных грантов и поданных заявок. На основе этого вычислялась процентная вероятность поддержки проектов. Проводили объединение результатов по анализируемым рубрикам за весь временной период и вычисляли статистическую значимость различия величин, составляющих совокупности. Для статистического анализа использовали сравнение двух выборочных долей вариантов. Кроме того, применяли корреляционный анализ.

Результаты и обсуждение

Издательские проекты самостоятельно рассматривались в РФФИ с 1995 г. В 1993 и 1994 гг. они представляли единую рубрику совместно с инициативными проек-

тами. Поскольку было необходимо подробное рассмотрение отдельных научных направлений издательских проектов, пришлось временной период материала ограничить 1995-2012 .

Число поддержанных РФФИ издательских проектов по области знания "Физика, астрономия" за 18 лет составляло 566, что представляло 12.52% от общего числа по всем издательским проектам - 4521. Динамика чисел соответствующих грантов за 20-летний период отражена в табл. 1.

Таблица 1

Динамика чисел поддержанных издательских проектов по области знания «Физика, астрономия» в течение 18-летнего периода

Годы	Издательские проекты "Физика, астрономия"			
	Физика, астрономия	% от суммы	Все области знания	% от обла- стей знания
1993				
1994				
1995	45	7.95	304	14.80
1996	42	7.42	273	15.38
1997	25	4.42	246	10.16
1998	39	6.89	323	12.07
1999	24	4.24	179	13.41
2000	21	3.71	224	9.38
2001	31	5.48	240	12.92
2002	29	5.12	265	10.94
2003	33	5.83	232	14.22
2004	28	4.95	214	13.08
2005	36	6.36	232	15.52
2006	32	5.65	237	13.50
2007	32	5.65	255	12.55
2008	39	6.89	296	13.18
2009	42	7.42	393	10.69
2010	28	4.95	255	10.98
2011	23	4.06	199	11.56
2012	17	3.00	154	11.04
Сумма	566	100	4521	12.52
Среднее	31.44	5.56	251.17	12.52

Выделенных грантов приходилось на один год от 17 до 45 и в среднем равнялось 31.44. Из табл. 1 следует, что имели место весьма выраженные колебания чисел поддержанных проектов. Пиковые их значения отмечались в 1995, 1996 и 2009.

Число полученных заявок по издательским проектам в ИБ указано только за годы 2002-2012. За эти годы было получено 612 заявок относительно проектов по области знания "Физика, астрономия", что составляет 10.61% от их общего числа по всем областям знания - 5768. Динамика чисел поданных заявок по области знания "Физика, астрономия" за исследуемый период представлена в табл. 2.

Таблица 2

Динамика чисел поданных заявок по издательским научным проектам в области знания «Физика, астрономия» в течение рассматриваемого периода

Годы	Издательские проекты "Физика, астрономия"			
	Физика, астрономия	% от суммы	Все области знания	% от обла- стей знания
1993				
1994				
1995				
1996				
1997				
1998				
1999				
2000				
2001				
2002	56	9.15	484	11.57
2003	57	9.13	524	10.88
2004	56	9.15	435	12.87
2005	62	10.13	463	13.39
2006	52	8.50	491	10.59
2007	55	8.99	456	12.06
2008	67	10.95	526	12.74
2009	61	9.97	711	8.58
2010	61	9.97	681	8.96
2011	55	8.99	594	9.26
2012	30	4.90	403	7.44
Сумма	612	100	5768	10.61
Среднее	55.64	9.09	524.36	10.61

Числа поданных заявок за один год колебались от 30 до 67 при среднем значении 55.64. Табл. 2 показывает, что в течение анализируемого периода отсутствовали резкие колебания чисел подаваемых заявок, кроме выраженного их понижения в 2012 г. Несколько повышенные значения наблюдались в 2005 и в 2008-2010 гг.

Описанные здесь количественные характеристики выделенных грантов и представленных заявок позволили определить вероятность поддержки посылаемых материалов. В течение 11 лет, по которым в ИБ даны числа заявок, из 612 заявок по области знания "Физика, астрономия" было поддержано 339 проектов, что составило 55.39%. Динамика процентных чисел проектов по годам продемонстрирована в табл. 3.

Таблица 3

Динамика процентных чисел поддержанных издательских проектов по области знания «Физика и астрономия» в течение рассматриваемого периода.

Годы	Издательские проекты. "Физика, астрономия"		
	Гранты	Заявки	% под- держанных
1993			
1994			
1995			
1996			
1997			
1998			
1999			
2000			
2001			
2002	29	56	51.79
2003	33	57	57.89
2004	28	56	50.00
2005	36	62	58.06
2006	32	52	61.54
2007	32	55	58.18
2008	39	67	58.21
2009	42	61	68.85
2010	28	61	45.90
2011	23	55	41.82
2012	17	30	56.67
Сумма	339	612	55.39
Среднее	30.82	55.64	55.39

Годовые значения процентных чисел поддержанных проектов по области знания "Физика, астрономия" за данный период составляли от 41.82 до 68.85 при средней величине 55.39. Как видно из табл. 3, пикового значения процентное число поддержанных проектов достигало в 2009 г. Наименьшие процентные числа поддержанных проектов приходились на 2010 и 2011 гг.

Таким образом, за 20 лет своей деятельности РФФИ оказал значительную поддержку публикации материалов по области знания "Физика, астрономия", которой принадлежит существенная роль в развитии новейших технологий XXI-ого века [2, 6]. Проведен анализ чисел выделенных грантов, чисел подаваемых заявок и процентных чисел поддержанных проектов, что позволило выявить следующие моменты.

Во-первых, число поддержанных издательских проектов по области знания "Физика, астрономия" составляло 566, что равнялось 12.52% от общего числа по всем восьми областям знания. Число поданных заявок проектов по области знания "Физика, астрономия" было 612, что в общем числе таковых обладало близким указанному выше показателем - 10.61%. Процентное число поддержанных проектов по области знания "Физика, астрономия" равнялось 55.39, что превышало соответствующее процентное число в суммарных данных по всем областям знания издательских проектов - 47.36 [13] при $p < 0.01$ ($U > 3.63$).

Во-вторых, имели место выраженные колебания по годам величин исследуемых показателей. Отмечалось некоторое сходство их динамик. При этом колебания чисел грантов были в 2.65 раз, сделанных заявок - 2.33 раза и процентов поддержанных проектов - в 1.65 раз.

Корреляционный анализ позволил выявить факт наличия некоторого параллелизма величин чисел выделенных грантов и чисел подаваемых заявок ($r = 0.77$; $p < 0.01$), что свидетельствует о значительной роли общего состояния внутренней возможности в поддержке научных проектов РФФИ. Кроме того, была установлена положительная корреляционная взаимосвязь чисел выделенных грантов по области знания "Физика, астрономия" с соответствующими величинами суммарных данных по всем областям знания в конкурсе издательских проектов ($r = 0.81$; $p < 0.01$). Однако корреляционная взаимосвязь чисел подаваемых заявок и процентных чисел поддержанных проектов по области знания "Физика, астрономия" с таковыми в суммарных данных по всем областям знания в конкурсе издательских проектов отсутствовала ($r = 0.50$ и 0.35 ; $p > 0.05$).

Следует отметить некоторые отличия результатов конкурса издательских научных проектов по области знания "Физика, астрономия" от соответствующего конкурса инициативных проектов [13]. Числа выделенных грантов по данной области знания среди издательских проектов были значительно ниже, чем среди инициативных проектов. Среднее число поддержанных издательских проектов в год составляло 31.44, а инициативных 618.80, их различие в 19.68 раз. Существенно ниже у издательских проектов отмечались и количественные показатели заявок. Среднее число заявок по издательским проектам в год равнялось 55.64, а инициативных 1943.50, их различие в 34.93 раза. Тем не менее процентное число поддержанных издательских проектов данной области знания (55.39) было выше такового у инициативных проектов (30.76) в 1.80 раз.

Заключение

Организация РФФИ для поддержки работы научных коллективов и отдельных ученых явилась одним из первых нововведений молодой РФ по опыту других развитых государств. За два десятилетия деятельности РФФИ была оказана существенная поддержка публикации результатов фундаментальных исследований, в том числе и по области знания "Физика, астрономия". Для повышения возможности поддержки научных проектов весьма желательно увеличение финансового наполнения Фонда. Предполагается, что российское правительство в ближайшее время может увеличить

ресурсное наполнение Фонда. Об этом было сказано во время выступления В.В. Путином на Общем собрании Российской академии наук в 2012 г., где он дал высокую оценку работе Фонда [8].

Список литературы

1. Алфимов М.В. Российский фонд фундаментальных исследований: десять лет служения российской науке // Вестник РФФИ. - 2002. - № 1(27). - С. 5-39
2. Горохов В.Г., Сидоренко А.П. Роль фундаментальных исследований в развитии новейших технологий // Вопросы философии. 2009. - № 3. - С. 67-76.
3. Ефремов Ю.Н. Зачем нужна наука миру и России // Вестник РФФИ. - 2000. - № 1(19). - С. 40-43.
4. Коннов В.И. Самоуправление на "передовой": становление национального научного фонда США // Вестник РФФИ. - 2007. - №4(54). - С. 10-15.
5. Лебедев С.А. Праксиология науки // Вопросы философии. - 2012. - №4. - С. 52-63.
6. Липкин А.И. Две методологические революции в физике - ключ к пониманию оснований квантовой механики // Вопросы философии. 2010. - № 4. - С 74-90.
7. Обама Б. Выступление в Национальной академии наук 27-ого апреля 2009 г. // В защиту науки. Бюл. № 6. Ред. Э.П. Кругляков. - М.: Наука, 2009. - С. 185-198.
8. Путин В.В. Выступление на Общем собрании Российской академии наук 22 мая 2012 // В защиту науки. Бюл. № 11. Ред. Э.П. Кругляков. - М.: Наука, 2012. - С. 7-14.
9. Чиженкова Р.А. Наука в современном мире // Актуальные проблемы социальной философии / ред. Э.В. Гирусов. - М., 1998. - С. 111-112.
10. Чиженкова Р.А. Библиометрический анализ нейрофизиологических аспектов действия неионизирующей радиации / Р.А. Чиженкова, А.А. Сафрошкина, Н.А. Слащева, В.Ю. Чернухин // Успехи современной биологии. - 2004. - Т. 124. - № 5. - С. 472-479.
11. Чиженкова Р.А. Динамика нейрофизиологических исследований действия неионизирующей радиации во второй половине XX-ого века. М.: Издат. дом Акад. Естествознания, 2012. - 88 с.
12. Чиженкова Р.А. Библиометрический анализ научных проектов, поддержанных Российским Фондом Фундаментальных Исследований за 20 лет: виды конкурсов // Успехи современного естествознания. - 2014. - №5. - С. 145-150.
13. Чиженкова Р.А. Российский Фонд Фундаментальных Исследований. Библиометрический анализ поддержки научных проектов. Germany: Palmarium Academic Publishing, 2015. - 88 с.
14. Chizhenkova R.A. Bibliometrical review of neurophysiological investigation of action of non-ionized radiation in second half of the XXth century // Biophysics. - 2005. - Supplement. - № 1(50). - P. 163-172.

РАСЩЕПЛЕНИЕ ВЕРШИНЫ И БОКОВОЕ ВЕТВЛЕНИЕ ДЕНДРИТА ПРИ РОСТЕ ИЗ ПЕРЕОХЛАЖДЕННОГО РАСПЛАВА

О.Н. Шабловский, Д.Г. Кроль

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

Введение. Проблема макроскопического роста кристалла из переохлаждённого расплава чистого вещества требует исследования морфологических свойств межфазной границы. Первостепенное значение имеют закономерности пространственно-временной эволюции поверхности роста и возникновение боковых ветвей дендрита. Современное состояние теоретических и экспериментальных исследований дендритообразования представлено в статьях [1–4]. В данной работе рассматривается класс поверхностей роста, скорость перемещения которых зависит только от локальной формы этой поверхности [1]. Учитывается, что предвестником морфологической неустойчивости одиночного дендрита служат изгибы и складки, генерирующие возмущение кривизны исходной поверхности. Цель исследования: дать численно-аналитическое описание режимов роста, сопровождающихся образованием боковых ветвей и расщеплением вершины.

Уравнение роста. 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 [5], а математической моделью фазовой границы кристаллизации служит поверхность сильного разрыва $f(x, y, z, t) = 0$, на которой выполнены условия динамической совместности. Здесь t – время; x, y, z – прямоугольные декартовы координаты в трехмерном пространстве с ортонормированным базисом $\mathbf{i}_\varepsilon$, $\varepsilon = 1, 2, 3$. Считаем, что вершина дендрита движется прямолинейно вдоль оси x в отрицательном направлении, справа налево. Ортогональный базис $\mathbf{s}$, $\mathbf{n}$, $\mathbf{b}$ соответствует касательной, главной нормали и бинормали к поверхности роста. Вектор внутренней нормали $\mathbf{n} = \text{grad}f / |\text{grad}f|$ направлен в сторону кристаллической фазы. Единичный вектор касательной $\mathbf{s}$ указывает положительное направление отсчета дуговой координаты s от вершины к периферии дендрита. Вектор бинормали $\mathbf{b} = \mathbf{s} \times \mathbf{n}$ вместе с $\mathbf{s}$, $\mathbf{n}$ образует правую систему векторов. Скорость перемещения поверхности роста равна

$$N = N\mathbf{n}, \quad N = -\frac{\partial f / \partial t}{|\text{grad}f|}. \quad (1)$$

Направление $\mathbf{n}$ характеризуется локальными углами наклона нормали к координатным осям $\theta_\varepsilon = (\mathbf{n}, \mathbf{i}_\varepsilon)$. Учитывая направление роста, заключаем, что доминирующая роль принадлежит угловой координате $\theta_1 \equiv \theta$. Общая постановка тепловой задачи для однокомпонентной системы заключается в том, чтобы решить в каждой фазе уравнения теплопереноса, для которых заданы следующие граничные условия: 1) кинетическая связь, которая определяет нормальный механизм роста из расплава и динамические условия совместности на неизвестной поверхности сильного разрыва (следствия из интегральных законов сохранения); 2) условия теплообмена системы «расплав – твёрдая фаза» с внешней средой. Ясно, что даже двухмерная нестационарная задача очень сложна. Рассмотрим более простой (полуобратный) подход к проблеме, позволяющий выяснить многие существенные детали процесса формирования поверхности роста дендрита. Будем изучать кинематические свойства линии роста дендрита, предполагая,

что $N = N(t, \theta)$ и априорно задавая физически содержательные зависимости N от угловой координаты. Известно, что такой подход оказался плодотворным в задачах отыскания форм тел, которые подвергаются аэродинамическому нагреву и уносу массы с обтекаемой поверхности; библиография этой проблемы приведена в [6]. Здесь мы используем некоторые математические результаты этих работ и даем им новую физическую интерпретацию, рассматривая свойства поверхности раздела «расплав – кристалл». Для размерного и безразмерного уравнения (1) применяем одинаковую форму записи, полагая $x \rightarrow x'$, $y \rightarrow y'$, $z \rightarrow z'$, $t \rightarrow t'$, $N \rightarrow N'$, $x = x'_b$, $y = y'_b$, $z = z'_b$, $t = t'_b$, $N = N'_b$, $N_b = x_b / t_b$, где нижним индексом b отмечены масштабы координат, времени и скорости. Штрих, который относится к безразмерным переменным, далее не пишем. Все вычисления выполнены в безразмерных переменных.

Боковые ветви дендрита. Уравнение поверхности фазовой границы возьмем в виде

$$f \equiv x - F(y, z, t) = 0, \quad p = \partial F / \partial y, \quad q = \partial F / \partial z,$$

выделяя явно координату x ; $G = (1 + p^2 + q^2)^{1/2}$, $\cos \theta = 1/G > 0$; полубесконечная поверхность роста движется справа налево, $N < 0$. Предположим, что $N = N(G, t)$, т.е. $\partial F / \partial t = GN(G, t)$. Следуя алгоритму [6], рассмотрим класс задач о поверхности роста стационарной формы, для которой $GN(G, t) = N_1(t)$:

$$F(y, z, t) = F_0(y, z) + \int_0^t N_1(t) dt.$$

Здесь $N_1(t)$ – функция, описывающая нестационарные свойства скорости; функция $F_0(y, z)$ представляет начальную форму поверхности. В частном случае, когда $N \sim \cos \theta$, любая поверхность будет поверхностью стационарной формы. Итак, поверхность стационарной формы обладает свойством: $G^2 \equiv 1 + (\partial F / \partial y)^2 + (\partial F / \partial z)^2 = c^2 > 1$, $c \equiv \text{const}$, которое представляет собой дополнительную связь для искомой функции $F(y, z, t)$. Точки поверхности перемещаются вдоль оси x со скоростью $N_1(t)$. Возьмем $F = H\sqrt{c^2 - 1}$, $H = H(y, z)$ и получим уравнение эйконала: $(\partial H / \partial y)^2 + (\partial H / \partial z)^2 = 1$. Начальное условие: $z = h$, $y = y_0(h)$, $H_0 = 0$, где h – параметр. Решение имеет вид:

$$z = h - \frac{2\alpha y'_0(h)}{\sqrt{1 + (y'_0)^2}}, \quad y = y_0(h) + \frac{2\alpha}{\sqrt{1 + (y'_0)^2}}, \quad H = 2\alpha,$$

где α – параметр; $y'_0 = dy_0 / dh$. Выбор фиксированного α означает выбор поперечного сечения дендрита $x = \text{const}$, т.е. параметр α служит аналогом координаты x : значение $\alpha = 0$ есть начальное сечение дендрита $x = x^{(0)}$; последующие шаги такие: $\alpha = \alpha_1 > 0 \rightarrow x = x^{(1)} > x^{(0)}$; $\alpha = \alpha_2 > \alpha_1 \rightarrow x = x^{(2)} > x^{(1)}$ и т.д.

Пример 1. Начальное сечение – эллипс: $y_0(h) = [b(a^2 - h^2)^{1/2}] / a$, $h \in (-a, a)$, $\alpha \geq 0$. Эти формулы относятся к правой части эллипса: $y \in (0, b]$, $z \in (-a, a)$. Чтобы построить левую половину, надо взять $y_0(h) = -[b(a^2 - h^2)^{1/2}] / a$, $h \in (-a, a)$, $\alpha \leq 0$.

Пример 2. Начальное сечение образовано двумя смыкающимися при $y = 0$ фрагментами парабол: левая часть $y_0 = y_1 + ah^{2b}$, $y_1 < 0$, $a > 0$, $2b > 1$; $\alpha \leq 0$; правая

часть определяется такой же формулой при $y_1 > 0$, $a < 0$, $\alpha \geq 0$. Здесь $2b$ – четное целое число; $h^{(1)} = -(-y_1/a)^{1/2b} < 0$, $h^{(2)} = (-y_1/a)^{1/2b} > 0$.

Пример 3. Начальное сечение – фрагмент гиперболы, моделирующий впадину – вогнутый вдоль оси y профиль поперечного сечения дендрита. Правая ветвь $y_0(h) = [b(a^2 - h^2)^{1/2}]/a$, $\alpha \geq 0$; левая ветвь $y_0(h) = -[b(a^2 - h^2)^{1/2}]/a$, $\alpha \leq 0$.

Далее для определенности говорим о положительном параметре α . На рисунке 1 показаны контуры поперечного сечения поверхности роста кристалла для последовательных значений $\alpha \geq 0$. Сплошной линией черного цвета отмечено исходное сечение $\alpha = 0$; по мере роста α контур расширяется и включает в себе предшествующие контуры. На рисунке 1А, Б контур выпуклый; при $\alpha \rightarrow \infty$, $x \rightarrow \infty$ поперечное сечение стремится к окружности радиуса (рисунок 1А) либо к эллипсу (рисунок 1Б). На рисунке 1В, Г исходный контур вогнутый (фрагмент гиперболы). Оказывается, что при $\alpha \rightarrow +\infty$ тоже происходит асимптотический переход к эллипсовидному профилю, но этому переходу предшествует (вдоль оси x) конечный интервал, на котором наблюдается ветвление стационарного контура.

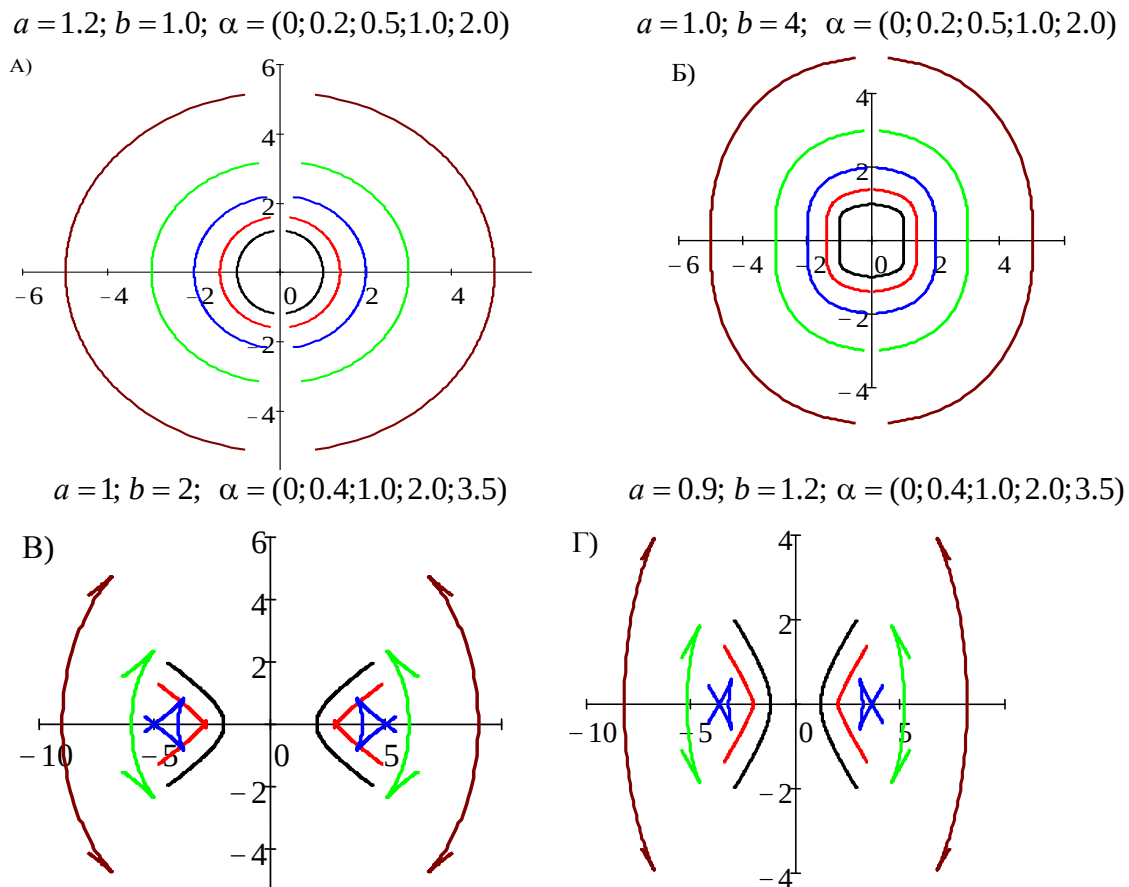


Рис. 1. Влияние направления вогнутости начального контура дендрита на формирование боковых ветвей

Расщепление вершины. Допустим, что фазовая граница имеет скорость $N = \tilde{A}(t)B(G)$, причем $\tilde{A}(t) > 0$, $B(G) < 0$. Тогда получаем уравнение роста:

$$\partial F / \partial A = D(G), \quad D(G) = GB(G); \quad F(y, z, A=0) = F_0(y, z); \quad A = \int_0^t \tilde{A}(t) dt \geq 0. \quad (2)$$

Автомодельное решение записываем с учетом начальных условий:

$$y = y_0 \omega(A), \quad z = z_0 \omega(A), \quad F = \omega(A) F_0(y_0, z_0), \quad \omega(A=0) = 1.$$

Искомая функция выглядит так:

$$F(y, z, A) = \omega(A) F_0\left(\frac{y}{\omega(A)}, \frac{z}{\omega(A)}, 0\right).$$

В итоге получаем уравнение для $F_0(y_0, z_0)$:

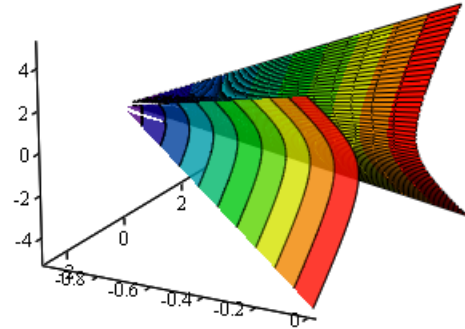
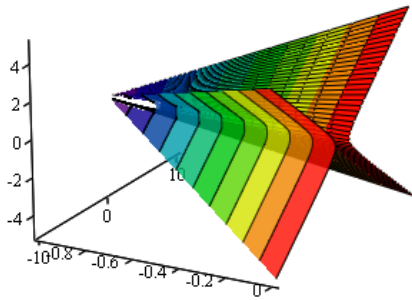
$$\Phi_0 \equiv F_0 - y_0 \frac{\partial F_0}{\partial y_0} - z_0 \frac{\partial F_0}{\partial z_0} - D(G_0) = 0, \quad (3)$$

и (2) превращается в обыкновенное дифференциальное уравнение

$$\frac{d\omega}{dA} = \omega_1; \quad \omega_1 = D(G_0) \left[F_0 - y_0 \frac{\partial F_0}{\partial y_0} - z_0 \frac{\partial F_0}{\partial z_0} \right]^{-1} \equiv \text{const}.$$

$$a = 0,5; b = 1; B_0 = -1/2; B_1 = -1/2$$

$$a = 2; b = 1; B_0 = -1/2; B_1 = -1/2$$



$$a = 3; b = 1; B_0 = -1; B_1 = -1/2$$

$$a = 1; b = 2; B_0 = -1/2; B_1 = -1/2$$

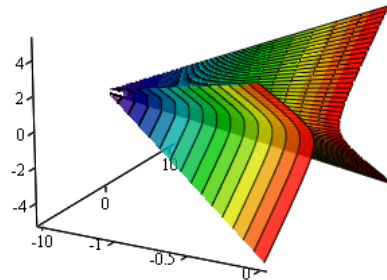
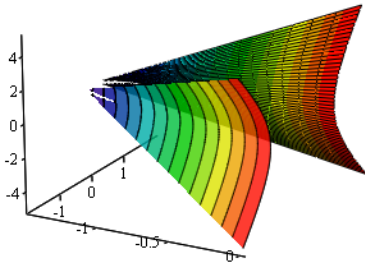


Рис. 2. Автомодельный неособый режим эволюции продольной впадины на поверхности роста

Принимаем здесь $\omega_1 = 1$, $\omega = A \pm 1$, где знаки «+» и «-» относятся к неособому и особому решениям уравнения (3). Выбор этих знаков обусловлен принятым в задаче направлением роста. Неособое решение дает поверхность, имеющую стационарную форму: с течением времени размеры поверхности увеличиваются, но безразмерные геометрические параметры процесса сохраняются без изменения. В соответствии с автомодельной структурой решения по мере заострения дендрита сохраняется вид первоначального контура поперечного сечения. Гиперболический профиль вогнутости сужа-

ется в направлении роста, т.е. впадина располагается в конечной окрестности вершины, рисунок 2. Автомоделное особое решение дает в начальном ($t = 0$) состоянии вершину, которая расщеплена на четыре отдельные ветви, рисунок 3. В течение конечного промежутка времени эти ветви сливаются в одну точку – острый вершины дендрита.

$$B_0 = 2; k = 1/\sqrt{2}, p_0 = 1.5, q_0 = 1.5$$

$$B_0 = 2; k = 1/200, p_0 = 1.5, q_0 = 1.5$$

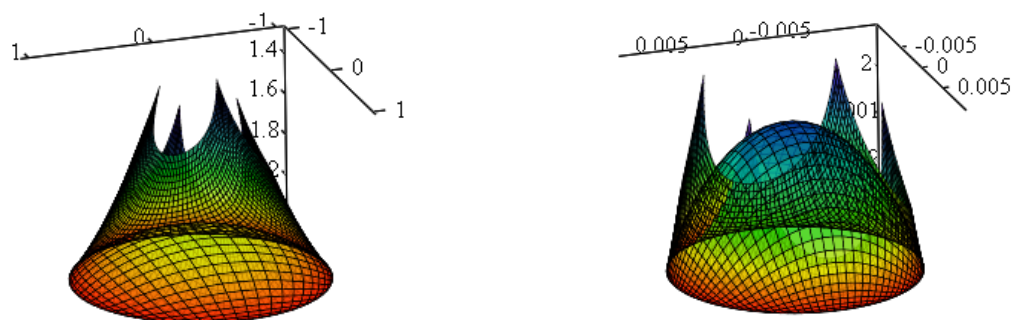


Рис. 3. Автомоделный особый режим расщепления вершины на самостоятельные ветви

Заключение. Изучен процесс роста кристалла в однокомпонентном переохлажденном расплаве чистого вещества. Фазовая граница кристаллизации рассматривается как поверхность сильного разрыва, на которой выполнены условия динамической совместности, являющиеся следствием интегральных законов сохранения. Рассмотрен класс движений, для которого скорость фазовой границы есть функция локального угла наклона нормали к поверхности роста. Представлены результаты аналитического и численного исследования предвестников морфологической неустойчивости фазовой границы.

Список литературы

1. 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.
2. Шибков, А.А. Связь нестационарного роста вершины дендрита с образованием боковых ветвей / А.А. Шибков, А.А. Леонов, А.А. Казаков, С.С. Столбенников // *Материаловедение*. 2005. – №7. – С. 2–9.
3. Glicksman, M.E. Capillary-mediated interface perturbations: Deterministic pattern formation / M.E. Glicksman // *Journal of Crystal Growth*. – 2016. – Vol. 450. – P. 119–139.
4. Шабловский, О.Н. Морфологические свойства линии роста двумерного дендрита в переохлажденном расплаве / О.Н. Шабловский // *Прикладная физика*. – 2012. – №4. – С. 40–46.
5. Жоу, Д. Расширенная необратимая термодинамика / Д. Жоу, Х. Касас-Баскес, Дж. Лебон. – Москва–Ижевск: ниц «регулярная и хаотическая динамика», 2006. – 528 с.
6. Апштейн, Э.З. Стационарная форма тел при их разрушении под действием тепловых потоков, зависящих от локального угла наклона поверхности / Э.З. Апштейн, Н.Н. Пилюгин // *Известия АН СССР. Механика жидкости и газа*. – 1981. – №6. – С. 137–143.

БЕЗЫНВЕРСНОЕ УСИЛЕНИЕ СВЕТА НЕДИПОЛЬНЫМИ МОЛЕКУЛАМИ СЕЛЕКТИВНО ПО СОСТОЯНИЯМ ОРИЕНТИРОВАННЫМИ В ПОЛЕ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

А.В.Шамшури¹, И.А.Кузоватов², В.В.Слабко¹

Сибирский федеральный университет,
Институт инженерной физики и радиоэлектроники, базовая кафедра фотоники и лазерных технологий, shamshurin.alex@mail.ru

Сибирский федеральный университет,
Институт математики и фундаментальной информатики, кафедра высшей математики

Возможность безынверсного усиления света в системе селективно по состояниям ориентированных молекул во внешнем постоянном поле, в приближении малости времени ориентации по сравнению со временем жизни возбужденного состояния, была рассмотрена в работах [1, 2]. Было показано, что в постоянном ориентирующем поле (ОП) вряд ли удастся получить достаточную степень ориентации простых молекул, удовлетворяющих названному приближению, из-за низкого значения предпробойного ОП. Эти идеи впоследствии были развиты в работах [3 – 6], в которых, на основе связанной системы кинетических уравнений Больцмана для основного и возбужденного состояний, рассмотрена возможность безынверсного усиления света в системе дипольных молекул селективно по состояниям ориентированных во внешнем как постоянном, так и импульсном ОП, при произвольном соотношении времен ориентации и жизни возбужденного состояния. Показано, что степень селективной ориентации при импульсном ОП в ряде случаев может быть достаточной для безынверсного усиления.

В данной работе рассматривается возможность безынверсного усиления света в системе недипольных молекул селективно по состояниям ориентированных во внешнем ОП лазерного излучения. Это позволяет значительно повысить параметр ориентации благодаря более высокому значению напряженности предпробойного поля. Кроме того, рассмотрена возможность увеличения селективности по состояниям за счет квазирезонансного ориентирующего воздействия. Проведен численный анализ схем безынверсного усиления при различной взаимной направленности ОП и пробного поля, а также различных значений параметров ориентации основного и возбужденного состояний.

При воздействии на молекулярную среду внешних полей $\vec{E}_0$ молекулы ориентируются в направлении, соответствующем минимуму потенциальной энергии их взаимодействия с ОП. При этом направление ориентации определяется как направлением внешнего поля $\vec{E}_0$, так и симметрией молекулы. Степень ориентации среды в целом зависит от параметра ориентации, представляющего собой отношение энергии взаимодействия молекулы с полем U , к энергии теплового движения kT , оказывающего дезориентирующее влияние. Естественно, что для молекул, находящихся в основном и в возбужденном состояниях, U может быть различной. Поэтому степень ориентации внешним ОП возбужденных и не возбужденных молекул может различаться. В этом случае, вероятности индуцированных переходов с поглощением и усилением плоскополяризованного пробного поля $\vec{E}$ могут быть также не равны. Таким образом, управляя степенью ориентации в основном и возбужденном состояниях, имеется возможность реализовать условия усиления света с определенной поляризацией в отсутствии инверсии населенностей [1, 2]. В данной работе рассматриваем селективную по состоя-

ниям ориентацию молекул в поле квазирезонансного лазерного излучения.

Потенциальная энергия взаимодействия не изотропно поляризующейся молекулы с электрическим полем $\vec{E}_0$ в отсутствии постоянного дипольного момента определяется через компоненты тензора электрической поляризации молекулы, находящиеся в j -ом энергетическом состоянии (α_{ik}^j) [2]

$$U_j = -\alpha_{ik}^j E_{ik}^* E_{0i} / 2. \quad (1)$$

Рассмотрим аксиально-симметричные молекулы и примем направление электродипольного момента перехода между основным и возбужденным состояниями, совпадающим с направлением оси симметрии, которая составляет угол ϑ_0 с электрическим полем $\vec{E}_0$ [1 – 3]. В этом случае функция распределения по ориентациям f_j не изотропно поляризующейся аксиально-симметричной молекулы с электрическим полем зависят только от угла ϑ_0 , и, в отсутствие постоянного дипольного момента, определяется выражением

$$f_j(\Theta, E_0) = f_j(\vartheta_0, E_0) = A_j \exp[\pm q_j \cos^2 \vartheta_0]. \quad (2)$$

Здесь $A_j^{-1} = \int \exp[-U_j(\Omega, E_0)/kT] d\Omega$ – нормирующий множитель, T – температура, k – постоянная Больцмана, $d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$ – элемент телесного угла, $q_j = (\alpha_{33}^j - \alpha_{11}^j) E_0^2 / 2kT$ – безразмерные параметры ориентации эллипсоида поляризуемости молекулы, α_{33}^j и α_{11}^j – главные значения тензора поляризуемости молекулы, находящейся в j -м состоянии вдоль оси симметрии и поперек соответственно.

Отличительной особенностью ориентации недипольных молекул по сравнению с дипольными является зависимость знака параметра ориентации q_j как от строения молекулы, так и частоты ОП ω_0 . Так, для молекул, вытянутых вдоль оси симметрии (с положительной оптической анизотропией), $\alpha_{33}^j > \alpha_{11}^j$ и параметр q_j положителен при не слишком больших частотах ОП ($\omega_0 < \omega_{lj}$). Для дискообразных молекул (с отрицательной оптической анизотропией) $\alpha_{33}^j < \alpha_{11}^j$ и параметр $q_j < 0$ при $\omega_0 < \omega_{lj}$. Полагая $\alpha_{33}^j \gg \alpha_{11}^j$, для компоненты тензора поляризуемости молекулы α_{33}^j , находящейся в j -ом электронном состоянии на частоте ОП ω_0 , можно записать выражение

$$\alpha_{33}^j = \frac{e^2}{m} \sum_l \frac{f_{lj}}{\omega_{lj}^2 - \omega_0^2}. \quad (3)$$

Здесь ω_{lj} и f_{lj} – частота и сила осциллятора перехода из состояния j в l , e – заряд электрона, m – масса электрона.

Известно, что пробойная напряженность импульсного ОП излучения на оптических частотах значительно выше, чем постоянного. Как было показано в [3, 4], параметр ориентации для дипольных молекул, в рассматриваемых здесь схемах, в постоян-

ном ОП не может быть больше единицы даже при предпробойных значениях $\vec{E}_0$. Хотя, в импульсных полях величина $\vec{E}_0$ может быть увеличена на порядок, однако этого, как правило, не достаточно. В то же время параметр ориентации эллипсоида поляризуемости молекулы в поле импульсного лазерного излучения, величина которого ниже пробойной, может значительно превышать единицу (см. ссылки в работах [1–2]).

Предполагаем, что частота ω_0 ОП $\vec{E}_0$ лежит вдалеке от частоты перехода, на котором происходит усиление пробного поля $\vec{E}$ с частотой ω . Остановимся на двух случаях взаимной ориентации $\vec{E}_0$ и $\vec{E}$ в зависимости от соотношения q_1 и q_2 .

Согласно закону Бугера показатель усиления $\alpha > 0$ (поглощения $\alpha < 0$) для случая ориентированных во внешнем поле $\vec{E}_0$ молекул и плоскополяризованного пробного излучения $\vec{E}$ будет иметь вид

$$\alpha = N\sigma_0 \int_{\Omega} [n_2 f_2(\Omega, E_0) - n_1 f_1(\Omega, E_0)] \cos^2 \vartheta d\Omega. \quad (4)$$

Здесь $\sigma_0 = \frac{(8\pi)^2}{c\hbar} \omega |d_{21}|^2 F(\omega)$ – сечение поглощения-испускания для молекулы, электродипольный момент перехода которой ориентирован параллельно плоскости поляризации, d_{21} – матричный элемент электродипольного момента перехода в системе координат, связанной с молекулой, $F(\omega)$ – частотный форм-фактор, ω – частота пробного поля, ϑ – угол между направлением электродипольного момента перехода $\vec{d}_{21}$ и вектором электрического поля $\vec{E}_0$, N – концентрация частиц, n_1 и n_2 – относительные населенности основного и возбужденного энергетических уровней, $n_1 + n_2 = 1$, обусловленные внешним источником накачки, тип которой здесь не конкретизируется, $d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$ – элемент телесного угла, $f_1(\Omega, E_0)$ и $f_2(\Omega, E_0)$ – нормированные на единицу функции статистического распределения ориентации молекул в основном 1 и возбужденном 2 состояниях, определяющиеся энергией их взаимодействий $U(\Omega, E_0)$ с внешним электрическим ОП E_0 .

Пусть поляризуемость возбужденного состояния выше поляризуемости основного $q_2 > q_1$, тогда оптимальной будет параллельная ориентация ориентирующего и усиливаемого (пробного) полей $\vec{E} \parallel \vec{E}_0$. В этом случае коэффициент α будет иметь вид

$$\alpha = N\sigma_0 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} [n_2 A_2 \exp(q_2 \cos^2 \vartheta) - n_1 A_1 \exp(q_1 \cos^2 \vartheta)] \cos^2 \vartheta \sin \vartheta d\vartheta. \quad (5)$$

В обратном случае, когда $q_1 > q_2$, оптимальна ортогональная геометрия ориентирующего и пробного полей $\vec{E} \perp \vec{E}_0$. При этом коэффициент усиления α выражается следующим образом

$$\alpha = N\sigma_0 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi [n_2 A_2 \exp(q_2 \cos^2 \vartheta) - n_1 A_1 \exp(q_1 \cos^2 \vartheta)] \sin^3 \vartheta d\vartheta. \quad (6)$$

При наложении на среду ОП напряженности $\vec{E}_0$, ориентация молекул описывается функцией распределения по ориентациям $f_j(\Omega, E_0)$, которая, в общем случае, определяется временами жизни основного τ_1^{eff} и возбужденного τ_2^{eff} состояний, а также временем ориентационной релаксации τ_0 , зависящих как от параметров молекул, так и от параметров среды, в которую они помещены. Времена жизни основного τ_1^{eff} и возбужденного τ_2^{eff} состояний определяются следующим образом

$$\frac{1}{\tau_1^{eff}} = w_{12}^{ind}, \quad \frac{1}{\tau_2^{eff}} = w_{21}^{ind} + w_{21}^{sp}, \quad \frac{\tau_2^{eff}}{\tau_1^{eff}} = \frac{n_2}{n_1}. \quad (7)$$

Здесь $w_{12}^{ind} = w_{21}^{ind}$ – вероятность индуцированных и w_{21}^{sp} – спонтанных переходов.

Для определения функций распределения $f_1(\Omega, E_0)$ и $f_2(\Omega, E_0)$, с целью вычисления коэффициента усиления α , с учетом выражений (5), (6), используем систему нестационарных кинетических уравнений [5, 6]

$$\begin{cases} 6\tau_0 \frac{\partial f_1}{\partial t} - \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \left(\frac{\partial f_1}{\partial \vartheta} + f_1 \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\frac{U_1(t)}{kT} \right) \right) \right) = -\frac{6\tau_0}{\tau_1^{eff}} f_1 + \frac{6\tau_0}{\tau_2^{eff}} f_2, \\ 6\tau_0 \frac{\partial f_2}{\partial t} - \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \left(\frac{\partial f_2}{\partial \vartheta} + f_2 \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\frac{U_2(t)}{kT} \right) \right) \right) = -\frac{6\tau_0}{\tau_2^{eff}} f_2 + \frac{6\tau_0}{\tau_1^{eff}} f_1. \end{cases} \quad (8)$$

Дополним систему (8) граничными (9) и начальными условиями (10), а также условием нормировки для функций распределения в начальный момент (11)

$$\left. \frac{\partial f_1}{\partial \vartheta} \right|_{\vartheta=0} = \left. \frac{\partial f_2}{\partial \vartheta} \right|_{\vartheta=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial f_1}{\partial \vartheta} \right|_{\vartheta=\pi} = \left. \frac{\partial f_2}{\partial \vartheta} \right|_{\vartheta=\pi} = 0, \quad (9)$$

$$f_1(0, E_0) = g_1(\vartheta), \quad f_2(0, E_0) = g_2(\vartheta), \quad (10)$$

$$2\pi \int_0^\pi [g_1(\vartheta) + g_2(\vartheta)] \cdot \sin \vartheta d\vartheta = 1. \quad (11)$$

Для численного анализа системы (8–11) применяется оригинальный эффективный вычислительный алгоритм, который основан на методе экспоненциальной подгонки и реализован при помощи явной схемы бегущего счета

$$\begin{cases} \frac{f_{1i}^{j+1} e^{(\eta_1 + \eta_2)\tau} - f_{1i}^j}{e^{(\eta_1 + \eta_2)\tau} - 1} (\eta_1 + \eta_2) \sin \mathcal{G}_i - (\eta_1 + \eta_2) f_{1i}^j \sin \mathcal{G}_i + \frac{kT}{W} L_{1h} f_{1h}^j = \\ = -\eta_1 f_{1i}^j \sin \mathcal{G}_i + \eta_2 f_{2i}^j \sin \mathcal{G}_i, \\ \frac{f_{2i}^{j+1} e^{(\eta_1 + \eta_2)\tau} - f_{2i}^j}{e^{(\eta_1 + \eta_2)\tau} - 1} (\eta_1 + \eta_2) \sin \mathcal{G}_i - (\eta_1 + \eta_2) f_{2i}^j \sin \mathcal{G}_i + \frac{kT}{W} L_{2h} f_{2h}^j = \\ = -\eta_2 f_{2i}^j \sin \mathcal{G}_i + \eta_1 f_{1i}^j \sin \mathcal{G}_i. \end{cases} \quad (12)$$

Здесь $\eta_1 = 6\tau_0/\tau_1^{eff}$, $\eta_2 = 6\tau_0/\tau_2^{eff}$, L_{1h} , L_{2h} – экспоненциальные разностные операторы, [5].

При построении экспоненциальной разностной схемы (12) метод экспоненциальной подгонки применялся при аппроксимации дифференциальных выражений, как по пространственной переменной, так и по времени. Доказана условная устойчивость и монотонность построенной схемы (12). Условие устойчивости вследствие быстроты протекания физических процессов лазерной генерации не является обременительным.

Для решения исходной системы (8–11) справедливо распространение условия нормировки (11) на любой момент времени

$$2\pi \int_0^\pi (f_1(t, \mathcal{G}) + f_2(t, \mathcal{G})) \sin \mathcal{G} d\mathcal{G} = 1. \quad (13)$$

Одним из важнейших аспектов численного моделирования является консервативность применяемых разностных схем. Экспоненциальная разностная схема (12) обладает свойством консервативности, а именно, для численного решения схемы (12) справедливо выполнение разностного аналога условия нормировки (13) для любого расчетного слоя по времени $t = t^j$

$$\sum_{i=0}^n f_{1i}^j \sin \mathcal{G}_i + \sum_{i=0}^n f_{2i}^j \sin \mathcal{G}_i = \frac{1}{2\pi}.$$

Развернутое изложение и теоретическое обоснование данного вычислительного алгоритма для численного исследования систем кинетических уравнений дано в работе [5].

Следующий вычислительный эксперимент проведен для численного исследования нестационарной системы (8–11) при воздействии импульсного лазерного ОП $\vec{E}_0$ прямоугольной формы, $n_2/n_1 = 0,8$, $\tau_0/\tau_2^{eff} = 0,01$. На рисунке 1А представлена зависимость безразмерного коэффициента усиления α' ($\alpha' = \alpha/N\sigma_0$) под воздействием импульсного ОП $\vec{E}_0$, при $\vec{E} \parallel \vec{E}_0$, от времени для молекул, вытянутых вдоль оси симметрии $q_2 > q_1 > 0$ (Рис.1А – сплошная линия), и дискообразных $q_1 < q_2 < 0$ (Рис.1А – штриховая линия).

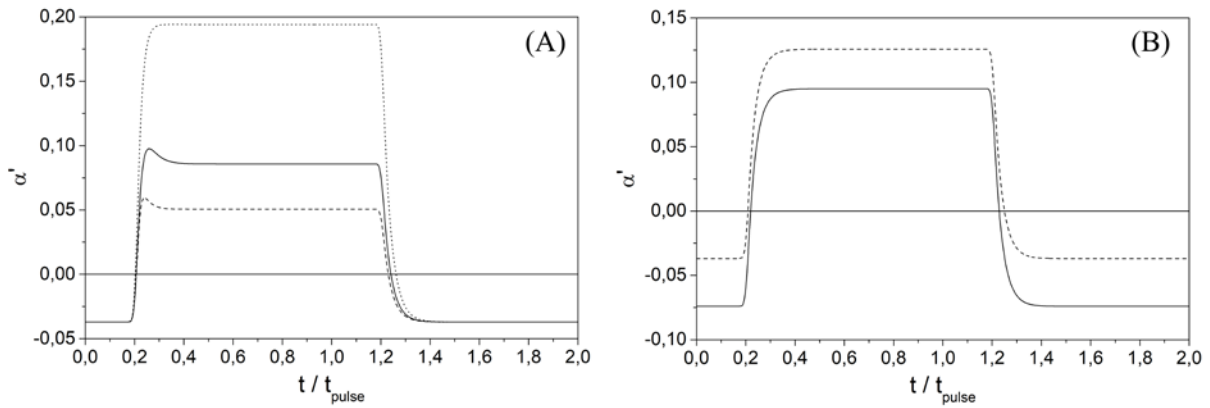


Рис.1. Влияние величины параметра ориентации на коэффициент усиления.

(А) сплошная линия – $q_1 = 2,0$, $q_2 = 8,0$, $\vec{E} \parallel \vec{E}_0$; штриховая линия – $q_1 = -8,0$, $q_2 = -2,0$, $\vec{E} \parallel \vec{E}_0$; пунктирная линия – $q_1 = 0$, $q_2 = 8,0$, $\vec{E} \parallel \vec{E}_0$.
 (В) сплошная линия – $q_1 = 2,0$, $q_2 = -2,0$, $\vec{E} \perp \vec{E}_0$; штриховая линия – $q_1 = -2,0$, $q_2 = 2,0$, $\vec{E} \parallel \vec{E}_0$.

Как видно из рисунка 1А, безынертное усиление достигается за время порядка времени ориентации. Наличие резкого выброса усиления на начальном этапе включения ОП связано с тем, что $q_2 > q_1$ и поэтому, для молекул, находящихся в возбужденном состоянии, функции распределения по ориентациям достигают квазистационарного состояния быстрее, чем для молекул в основном состоянии. Естественно, что после того, как молекулы основного состояния приобретут квазистационарную функцию распределения по ориентациям, коэффициент усиления стабилизируется. Это легко проверить, приняв параметр $q_1 = 0$ (Рис. 1А – пунктирная линия).

Наибольший интерес может представлять вариант, при котором знак параметра q_j различен в основном и в возбужденном состоянии. Последнее может иметь место, если выход из резонанса частоты ОП ω_0 относительно электронного перехода молекулы ω_{ij} имеет разный знак в состояниях 1 и 2. Действительно, если при возбуждении молекулы в состояние 2 частота перехода между рабочим энергетическим уровнем 2 и любым другим возбужденным уровнем j удовлетворяет условию $\omega_{ij} < \omega_0$, а частоты переходов ω_{ij} , $\omega_{12} > \omega_0$, тогда следует, что $q_2 < 0 < q_1$ для вытянутых молекул и $q_2 > 0 > q_1$ для дискообразных. В этом случае ОП оказывает ориентирующее влияние для молекул, находящихся в одном из рабочих состояний 2 или 1, и дезориентирующее — в другом.

На рисунке 1В продемонстрирована зависимость безразмерного коэффициента усиления α' под воздействием импульсного ОП $\vec{E}_0$ от времени в случае, когда знак параметра q_j различен в основном и в возбужденном состоянии: для вытянутых вдоль оси симметрии молекул $q_2 < 0 < q_1$ при $\vec{E} \perp \vec{E}_0$ (Рис. 1В – сплошная линия) и дискообразных молекул $q_2 > 0 > q_1$ при $\vec{E} \parallel \vec{E}_0$ (Рис. 1В – штриховая линия).

Как видно из рисунка 1В, резкий выброс коэффициента усиления в момент включения ОП отсутствует. Последнее связано с тем, что в данном примере $|q_2| = |q_1|$ и равновесные функции распределения по ориентациям достигаются через одинаковый промежуток времени.

Приведенные расчеты позволяют сделать вывод о возможности безынерсного усиления излучения путем селективного по состояниям ориентирования молекул в поле лазерного излучения. В случае оптической ориентации, анизотропия поляризуемости $(\alpha_{33}^j - \alpha_{11}^j)$ составляет величину около 10^{-24} см^3 даже при выходах из резонанса $\omega_{ij} - \omega_0 \approx \omega_0$. При нормальных температурах ($T \approx 300 \text{ К}$) параметр оптической ориентации q_j может достигать значений порядка единицы при интенсивности ОП ниже пробойной. Особо необходимо выделить то, что величина q_j может быть значительно увеличена при приближении частоты ω_0 к частотам оптических переходов, и, кроме того, подбором частоты ω_0 можно реализовать условия, в которых параметры ориентации в основном и возбужденном состоянии имеют разные знаки. Последнее позволяет получить безынерсное усиление при более низких значениях ОП и расширяет класс молекулярных соединений, которые можно рассматривать в качестве объектов для экспериментальных исследований.

Список литературы

1. Popov A.K. Switching from opaque via transparent to a strongly amplifying state is shown to be possible for molecular media without a change in the noninverted population of their energy levels / A.K.Popov, V.V.Slabko // Optics Letters. — 2005. — V. 30. — №13. — P. 1719–1721..
2. Popov A.K. Optical switching and inversionless amplification controlled by state-dependent alignment of molecules / A.K.Popov, V.V.Slabko // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2005. — V. 38. — №11. — P. 1787–1796.
3. Кузоватов И.А. Влияние времени установления ориентационного равновесия на эффект безынерсного усиления селективно по состояниям ориентированными молекулами / И.А.Кузоватов, В.В.Лашинский, В.В.Слабко, А.В.Шамшури // Журнал Сибирского федерального университета. Серия: Математика и физика. — 2011. — Т. 4. — № 2. — С. 240-248.
4. Слабко В.В. О возможности безынерсного усиления света дихроичными молекулами во внешнем ориентирующем поле / В.В.Слабко, И.А.Кузоватов, А.В.Шамшури // Журнал технической физики. — 2012. — Т. 82. — № 2. С. 57-62.
5. Кузоватов И.А. Численное моделирование процесса ориентации двухуровневых молекул во внешнем поле при помощи метода экспоненциальной подгонки / И.А.Кузоватов, А.В.Шамшури // Сибирский журнал индустриальной математики. — 2012. — Т. XV. — № 3. — С. 45-57.
6. Кузоватов И.А. Amplification of light by molecules with selectively oriented states in the pulsed electric field / И.А.Кузоватов, В.В.Слабко, А.В.Шамшури // Журнал Сибирского федерального университета. Серия: Математика и физика. — 2016. — Т. 9. — № 3. — С. 332-337.

ВЛИЯНИЕ ФОРМЫ ПОВЕРХНОСТИ КРУПНОГО КОСМИЧЕСКОГО ТЕЛА НА ЕГО ФРАГМЕНТАЦИЮ В АТМОСФЕРЕ ПЛАНЕТЫ

П.И. Смирнова¹ А.К. Титов², Д.Е. Хренников³, А.Е. Ершов^{1,4}, С.В. Карпов^{1,3,5}

¹Сибирский государственный университет науки и технологий им. М.Ф. Решетнева,
кафедра космических материалов и технологий,

²Московский физико-технический институт (государственный университет),

³Сибирский федеральный университет,

⁴Институт вычислительного моделирования КНЦ СО РАН

⁵Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН

karpov@iph.krasn.ru

К числу приоритетных задач современной астрономии относится прогнозирование столкновения Земли с астероидами, способными нанести масштабный ущерб планете. В этой связи исследование прохождения в земной атмосфере крупных космических тел (КТ), которые могут выпасть на поверхность планеты, вызывает большой интерес [1-7]. Как правило, такие процессы сопровождаются фрагментацией тел, что снижает степень ущерба для наземных объектов в силу падения на поверхность планеты отдельных фрагментов со значительно меньшей массой и кинетической энергией. Таким образом, одним из важных аспектов проблемы космической безопасности Земли является предсказание возможности разрушения КТ и рассеяния его фрагментов в атмосфере [8].

К числу факторов, определяющих возможность фрагментации, относятся неправильная форма КТ, сильно отклоняющаяся от сферической, материал, скорость входа в атмосферу, длина траектории, плотность атмосферы и ряд других факторов. Прогноз вероятности фрагментации и предсказание степени опасности крупных КТ может быть основан на наличии предварительных данных об их форме, полученных на основе данных радиоастрономических наблюдений, а также сведений о составе материала.

В настоящее время в литературе рассматривается ряд моделей фрагментации: В работе [8] представлен обзор существующих представлений о процессах фрагментации крупных КТ. В частности, в рамках динамической модели фрагментации движение образующихся фрагментов рассматривается как перемещение отдельных тел, расходящихся из-за аэродинамического взаимодействия. Кроме того, принимается во внимание воздействие аэродинамического давления на внутренние трещины КТ, которое может вызвать в образовавшихся фрагментах повторную фрагментацию. Помимо этого, обсуждается фрагментационная модель, называемая «мешком с песком», которая рассматривает КТ в виде роя фрагментов разного размера, движущихся в одном облаке. Для крупных КТ процесс фрагментации рассматривается на примере модели жидкой капли, которая сильно деформируется в зоне максимального давления. Образование вогнутой поверхности в этой области рассматривается в качестве начального этапа разделения КТ на две части.

Ряд вычислительных и теоретических моделей для этапа фрагментации были разработаны с использованием различных физических подходов (см. например, [8-15]). Общей чертой моделей является то, что они используют критерии разрушения, принятые в механике материалов, хотя для разрушения хрупких тел (например, структурно неоднородных КТ) они считаются неприемлемыми. В результате фрагментация рассматривается как единый общий разрыв [8] с неопределенным числом и размерами фрагментов, или как последовательные «лавинообразные» разломы, в которых происходит постепенное дробление фрагментов на все более мелкие размеры [8,13,14]. В ра-

ботах [16,17] была предложена модель последовательной фрагментации КТ – сначала основного тела, а затем – его фрагментов. Модель основана на существовании порогового значения разлома и современной механике разрушения [18]. Дискретная модель фрагментации использовалась для определения среднего размера фрагмента на каждом этапе фрагментации, а также координат точек траектории, в которых происходит этот процесс. Кроме того, в [17] утверждается, что при малых размерах КТ их форма (сферическая и прямоугольная) не имеет значения для расчетов их взаимодействия с атмосферой и фрагментацией. Обзор некоторых моделей распада и рассеяния КТ из прочных материалов в атмосфере дан в [18]. На основе этих моделей, авторы [19] выполнили численные трехмерные расчеты рассеяния фрагментов двух одинаковых КТ в атмосфере при небольшом расстоянии между фрагментами в начальный момент времени, которые взаимодействуют через силы давления атмосферных газов. Были рассчитаны размеры поля рассеяния фрагментов в зависимости от их плотности, скорости и высоты траектории.

Важно отметить, что все перечисленные модели не учитывают такой важный фактор, как форма КТ. По форме крупные КТ можно разделить на правильные (близкие к сфере) и неправильные с хаотичным рельефом поверхности. Именно при учете этого фактора могут возникнуть условия, при которых аэродинамические силы способны порождать деформацию, действующую на разрыв КТ.

Материал КТ – другая важная характеристика, определяющая устойчивость КТ к фрагментации. Неоднородные каменные КТ характеризуются наличием глубоких внутренних микротрещин, которые на фронтальной поверхности КТ заполняются атмосферными газами ударного слоя со сверхвысоким давлением, способствующими появлению поперечных сил и разлому КТ. Прочность каменных КТ низка, прежде всего, из-за их внутренней неоднородности. Железные и железо-никелевые КТ однородны с отсутствием внутренних трещин, что повышает их порог прочности в 5-8 раз по сравнению с камнем. Несмотря на поликристаллическую структуру, они являются наиболее устойчивыми к фрагментации космическими телами.

Подчеркнем, что вопросам влияния формы КТ на их способность к фрагментации в литературе уделено недостаточное внимание.

Целью настоящей работы является исследование влияния формы крупных несферических КТ из железа на их способность к фрагментации за счет аэродинамической нагрузки на элементы поверхности рельефа, а также установление происхождения поперечных сил, которые создают деформацию на разрыв КТ. В рамках работы выполняется оценка этой силы для структурно-однородного крупного КТ из наиболее прочного материала – железа и сравнение этой силы с пороговым значением напряжения, выше которого начинается фрагментация КТ.

Отметим, что примеры крупных КТ из железа хорошо известны. Например, Аризонский метеорит с начальным размером более 50 м, метеорит Гоба с размером наибольшего найденного фрагмента более 5 метров.



Рис. 1. Характерные неправильные формы космических тел.

Прежде всего, необходимо пояснить происхождение аэродинамической силы, действующей на КТ как на разрыв, так и на сжатие для таких форм, как конус, сфера, сфера с дефектом в форме протяженного углубления. На рис. 1 приведены характерные формы известных КТ – астероидов и ядер комет достаточно большого размера (порядка нескольких километров). КТ меньшего размера, как правило, характеризуются еще большим отклонением формы поверхности от сферы.

На рис. 2а в качестве примера приведено сечение рельефа КТ с дефектом в форме треугольного выреза. Идеализированной модельной формой такого дефекта может являться углубление в виде сферического сектора, представленного на рис. 2б. В этом случае КТ обладает плоскими аэродинамическими поверхностями такого углубления, распределение сил давления на которые представлено на рис. 2в. Проекция этих сил, перпендикулярные вектору скорости потока (v), создают поперечную деформацию тела, которая действует на разрыв КТ. Величина выреза характеризуется двумя параметрами: углом раствора θ и глубиной h от поверхности идеальной сферы, в которую вписано КТ, до донной части выреза.

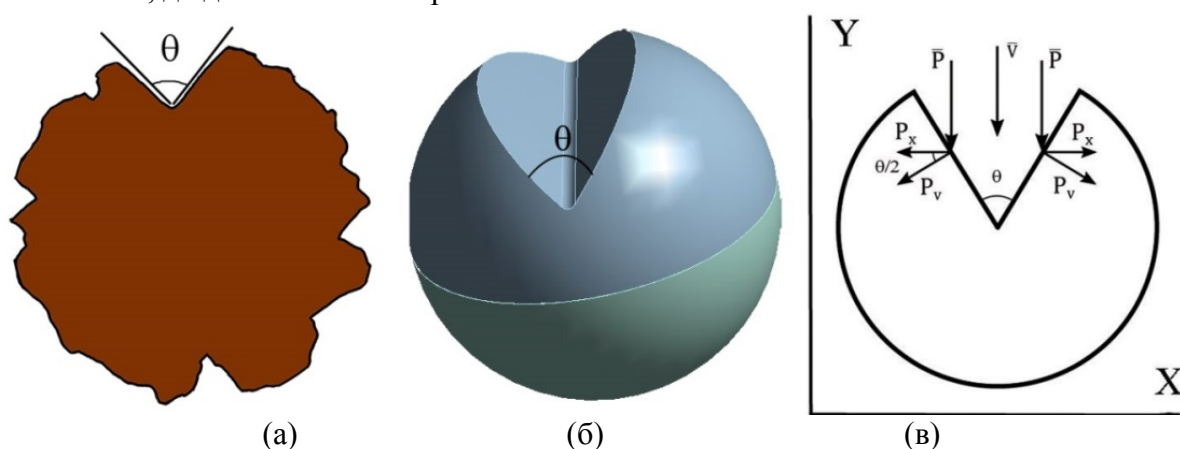


Рис. 2. Случайная форма рельефа КТ (а), модельный тип дефекта поверхности (б) и распределение аэродинамического давления на плоские грани дефекта, действующих на разрыв КТ (здесь θ – угол раствора).

В рамках данного рассмотрения наиболее устойчивыми к фрагментации формами являются конус и, в несколько меньшей степени, сфера. Это связано с тем, что аэродинамические поперечные силы в этих случаях действуют на поперечное сжатие КТ.

Из рис. 2в следует, что проекция аэродинамической силы, действующей перпендикулярно грани, создает давление

$$P_v = \frac{1}{2} \rho_h v^2 \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (1)$$

Здесь ρ_h – плотность атмосферы на высоте h , v – скорость КТ, θ – угол раствора дефекта. Сумма модулей горизонтальных проекций этой силы, действующей на обе грани, создает давление, равное

$$P = \frac{1}{2} \rho_h v^2 \sin \theta \quad (2)$$

Таким образом, напряжение, возникающее в КТ при деформации на разрыв, создается давлением (2).

Для расчетов деформации и величины напряжения под действием этого давления в настоящей работе использовался пакет ANSYS [20] — универсальная программная си-

стема конечно-элементного анализа, применяемая для решения задач механики деформируемого твёрдого тела.

Модель деформации, используемая в пакете ANSYS, при достижении статического равновесия описывается уравнениями [21], для которых в каждом элементе объема деформированного тела при равновесии сил ($\sum F_i = 0$) выполняется условие

$$\sum_{k=1}^3 \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} = 0 \quad (3)$$

где σ_{ik} – тензор напряжения, равный i -той компоненте силы, действующей на единицу поверхности, перпендикулярную к оси k . Значения каждого индекса i, k, l далее соответствуют координатным осям.

На границах тела выполняются условия, описываемые выражением

$$\sum_{k=1}^3 \sigma_{ik} n_k = P_i \quad (4)$$

где n_k – вектор нормали к поверхности тела, P_i – вектор давления.

Тензор деформации связан с тензором напряжения следующим уравнением

$$\sigma_{ik} = K \sum_{l=1}^3 u_{ll} \delta_{ik} + 2\mu \left(u_{ik} - \frac{1}{3} \delta_{ik} \sum_{l=1}^3 u_{ll} \right) \quad (5)$$

Здесь K и μ – модуль всестороннего сжатия и модуль сдвига конкретного материала, соответственно, δ_{ik} – символ Кронекера, u_{ik} – тензор деформации, который определяется выражением

$$u_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \sum_{l=1}^3 \frac{\partial u_l}{\partial x_i} \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) \quad (6)$$

u_i – вектор деформации, определяемый как

$$u_i = x'_i - x_i,$$

x'_i, x_i – компоненты радиусов-векторов r'_i и r_i после и до деформации.

Результаты расчетов статической деформации КТ и картина распределения напряжений, рассчитанная с помощью пакета ANSYS, приведена на рис. 3. Как видно из рисунков, наибольшее напряжение возникает в области донной части выреза, значительно превышающее пороговое значение. Это приводит к разрыву этой части КТ и перераспределению напряжения в более глубокие, нижележащие слои КТ, вскрывающиеся после разрыва верхнего слоя в процессе движения по траектории. Обращает на себя внимание изменение формы КТ в виде сплющивания фронтальной части и увеличения угла раствора выреза.

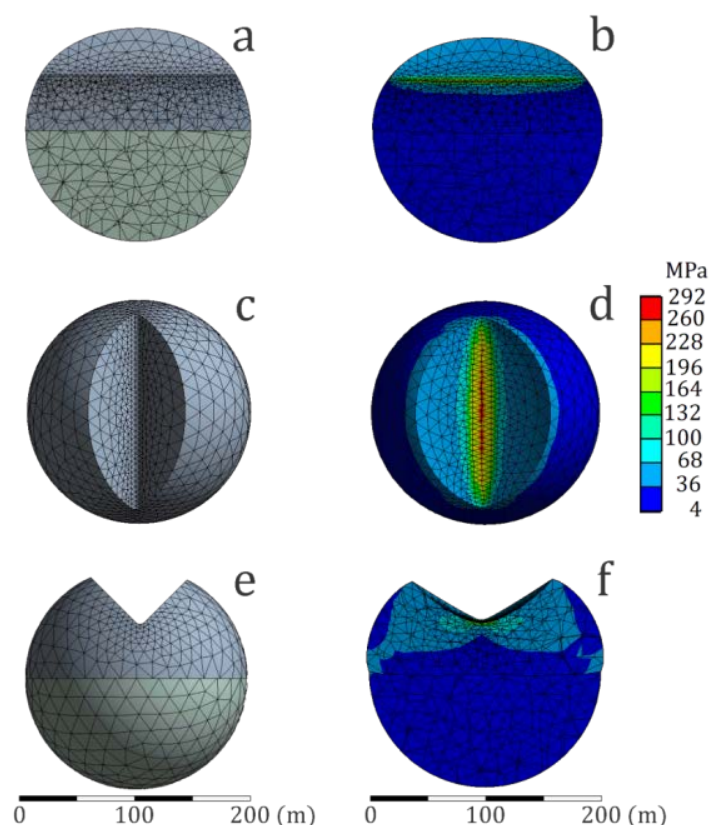


Рис. 3. Распределение деформационного напряжения (диагональных компонент тензора напряжения) и изменение формы КТ из железа с глубиной выреза $0.5 R$, начальным углом раствора 90° при скорости 40 км/с и плотности атмосферы на высоте 10 км . Вид в разных ракурсах (положение тела в системе координат см. на рис. 2в): (a,b) – YZ (разрез через центр КТ), (c,d) – ZX, (e,f) – YX (разрез через центр КТ). (a,c,e) – до воздействия, (b,d,f) – после воздействия. Цвет градиционной шкалы соответствует величине указанного напряжения.

Для получения количественных зависимостей исследуются КТ из железа трех размеров с радиусом $R=100, 50$ и 25 м . Рис. 4 показывает максимальную величину напряжения в КТ, возникающего при наиболее экстремальных условиях – скорости КТ 40 км/с и глубине выреза $h=0.7 R$. При расчетах силы давления использовалось значение плотности атмосферы ρ_h на высоте 10 км .

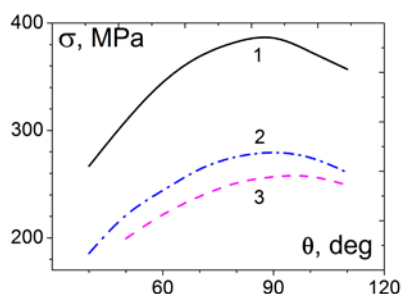


Рис.4. Зависимость напряжения в КТ из железа при его движении в атмосфере от угла раствора. Кривая 1 соответствует радиусу 100 м , кривая 2 – 50 м , кривая 3 – 25 м , при скорости КТ 40 км/с и глубине выреза $h=0.7 R$.

Как известно, прочность железа на сжатие в 3-5 раз превышает прочность на растяжение. На рис. 5–7 пороговая прочность железа на разрыв 170 МПа показана в виде пунктирной горизонтальной линии. Как видно из рисунка, возникающее напряжение значительно превосходит порог разрыва, равный 170 МПа.

На рис. 5 показаны зависимости напряжения, возникающие в КТ в зависимости от угла раствора при меньшей глубине выреза – $h=0.5 R$ при трех значениях скорости – 20, 30 и 40 км/с. Особенностью этих зависимостей является то, что максимум величины напряжения достигается при угле раствора равном 90° , что коррелирует с выражением (2).

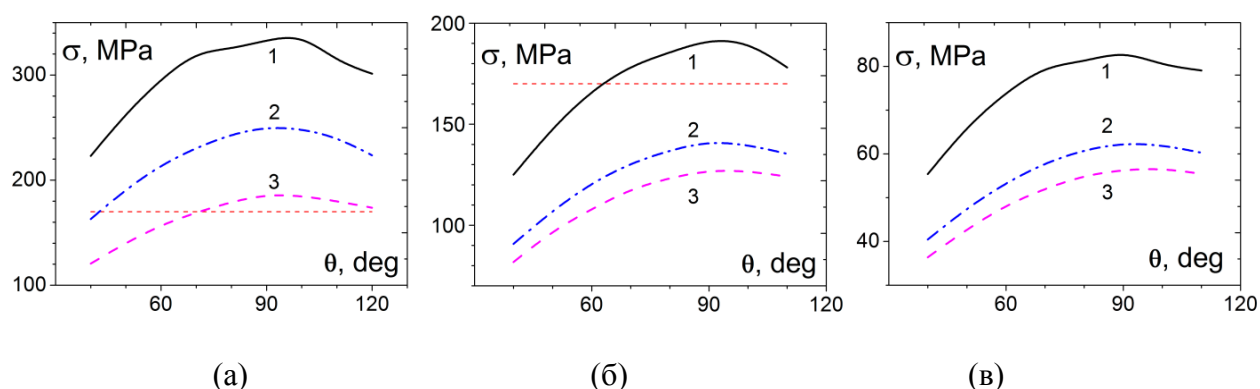


Рис.5. Зависимость напряжения в КТ из железа при его движении в атмосфере от угла раствора. Кривая 1 – радиус КТ 100 м, кривая 2 – 50 м, кривая 3 – 25 м. Глубина выреза $h=0.5 R$. (а) – скорость КТ 40 км/с, (б) – 30 км/с, (в) – 20 км/с

Рис. 5в показывает, что фрагментация железного КТ с таким дефектом поверхности при скорости 20км/с невозможна.

Рис. 6 и 7 показывают зависимость максимальной величины деформационного напряжения в КТ от глубины выреза h и, соответственно, площади аэродинамических поверхностей выреза. Расчет выполнен для тел с радиусом 100, 50 и 25 м и трех значений скоростей при оптимальном угле раствора 90° . Глубина выреза варьировалась от $h=0.2 R$ до $0.5 R$.

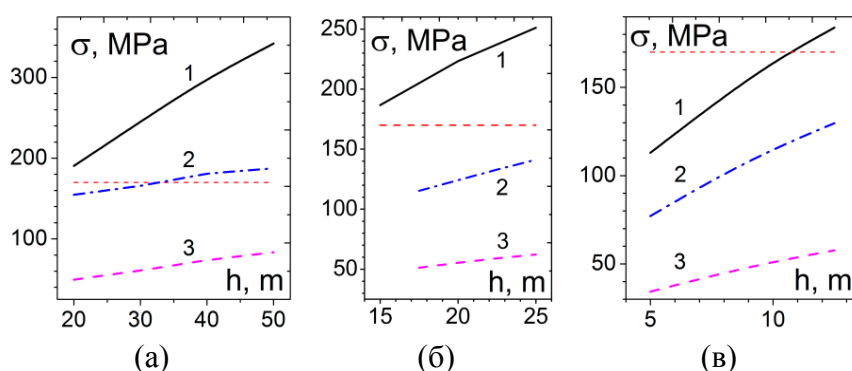


Рис.6. Зависимость напряжения в КТ из железа при его движении в атмосфере от глубины выреза. Кривые 1, 2, и 3 соответствуют скоростям 40, 30 и 20 км/с и угла раствора 90° .

(а) – радиус КТ 100 метров, (б) – 50 метров, (в) – 25 метров.

Как видно из рис. 6, условия для фрагментации достигаются только при скорости 40 км/с. Для скорости 30 км/с фрагментация возможна лишь для КТ с радиусом 100 м при значительной глубине выреза $h=0.6 R$. Для КТ с радиусом 50 и 25 м при скорости 20 и 30 км/с фрагментация невозможна.

Рис. 7 показывает зависимость максимальной величины деформационного напряжения в КТ от скорости при глубине выреза $h=0.5 R$ для трех значений радиусов 100, 50 и 25 м.

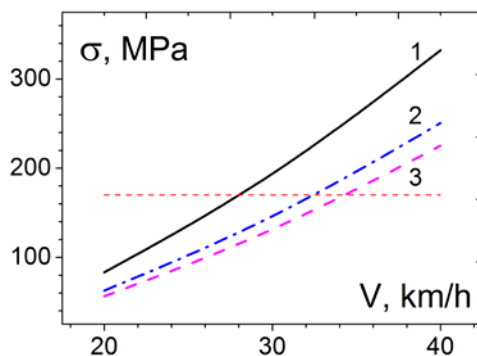


Рис. 7. Зависимость напряжения в КТ из железа при его движении в атмосфере от скорости. Кривые 1, 2 и 3 соответствуют радиусам КТ 100, 50 и 25 метров. Угол раствора 90° , глубина выреза $h=0.5 R$.

Как видно из рисунка, при таких условиях КТ с радиусом 100 м фрагментируется при скорости 26.5 км/с, при $R=50$ м – при скорости 32 км/с, а при $R=25$ м – при скорости свыше 34 км/с.

Полученные результаты свидетельствуют в пользу следующих утверждений:

1. Показано, что поперечные аэродинамические силы, действующие на разрыв железного КТ и возникающие на дефектах его фронтальной поверхности в виде удаленного из сферы сектора, способны преодолеть предел прочности железа. Такими дефектами являются протяженные квазиплоские поверхности разломов с глубиной $1/3$ и более от среднего радиуса КТ. При этом оптимальный угол наклона поверхностей по отношению к вектору скорости аэродинамического потока близок к 45 градусам.
2. Условия фрагментации на разрыв для случая модельного дефекта в форме выреза становятся более благоприятными с увеличением размера КТ и, соответственно, площади аэродинамических поверхностей, а также с возрастанием начальной скорости входа в атмосферу.
3. Необходимо учесть, что по мере входа КТ в более плотные слои атмосферы формы выреза подвергается эрозии из-за сублимационной потери материала, что может сопровождаться постепенным снижением аэродинамических сил. Однако из-за большой начальной массы основная часть дефекта может сохраняться.
4. При скорости менее 27 км/с и на высоте более 10 км фрагментация железных сферических КТ радиусом 100 м с вырезом в форме сферического сектора даже с глубиной 0.5 радиуса невозможна.
5. Фрагментация тел с радиусом меньше 100 м возможна только при скоростях 32 км/с и выше. При этом с увеличением глубины выреза увеличивается вероятность фрагментации КТ.
6. Полученные зависимости позволяют оценить вероятность фрагментации КТ из материалов с меньшим порогом прочности на разрыв (50 МПа и менее).
7. Полученные результаты подтверждают реалистичность версии, согласно которой Тунгусский феномен связан со сквозным прохождением через атмосферу Зем-

ли при минимальной высоте 10-16 км астероидного тела из железа с радиусом от 100 до 50 метров с его последующим выходом в космическое пространство на околосолнечную орбиту [22] на скорости меньше порога фрагментации.

Список литературы

1. Stulov V. P. *Aerodynamics of bolides*. / Stulov V. P., Mirskiy V. N., Vyslyi A. I. – Moscow – 1995.
2. Bronshten V. A. *Physics of meteoritic Phenomena*. / Bronshten V. A. – Moscow – 1981.
3. Martin J. J. *Atmospheric Entry - An Introduction to Its Science and Engineering*. / Martin J. J. Old Tappan. – NJ: Prentice-Hall – 1966.
4. Loh W. H. T. *Dynamics and thermodynamics of planetary entry*. / Loh W. H. T. Englewood Cliffs, N. J. – Prentice-Hall – 1963.
5. Hawkins G. S. *The meteor process*. Physics and Astronomy of Meteors, Comets and Meteorites. / Hawkins G. S. – New York: McGraw-Hill – 1964.
6. Adushkin V. V. in: Gehrels T. (ed.) *Hazards due to Comets and Asteroids*,// Adushkin V. V. and Nemchinov I. V. – Tucson and London – 1994, p. 721-778.
7. Morrison D. in: Gehrels T. (ed.), *Hazards due to Comets and Asteroids*. / Morrison D., Chapman C. R., and Slovic P. – Tucson and London – 1994. p. 59-93.
8. Nemchinov I. V. Penetration of large meteoroids into the atmosphere: theory and observations / Nemchinov I. V., Popova O. P., and Teterev A. V. // Journal of Engineering Physics and Thermophysics – 2005 – Vol. 72. – No. 6. p. 1194-1223
9. Ivanov A. G. Model for the Atmospheric Fragmentation and Scattering of a Small Celestial Body / Ivanov A. G. and Ryzhanskii V. A. // Combustion, Explosion, and Shock Waves – 2005 – Vol. 41, – No. 3. p. 346–356
10. Fadeenko Yu. I. Fracture of meteoroids in the atmosphere. / Fadeenko Yu. I. // Combust., Explos., Shock Waves – 1997 – Vol. 3 – No. 2. p. 172–174.
11. Grigoryan S. S. Motion and fracture of meteorites in planetary atmospheres.// Grigoryan S. S. // Kosm. Issled. (Space Researches) – 1979 – Vol. 17 – No. 6. p. 875– 893.
12. Hills J. H. The fragmentation of small asteroids in the atmosphere. / Hills J. H. and Goda M. H. // Astronom. J. – 1993 – Vol. 105 – No. 3. p. 1114-1144.
13. Stulov V. P. Analytical model for the sequential breakup and ablation of a meteoroid in the atmosphere. / Stulov V. P. // Astronom. Vestn. – 1998 – Vol. 32 – No. 3. p. 455–458.
14. Svetsov V. V. Disintegration of large meteoroids in Earth's atmosphere: Theoretical models. / Svetsov V. V., Nemtchinov I. V., and Teterev A. V. // Icarus – 1995 – Vol. 116. p. 131–153.
15. Barri N. Movement, Ablation and Fragmentation of Meteoroid in the Atmosphere / Barri N. // Arch. Comput. Methods Eng. – 2010 – Vol. 17. p.1–23
16. Ivanov A. G. Effect of the shape of a small object from outer space on its fragmentation in a planetary atmosphere. / Ivanov A. G. and Ryzhanskii V. A. // Combust., Explos., Shock Waves – 1999 – Vol. 35 – No. 3. p. 326–330.
17. Ivanov A. G. Fragmentation of a small celestial body entering the atmosphere of a planet. / Ivanov A. G. and Ryzhanskii V. A. // Combust., Explos., Shock Waves – 1999. Vol. 35 – No. 5. p. 581–590.
18. Ivanov A. G. Fracture under explosive loadings / Ivanov A. G.// J. Appl. Mech. Tech. Phys. – 1994 – Vol. 3. p. 430–443.
19. Artem'eva N. A. Interaction of shock waves during the passage of a disrupted meteoroid through the atmosphere./ Artem'eva N. A. and Shuvalov V. V. // Shock Waves – 1996 – Vol. 5. p. 359–367.
20. <https://www.ansys.com/>

21. Landau L. D. *Theory of Elasticity*. Vol. 7 (Course of Theoretical Physics, 2nd ed.). / Landau L. D., Lifshitz E. M. – Pergamon Press – 1970.
22. Khrennikov D. E. / On the conditions for passage of asteroids through the Earth's atmosphere without collision with its surface // Khrennikov D. E., Titov A. K., Ershov A.E., Karpov S. V. Proceedings, XIX All-Russian seminar "Modeling of non-equilibrium systems (MNS-2016)". Krasnoyarsk. October 7-9 – 2016. p. 123-130.

СПИСОК ДОКЛАДОВ

Айзенберг Н.М., Бывшев Е.С., Мальгин Г.Ю. РАЗРАБОТКА ПЕРЧАТКИ СУРДОПЕРЕВОДЧИКА	3
С.С. Анцыферов, К.Н. Фазилова, К.Е. Русанов МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОЙ УСТОЙЧИВОСТИ КОГНИТИВНЫХ СИСТЕМ	9
Д.А.Башкова, Ю.Я.Гафнер ПРИМЕНЕНИЕ В КАЧЕСТВЕ БИТОВ ИНФОРМАЦИИ В УСТРОЙСТВАХ РСМ ПАМЯТИ НАНАСПЛАВА Ag–Cu	15
Н.М.Богатов, А.С.Синицын УРАВНЕНИЯ КИНЕТИКИ ЯДЕРНОЙ НАМАГНИЧЕННОСТИ	20
Т.Б. Витова, Е.С. Кирик, А.В. Малышев ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ДИАГРАММЫ И ПЛОЩАДЬ ГОРИЗОНТАЛЬНОЙ ПРОЕКЦИИ ЛЮДЕЙ В ДИСКРЕТНО-НЕПРЕРЫВНОЙ МОДЕЛИ ДВИЖЕНИЯ ЛЮДЕЙ	25
Л.Р. Григорьян, Е.Г. Ляшко, А.Л. Григорьян МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЛЬТРА ШУМА ФОНОКАРДИОГРАФА В СРЕДЕ МАТЛАВ	30
В. В. Деревянко, Е. Д. Каропова, Д. А. Нестеров, Ю. В. Шанько Статистический анализ данных ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ РЕЖИМОВ РАБОТЫ РАДИОЭЛЕКТРОННОЙ АППАРАТУРЫ	35
Каганович Б.М, Стенников В.А., Зароднюк М.С., Якшин С.В. О РАЗВИТИИ ВЗАИМОСВЯЗЕЙ МЕЖДУ РАВНОВЕСНОЙ И НЕРАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКАМИ	39
В.Б. Кашкин, К.В. Кранощеков, Т.В. Рублева, М.А. Курако, К.В. Симонов, А.Н. Мацулев ИССЛЕДОВАНИЕ ОБЛАСТЕЙ ПОДГОТОВКИ СИЛЬНЕЙШИХ ЗЕМЛЕТРЯС- НИЙ НА ОСНОВЕ АНАЛИЗА СПУТНИКОВЫХ ИЗМЕРЕНИЙ КОСМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ GRACE	44
А.И. Колесникова, В.Д. Федотовская, Т.О. Шпагина, М.Г. Садовский ВЛИЯНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ РАЗЛИЧИЙ СИЛЬНЕЕ ВЛИЯНИЯ ТАКСОНОМИЧЕСКИХ РАЗЛИЧИЙ ДЛЯ ГЕНОВ СЕМЕЙСТВА <i>atp</i> МИТОХОНДРИЙ ГРИБОВ	49
В.А.Миронов ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНОЙ СКОРОСТНОЙ МОДЕЛИ ГРУНТОВОЙ ТОЛЩИ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ ВЕРТИКАЛЬНОГО СЕЙСМИЧЕСКОГО ПРОФИЛИРОВАНИЯ	55

А.В. Попов МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ КОНДЕНСАТА ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ	59
А.В. Попов, В.А. Попов АТОМАРНЫЙ ЛИТИЙ В ПОТОКЕ ИНЕРТНОГО ГЕЛИЯ	63
И.И. Рыжков, А.С. Вяткин, В.О. Кучерявый УПРАВЛЯЕМЫЙ ТРАНСПОРТ ИОНОВ В НАНОПОРИСТЫХ МЕМБРАНАХ С ПРОВОДЯЩЕЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ	69
Г.А. Самигулина, З.И. Самигулина РАЗРАБОТКА СТРУКТУРЫ БАЗЫ ДАННЫХ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ МЕДИЦИНСКОЙ ЭКСПЕРТНОЙ СИСТЕМЫ, УЧИТЫВАЮЩЕЙ ЗАВИСИМОСТИ «СТРУКТУРА-СВОЙСТВО» ЛЕКАРСТВЕННЫХ СОЕДИНЕНИЙ	74
С.П. Царев, М.Ю. Сенашова, М.Г. Садовский БЫСТРЫЙ АЛГОРИТМ ВЕРНЬЕРА ПОИСКА ДЛИННЫХ ПОВТОРОВ В ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЯХ ДНК С ОГРАНИЧЕННОЙ ПЛОТНОСТЬЮ ОШИБКИ	79
В.П.Сизиков, В.И. Разумов ОБЪЯСНЕНИЕ ПОВЕДЕНИЯ СИСТЕМ НА БАЗЕ ДИС-ТЕХНОЛОГИИ	87
В.Н. Удодов КИНЕТИЧЕСКИЕ КРИТИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ ДЛЯ СМЕСИ ИЗОТОПОВ СВЕРХТЕКУЧЕГО ГЕЛИЯ ВБЛИЗИ АБСОЛЮТНОГО НУЛЯ	95
Ю.А. Хамад, С.В.Кириллова, М.А. Курако, К.В. Симонов, Т.В. Черепанова АЛГОРИТМЫ ОБНАРУЖЕНИЯ ГРАНИЦ НА НИЗКО-КОНТРАСТНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЯХ КОМПЬЮТЕРНОЙ ТОМОГРАФИИ	99
В.Н.Хмелёв, Р.Н.Голых, А.В. Шалунов, Р.А. Лопатин, В.Д. Минаков МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ КАВИТАЦИОННОЙ ОБЛАСТИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ УЛЬТРАЗВУКОВЫХ КОЛЕБАНИЙ В ВЫСОКОВЯЗКИХ И НЕНЬЮТОНОВСКИХ ЖИДКИХ СРЕДАХ	105
Р.А. Чиженкова АНАЛИЗ ИЗДАТЕЛЬСКИХ НАУЧНЫХ ПРОЕКТОВ ПО ОБЛАСТИ ЗНАНИЯ "ФИЗИКА, АСТРОНОМИЯ", ПОДДЕРЖАННЫХ РОССИЙСКИМ ФОНДОМ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ	111
О.Н. Шабловский, Д.Г. Кроль РАСЩЕПЛЕНИЕ ВЕРШИНЫ И БОКОВОЕ ВЕТВЛЕНИЕ ДЕНДРИТА ПРИ РОСТЕ ИЗ ПЕРЕОХЛАЖДЕННОГО РАСПЛАВА	117
А.В.Шамшурин, И.А.Кузоватов, В.В.Слабко БЕЗЫНВЕРСНОЕ УСИЛЕНИЕ СВЕТА НЕДИПОЛЬНЫМИ	

МОЛЕКУЛАМИ СЕЛЕКТИВНО ПО СОСТОЯНИЯМ ОРИЕНТИРОВАННЫМИ В ПОЛЕ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ	122
--	-----

П.И. Смирнова, А.К. Титов, Д.Е. Хренников, А.Е. Ершов, С.В. Карпов ВЛИЯНИЕ ФОРМЫ ПОВЕРХНОСТИ КРУПНОГО КОСМИЧЕСКОГО ТЕЛА НА ЕГО ФРАГМЕНТАЦИЮ В АТМОСФЕРЕ ПЛАНЕТЫ	130
---	-----

АЛФАВИТНЫЙ СПИСОК УЧАСТНИКОВ СЕМИНАРА

Участник	Адрес	Стр.
Айзенберг Наталья Михайловна	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский федеральный университет E-mail: nataliaaiz@mail.ru	3
Анцыферов Сергей Сергеевич	119454, ЦФО, г. Москва, пр-т Вернадского, д. 78, МИРЭА – Российский технологический университет, Физико-технологический институт, каф. метрологии и стандартизации E-mail: c_standard@fel.mirea.ru	9
Башкова Дарья Антоновна	655017, г. Абакан, пр. Ленина 90, Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова (ХГУ) E-mail: bashkova.daria@yandex.ru	15
Богатов Николай Маркович	350040, г. Краснодар, ФГБОУ ВПО «Кубанский государственный университет», т. 8(861)2199501*266 E-mail: bogatov@phys.kubsu.ru	20
Бывшев Егор Сергеевич	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский федеральный университет E-mail: egorsergsss@gmail.com	3
Витова Татьяна Брониславовна	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: vitova@icm.krasn.ru	25
Вяткин Александр Владимирович	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: vyatkin@icm.krasn.ru	69
Гафнер Юрий Яковлевич	655017, г. Абакан, пр. Ленина 90, Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова (ХГУ) E-mail: ygafner@khsu.ru	15
Голых Роман Николаевич	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: romangl90@gmail.com	105
Григорьян Анастасия Леонтиевна	350040, Краснодар, ул. Ставропольская 149, Кубанский государственный университет E-mail: leonmezon@mail.ru	30
Григорьян Леонтий Рустемович	350040, Краснодар, ул. Ставропольская 149, Кубанский государственный университет E-mail: leonmezon@mail.ru	30
Деревянко Виктор Валерьевич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: ws@icm.krasn.ru	35
Ершов Александр Евгеньевич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: fiaf1@mail.ru;	130
Зароднюк Максим Сергеевич	664033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А.Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: max@isem.sei.irk.ru	39

Каганович Борис Моисеевич	664033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: thermo@isem.sei.irk.ru	39
Карепова Евгения Дмитриевна	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: jane@icm.krasn.ru	35
Карпов Сергей Васильевич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт физики СО РАН E-mail: karpov@iph.krasn.ru	130
Кашкин Валентин Борисович	660074, г. Красноярск, ул. Киренского, 28, СФУ, Институт инженерной физики и радиоэлектроники E-mail: rtcvbk@sfu-kras.ru	44
Кирик Екатерина Сергеевна	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: kirik@icm.krasn.ru	25
Кириллова Светлана Владимировна	660074, г. Красноярск, Сибирский федеральный университет, Институт космических и информационных технологий, т. 8-923-285-67-12 E-mail: svkirillova2009@yandex.ru	99
Краснощеков Константин Вячеславович	660074, г. Красноярск, ул. Киренского, 28, СФУ, Институт инженерной физики и радиоэлектроники E-mail: kraspeed1994@gmail.com	44
Колесникова Анна Игорьевна	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский федеральный университет E-mail: kolesnikova.denovo@gmail.com	49
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	117
Кузоватов Игорь Анатольевич	660074, г.Красноярск, ул. Им. Акад. Киренского, 26 д, Институт математики и фундаментальной информатики E-mail: kuzovатов@yandex.ru	122
Курако Михаил Александрович	660074, г. Красноярск, Сибирский федеральный университет, Институт космических и информационных технологий, т. 8-923-285-67-12 E-mail: mkurako@gmail.com	44, 99
Кучерявый Валерий Олегович	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: kuchvo@icm.krasn.ru	69
Лопатин Р.А.	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: romangl90@gmail.com	105
Ляшко Екатерина Григорьевна	350040, Краснодар, ул. Ставропольская 149, Кубанский государственный университет E-mail: leonmezon@mail.ru	30

Малышев Андрей Валерьевич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: amal@icm.krasn.ru	25
Мальгин Георгий Юрьевич	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский федеральный университет E-mail: georgeomeg@mail93@gmail.com	3
Мацулев Александр Николаевич	660036, Россия, г. Красноярск, Академгородок, д. 50, стр. 24, Институт химии и химической технологии СО РАН E-mail: matsulev@icct.ru	44
Минаков В.Д.	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: romangl90@gmail.com	105
Миронов Василий Александрович	660049, Красноярск, пр.Мира, 53, НП «Экологический центр рационального освоения природных ресурсов» E-mail: vasya-kun@mail.ru	55
Нестеров Денис Александрович	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: ndanda@icm.krasn.ru	35
Попов Андрей Валерьевич	656038, Барнаул, пр. Ленина, 46, Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова E-mail: Popov.Barnaul@mail.ru	59, 63
Попов Валерий Андреевич	656038, Барнаул, пр. Ленина, 46, Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова E-mail: pva379@mail.ru	63
Разумов Владимир Ильич	Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Россия, 644077, Омск, проспект Мира 55-а E-mail: razumov@omsu.ru	87
Рублева Татьяна Васильевна	660074, г. Красноярск, ул. Киренского, 28, СФУ, Институт инженерной физики и радиоэлектроники E-mail: Tvrubleva@mail.ru	44
Русанов Константин Евгеньевич	119454, ЦФО, г. Москва, пр-т Вернадского, д. 78, МИРЭА – Российский технологический университет, Физико-технологический институт, каф. Метрологии и стандартизации E-mail: c_standard@fel.mirea.ru	9
Рыжков Илья Игоревич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: rii@icm.krasn.ru	69
Садовский Михаил Георгиевич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: msad@icm.krasn.ru	49, 79

Самигулина Галина Ахметовна	050010, Республика Казахстан, г. Алматы, ул. Пушкина, 125, Институт информационных и вычислительных технологий МОН РК E-mail: galinasamigulina@mail.ru	74
Самигулина Зарина Ильдусовна	Казахстан, 050000, Алматы, ул. Толе Би 59, Казахстанско-Британский Технический Университет, Факультет Информационных Технологий E-mail: zarinasamigulina@mail.ru	74
Сенашова Мария Юрьевна	Институт вычислительного моделирования СО РАН, 660036, Красноярск, Академгородок E-mail: msen@icm.krasn.ru	79
Сизиков Виктор Петрович	Омский государственный университет путей сообщения, 644046, Россия, г. Омск, пр. Маркса, 35. Т./ф.: (3812) 31-42-19. E-mail: v_p_sizikov@mail.ru	87
Симонов Константин Васильевич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН, т. 89135954902 E-mail: simonovkv@icm.krasn.ru	44, 99
Синицын Алексей Сергеевич	350040, г. Краснодар, ФГБОУ ВПО «Кубанский государственный университет», т. 8(861)2199501*266 E-mail: Nj_1@inbox.ru	20
Слабко Виталий Васильевич	660074, Красноярск, ул. Академика Киренского, д.26б, Институт космических и информационных технологий СФУ E-mail: vepom@krgtu.ru	122
Смирнова Полина Игоревна	660000, Красноярск, просп. имени газеты Красноярский Рабочий, 31, Сибирский государственный университет науки и технологий им. М.Ф. Решетнева E-mail: sveta2208@yandex.ru	130
Стенников Валерий Алексеевич	64033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: sva@isem.irk.ru	39
Титов Андрей Константинович	141701, Долгопрудный, Московская обл., Институтский пер., 9, Московский физико-технический институт E-mail: andtit2001@gmail.com;	
Удодов Владимир Николаевич	655017, Абакан, пр. Ленина 90, Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова (ХГУ), т. р.тел. (3902)222-163 E-mail: udodovv@hotmail.com	95
Фазилова Ксения Наильевна	119454, ЦФО, г. Москва, пр-т Вернадского, д. 78, МИРЭА – Российский технологический университет, Физико-технологический институт E-mail: fazilova@mirea.ru	9
Федотовская Виктория Дмитриевна	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский федеральный университет E-mail: viktorii.fedotovskaia@gmail.com	49

Хамад Юсиф Ахмед	660074, Красноярск, ул. Академика Киренского, д.266, Институт космических и информационных технологий СФУ E-mail: y.albayati8@gmail.com	99
Хмелёв Владимир Николаевич	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: vnh@bti.secna.ru	105
Хренников Даниил Евгеньевич	660074, Красноярск, ул. Киренского, 28, ИИФиРЭ СФУ E-mail: hypnotoad_1@mail.ru	130
Царев Сергей Петрович	660074, Красноярск, ул. Академика Киренского, д.266, Сибирский федеральный университет E-mail: sptsarev@mail.ru	79
Черепанова Татьяна Валентиновна	660022, г. Красноярск, ул. Партизана Железняка, 1, Красноярский государственный медицинский университет имени проф. В. Ф. Войно-Ясенецкого E-mail: grakova@list.ru	99
Чиженкова Рогнеда Александровна	Институт биофизики клетки РАН, г. Пущино Московской области, 142290, Тел.: (4967)739-196 E-mail: chizhenkova@mail.ru	111
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	117
Шалунов Андрей Викторович.	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: romangl90@gmail.com	105
Шамшури́н Алексей Валерьевич	660074, Красноярск, ул. Академика Киренского, д.266, Институт космических и информационных технологий СФУ E-mail: shamshurin.alex@mail.ru	122
Шанько Юрий Вадимович	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: shanko@icm.krasn.ru	35
Шпагина Татьяна Олеговна	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский федеральный университет E-mail: shpagusa@mail.ru	49
Якшин Сергей Владимирович	64033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: s.yakshin@sei.irk.ru	39

СПИСОК ДОКЛАДОВ

Айзенберг Н.М., Бывшев Е.С., Мальгин Г.Ю. РАЗРАБОТКА ПЕРЧАТКИ СУРДОПЕРЕВОДЧИКА	3
С.С. Анцыферов, К.Н. Фазилова, К.Е. Русанов МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОЙ УСТОЙЧИВОСТИ КОГНИТИВНЫХ СИСТЕМ	9
Д.А.Башкова, Ю.Я.Гафнер ПРИМЕНЕНИЕ В КАЧЕСТВЕ БИТОВ ИНФОРМАЦИИ В УСТРОЙСТВАХ РСМ ПАМЯТИ НАНАСПЛАВА Ag–Cu	15
Н.М.Богатов, А.С.Синицын УРАВНЕНИЯ КИНЕТИКИ ЯДЕРНОЙ НАМАГНИЧЕННОСТИ	20
Т.Б. Витова, Е.С. Кирик, А.В. Малышев ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ДИАГРАММЫ И ПЛОЩАДЬ ГОРИЗОНТАЛЬНОЙ ПРОЕКЦИИ ЛЮДЕЙ В ДИСКРЕТНО-НЕПРЕРЫВНОЙ МОДЕЛИ ДВИЖЕНИЯ ЛЮДЕЙ	25
Л.Р. Григорьян, Е.Г. Ляшко, А.Л. Григорьян МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЛЬТРА ШУМА ФОНОКАРДИОГРАФА В СРЕДЕ MATLAB	30
В. В. Деревянко, Е. Д. Каропова, Д. А. Нестеров, Ю. В. Шанько Статистический анализ данных ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ РЕЖИМОВ РАБОТЫ РАДИОЭЛЕКТРОННОЙ АППАРАТУРЫ	35
Каганович Б.М, Стенников В.А., Зароднюк М.С., Якшин С.В. О РАЗВИТИИ ВЗАИМОСВЯЗЕЙ МЕЖДУ РАВНОВЕСНОЙ И НЕРАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКАМИ	39
В.Б. Кашкин, К.В. Кранощеков, Т.В. Рублева, М.А. Курако, К.В. Симонов, А.Н. Мацулев ИССЛЕДОВАНИЕ ОБЛАСТЕЙ ПОДГОТОВКИ СИЛЬНЕЙШИХ ЗЕМЛЕТРЯСЕНИЙ НА ОСНОВЕ АНАЛИЗА СПУТНИКОВЫХ ИЗМЕРЕНИЙ КОСМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ GRACE	44
А.И. Колесникова, В.Д. Федотовская, Т.О. Шпагина, М.Г. Садовский ВЛИЯНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ РАЗЛИЧИЙ СИЛЬНЕЕ ВЛИЯНИЯ ТАКСОНОМИЧЕСКИХ РАЗЛИЧИЙ ДЛЯ ГЕНОВ СЕМЕЙСТВА <i>atp</i> МИТОХОНДРИЙ ГРИБОВ	49
В.А.Миронов ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНОЙ СКОРОСТНОЙ МОДЕЛИ ГРУНТОВОЙ ТОЛЩИ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ ВЕРТИКАЛЬНОГО СЕЙСМИЧЕСКОГО ПРОФИЛИРОВАНИЯ	55
А.В. Попов	

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ КОНДЕНСАТА ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ	59
А.В. Попов, В.А. Попов АТОМАРНЫЙ ЛИТИЙ В ПОТОКЕ ИНЕРТНОГО ГЕЛИЯ	63
И.И. Рыжков, А.С. Вяткин, В.О. Кучерявый УПРАВЛЯЕМЫЙ ТРАНСПОРТ ИОНОВ В НАНОПОРИСТЫХ МЕМБРАНАХ С ПРОВОДЯЩЕЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ	69
Г.А. Самигулина, З.И. Самигулина РАЗРАБОТКА СТРУКТУРЫ БАЗЫ ДАННЫХ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ МЕДИЦИНСКОЙ ЭКСПЕРТНОЙ СИСТЕМЫ, УЧИТЫВАЮЩЕЙ ЗАВИСИМОСТИ «СТРУКТУРА-СВОЙСТВО» ЛЕКАРСТВЕННЫХ СОЕДИНЕНИЙ	74
С.П. Царев, М.Ю. Сенашова, М.Г. Садовский БЫСТРЫЙ АЛГОРИТМ ВЕРНЬЕРА ПОИСКА ДЛИННЫХ ПОВТОРОВ В ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЯХ ДНК С ОГРАНИЧЕННОЙ ПЛОТНОСТЬЮ ОШИБКИ	79
В.П.Сизиков, В.И. Разумов ОБЪЯСНЕНИЕ ПОВЕДЕНИЯ СИСТЕМ НА БАЗЕ ДИС-ТЕХНОЛОГИИ	87
В.Н. Удодов КИНЕТИЧЕСКИЕ КРИТИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ ДЛЯ СМЕСИ ИЗОТОПОВ СВЕРХТЕКУЧЕГО ГЕЛИЯ ВБЛИЗИ АБСОЛЮТНОГО НУЛЯ	95
Ю.А. Хамад, С.В.Кириллова, М.А. Курако, К.В. Симонов, Т.В. Черепанова АЛГОРИТМЫ ОБНАРУЖЕНИЯ ГРАНИЦ НА НИЗКО-КОНТРАСТНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЯХ КОМПЬЮТЕРНОЙ ТОМОГРАФИИ	99
В.Н.Хмелёв, Р.Н.Голых, А.В. Шалунов, Р.А. Лопатин, В.Д. Минаков МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ КАВИТАЦИОННОЙ ОБЛАСТИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ УЛЬТРАЗВУКОВЫХ КОЛЕБАНИЙ В ВЫСОКОВЯЗКИХ И НЕНЬЮТОНОВСКИХ ЖИДКИХ СРЕДАХ	105
Р.А. Чиженкова АНАЛИЗ ИЗДАТЕЛЬСКИХ НАУЧНЫХ ПРОЕКТОВ ПО ОБЛАСТИ ЗНАНИЯ "ФИЗИКА, АСТРОНОМИЯ", ПОДДЕРЖАННЫХ РОССИЙСКИМ ФОНДОМ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ	111
О.Н. Шабловский, Д.Г. Кроль РАСЩЕПЛЕНИЕ ВЕРШИНЫ И БОКОВОЕ ВЕТВЛЕНИЕ ДЕНДРИТА ПРИ РОСТЕ ИЗ ПЕРЕОХЛАЖДЕННОГО РАСПЛАВА	117
А.В.Шамшурин, И.А.Кузоватов, В.В.Слабко БЕЗЫНВЕРСНОЕ УСИЛЕНИЕ СВЕТА НЕДИПОЛЬНЫМИ МОЛЕКУЛАМИ СЕЛЕКТИВНО ПО СОСТОЯНИЯМ ОРИЕНТИРОВАННЫМИ В ПОЛЕ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ	122

АЛФАВИТНЫЙ СПИСОК УЧАСТНИКОВ СЕМИНАРА

Участник	Адрес	Стр.
Айзенберг Наталья Михайловна	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский федеральный университет E-mail: nataliaaiz@mail.ru	3
Анцыферов Сергей Сергеевич	119454, ЦФО, г. Москва, пр-т Вернадского, д. 78, МИРЭА – Российский технологический университет, Физико-технологический институт, каф. метрологии и стандартизации E-mail: c_standard@fel.mirea.ru	9
Башкова Дарья Антоновна	655017, г. Абакан, пр. Ленина 90, Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова (ХГУ) E-mail: bashkova.daria@yandex.ru	15
Богатов Николай Маркович	350040, г. Краснодар, ФГБОУ ВПО «Кубанский государственный университет», т. 8(861)2199501*266 E-mail: bogatov@phys.kubsu.ru	20
Бывшев Егор Сергеевич	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский федеральный университет E-mail: egorsergsss@gmail.com	3
Витова Татьяна Брониславовна	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: vitova@icm.krasn.ru	25
Вяткин Александр Владимирович	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: vyatkin@icm.krasn.ru	69
Гафнер Юрий Яковлевич	655017, г. Абакан, пр. Ленина 90, Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова (ХГУ) E-mail: ygafner@khsu.ru	15
Голых Роман Николаевич	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: romangl90@gmail.com	105
Григорьян Анастасия Леонтиевна	350040, Краснодар, ул. Ставропольская 149, Кубанский государственный университет E-mail: leonmezon@mail.ru	30
Григорьян Леонтий Рустемович	350040, Краснодар, ул. Ставропольская 149, Кубанский государственный университет E-mail: leonmezon@mail.ru	30
Деревянко Виктор Валерьевич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: ws@icm.krasn.ru	35
Ершов Александр Евгеньевич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: fiaf1@mail.ru;	130

Зароднюк Максим Сергеевич	664033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А.Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: max@isem.sei.irk.ru	39
Каганович Борис Моисеевич	664033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: thermo@isem.sei.irk.ru	39
Карепова Евгения Дмитриевна	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: jane@icm.krasn.ru	35
Карпов Сергей Васильевич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт физики СО РАН E-mail: karpov@iph.krasn.ru	130
Кашкин Валентин Борисович	660074, г. Красноярск, ул. Киренского, 28, СФУ, Институт инженерной физики и радиоэлектроники E-mail: rtcvbk@sfu-kras.ru	44
Кирик Екатерина Сергеевна	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: kirik@icm.krasn.ru	25
Кириллова Светлана Владимировна	660074, г. Красноярск, Сибирский федеральный университет, Институт космических и информационных технологий, т. 8-923-285-67-12 E-mail: svkirillova2009@yandex.ru	99
Краснощеков Константин Вячеславович	660074, г. Красноярск, ул. Киренского, 28, СФУ, Институт инженерной физики и радиоэлектроники E-mail: kraspeed1994@gmail.com	44
Колесникова Анна Игорьевна	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский федеральный университет E-mail: kolesnikova.denovo@gmail.com	49
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	117
Кузоватов Игорь Анатольевич	660074, г.Красноярск, ул. Им. Акад. Киренского, 26 д, Институт математики и фундаментальной информатики E-mail: kuzovатов@yandex.ru	122
Курако Михаил Александрович	660074, г. Красноярск, Сибирский федеральный университет, Институт космических и информационных технологий, т. 8-923-285-67-12 E-mail: mkurako@gmail.com	44, 99
Кучерявый Валерий Олегович	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: kuchvo@icm.krasn.ru	69
Лопатин Р.А.	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: romangl90@gmail.com	105

Ляшко Екатерина Григорьевна	350040, Краснодар, ул. Ставропольская 149, Кубанский государственный университет E-mail: leonmezon@mail.ru	30
Малышев Андрей Валерьевич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: amal@icm.krasn.ru	25
Мальгин Георгий Юрьевич	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский федеральный университет E-mail: georgeomeg@mail93@gmail.com	3
Мацулев Александр Николаевич	660036, Россия, г. Красноярск, Академгородок, д. 50, стр. 24, Институт химии и химической технологии СО РАН E-mail: matsulev@icct.ru	44
Минаков В.Д.	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: romangl90@gmail.com	105
Миронов Василий Александрович	660049, Красноярск, пр.Мира, 53, НП «Экологический центр рационального освоения природных ресурсов» E-mail: vasya-kun@mail.ru	55
Нестеров Денис Александрович	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: ndanda@icm.krasn.ru	35
Попов Андрей Валерьевич	656038, Барнаул, пр. Ленина, 46, Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова E-mail: Popov.Barnaul@mail.ru	59, 63
Попов Валерий Андреевич	656038, Барнаул, пр. Ленина, 46, Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова E-mail: pva379@mail.ru	63
Разумов Владимир Ильич	Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Россия, 644077, Омск, проспект Мира 55-а E-mail: razumov@omsu.ru	87
Рублева Татьяна Васильевна	660074, г. Красноярск, ул. Киренского, 28, СФУ, Институт инженерной физики и радиоэлектроники E-mail: Tvrubleva@mail.ru	44
Русанов Константин Евгеньевич	119454, ЦФО, г. Москва, пр-т Вернадского, д. 78, МИРЭА – Российский технологический университет, Физико-технологический институт, каф. Метрологии и стандартизации E-mail: c_standard@fel.mirea.ru	9
Рыжков Илья Игоревич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: rii@icm.krasn.ru	69

Садовский Михаил Георгиевич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: msad@icm.krasn.ru	49, 79
Самигулина Галина Ахметовна	050010, Республика Казахстан, г. Алматы, ул. Пушкина, 125, Институт информационных и вычислительных технологий МОН РК E-mail: galinasamigulina@mail.ru	74
Самигулина Зарина Ильдусовна	Казахстан, 050000, Алматы, ул. Толе Би 59, Казахстанско-Британский Технический Университет, Факультет Информационных Технологий E-mail: zarinasamigulina@mail.ru	74
Сенашова Мария Юрьевна	Институт вычислительного моделирования СО РАН, 660036, Красноярск, Академгородок E-mail: msen@icm.krasn.ru	79
Сизиков Виктор Петрович	Омский государственный университет путей сообщения, 644046, Россия, г. Омск, пр. Маркса, 35. Т./ф.: (3812) 31-42-19. E-mail: v_p_sizikov@mail.ru	87
Симонов Константин Васильевич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН, т. 89135954902 E-mail: simonovkv@icm.krasn.ru	44, 99
Синицын Алексей Сергеевич	350040, г. Краснодар, ФГБОУ ВПО «Кубанский государственный университет», т. 8(861)2199501*266 E-mail: Nj_1@inbox.ru	20
Слабко Виталий Васильевич	660074, Красноярск, ул. Академика Киренского, д.266, Институт космических и информационных технологий СФУ E-mail: vepom@krgtu.ru	122
Смирнова Полина Игоревна	660000, Красноярск, просп. имени газеты Красноярский Рабочий, 31, Сибирский государственный университет науки и технологий им. М.Ф. Решетнева E-mail: sveta2208@yandex.ru	130
Стенников Валерий Алексеевич	64033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: sva@isem.irk.ru	39
Титов Андрей Константинович	141701, Долгопрудный, Московская обл., Институтский пер., 9, Московский физико- технический институт E-mail: andtit2001@gmail.com;	
Удодов Владимир Николаевич	655017, Абакан, пр. Ленина 90, Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова (ХГУ), т. р.тел. (3902)222-163 E-mail: udodovv@hotmail.com	95

Фазилова Ксения Наильевна	119454, ЦФО, г. Москва, пр-т Вернадского, д. 78, МИРЭА – Российский технологический университет, Физико-технологический институт E-mail: fazilova@mirea.ru	9
Федотовская Виктория Дмитриевна	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский федеральный университет E-mail: viktoriia.fedotovskaia@gmail.com	49
Хамад Юсиф Ахмед	660074, Красноярск, ул. Академика Киренского, д.266, Институт космических и информационных технологий СФУ E-mail: y.albayati8@gmail.com	99
Хмелёв Владимир Николаевич	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: vnh@bti.secna.ru	105
Хренников Даниил Евгеньевич	660074, Красноярск, ул. Киренского, 28, ИИФиРЭ СФУ E-mail: hypnotoad_1@mail.ru	130
Царев Сергей Петрович	660074, Красноярск, ул. Академика Киренского, д.266, Сибирский федеральный университет E-mail: sptsarev@mail.ru	79
Черепанова Татьяна Валентиновна	660022, г. Красноярск, ул. Партизана Железняка, 1, Красноярский государственный медицинский университет имени проф. В. Ф. Войно-Ясенецкого E-mail: grakova@list.ru	99
Чиженкова Рогнеда Александровна	Институт биофизики клетки РАН, г. Пущино Московской области, 142290, Тел.: (4967)739-196 E-mail: chizhenkova@mail.ru	111
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	117
Шалунов Андрей Викторович.	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: romangl90@gmail.com	105
Шамшурин Алексей Валерьевич	660074, Красноярск, ул. Академика Киренского, д.266, Институт космических и информационных технологий СФУ E-mail: shamshurin.alex@mail.ru	122
Шанько Юрий Вадимович	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: shanko@icm.krasn.ru	35
Шпагина Татьяна Олеговна	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский федеральный университет E-mail: shpagusa@mail.ru	49
Якшин Сергей Владимирович	64033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: s.yakshin@sei.irk.ru	39

Научное издание

Моделирование неравновесных систем—2018

Материалы XXI Всероссийского семинара 5 – 7 октября 2018 г.

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

Подписано в печать «6» сентября 2018 г. Формат 60 × 90/8. (А4)
Бумага офсетная. Печать плоская.
Усл. печ. л. 13,56. Уч.-изд. л. 11,81.
Тираж 500 экз. Заказ 14

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

Отпечатано в типографии ИВМ СО РАН
660036, Красноярск, Академгородок