

**МОДЕЛИРОВАНИЕ
НЕРАВНОВЕСНЫХ,
АДАПТИВНЫХ И
УПРАВЛЯЕМЫХ
СИСТЕМ – 2021**

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

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ, АДАПТИВНЫХ И УПРАВЛЯЕМЫХ СИСТЕМ-2021

МАТЕРИАЛЫ
ДВАДЦАТЬ ЧЕТВЕРТОГО ВСЕРОССИЙСКОГО СЕМИНАРА
1 – 3 октября 2021 года

Красноярск 2021

УДК 001.126 (571.51) (043)

М 74

Моделирование неравновесных, адаптивных и управляемых систем:
Материалы XXIV Всероссийского семинара, / Под ред. М.Г. Садовского; отв. за
вып. М.Ю. Сенашова; – Красноярск: Институт вычислительного моделирования
Сибирского отделения Российской академии наук, 2021. –125 с.

*В сборнике представлены материалы XXIV Всероссийского семинара
«Моделирование неравновесных, адаптивных и управляемых систем» (МНАУС–2021),
проходившего в городе Красноярске 1–3 октября 2021 г.*

*Проблема моделирования неравновесных систем – одна из важнейших
современных научных проблем на стыке математического моделирования, физики,
химии, биологии, социальных наук. Важнейшим итогом конференции является обмен
последними результатами в различных областях моделирования и исследования
неравновесных моделей, описывающих самые различные конкретные системы в
области химии, биоинформатики, экологии, генетики, биофизики, социологии,
демографии, теории управления сложными системами, теории управления
рефлексивными системами, политологии. Среди главных достижений конференции –
формирование целостного взгляда на подходы в моделировании неравновесных систем
различной природы среди участников этой конференции, распространение опыта и
новейших методов моделирования и анализа таких систем на более широкие области
применимости.*

*Материалы предназначены для научных работников, преподавателей,
студентов и аспирантов соответствующих специальностей.*

**Конференция проводится при поддержке Красноярского математического
центра, финансируемого Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и
развитию региональных НОМЦ (Соглашение 075-02-2021-1384) и проекта РНФ №
20-61-46017.**

Редакционная коллегия:

Садовский Михаил Георгиевич – ответственный редактор

Сенашова Мария Юрьевна – ответственный за выпуск

© ИВМ СО РАН, 2021

© Коллектив авторов, 2021

ISBN 978-5-6043558-9-3



9 785604 355893

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ АРХИТЕКТУР СВЕРТОЧНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ РЕАЛИЗАЦИИ КОМПЬЮТЕРНОГО ЗРЕНИЯ УМНОГО ХОЛОДИЛЬНИКА

А. Е. Алёхина, А.Г. Овчинников

«Фабрика решений»,

vkarmeo@mail.ru

М. Г. Доррер

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

Решетнева, *dorrer_mg@sibsau.ru*

Введение

Данная статья посвящена изложению результатов НИОКР по развитию модуля компьютерного зрения облачной программной платформы роботизированной розничной торговли. НИОКР выполнялся в рамках договора гранта Фонда содействия инновациям, № договора 641ГРНТИС5/63440 от 10.12.2020г.

Поставленная в рамках проекта задача заключается в нахождении объектов на изображении в режиме реального времени. При этом на работу системы наложено ограничение по мощности аппаратного обеспечения, осуществляющего анализ изображений, связанное с тем, что данное аппаратное обеспечение расположено на месте, непосредственно в торговой точке. Передача видеоинформации для анализа на сервер может повлечь за собой проблемы при нестабильной связи и потребует существенных расходов на оплату интернет-трафика.

Обзор методов выявления и классификации объектов в видеопотоке

Для решения задач поиска объектов на изображении в настоящее время используются два основных параллельно развивающихся подхода:

1) Двухэтапные методы (англ. two-stage methods), они же «методы, основанные на регионах» (англ. region-based methods) — подход, разделённый на два этапа. На первом этапе селективным поиском или с помощью специального слоя нейронной сети выделяются регионы интереса (англ. regions of interest, RoI) — области, с высокой вероятностью содержащие внутри себя объекты. На втором этапе выбранные регионы рассматриваются классификатором для определения принадлежности к исходным классам, и регрессором, уточняющим местоположение ограничивающих рамок. К подобным методам относятся Faster R-CNN, Mask R-CNN и т.д.

2) Одноэтапные методы (англ. one-stage methods) — подход, не

использующий отдельный алгоритм для генерации регионов, вместо этого предсказывающий координаты определённого количества ограничивающих рамок с различными характеристиками, такими, как результаты классификации и степень уверенности и в дальнейшем корректирующий местоположение рамок. К одноэтапным методам относятся различные версии YOLO.

Все перечисленные методы довольно известны, используются во многих задачах компьютерного зрения, а также, показали высокие показатели точности и скорости на датасете MS COCO.

В настоящее время в задачах классификации объектов в режиме реального времени необходимо чем-то жертвовать. Модель работает медленно, но классифицирует объекты качественно, или же операция распознавания выполняется быстро, но качество определения резко падает.

Для каждой задачи необходимо сделать данный выбор и подобрать оптимальную архитектуру. В ходе описываемой работы применялись следующие методы и архитектуры.

В архитектуре YOLOv2 [1] реализовано обнаружение объектов как решение проблемы регрессии для пространственно-разделённых ограничивающих рамок и связанных вероятностей классов. Единая нейронная сеть предсказывает ограничивающие прямоугольники и вероятности классов непосредственно из полных изображений за одну оценку. Поскольку весь конвейер обнаружения представляет собой единую сеть, его можно оптимизировать от начала до конца непосредственно в зависимости от производительности обнаружения.

Архитектура YOLOv3 [2] прогнозирует результат класса для каждого ограничивающего прямоугольника с помощью логистической регрессии. Если ограничивающий прямоугольник не самый лучший, но перекрывает основной истинный объект b больше некоторого порога, то модель игнорирует предсказание. Система назначает только одну ограничивающую рамку для каждого основного объекта истины. Если ограничивающий прямоугольник до этого не присваивается объекту `groundtruth`, он не несёт потерь для предсказаний координат или классов, а только для области.

При создании архитектуры YOLOv4 [3] задача состояла в разработке быстро обучаемого детектора без потери точности, позволяющего быстро получать качественные результаты на картах серии Nvidia 1080ti и подобных. В данной версии оптимизирован процесс параллельного вычисления, исследованы и модифицированы методы Bag-of-Freebies и Bag-of-Specials.

Архитектура Mask R-CNN [4] построена на основе предшествующей версии Faster R-CNN, добавляя ветвь для прогнозирования масок сегментации для каждой области интереса (RoI) параллельно с существующей ветвью для

классификации и регрессии ограничивающего прямоугольника.

Разработчики архитектуры Yolact++ [5] используют ResNet-101 с FPN в качестве основы архитектуры и размером базового изображения 550×550 . Система не сохраняет соотношение сторон, так как это не повлияло на точности определения на тестовом наборе MS COCO. Для обучения предсказанию классов система использует кросс-энтропию softmax с положительными метками и 1 фоновой меткой, выбирая обучающие примеры с помощью ОНЕМ с соотношением отрицательных и положительных значений.

Для улучшения анализа изображений моделью необходимо предварительно обрабатывать изображение, чтобы повысить яркость и насыщенность ярких областей объектов. Эта задача решается с применением различных методов контрастирования [6].

Еще одним способом повышения контрастности изображений является кластеризация K-средних [7], [8], представляющая собой алгоритм машинного обучения без учителя, целью которого является разделение N наблюдений на K кластеров, в которых каждое наблюдение принадлежит кластеру с ближайшим средним. Кластер относится к набору точек данных, агрегированных вместе из-за определенного сходства. Для сегментации изображения в качестве кластеров рассматриваются области разных цветов.

Авторы данного доклада также сталкивались в своей работе с различными методами компьютерного зрения для обработки видеопотока различных технических систем. Так, в работе [9] метод Mask-CNN использовался для детекции клеток на микрофотографиях. В работе [10] рассматривалась задача, подобная рассмотренной в статье [11] – отслеживание шайбы в игре. Работа [12] посвящена сравнительному анализу эффективности аппаратных платформ для задач видеодетекции при помощи решений на базе архитектуры YOLO. В работе [13] исследовались применение методов instant segmentation для создания обучающих выборок в целях обучения нейронных сетей на основе архитектуры YOLOv3.

Сравнительная оценка методов и архитектур

С целью определения соответствия рассмотренных выше методов глубокого обучения в части их применимости к задачам НИОКР было проведено сравнительное тестирование архитектур на тестовой выборке MS COCO [14] (Microsoft Common Objects in Context) – крупномасштабном наборе данных для обнаружения, сегментации, обнаружения ключевых точек и субтитров, состоящем из 328 000 изображений.

В Таблице 1 описаны результаты сравнительного тестирования моделей по выборке MS COCO.

Таблица 1

Сравнение результатов моделей на coco-test

Task	Method	Backbone	FPS	AP %
Detection	YOLOv2	Darknet-19	171	21.6
Detection	YOLOv3	Darknet-53	35	33.0
Detection	YOLOv4*	Darknet-53	31	45.5
Instance segmentation	Mask R-CNN	Resnet-101	8.6	46.1
Instance segmentation	YOLACT++	Resnet-101	33.5	29.8

По результатам тестирования лучшие результаты показали YOLOv3, YOLOv4 и Mask R-CNN.

Проведение тестовых экспериментов по анализу видеопотока в режиме реального времени с применением отобранных методов

На данный момент модели анализируются на нейромодуле Intel Neural Computer Stick 2 [15], который войдет в состав стандартного комплекта для роботизированных торговых точек. Данный нейромодуль представляет собой компактный вычислительный модуль, предназначенный для выполнения задач, связанных с искусственным интеллектом, машинным обучением. Основой устройства служит Intel Movidius Myriad X Vision Processing Unit (VPU) — специализированный SoC, содержащий в себе 16 вычислительных ядер общего назначения, а также аппаратные компоненты для ускорения инференса нейронных сетей и компьютерного зрения.

Основные характеристики устройства:

- Поддерживаемые фреймворки: TensorFlow, Caffe;
- Подключение: USB 3.0 Type-A;
- Размеры: 72.5 x 27 x 14 мм;
- Совместимые ОС: Ubuntu 16.04.3 LTS (64 bit), CentOS 7.4 (64 bit), Windows 10 (64 bit).

Все модели показавшие наилучшие результаты были последовательно скомпилированы на Neural Computer Stick 2 с последующим проведением тестовых экспериментов.

Следующим этапом отбора архитектур для компьютерного зрения облачной программной платформы роботизированной розничной торговли стало тестирование платформ в условиях, приближенных к режиму эксплуатации в реальных условиях как по аппаратной платформе, так и по физическим

параметрам рабочей зоны. Для формулирования окончательных выводов необходимо было проведение тестовых экспериментов с собственным датасетом, сформированным с учетом особенностей и ограничений реального объекта.

Ограничения накладываются за счет учета нескольких факторов. Описываемые НИОКР развивают научно-технический задел, сформированный ранее компанией-исполнителем при создании «умных» торговых витрин. Умные торговые витрины находятся на стадии внедрения, с точки зрения экономической эффективности было принято решение об использовании в процессе НИОКР тех же комплектующих (камеры и прочее аппаратное обеспечение), что уже применяются в витринах.

1) Параметры камеры:

- Фиксированный размер изображения: 1920x1080 пикселей;
- Параметры дисторсии.

2) Условия среды:

- Расстояние между объективом и полкой: 310 мм;
- Размерность полки: 350x350 мм;
- Цвет полки: белый равномерный однотонный;
- Тип освещения: внутренний, сверху вдоль полки;
- Теплота освещения: холодный белый;
- Наличие фильтров освещения: матовое.

3) Размер входящего изображения: 720x480

4) Аппаратные ресурсы: Neural Computer Stick 2

Для экспериментов было отобрано 7 целевых классов и 1 дополнительный технический класс, условный «мусор» - товар с поврежденной упаковкой и прочие объекты. В качестве целевых классов отбирались представители основных категорий продукции: хлеб, сыр, майонез, шоколад, газированные напитки, овощи, крупы. Первоначальный набор изображений данных классов, не подвергавшихся предобработке, далее именуется «нулевым датасетом».

По причине накладываемых выбранным аппаратным обеспечением ограничений, работа в рамках экспериментов была сконцентрирована на работе с датасетом и предобработке изображений для получения лучших результатов.

Для объективной оценки результатов экспериментов из общепринятого перечня метрик для оценки «успешности» модели машинного обучения нами было отобрано 4 параметра: Precision, Recall, IoU, F1-score [16].

Всего было проведено 18 экспериментов, параметры которых описаны в таблице 2, а результаты показаны в таблице 3

План экспериментов по выбору оптимальной архитектуры

План экспериментов по отбору оптимальной архитектуры включал в сравнительную оценку комбинаций исследуемых архитектур и наборов обучающих и тестовых выборок, показанных в таблице 2. Индекс эксперимента формируется из кода тестируемой архитектуры, где Y3, Y4, M – YOLOv3, YOLOv4 и Mask R-CNN, соответственно, а числа после знака «-» - номер эксперимента над данной моделью.

Таблица 2
План экспериментов

№№	ID эксперимента	Параметры эксперимента	
		Датасет	Предобработка изображений
1.	Y3-0	нулевая модель, входное изображение / видео	отсутствует
2.	Y4-0	нулевая модель, входное изображение / видео	отсутствует
3.	M-0	нулевая модель, входное изображение / видео	отсутствует
4.	Y3-1	нормализован, в каждом классе 1000 размеченных образцов	отсутствует
5.	Y4-1	нормализован, в каждом классе 1000 размеченных образцов	отсутствует
6.	M-1	нормализован, в каждом классе 1000 размеченных образцов	отсутствует
7.	Y3-2	нормализован, в каждом классе 1500 размеченных образцов, добавлены сложные пересечения	отсутствует
8.	Y4-2	нормализован, в каждом классе 1500 размеченных образцов, добавлены сложные пересечения	отсутствует
9.	M-2	нормализован, в каждом классе 1500 размеченных образцов, добавлены сложные пересечения	отсутствует
10.	Y3-3	нормализован, в каждом классе 1500 размеченных образцов, добавлены сложные пересечения. Добавлены аугментации фильтрами: черно-белый, контраст + насыщенность, размытие	отсутствует

11.	Y4-3	нормализован, в каждом классе 1500 размеченных образцов, добавлены сложные пересечения. Добавлены аугментации фильтрами: черно-белый, контраст + насыщенность, размытие	отсутствует
12.	M-3	нормализован, в каждом классе 1500 размеченных образцов, добавлены сложные пересечения. Добавлены аугментации фильтрами: черно-белый, контраст + насыщенность, размытие	отсутствует
13.	Y3-4	нормализован, в каждом классе 1500 размеченных образцов, добавлены сложные пересечения. Добавлены аугментации фильтрами: черно-белый, контраст + насыщенность, размытие	к-средних, контраст
14.	Y4-4	нулевая модель	к-средних, контраст
15.	M-4	нулевая модель	к-средних, контраст
16.	Y3-5	нулевая модель	к-средних, контраст
17.	Y4-5	нулевая модель	к-средних, контраст
18.	M-5	нулевая модель	к-средних, контраст

Результаты экспериментов

Рассматривая таблицу 3 можно видеть, что с учетом ограничений, накладываемых аппаратным обеспечением, по результатам сравнения лучшие показатели продемонстрировал эксперимент Y3-2 на базе нормализованного датасета с добавленными сложными пересечениями объектов, без предобработки изображений.

Таблица 3

Матрица сравнений результатов экспериментов

Рейтинг	ID эксперимента	Precision	Recall	IoU	F1-score	TP	FP	FN

	Y3-0	0.98	0.99	78.15	0.98	5285	131	62
3	Y4-0	0.97	0.99	83.23	0.98	5295	151	52
	M-0	0.85	0.76	75.3	0.80	5360	1000	2012
	Y3-1	0.99	0.98	84.20	0.98	8946	111	189
	Y4-1	0.94	0.99	78.34	0.96	8999	591	136
	M-1	0.93	0.96	85.13	0.94	8953	653	421
1	Y3-2	0.99	0.98	82.41	0.98	10083	138	238
	Y4-2	0.93	0.98	76.74	0.95	10120	784	201
2	M-2	0.98	0.97	90.5	0.97	10213	212	314
	Y3-3	0.97	0.96	81.48	0.96	28024	907	1239
	Y4-3	0.95	0.95	81.23	0.94	28073	1189	1256
	M-3	0.97	0.95	90.34	0.96	28163	782	1405
	Y3-4	0.97	0.90	73.28	0.93	229	8	26
	Y4-4	0.85	0.90	69.93	0.87	229	40	26
	M-4	0.97	0.90	65.74	0.93	229	6	26

Обсуждение и выводы

С учетом рейтингования результатов экспериментов по выбранным показателям качества базы для компьютерного зрения облачной торговой платформы выбрана архитектура YOLOv3, обучаемая на базе нормализованного датасета, дополненного примерами со сложными пересечениями образцов без предобработки примеров.

Однако при функционировании системы важную роль играет не только обнаружение и классификация объекта, но и отслеживание его перемещений. Клиент автоматизированной торговой точки может перемещаться с товаром в руках по торговой точке, подвинуть товар на полке или переставить его на другую полку. Отслеживание этих действий должно происходить для минимизации вероятности ошибочного списания средств. При этом важно минимизировать вычислительную нагрузку на систему.

Следовательно, направлением дальнейшей работы над проектом является

применение методов object tracing для постобработки видеопотока.

Список литературы

1. Redmon J., Farhadi A. YOLO9000: Better, Faster, Stronger. 2016.
2. Redmon J., Farhadi A. YOLOv3: An Incremental Improvement. 2018.
3. Bochkovskiy A., Wang C.-Y., Liao H.-Y.M. YOLOv4: Optimal Speed and Accuracy of Object Detection. 2020.
4. He K. et al. Mask R-CNN. 2017.
5. Bolya D. et al. YOLACT: Real-time Instance Segmentation. 2019.
6. Russ J.C., Russ J.C. The Image Processing Handbook. CRC Press, 2002.
7. Zheng X. et al. Image segmentation based on adaptive K-means algorithm // EURASIP J. Image Video Process. 2018. Vol. 2018, № 1. P. 68.
8. Dorrer M.G., Alekhina A.E. Normalization of data for training and analysis by the {MaskRCNN} model using the k-means method for a smart refrigerator's computer vision // J. Phys. Conf. Ser. {IOP} Publishing, 2021. Vol. 1889, № 2. P. 22103.
9. Yakimov A. et al. The use of convolutional neural networks to identify artifacts of cells micrographs in biomedical research // Journal of Physics: Conference Series. 2019. Vol. 1399, № 3.
10. Tolmacheva A.E., Ogurcov D.A., Dorrer M.G. Puck tracking system for aerohockey game with YOLO2 // Journal of Physics: Conference Series. 2019. Vol. 1399, № 3.
11. Deepa R. et al. Comparison of Yolo, SSD, Faster RCNN for Real Time Tennis Ball Tracking for Action Decision Networks // 2019 International Conference on Advances in Computing and Communication Engineering (ICACCE). IEEE, 2019. P. 1–4.
12. Tolmacheva A.E., Ogurtsov D.A., Dorrer M.G. Justification for choosing a single-board hardware computing platform for a neural network performing image processing // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. 2020. Vol. 734, № 1.
13. Dorrer M.G., Tolmacheva A.E. Application of the Canny's operation and the template matching method to improve the training set in computer vision training's issue system // J. Phys. Conf. Ser. 2020. Vol. 1679. P. 032089.
14. COCO: Common Objects in Context [Electronic resource]. URL: <https://cocodataset.org/#home>.
15. Introduction to the Intel® Neural Compute Stick 2 [Electronic resource]. URL: [https://software.intel.com/content/www/us/en/develop/videos/introduction-to-the-intel-neural-compute-stick-2.html?wapkw=intel neural compute stick 2](https://software.intel.com/content/www/us/en/develop/videos/introduction-to-the-intel-neural-compute-stick-2.html?wapkw=intel%20neural%20compute%20stick%202).
16. Ohsaki M. et al. Confusion-Matrix-Based Kernel Logistic Regression for Imbalanced Data Classification // IEEE Trans. Knowl. Data Eng. 2017. Vol. 29, № 9. P. 1806–1819.

АЛГОРИТМЫ КОНТРОЛЯ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ НЕРАВНОВЕСНЫХ СИСТЕМ ОБРАБОТКИ ИНФОРМАЦИИ

С.С. Анцыферов, К.Н. Фазилова

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

Введение

Существует широкий класс систем, отличающихся сложным структурным построением и связанных с восприятием и обработкой интенсивных изменяющихся информационных потоков. Сюда можно отнести сложные технические системы, научно-производственные и образовательные процессы, рабочие группы, выполняющие ответственные научно-исследовательские работы. Такие системы относятся, как правило, к разряду неравновесных систем. Для обеспечения высокой эффективности функционирования данных систем следует осуществлять непрерывный контроль их состояния, чтобы в случае необходимости принять соответствующие меры, которые могут быть связаны, например, с трансформацией структурного построения той или иной системы. Одним из эффективных способов контроля может служить представление неравновесной системы в виде когнитивной, функционирование которой описывается с помощью нелинейного дифференциального уравнения. Вопросам исследования такого рода систем был посвящен ряд работ [1,2], в частности связанных с разработкой методологии оценки неравновесной устойчивости когнитивных систем.

Цель работы – разработка алгоритмов контроля функционирования неравновесных систем обработки информации.

Алгоритм формирования пространства функционирования неравновесных систем

Формирование пространства функционирования систем в режиме неравновесной устойчивости осуществляется путем (рис. 1.) построения фазовой диаграммы функционирования системы в режиме неравновесной устойчивости и определения границ области неравновесной устойчивости. Оценка состояния системы предполагает определение верхних и нижних границ области неравновесной устойчивости, т.е. граничных значений H , $\dot{H}$ и L для заданных (оптимальных) условий функционирования (P_{min} – минимальное допустимое значение эффективности функционирования СЭ, P_{max} – максимальное

допустимое значение эффективности функционирования СЭ, N – оптимальное число СЭ).

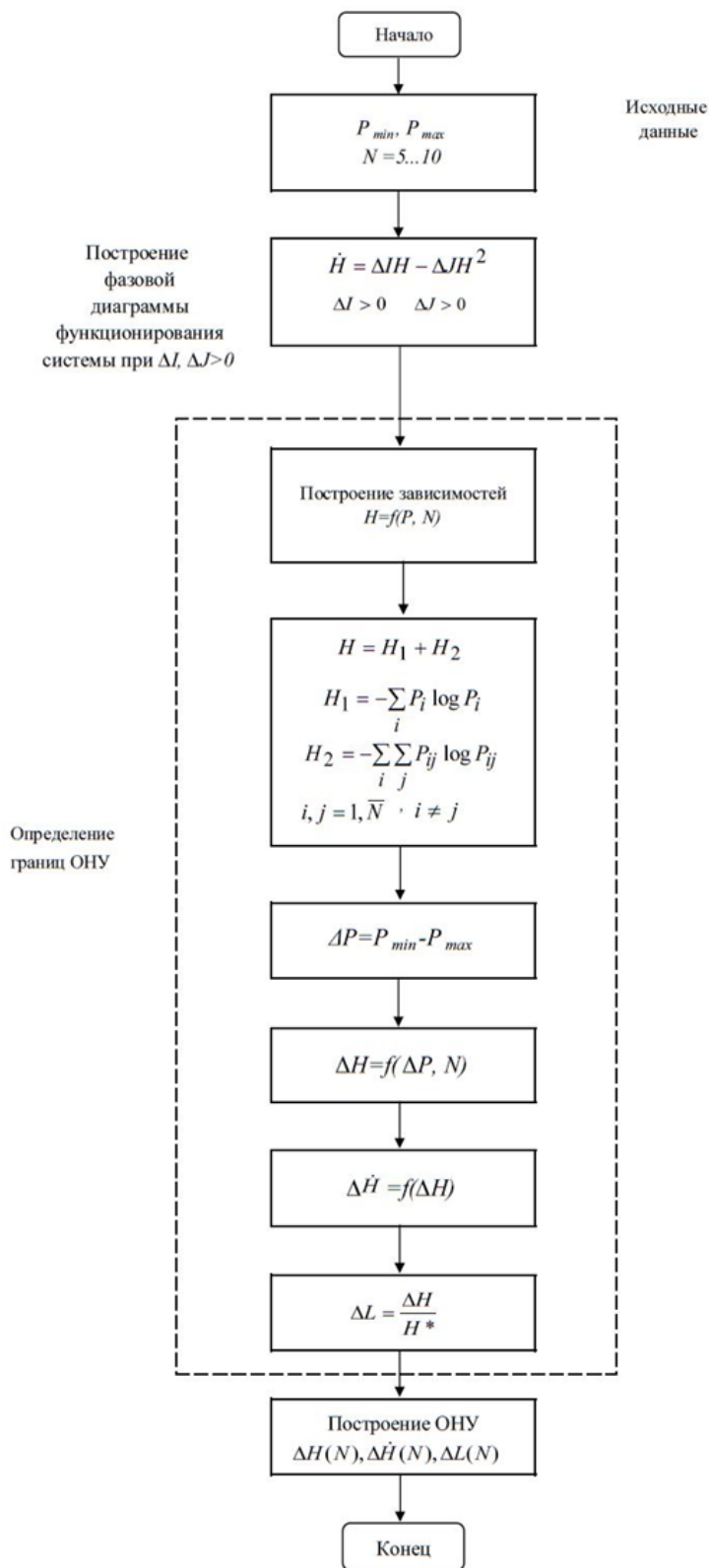


Рис. 1. Структурная схема алгоритма формирования пространства функционирования системы

Алгоритм контроля текущего состояния системы

Реальное состояние системы определяется действительными значениями вероятности эффективности СЭ, соответствующим значениям H , $\dot{H}$ и L , которые, в свою очередь, определяют положение точки, адекватное состоянию системы в трехмерном пространстве координат H , $\dot{H}$ и L . В случае «выхода» той или иной точки за пределы установленной области поступает сигнал на координирующий блок и, в случае необходимости, осуществляется трансформация структуры системы (рис. 2).

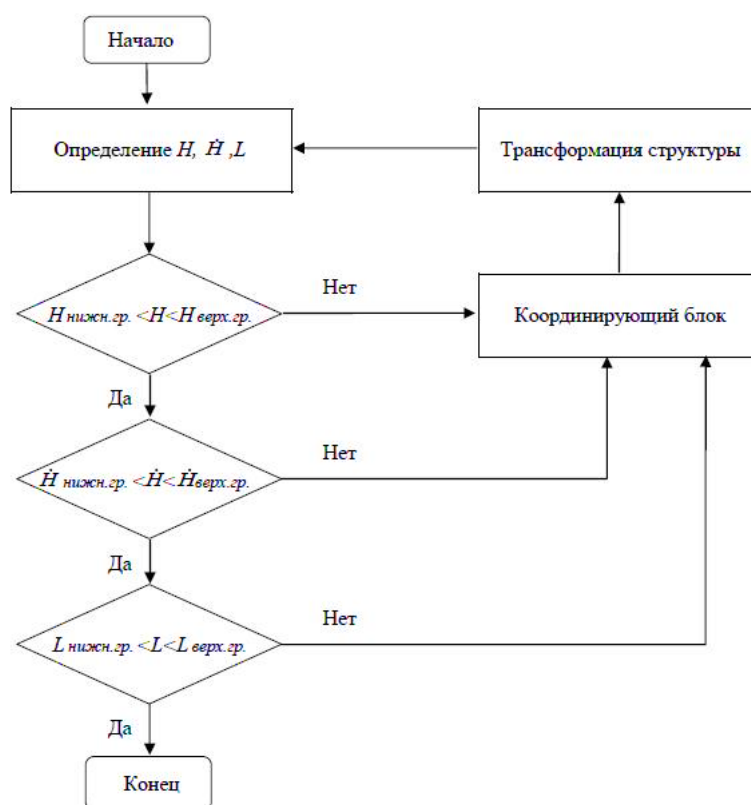


Рис. 2. Структурная схема алгоритма контроля текущего состояния системы

Практическая апробация разработанных алгоритмов

Будем рассматривать действующую магистерскую программу как некую когнитивную систему, СЭ которой являются дисциплины, изучаемые в рамках этой программы. Естественнo предположить, что каждая из дисциплин обладает своей вероятностной мерой эффективности. Будем полагать, что вероятностные связи между дисциплинами носят опосредованно субъективный характер, т.е. для каждого отдельного студента они «свои». Поэтому при контроле эффективности программы будем учитывать только вероятности эффективности отдельных СЭ (дисциплин). Исследуемая магистерская программа РТУ МИРЭА

«Метрологическое обеспечение измерительных процессов» по направлению подготовки 27.04.01 Стандартизация и метрология состоит из 17 СЭ.

Согласно алгоритму (рис. 1) будем полагать $P_{min}=0,7$; $P_{max}=0,9$; $N=17$; $\Delta I > 0$; $\Delta J > 0$. Следуя алгоритму, построим зависимости $\dot{H}$ (N, P) и найдем граничные значения $\Delta \dot{H}$ по координате $\dot{H}$. Используя фазовую диаграмму для $\Delta I > 0$ и $\Delta J > 0$ найдем граничные значения $\Delta \dot{H}$ по координате $\dot{H}$. После этого найдем граничные значения ΔL по координате L . В результате получим следующие граничные значения $H=14,1-16,8$; $\dot{H}=-185,7-264,5$; $L=0,08-0,23$.

Следующий этап исследования связан с определением значений вероятностей эффективности СЭ методом попарного сопоставления [2], определением соответствующих значений H , $\dot{H}$, L с последующим принятием решения о состоянии системы согласно алгоритму контроля текущего состояния системы (рис. 2).

Значения координат точки состояния системы (рис. 3): $H=16,3$; $\dot{H}=-248,7$; $H^*=18,4$ и $L=1-\frac{H}{H^*}=0,11$.

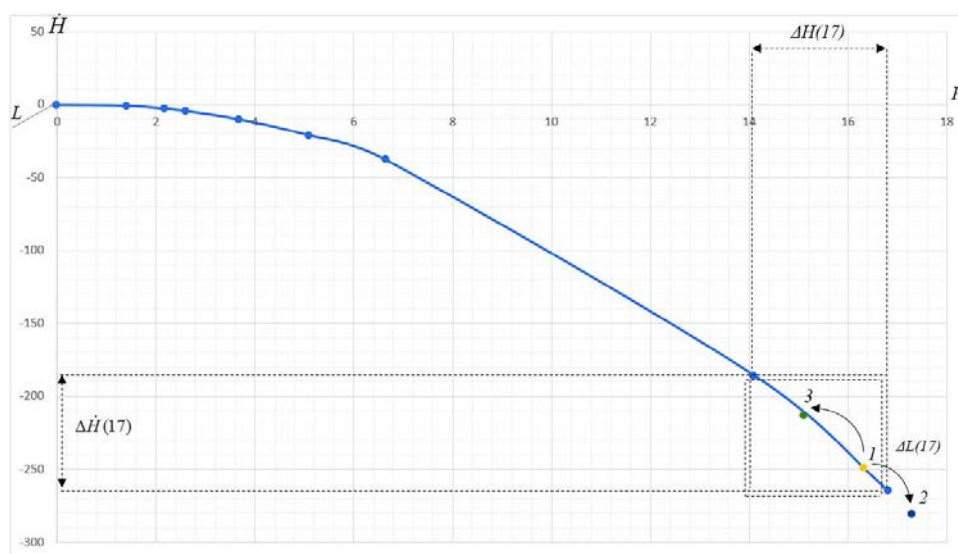


Рис. 3. Положение точек в фазовом пространстве

Согласно проведенным расчетам магистерская программа находится в установленной области неравновесной устойчивости, однако, близко к границе данной области. Это означает, что при незначительных флуктуациях вероятностных параметров этой программы, она может оказаться за пределами области неравновесной устойчивости, что подтверждает положение точки 2, полученной при снижении вероятностных показателей СЭ на величину погрешности. Для предотвращения такой ситуации исходные значения желательно увеличить, что подтверждает положение точки 3, полученное в результате увеличения вероятностей на величину погрешности.

Научно-производственное подразделение имеет структуру, включающую в себя ряд связанных между собой отделов (рис. 4).

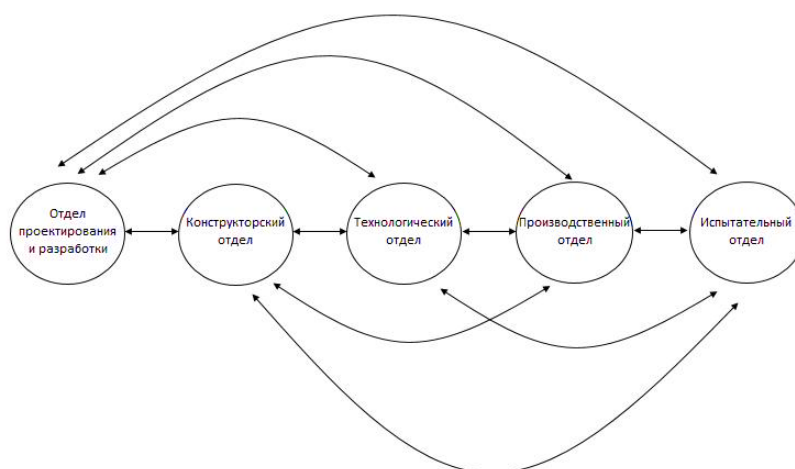


Рис. 4. Структурное построение научно-производственного подразделения

Оценка эффективности каждого отдела производилась по четырем показателям и носила экспертный характер. Результаты оценки представлены в таблице 1.

Таблица 1.
Экспертные показатели

	Уровень квалификации сотрудников	Уровень оснащенности приборами (МТБ)	Укомплектованность нормативно-технической	Математическо-программное обеспечение	P_s
Отдел проектирования и разработки	0,81	0,8	0,8	0,7	0,64
Конструкторский отдел	0,83	0,8	0,9	0,7	0,58
Технологический отдел	0,79	0,9	0,8	0,6	0,66
Производственный отдел	0,79	0,9	0,8	0,7	0,60
Испытательный отдел	0,85	0,8	0,9	0,6	0,63

Согласно проведенным расчетам научно-производственное подразделение находится в установленной области неравновесной устойчивости, однако, как и в предыдущем случае, близко к границе данной области (рис. 5).

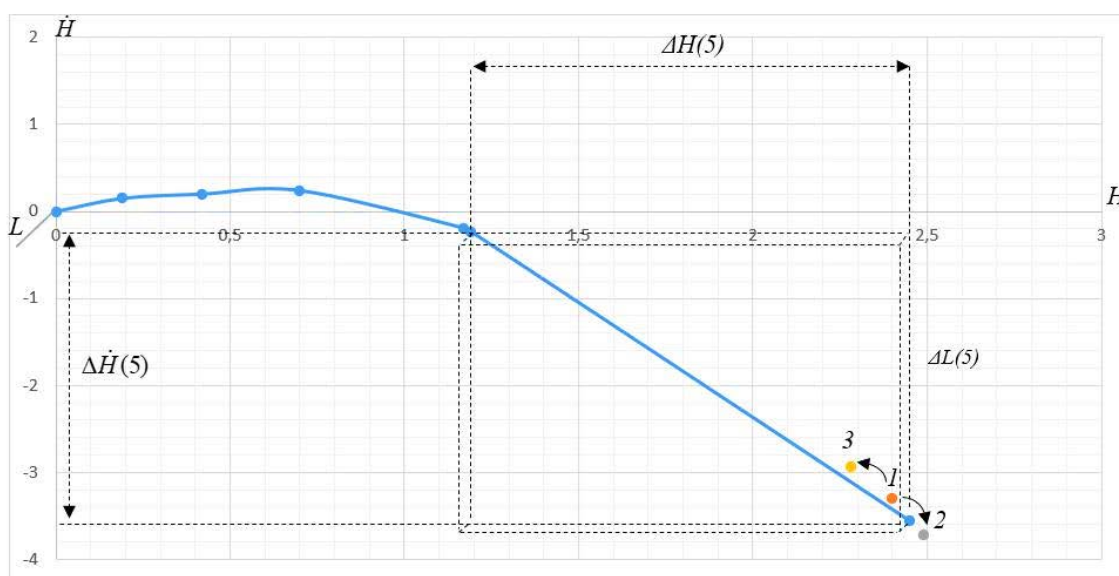


Рис. 5. Положение точек в фазовом пространстве

Выводы

Практическая апробация разработанных алгоритмов показала, что они могут быть использованы для решения целого ряда практических задач, связанных с контролем функционирования и прогнозирования состояний широкого класса неравновесных сложных технических систем, аппроксимируемых когнитивной моделью.

Список литературы

1. Анцыферов С.С., Фазилова К.Н., Русанов К.Е. Моделирование неравновесной устойчивости когнитивных систем // Моделирование неравновесных систем: Материалы XXII Всероссийского семинара, 4–6 октября 2019 г., Красноярск: Институт вычислительного моделирования Сибирского отделения Российской академии наук. 2019. С. 3–8.
2. Анцыферов С.С., Фазилова К.Н. Метод контроля функционирования когнитивных систем в режиме неравновесной устойчивости // Моделирование неравновесных систем: Материалы XXIII Всероссийского семинара, 4–6 октября 2020 г., Красноярск: Институт вычислительного моделирования Сибирского отделения Российской академии наук. 2020. С. 3–6.

ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ ИСКАЖЕНИЯ ФОРМ СТАТОРА И РОТОРА НА ПАРАМЕТРЫ РАБОТЫ ГИДРОГЕНЕРАТОРА

А.А. Ачитаев¹, Н.С. Савельева¹, Н.С. Наумкин¹, А.Г. Русина²

¹Сибирский федеральный университет,
Саяно-Шушенский филиал Сибирского федерального университета,
aachitaev@shf-sfu.ru

²Новосибирский государственный технический университет, факультет
Энергетики, каф. Электрических станций, *rusina@corp.nstu.ru*

Введение

Современное развитие крупного энергетического машиностроения невозможно без применения методов математического моделирования в целях прогнозирования изменения его режимных параметров в период его промышленной эксплуатации. Статья посвящена исследованию построения математической модели синхронного генератора гидроэлектростанции с применением метода конечных элементов в целях оценки возможных последствий неправильного монтажа или эксплуатации синхронного генератора и выявление различных его искажений формы геометрии воздушного зазора. В мировой и отечественной литературе также данная проблема получило внимание в ряде исследований различных форм деформации ротора синхронной машины гидроагрегата применяя различные подходы и методы [1-5]. Данная статья посвящена анализу режимных параметров генератора при деформации симметричного воздушного зазора синхронного гидрогенератора, возникающего в ходе его эксплуатации. Проведен анализ результатов при номинальной мощности и в режиме внезапного трехфазного короткого замыкания для вычисления основных и добавочных потерь с целью определения КПД и параметров схемы его замещения. Для проверки исходного варианта геометрии генератора была проведена верификация с целью определения адекватности численной модели с аналитическим расчётом в режиме внезапного короткого замыкания. Была аналитически рассчитана осциллограмма характеристики электромагнитного момента генератора в условии симметричного воздушного зазора в режиме внезапного трехфазного короткого замыкания и соотнесена с результатами численного моделирования в MatLab Simulink. Следует отметить, что существуют ряд нормативных документов, где описаны критерии допустимого искажения формы ротора, где воздушный зазор между статором и ротором в диаметрально противоположных точках не должен отличаться друг от друга более чем на $\pm 20 \%$ от среднего значения, равного их полусумме. В данной работе проведен расчет, охватывающий данный промежуток изменения

диаметра, а также проведен анализ, учитывающий изменение в диапазоне $\pm 35\%$ от величины воздушного зазора.

Результаты исследований показали, что изменение величины воздушного зазора до 10% внесет существенный вклад на величину индукции магнитного поля, что в десятки раз увеличивает величину основных потерь в сердечнике магнитопровода генератора. Также, наблюдается значительное снижение напряжения (от 25 до 50%) от номинального напряжения в режиме номинальной мощности, что требует увеличения тока в обмотке возбуждения, приводящее к увеличению омических потерь в обмотке ротора. Полевой расчет проводился средствами метода конечных элементов с использованием инструмента программного комплекса Ansys Maxwell, и верификация модели в условии симметричности и нормативного значения ширины воздушного зазора в программе комплексе MatLab Simulink.

Постановка задачи

В ходе эксплуатации генераторов синхронных электрических машин возникают условия изменения формы статора и ротора. В статье отражены исследования влияния на режимные параметры синхронного генератора различные виды искажений ротора синхронного генератора гидроэлектростанции. В настоящий момент существует множество методов анализа искажений воздушного зазора. Например, работа Топоркова Д. М. и его коллег охватывает разные подходы в оценке деформации воздушного зазора в том числе с применением численных методов моделирования с помощью уравнений Парка-Горева [2]. Зарубежные исследования в основном охватывают использование метода конечных элементов [3-7].

В данной работе качестве математического аппарата расчета режимов были применены формулы Горева-Парка и Штейнмеца для вычисления потерь в электротехнической стали [1].

Из анализа геометрии машины на основании рекомендации по проектированию машин переменного тока была разработана математическая модели синхронной машины (рисунок 1). С целью уточнения расчета количества витков был проведен аналитический расчет числа витков в обмотке возбуждения исходя из необходимого потока через полюс. Магнитное поле гидрогенератора, как и любой электрической машины, имеет пространственно-периодическое распределение с периодом, равным двойному полюсному делению. Поток, проходящий через один полюс [1]:

$$\Phi = \frac{U_1}{4,44k_{\phi}W_1f_1p} \quad (1)$$

где Φ - магнитный поток; U_1 – номинальное напряжение статора; k_{ϕ} – обмоточный коэффициент; W_1 - число витков; f_1 – частота сети, Гц; p – число пар

ПОЛЮСОВ.

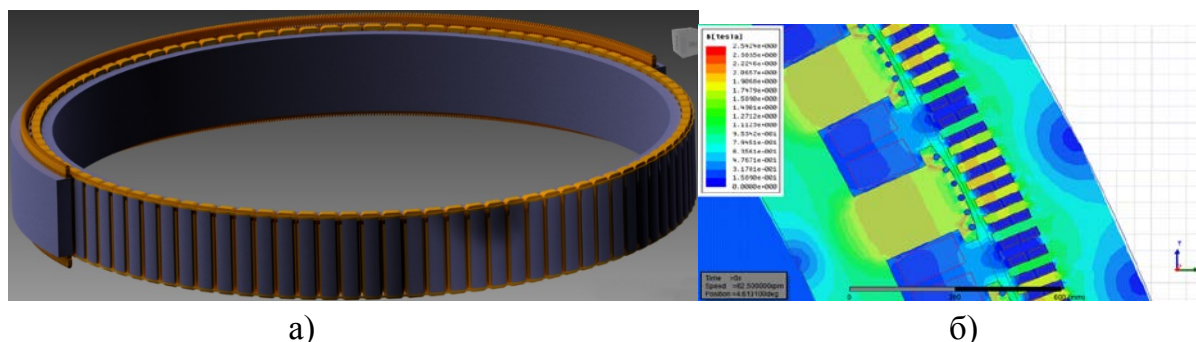


Рис. 1. Модель: а) исходной синхронной машины; б) График распределения магнитной напряженности в якоре синхронной машины в режиме номинальной мощности

Анализ результатов

Обмоточный коэффициент вычисляется по формуле [3]:

$$k_{об} = \frac{\sin\left(\frac{\pi}{2m}\nu\right)}{q \sin\left(\frac{\pi}{2mq}\nu\right)} \sin\left(\frac{\pi}{2}\beta\nu\right) \quad (2)$$

где ν номер гармоники ЭДС; q – число пазов на полюс и фазу; β – относительный шаг обмотки.

Расчет магнитного поля является основой для точного последующего расчета магнитной цепи, характеристик, параметров и потерь машины. С целью увеличения качества генерации электроэнергии была выбрана конфигурация отношения ширины башмака к ширине полюсного деления равного 0,7 в условии соотношения максимальной ширины воздушного зазора к минимальной в пределах одного башмака ротора, равного 1,5. Эта конфигурация на основании кривых Виземана позволит обеспечить коэффициент формы равного 1,07, что снизит высшие гармоники [2].

На рисунке 3 представлена характеристика тока возбуждения от выходного напряжения синхронного генератора.

В устройствах переменного тока, содержащих элементы с ферромагнитным сердечником, возникают потери энергии в сердечниках при периодическом изменении магнитного потока в них. Эти потери складываются из потерь на вихревые токи и на гистерезис.

Потери в электротехнической стали выражаются следующим уравнением [4]:

$$p_v = p_h + p_e + p_g, \quad (3)$$

где p_h – потери на гистерезис, p_e – потери на вихревые токи, p_g – добавочные потери.

Потери на гистерезис пропорциональны площади петли гистерезиса.

$$p_h = k_n \cdot f \cdot B_m^2 \quad (4)$$

где B_m – максимальная индукция магнитного поля в сердечнике, k_n – коэффициент, зависящий от материала, f – частота сети.

Потери на вихревые токи:

$$p_c = k_c \cdot (f \cdot B_m)^2, \quad (5)$$

где k_c – коэффициент, зависящий от сорта электротехнической стали.

Добавочные потери в стали:

$$p_s = k_s \cdot (f \cdot B_m)^{1.5}, \quad (6)$$

где k_s – коэффициент добавочных потерь.

На рисунке 2 представлены результаты расчета потерь в синхронном генераторе в зависимости от вида потерь. Как видно из осциллограммы основные потери составляют в медных обмотках.

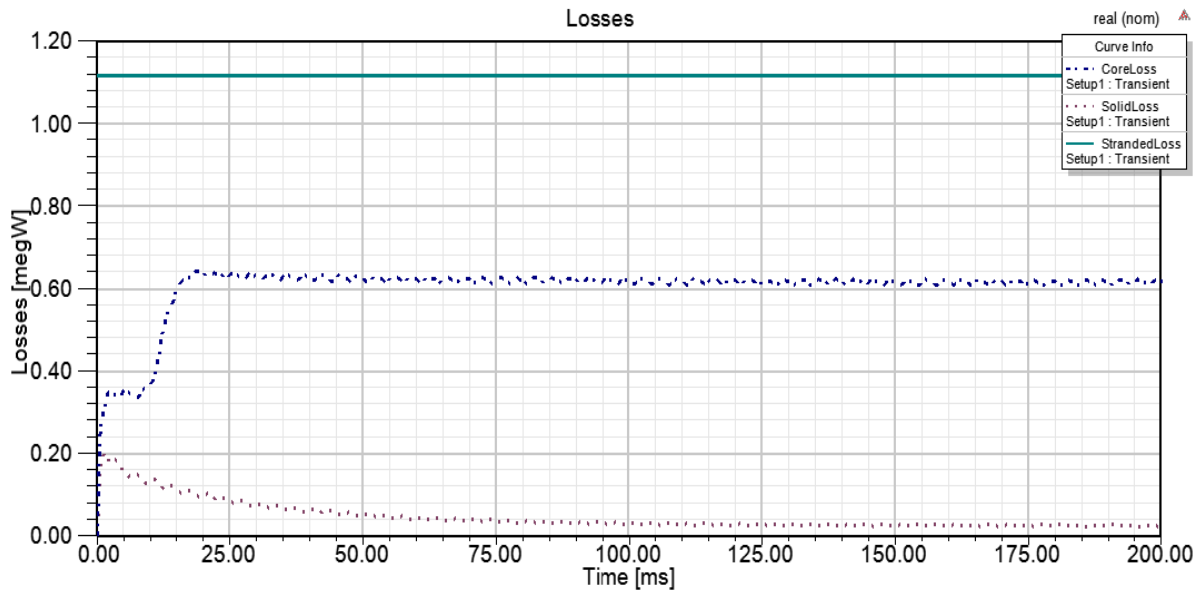


Рис. 2. Основные и добавочные потери в синхронном генераторе

Также, был проведен анализ переходных процессов при внезапном коротком замыкании с целью верификации исходной геометрии машины с аналитическим расчетом.

Электромагнитный момент описывается выражением [6-7]:

$$M_G = (L_q - L_d) i_d \cdot i_q + L_{md} \cdot i_{fd} \cdot i_q + L_{md} \cdot i_{kd} \cdot i_q - L_{mq} \cdot i_{kq} \cdot i_d. \quad (7)$$

С учётом того, что векторы состояния и входных переменных соответственно, могут быть выражены так:

$$\begin{cases} \mathbf{x} = [x_1(t) \ x_2(t) \ x_3(t) \ x_4(t) \ x_5(t)]^T \equiv [i_q \ i_d \ i_{fd} \ i_{kd} \ i_{kq}]^T, \\ \mathbf{u} = [u_d \ u_q \ u_{fd} \ 0 \ 0]^T \end{cases} \quad (8)$$

и матрицы [1, 2]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{M} = \begin{bmatrix} L_d & 0 & -L_{md} & -L_{md} & 0 \\ 0 & L_q & 0 & 0 & -L_{mq} \\ L_{md} & 0 & -L_{fd} & -L_{md} & 0 \\ L_{md} & 0 & -L_{md} & -L_{kd} & 0 \\ 0 & L_{mq} & 0 & 0 & -L_{kq} \end{bmatrix} \\ \mathbf{N}(\Omega_h) = \begin{bmatrix} -R_s & \Omega_h L_q & 0 & 0 & -\Omega_h L_{mq} \\ -\Omega_h L_d & -R_s & \Omega_h L_{md} & \Omega_h L_{kd} & 0 \\ 0 & 0 & R_{fd} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & R_{kd} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & R_{kq} \end{bmatrix} \end{array} \right. \quad (9)$$

и тогда модель синхронного генератора может быть представлена в виде:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{x}} = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{N}(\Omega_h) \cdot \mathbf{x} - \mathbf{u} \\ \mathbf{y} \equiv M_G = (L_q - L_d)x_1x_2 + L_{md}x_1x_3 + L_{md}x_1x_4 - L_{mq}x_2x_5 \end{cases} \quad (10)$$

Уравнение движения аналогично уравнению 8:

$$\frac{d\Omega_h}{dt} = \frac{1}{J} (M_{msc} - M_G - F\Omega_h), \quad (11)$$

где Ω_h , M_{msc} и J – означают те же самые величины, что и ранее; F – постоянная сила трения.

На рисунке 3 изображена математическая модель, а на рисунке 4 представлены результаты зависимостей электромагнитного момента от времени в режиме внезапного трехфазного короткого замыкания на выводе синхронного генератора. По виду характеристики наблюдается апериодическая составляющая, имеющая максимум, которая имеет четырехкратное значение по сравнению с номинальным моментом. Для проведения этапа верификации математической модели, составленная методом конечных элементов, была разработана численная модель синхронной машины в Matlab Simulink. Как показывают результаты на рисунке 4, наблюдается соответствие вычислений численного моделирования с расчетом с помощью метода конечных элементов.

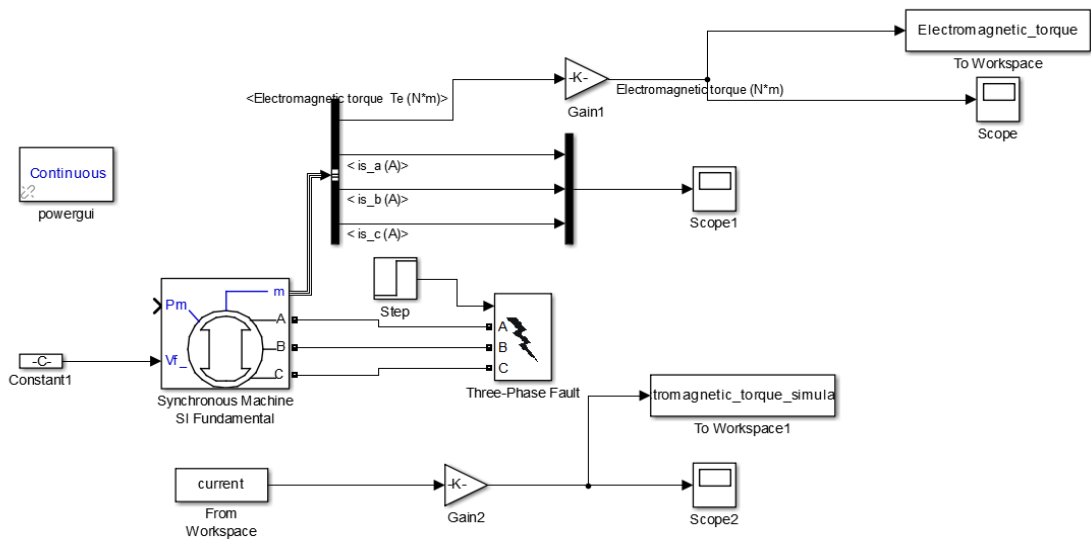


Рис. 3. Аналитическая модель синхронной машины в режиме внезапного короткого замыкания

Моделирование синхронного генератора выполняется при тех же упрощающих допущениях, как и в случае синхронного генератора с постоянными магнитами [6].

Модель основана на классическом представлении генератора в виде синхронной машины, имеющей три статорных обмотки, одну обмотку возбуждения и две демпфирующих обмотки [3, с. 198], описываемой при помощи следующих переменных и параметров: i_d, i_q – токи по осям в координатах $d - q$; u_d, u_q – напряжения по осям в координатах $d - q$; i_{fd}, u_{fd} – ток и напряжение обмотки возбуждения соответственно; i_{kd}, i_{kq} – демпфирующие токи по осям $d - q$; R_s – активное сопротивление обмотки статора; R_{fd} – активное сопротивление обмотки возбуждения; R_{kd}, R_{kq} – активные сопротивления демпферной обмотки; L_d, L_q – индуктивности обмоток статора по осям $d - q$; L_{fd} – индуктивность обмотки ротора; L_{kd}, L_{kq} – индуктивности демпферных обмоток; L_{md}, L_{mq} – индуктивности намагничивания по осям $d - q$.

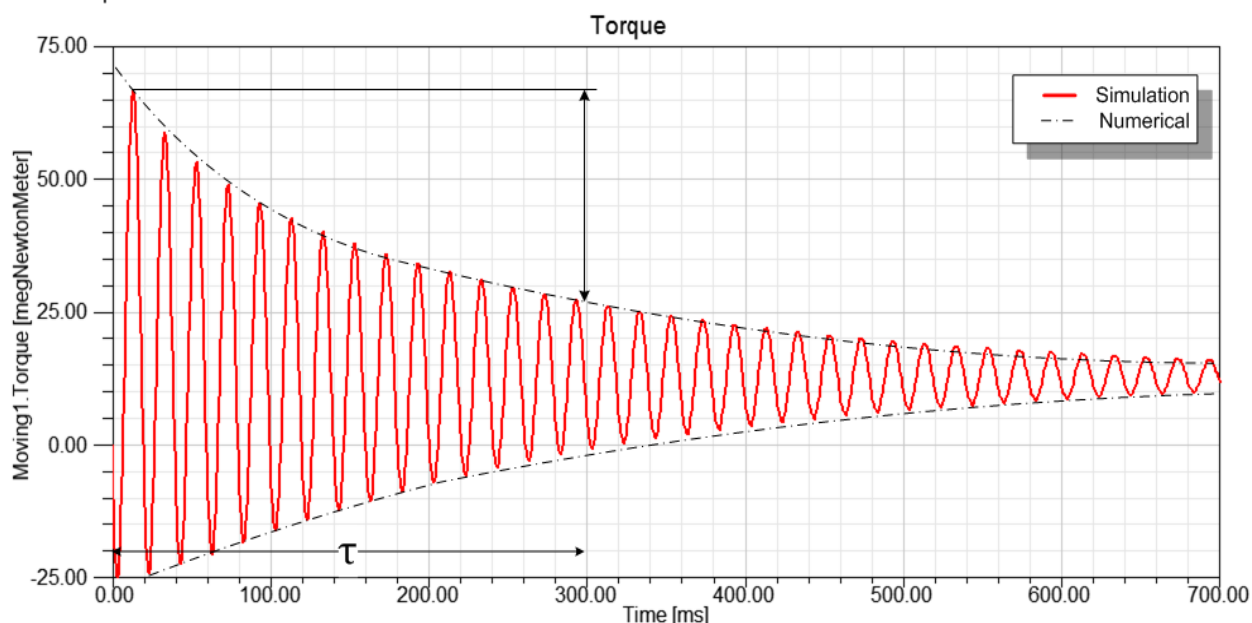
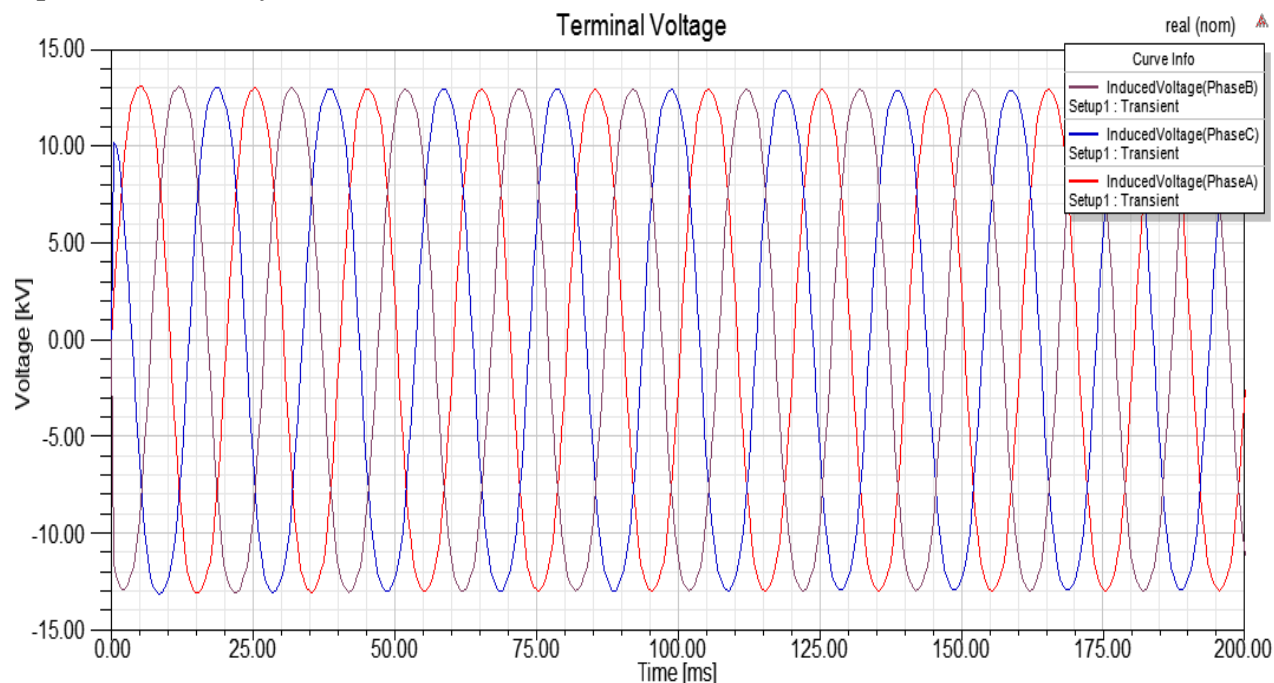


Рис. 4. Расчет переходного электромагнитного момента в режиме внезапного короткого замыкания при симметричной геометрии

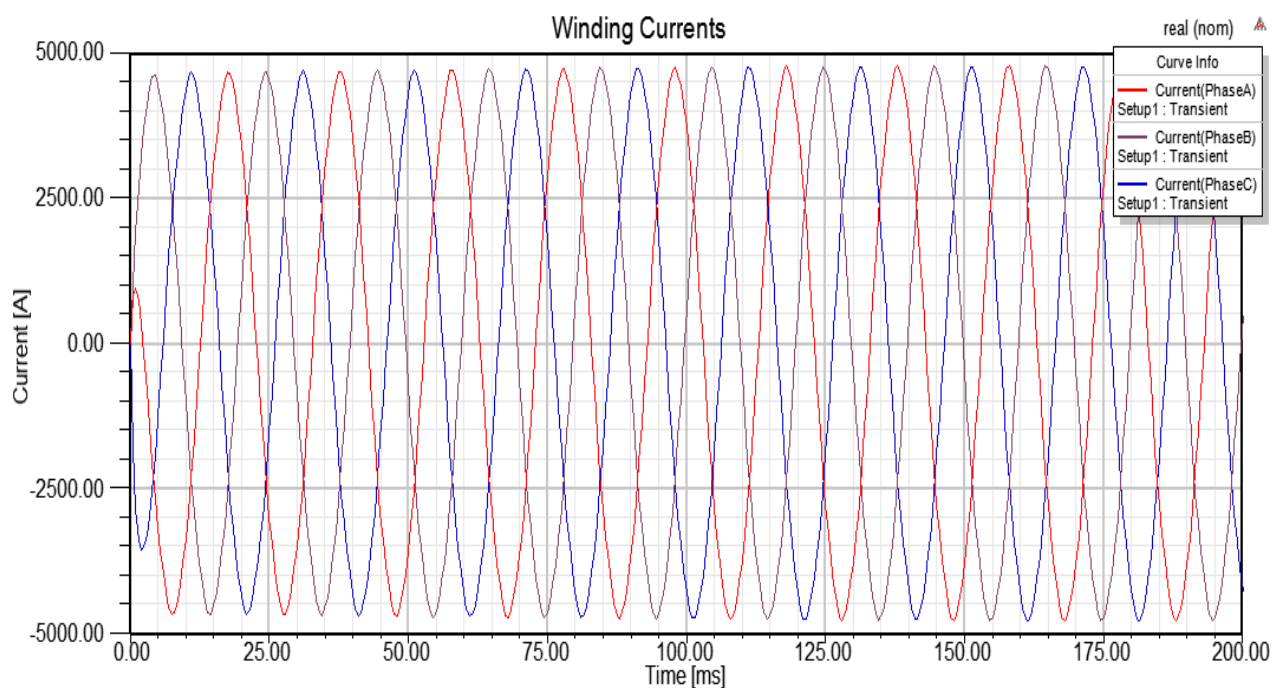
На рисунке 5 представлены результаты исследований математической модели синхронного генератора в виде осциллограмм тока и напряжения. Отметим, что в качестве исходных результатов были использованы результаты режима холостого хода.

Итогом исследования служит анализ сравнения изменения режимных параметров в зависимости от искажения формы ротора и размера воздушного зазора. В таблице 1 представлены режимные параметры воздушного зазора, посчитанной методом конечных элементов. В таблице 2 представлены режимные

параметры электрической сети, которая оказывает влияние изменение воздушного зазора. Результаты, полученные с помощью метода конечных элементов позволяют спрогнозировать соответствующее изменение режимных параметров синхронного генератора и дать соответствующие рекомендации в нормативные документы.



a)



б)

Рис. 5. Графики: а) напряжения на выходе синхронного генератора; б) тока на выходе синхронного генератора в режиме номинальной мощности

Таблица 1.

Режим номинальной мощности синхронного генератора

№	Изменение воздушного зазора между ротором и статором, %	Максимальная индукция магнитного поля в воздушном зазоре, Тл	Минимальная индукция магнитного поля в воздушном зазоре, Тл	Отношение номинального напряжения к напряжению на выходах генератора	Отношение текущего тока к номинальному току	КПД, %
1	+20	0,797	0,76	4	1,89	99,1
2	+35	0,847	0,65	4,60	2,03	99,16
3	-10	0,885	0,713	3,94	1,93	97,23
4	-20	0,741	0,101	3,68	1,87	95,10
5	-35	0,741	0,101	3,73	1,93	91,12

Таблица 2.

Режим внезапного короткого замыкания синхронного генератора

№	Деформация ротора по отношению к статору, %	Отношение максимального вращающего момента к номинальному, $M_{\max}/M_{\text{ном}}$	Отношение максимального тока к установившемуся $I_{\max.\text{aper}}/I_{\max}$	Отношение номинального напряжения к напряжению на выходах генератора
1	+20	5,5	2,5	1,73
2	+35	5,28	2,5	1,92
3	-10	5,78	2,37	1,86
4	-20	5,89	2,33	1,86
5	-35	5,56	2,33	1,86

Вывод

В ходе работы были проведены ряд исследований, которые показывают, как изменение величины зазора воздушного зазора оказывает влияние на режимные параметры генератора. Результаты, полученные в исследовании, отражают возможность получения режимных параметров при возможных изменениях геометрии воздушного зазора. Безусловно, развитие методов конечных элементов с учетом динамики исследуемого объекта позволяют получить тенденции изменения режимов гидрогенератора, как одного из самых дорогостоящих элементов ГЭС. На основании вышеперечисленных формул была проделана работа и сделана аналитическая верификация электромагнитного момента в режиме внезапного короткого замыкания (ВКЗ) при симметричном

воздушном зазоре.

Список литературы

1. Удалов С. Н. Моделирование ветроэнергетических установок и управление ими на основе нечеткой логики: монография / С. Н. Удалов, В. З. Манусов. - Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2013. - 200 с - (Монографии НГТУ).
2. Electrical asymmetry level influence on quality attributes of an induction motor / E. O. Lavrenov, Z. S. Temlyakova, M. E. Vilberger [et al.] // Journal of Physics: Conference Series : 2020 International Conference on Information Technology in Business and Industry, ITBI 2020, Novosibirsk, 06–08 апреля 2020 года. – BRISTOL, ENGLAND, 2020. – P. 012118.
3. D. Fallows, S. Nuzzo and M. Galea, "Analytical Modelling of Harmonics in an Exciterless Synchronous Generator," *2021 IEEE Workshop on Electrical Machines Design, Control and Diagnosis (WEMDCD)*, 2021, pp. 28-33, doi: 10.1109/WEMDCD51469.2021.9425658.
4. K. Takeuchi, M. Matsushita, H. Makino, Y. Tsuboi and N. Amemiya, "A Novel Modeling Method for No-Load Saturation Characteristics of Synchronous Machines Using Finite Element Analysis," in *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 57, no. 2, pp. 1-5, Feb. 2021, Art no. 7400605, doi: 10.1109/TMAG.2020.3010859.
5. K. Takeuchi, M. Matsushita, H. Makino, Y. Tsuboi and N. Amemiya, "Finite-Element Analysis for Magnetic Flux in End Region of Synchronous Machine Using End-Winding Model," in *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 57, no. 2, pp. 1-6, Feb. 2021, Art no. 7400506, doi: 10.1109/TMAG.2020.3014789.
6. H. Ehya, A. Nysveen, I. L. Groth and B. A. Mork, "Detailed Magnetic Field Monitoring of Short Circuit Defects of Excitation Winding in Hydro-generator," *2020 International Conference on Electrical Machines (ICEM)*, 2020, pp. 2603-2609, doi: 10.1109/ICEM49940.2020.9270942.
7. Bakhteev K. R., Fedotov A. I., Misbakhov R. S. Simulation of power supply systems with external faults and methods for increase of residual voltage at terminals of power receivers // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. – IOP Publishing, 2020. – vol. 860. – №. 1. – p. 012007.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ НАПРЯЖЕНИЯ В n - p ПЕРЕХОДЕ В ИМПУЛЬСНОМ РЕЖИМЕ

Н.М. Богатов, В.С. Володин, Л.Р. Григорьян, А.В. Кленевский, М.С. Коваленко
Кубанский государственный университет, bogatov@phys.kubsu.ru

Введение

Время переключения полупроводниковых приборов в импульсном режиме определяется рекомбинационными процессами. В кремнии рекомбинация неравновесных носителей заряда происходит преимущественно через примесные центры. Для измерения времени жизни неравновесных носителей заряда с учетом влияния поверхностной рекомбинации используются методы измерения спада фотопроводимости [1, 2]. Бесконтактные измерения времени жизни неосновных носителей заряда с помощью регистрируемой микроволновым излучением фотопроводимости используются для контроля результатов технологических воздействий [3]. Влияние структурных дефектов на время жизни неосновных носителей заряда в двухстороннем солнечном элементе из поликристаллического кремния исследовалось с помощью импульсного освещения [4].

Чтобы исключить временную зависимость фототока и фотопроводимости, использующуюся в методиках [1 – 4], в работе [5] измерялось изменение напряжения в импульсном режиме в неосвещенных кремниевых n^+ - p - p^+ структурах, облученных низкоэнергетическими протонами. Измерения проводились с помощью биполярных прямоугольных импульсов напряжения с постоянной амплитудой $U_m = 10$ mV. Условия измерений [5] позволили сделать вывод, что значение времени переключения определяется эффективным временем жизни в области пространственного заряда (ОПЗ) n^+ - p перехода исследуемых структур.

Цель работы – анализ транспорта носителей заряда в полупроводниковой структуре с n^+ - p переходом в условиях импульсного изменения напряжения с малой амплитудой на контактах.

Анализ транспорта носителей заряда

Фундаментальная система дифференциальных уравнений (ФСДУ) транспорта носителей заряда в полупроводниках с гомопереходами предложена Шокли [6] и обобщена для сложных полупроводниковых структур в работах [7, 8]:

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

В (1) n и p – концентрации электронов и дырок, соответственно, N_c – эффективная плотность электронных состояний в окрестности дна зоны проводимости, E_c – положение дна зоны проводимости, q – элементарный заряд, φ – потенциал внутреннего электрического поля, N_v – эффективная плотность электронных состояний в окрестности вершины валентной зоны, E_v – положение вершины валентной зоны, $\vec{j}_n$ – плотность потока электронов, μ_n – подвижность электронов, D_n – коэффициент диффузии электронов, $\vec{j}_p$ – плотность потока дырок, μ_p – подвижность дырок, D_p – коэффициент диффузии дырок, G – скорость объемной генерации, R – скорость объемной рекомбинации электронно-дырочных пар, N_D^+ – концентрация ионизованных доноров, N_A^- – концентрация ионизованных акцепторов, ε – диэлектрическая проницаемость, ε_0 – диэлектрическая постоянная.

Условие малости амплитуды напряжения на контактах означает, что

$$qU_m / kT < 1, \quad (2)$$

где k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура. В условиях измерения работы [5] неравенство (2) выполняется, так что реализуется режим низкой инжекции носителей заряда в эмиттере n^+ типа проводимости и базе p типа проводимости, кроме того световая генерация электронов и дырок отсутствует $G = 0$. В этом случае ФСДУ (1) упрощается так, что решение для концентрации неравновесных электронов и дырок можно искать в виде $n = n_0 + \delta n$, $p = p_0 + \delta p$, где равновесные концентрации электронов n_0 и дырок p_0 являются решением системы (1) при $\vec{j}_n = 0$, $\vec{j}_p = 0$,

$$\delta n(x, t) = \sum_i \left[A_{ni}(x) - B_{ni}(x) \cdot \exp\left(-\frac{t-t_0}{\tau_i}\right) \right], \text{ при } t_0 \leq t \leq t_m, \quad (3)$$

$$\delta p(x, t) = \sum_i \left[A_{pi}(x) - B_{pi}(x) \cdot \exp\left(-\frac{t-t_0}{\tau_i}\right) \right], \text{ при } t_0 \leq t \leq t_m, \quad (4)$$

$t_m - t_0 = (2f)^{-1}$, f – частота биполярных импульсов. Функции $A_{ni}(x)$, $B_{ni}(x)$, $A_{pi}(x)$,

$B_{pi}(x)$ найдем, решая методом разделения переменных полученные упрощенные уравнения в квазинейтральных p , n^+ областях и ОПЗ. Эти решения имеют громоздкий вид, поэтому не включены в текст статьи. Индекс суммирования i нумерует различные процессы релаксации концентрации носителей заряда к стационарным значениям.

Процедура измерений с длительностью биполярных импульсов напряжения $(2f)^{-1}$ и временем дискретизации измеряемого сигнала Δt выделяет диапазон значений параметров релаксации: $\tau_j \in (2\Delta t, (4f)^{-1})$, то есть выполняет фильтрацию процессов релаксации. Основной вклад в падение напряжения U на n^+-p-p^+ структуре дает ОПЗ [9]. В результате измерений, использующих импульсное напряжение при условии (2), реализуются процессы релаксации напряжения с параметрами эффективного временем жизни τ_j , соответствующими процессам в ОПЗ:

$$U(t) = \sum_j \left[D_j \cdot \exp\left(-\frac{t-t_0}{\tau_j}\right) - C_j \right], \text{ при } t_0 \leq t \leq t_m. \quad (5)$$

Этот вывод обосновывает экспериментальные результаты работы [5]. При моделировании транспорта носителей заряда в полупроводниковой структуре с n^+-p переходом в условиях импульсного изменения напряжения в формулах (3, 4) достаточно учитывать процессы релаксации с параметрами $\tau_j \in (2\Delta t, (4f)^{-1})$.

Результаты и их обсуждение

На рисунке 1, рисунке 2 показаны рассчитанные зависимости падения напряжения в ОПЗ от времени для различных значений времени релаксации τ при биполярном изменении напряжения с амплитудой $U_m = 10$ мВ на контактах n^+-p-p^+ структуры. Частота импульсов $f = 200$ kHz для рисунка 1, $f = 1$ MHz для рисунка 2.

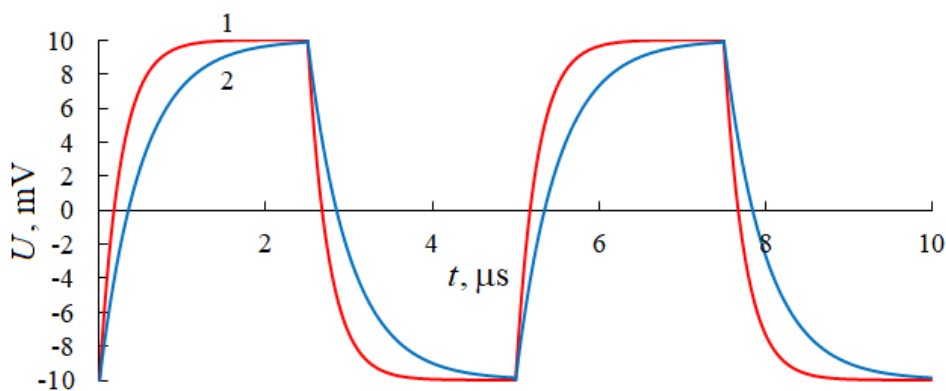


Рис.1. Зависимость падения напряжения в ОПЗ от времени при $f = 200$ kHz: 1 – $\tau = 0,25$ μs, 2 – $\tau = 0,5$ μs.

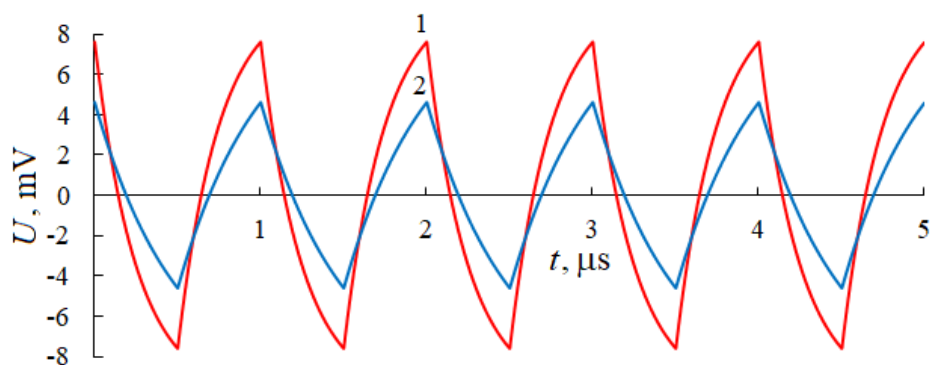


Рис.2. Зависимость падения напряжения в ОПЗ от времени при $f = 1 \text{ MHz}$: 1 – $\tau = 0,25 \text{ μs}$, 2 – $\tau = 0,5 \text{ μs}$.

Функция отклика $U(t)$ успевает выйти на стационарные значения $\pm 10 \text{ mV}$ за время длительности каждого импульса $T_{1/2} = 2,5 \text{ μs}$ при $\tau = 0,25 \text{ μs}$ и $\tau = 0,5 \text{ μs}$ (рисунок 1). Уменьшение времени длительности импульса изменяет характер функции отклика. Функция отклика не достигает стационарных значений при $T_{1/2} = 0,5 \text{ μs}$ и приобретает пилообразный вид при $\tau = 0,25 \text{ μs}$ и $\tau = 0,5 \text{ μs}$ (рисунок 2). Результаты этих расчетов полностью соответствуют экспериментальным данным работы [5].

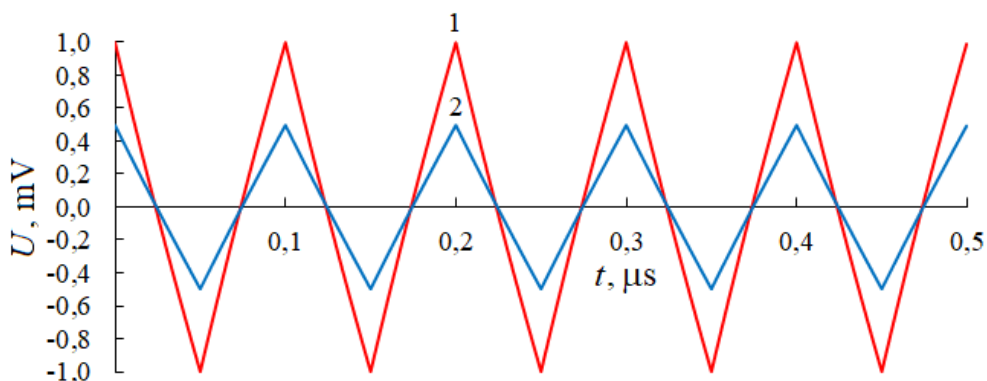


Рис.3. Зависимость падения напряжения в ОПЗ от времени при $f = 10 \text{ MHz}$: 1 – $\tau = 0,25 \text{ μs}$, 2 – $\tau = 0,5 \text{ μs}$.

Увеличение частоты импульсов изменяет форму импульсной характеристики. При частоте 10 MHz и тех же параметрах $\tau = 0,25 \text{ μs}$ и $\tau = 0,5 \text{ μs}$ импульсы имеют треугольную форму меньшей амплитуды с одинаковой длительностью переднего и заднего фронтов (рисунок 3).

Уменьшение значений τ при $f = 10 \text{ MHz}$ восстанавливает форму импульсов: уменьшение в 10 раз дает импульсные характеристики, показанные на рисунке 4, а в 50 раз – импульсные характеристики, показанные на рисунке 5.

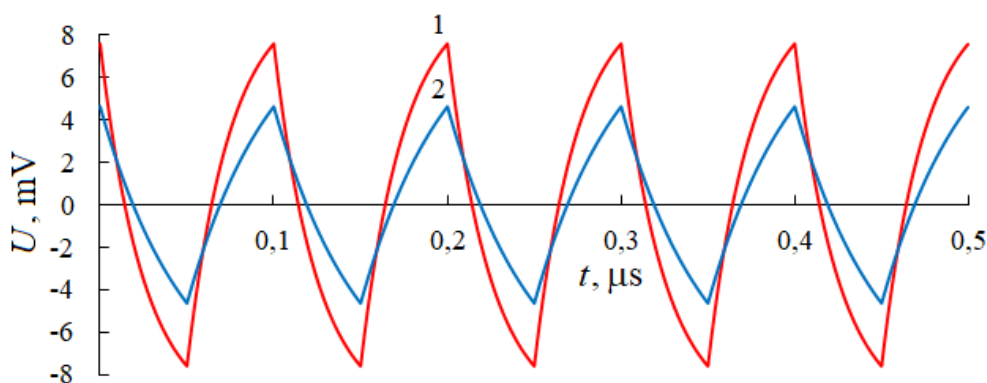


Рис.4. Зависимость падения напряжения в ОПЗ от времени при $f = 10 \text{ MHz}$: 1 – $\tau = 0,025 \mu\text{s}$, 2 – $\tau = 0,05 \mu\text{s}$.

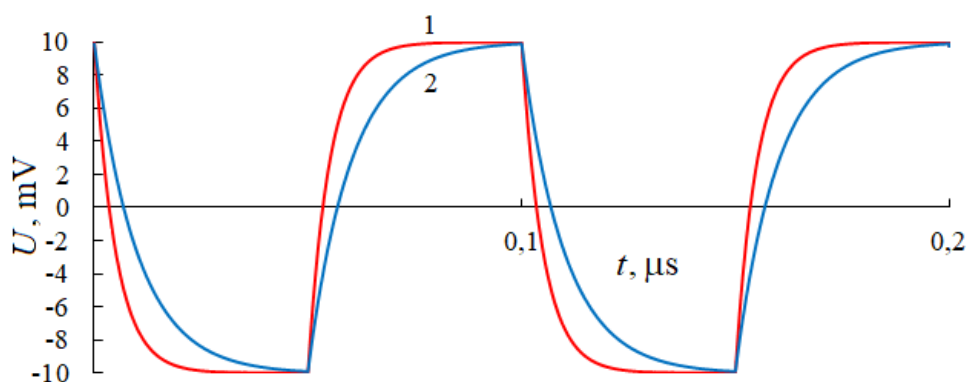


Рис.5. Зависимость падения напряжения в ОПЗ от времени при $f = 10 \text{ MHz}$: 1 – $\tau = 0,005 \mu\text{s}$, 2 – $\tau = 0,01 \mu\text{s}$.

Заключение

Технологии протонного облучения позволяют контролируемо модифицировать структуру полупроводниковых приборов, вводить центры рекомбинации, уменьшать эффективное время жизни носителей заряда в скрытых слоях, создавать слои с водород содержащими центрами [10]. В результате имплантации ионов водорода образуется неоднородный нарушенный слой, характеристики которого требуют изучения [11, 12]. Изменение времени жизни носителей заряда в локальном объеме полупроводниковых структур, облученных протонами, позволяет улучшить совокупность статических и частотных характеристик приборов [13].

Представленные результаты моделирования переходных характеристик полупроводниковых структур обосновывают методику определения эффективного времени жизни электронов, дырок в ОПЗ n^+p перехода, демонстрируют влияние эффективного времени жизни на форму импульсных и частотных характеристик.

Список литературы

1. Anfimov I.M. On the Problem of Determining the Bulk Lifetime by Photoconductivity Decay on the Unpassivated Samples of Monocrystalline Silicon / I.M. Anfimov, S.P. Kobeleva, A.V. Pylnev, I.V. Schemerov, D. S. Egorov, S.Yu. Yurchuk // Russian Microelectronics. — 2017. — V. 46. — no 8. — P. 585 – 590.
2. Koshelev O.G. Separate determination of the photoelectric parameters of $n^+p(n)-p^+$ silicon structure base region by noncontact method based on measurements of quantum efficiency relationships at two wavelengths / O.G. Koshelev, N.G. Vasiljev // Modern Electronic Materials. — 2017. — V. 3. — no 3. — P. 127 – 130.
3. Bscheid C. Minority Carrier Lifetime Measurements for Contactless Oxidation Process Characterization and Furnace Profiling / C. Bscheid, C.R. Engst, I. Eisele, C. Kutter // Materials. — 2019. — V. 12. — no 1. — P. 1 – 13.
4. Sam R. 3D determination of the minority carrier lifetime and the p-n junction recombination velocity of a polycrystalline silicon solar cell / R. Sam, B. Zouma, F. Zougmore, Z. Koalaga, M. Zoungrana, I. Zerbo // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. — 2012. — V. 29 no 012018. — P. 1 – 8.
5. Богатов Н.М. Импульсные характеристики кремниевых фотоэлектрических преобразователей, облученных низкоэнергетическими протонами / Н.М. Богатов, Н.М. Григорьян Н.М., А.И. Коваленко, М.С. Коваленко, Л.С. Лунин // Письма в ЖТФ. — 2021. — Т. 47. — В. 7. — С. 10 – 12.
6. Shockley W. The theory of p-n junctions in semiconductors and p-n junction transistors / W. Shockley // Bell Syst. Tech. J. — 1949. — V. 28. — no 7. — P. 435 – 439.
7. Emtage P.M. Electrical conductivity and the photovoltaic effect in semiconductors with position - dependent band gaps / P.M. Emtage // J. Appl. Phys. — 1962. — V. 33. — no 6. — P. 1950 – 1960.
8. Marfaing Y. Photovoltaic effects in graded bandgap structures / Y. Marfaing, J. Chvallier // IEEE Trans. Electron. Devices. — 1971. — V. ED-18. — P. 465.
9. Sze S. M. Physics of Semiconductor Devices / S. M. Sze. — Wiley-Interscience, New York, USA, 1969. — 814 p.
10. Gubarev V.N. Applying Proton Irradiation for Performance Improvement of Power Semiconductors / V.N. Gubarev, A.Yu. Semenov, A.M. Surma, V.S. Stolbunov // Power Electronics Europe. — 2011. — I. 3. — P. 35 – 38.
11. Asadchikov V.E. On the relationship of proton irradiation and heat treatment of monocrystalline silicon with its structure / V.E. Asadchikov, I.G. Dyachkova, D.A. Zolotov, Yu.S. Krivonosov, V.T. Bublik, A.I. Shikhov // Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Materialy Elektronnoi Tekhniki = Materials of Electronics Engineering. — 2019. — V. 22. — no 1. — P. 18 – 26.
12. Bogatov N.M. Influence of Radiation Defects Induced by Low-Energy Protons at a Temperature of 83 K on the Characteristics of Silicon Photoelectric Structures / N.M. Bogatov, Grigorian L.R., Kovalenko A.I., Kovalenko M.S., Kolokolov F.A., Lunin L.S. // Semiconductors. — 2020. — V. 54. — no 2. — P. 196 – 200.
13. Kozlov V.A. Doping of Semiconductors Using Radiation Defects Produced by Irradiation with Protons and Alpha Particles / V.A. Kozlov, V.V. Kozlovski // Semiconductors. — 2001. — V. 35. — no 7. — P.735 – 761.

ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЁТ РАЗРЫВА МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ СВЯЗЕЙ ПОД ДЕЙСТВИЕМ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ КАВИТАЦИИ¹

Р.Н.Голых^{1,2}, В.Н.Хмелёв^{1,2}, И.А.Маняхин¹, Д.А.Ильченко¹, В.Д.Минаков¹,
В.А. Шакура², Г.А. Боброва³

¹Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ им. И.И. Ползунова,
romangl90@gmail.com

²ООО «Центр ультразвуковых технологий АлтГТУ», *romangl90@gmail.com*

³ЗАО «Эвалар», *romangl90@gmail.com*

На сегодняшний день задача управления свойствами полимеров, в основном, решается путём введения дополнительных химических добавок – отвердителей, пластификаторов, дисперсных наполнителей, УФ-стабилизаторов и т. д. [1–3] Однако дополнительные химические добавки, в первую очередь, являются расходным материалом, что отрицательно сказывается на себестоимости конечного продукта, являются агрессивными средами, которые делают получаемый целевой материал вредным для человека и окружающей среды, а также приводящим к коррозии металлических деталей и узлов технической системы. Причём химические добавки, зачастую, делают вредным как производство, так и эксплуатацию материала. Другой недостаток химических добавок состоит в том, они могут улучшать одни целевые свойства и ухудшать другие свойства. Например, добавка 2-(2'-гидрокси-3',5'-дитретамилфенил) бензотриазола (УФ-стабилизатора) в жидкое эпоксидное связующее может увеличивать стойкость композиционного материала к УФ-излучению, но при этом снижать механическую прочность материала на 15%.

Многообещающее направление исследований, которое потенциально может служить базой для создания эффективной технологии управления свойствами полимеров – воздействие механическими колебательными возмущениями на высокомолекулярную среду. В реальных неотверждённых полимерах механические колебательные возмущения, как правило, представляют собой кавитационно-акустическое воздействие, т.е. линейные синусоидальные колебания, создаваемые в среде, инициируют вторичное явление – кавитационные пузырьки. Пузырьки при кавитационно-акустическом воздействии периодически расширяются и схлопываются, формируя микроударные волны. Таким образом, механические колебательные возмущения имеют две составляющие – линейная синусоидальная и нелинейная ударно-волновая.

Механические колебательные возмущения позволят управлять свойствами полимеров в связи с тем, что энергии таких возмущений оказывается достаточно для разрушения или образования новых водородных и углеродных связей в полимерах, и варьированием параметров и формы возмущений можно плавно изменять свойства материалов и тем самым получать материалы с определёнными заранее заданными свойствами [4–10]. Например,

¹ Исследование выполнено при частичной финансовой поддержке гранта Президента РФ в рамках научного проекта № МК-5387.2021.1.1.

экспериментально доказано, что кавитационно-акустическое воздействие на эпоксидное связующее с наполнителем повышает прочность композиционного материала до 70%, что может с большим запасом компенсировать снижение прочности, обусловленное добавлением УФ-стабилизатора. Всё это достигается за счёт повышения частоты взаимодействий макромолекул веществ между собой в кавитационно-акустическом поле, разрушения существующих химических связей и формирования новых связей и т. д. Другая особенность механических колебательных возмущений – они способны управлять отдельными свойствами целевого материала (можно плавно изменять свойства путём подбора режимов и продолжительности воздействия) без применения расходных материалов. Например, такое воздействие позволяет эффективно снижать вязкость неотверждённых полимеров (до 5 раз и более за время 1...2 мин) без применения химических добавок и нерастворимых в полимере жидкостей (например, без добавления воды в нефть для получения водонефтяной эмульсии, которая менее вязкая, чем исходная нефть). При этом для отдельных видов полимеров (например, фенолформальдегидной смолы) наблюдается отложенный эффект – вязкость повышается более чем на 20% относительно исходного неотверждённого полимера после снятия воздействия.

Для определения степени изменения свойств полимеров в зависимости от параметров кавитационно-акустического воздействия необходимо создание численной модели, которая позволит выявить, каким образом происходит реструктуризация молекулярных связей в среде, количество возникших актов разрушения связей и конечные свойства материала.

Как известно, полимеры в неотверждённом состоянии представляют собой жидкие среды, состоящие из молекулярных цепочек мономеров, соединённых водородными связями. Кавитация приводит к разрушению молекулярных цепочек. При этом фракционный состав молекулярных цепочек по концентрации молекул с разными количествами мономерных звеньев определяет реологические свойства материала, от которых, в конечном итоге, зависит прочность изделия на базе полимера с добавленным отвердителем, пропитывающая способность и однородность структуры материала.

Проведенный теоретический анализ воздействия кавитации на структуру макромолекул полимера основывался на следующих допущениях:

1. Все мономерные звенья макромолекул имеют одинаковую массу, равную m_0 .

2. Каждая молекулярная цепочка представляет собой линейную структуру (рисунок 1), характеризующуюся числом мономерных звеньев N , единичным вектором ориентации $\mathbf{n}$ ($|\mathbf{n}|=1$), скоростью центра масс $\mathbf{v}$ и собственным моментом импульса $\mathbf{l}$ (моментом импульса макромолекулы в системе отсчёта её центра масс).

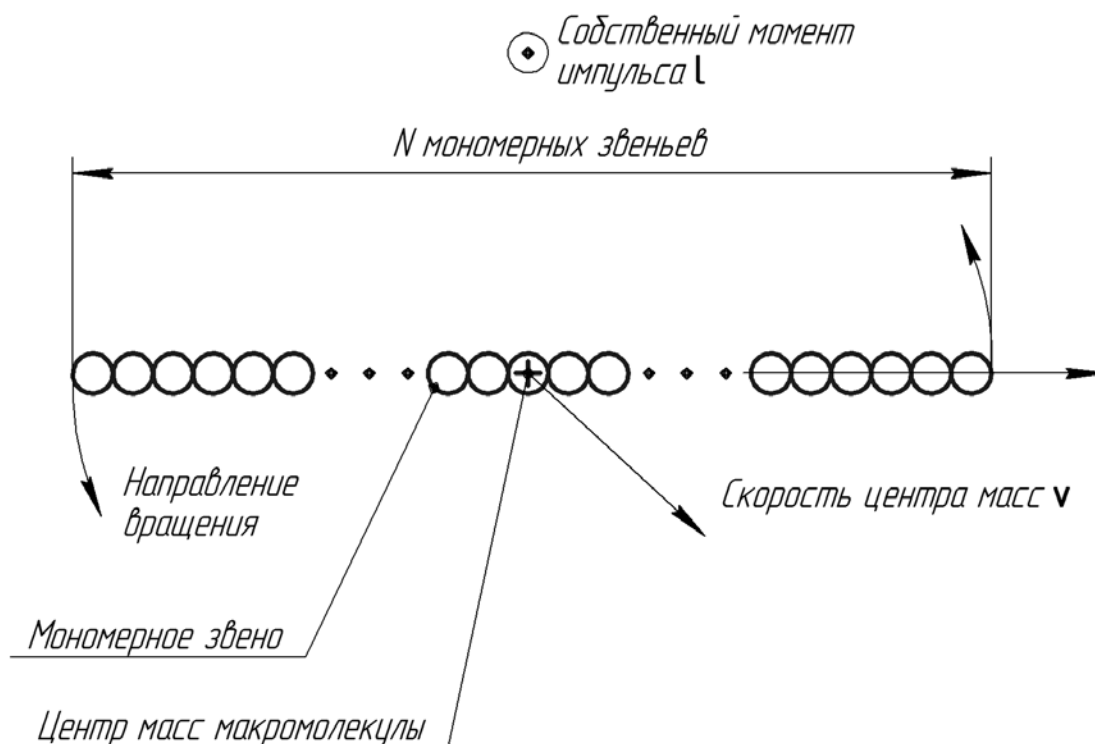


Рис. 1. Линейная модель макромолекулы

3. Состояние полимерной среды однозначно характеризуется функцией распределения макромолекул по числам мономерных звеньев, векторам ориентации, скоростям и собственным моментам импульса $f(N, \mathbf{n}, \mathbf{v}, \mathbf{l}, t)$ (t – момент времени). Функция распределения нормируется на плотность ρ неотверждённого полимера следующим образом

$$\rho = \sum_{N=1}^{\infty} \int \int \oint_{\|\mathbf{n}\|=1} f(N, \mathbf{n}, \mathbf{v}, \mathbf{l}, t) dS(\mathbf{n}) d\mathbf{v}.$$

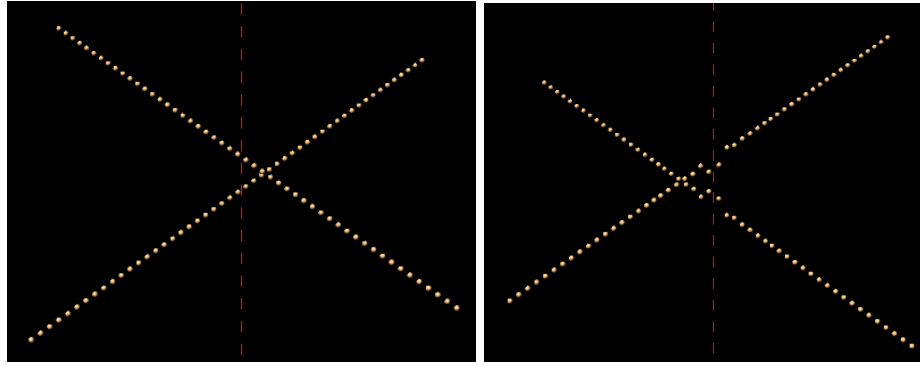
4. Плотность полимера является неизменной с течением времени кавитационного воздействия

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0.$$

5. Распад макромолекул возможен лишь при возникновении ударной волны, возникающей при схлопывании кавитационных пузырьков. При отсутствии кавитационного воздействия распада макромолекул не происходит.

6. Распад молекулы происходит тогда и только тогда, когда скорость столкновения молекул превышает определённое пороговое значение, при котором преодолевается потенциальное поле сил водородных или углеродных связей.

Визуализация процесса распада макромолекул представлена на рисунке 2.



а) до распада

б) после распада

Рисунок 2 – Визуализация процесса распада пары макромолекул (форма макромолекулы аппроксимируется линейной цепью мономерных звеньев) в результате соударения

Для определения фракционного состава макромолекул в результате их распада было получено выражение для вероятности распада отдельной молекулы:

$$\begin{aligned}
 P = & H(|\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j| - v_{\min}(\mathbf{n}_i, N_i, \mathbf{n}_j, N_j)) C_{N_i, \mathbf{v}_i, \mathbf{n}_i} C_{N_j, \mathbf{v}_j, \mathbf{n}_j} \Delta V \Delta t |\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j| \times \\
 & \times S d\mathbf{v}_i d\mathbf{v}_j d\Omega(\mathbf{n}_i) d\Omega(\mathbf{n}_j) = \frac{1}{2} H(|\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j| - v_{\min}(\mathbf{n}_i, N_i, \mathbf{n}_j, N_j)) \times \\
 & \times C_{N_i, \mathbf{v}_i, \mathbf{n}_i} C_{N_j, \mathbf{v}_j, \mathbf{n}_j} N_i N_j r_e^2 |\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j| \times \\
 & \times \left[\left(\mathbf{n}_i - \frac{(\mathbf{n}_i, \mathbf{v}_{ij})}{|\mathbf{v}_{ij}|^2} \mathbf{v}_{ij} \right) \times \left(\mathbf{n}_j - \frac{(\mathbf{n}_j, \mathbf{v}_{ij})}{|\mathbf{v}_{ij}|^2} \mathbf{v}_{ij} \right) \right] \times \Delta V \Delta t d\mathbf{v}_i d\mathbf{v}_j d\Omega(\mathbf{n}_i) d\Omega(\mathbf{n}_j)
 \end{aligned}$$

где P – число пар молекул, разрушенных в объёме ΔV за время Δt , $C_{N, \mathbf{v}, \mathbf{n}} \Delta V d\mathbf{v} d\Omega(\mathbf{n})$ – число макромолекул в объёме ΔV , имеющих скорости из диапазона $[v_x; v_x + dv_x] \times [v_y; v_y + dv_y] \times [v_z; v_z + dv_z]$, ориентации в пределах телесного угла $d\Omega(\mathbf{n})$ и количество мономерных звеньев N ; $H(v)$ – функция Хевисайда, равная 1, если $v \geq 0$, и 0 в противном случае; $\mathbf{n}_i$ – вектор ориентации i -й макромолекулы; $\mathbf{n}_j$ – вектор ориентации j -й макромолекулы; N_i – число мономерных звеньев в i -й макромолекуле; N_j – число мономерных звеньев в j -й макромолекуле; $v_{\min}(\mathbf{n}_i, N_i, \mathbf{n}_j, N_j)$ – минимальная скорость, необходимая для разрушения i -й макромолекулы при её столкновении с j -й макромолекулой, м/с.

С использованием выражения для вероятности распада на основании полученного кинетического уравнения далее был произведён расчёт фракционного состава макромолекул, позволившего определить вязкость полимера в результате ультразвукового кавитационного воздействия.

В результате проведённых расчётов установлено, что кавитационно-акустическое воздействие за время не более 1 мин при интенсивности колебаний не менее 6 Вт/см² и начальной вязкости 0,2 Па·с снижает вязкость полимеров не менее чем в 8 раз. При этом теоретически выявлено, что кавитационно-акустическое воздействие способно также до 4-х раз снизить вязкость

полимеров, имеющих начальную вязкость свыше 1 Па·с.

Полученные результаты свидетельствуют об эффективности применения кавитационно-акустического воздействия для интенсификации процесса механодеструкции макромолекул.

Список литературы

1. Nikafshar, S. The Effects of UV Light on the Chemical and Mechanical Properties of a Transparent Epoxy-Diamine System in the Presence of an Organic UV Absorber [Текст] / S. Nikafshar, O. Zabihi, M. Ahmadi, A. Mirmohseni, M. Taseidifar, M. Naebe // *Materials (Basel)*. – 2017. – 10(2). – P. 180.
2. Ожогин, А.В. Увеличение устойчивости к УФ-излучению промышленных изделий из стеклопластика [Текст] / А.В. Ожогин, М.А. Ленский, Д.В. Корабельников, А.Н. Новицкий // *Пластические массы*. – 2019. – № 1-2. – С. 57–59.
3. Ожогин, А.В. Борорганические олигомерные светостабилизаторы для стеклопластиков [Текст] / А.В. Ожогин, М.А. Ленский, Д.В. Корабельников, А.Н. Новицкий // *Полимерные композиционные материалы и производственные технологии нового поколения: Материалы III Всероссийской научно-технической конференции*. – 2018. – С. 262–270.
4. Huang, Y.D. Influence of ultrasonic treatment on the characteristics of epoxy resin and the interfacial property of its carbon fiber composites [Текст] / Y.D. Huang, L. Liu, J.H. Qiu, L. Shao // *Composit. Sci. Techn.*, 2002. – Vol. 62. – P. 2153.
5. Mullakaev, M.S. Effect of ultrasound on the viscosity-temperature properties of crude oils of various compositions [Текст] / Mullakaev M.S., Volkova G.I., Gradov O.M. // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. – 2015. – Vol. 49. – No. 3. – P. 287–296.
6. Волкова, Г.И. Ультразвуковая обработка нефтей для улучшения вязкостно-температурных характеристик [Текст] / Г.И. Волкова, И.В. Прозорова, Р.В. Ануфриев, Н.В. Юдина, М.С. Муллакаев, В.О. Абрамов // *Нефтепереработка и нефтехимия*. – 2012. – № 2. – С. 3–6.
7. Prachkin, V.G. Improving the productivity of wells by means of acoustic impact on high-viscosity oil in the channels of the face zone of a well [Текст] / V.G. Prachkin, M.S. Mullakaev, D.F. Asylbaev // *Chemical and Petroleum Engineering*. – 2015. – Vol. 50. – Issue 9-10. – P. 571–575.
8. Mohapatra, H. Mechanically controlled radical polymerization initiated by ultrasound [Текст] / H. Mohapatra, M. Kleiman, A.P. Esser-Kahn // *Nature Chemistry*. – 2017. – Volume 9. – P. 135–139.
9. Cass, P. Preparation of hydrogels via ultrasonic polymerization [Текст] / P. Cass, W. Knowler, E. Pereeia, N.P. Holmes, T. Hughes // *Ultrason Sonochem.* – 2010. – 17(2). – P. 326–332.
10. Магсумова, А.Ф. Влияние ультразвуковой обработки на технологические свойства эпоксидного олигомера [Текст] / А.Ф. Магсумова, Л.М. Амирова, М.М. Ганиев // *Вестник КГТУ им. Туполева*. – 2005. – №2.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЛЬТРАЦИИ ЭЛЕКТРОКАРДИОГРАММ В СРЕДЕ MATLAB

Л.Р. Григорьян, К.С. Ичетовкина
Кубанский государственный университет,
leonmezon@mail.ru, kbrusgod@mail.ru

Биоэлектрические процессы в организме человека широко используются в медицине как источник диагностической информации о состоянии тканей и органов, а также их деятельности. Современная диагностика сердечных заболеваний не может обойтись без электрокардиографического исследования, представляющего собой анализ зарегистрированной кривой изменения биопотенциалов сердца [1].

Следует отметить, что регистрация биопотенциалов относится к не инвазивным методам исследования. Биопотенциалы, возникающие на поверхности тела в результате биоэлектрической активности ткани или органа и отражающие внутреннее состояние организма, регистрируются без вредного действия на организм человека и могут производиться длительно и многократно. Это свойства биопотенциалов и методов их регистрации, а также высокая достоверность и информативность, обусловило широкое распространение этих методов исследования в различных областях медицины и биологии. Одним из направлений является электрокардиография – исследование биопотенциалов сердца человека, при котором измерение потенциалов проводят в 12 общепринятых отведениях в различных условиях (покой, физические нагрузки и т.д.).

Цель исследования – моделирование и сравнительный анализ сигналов ЭКГ без предварительной фильтрации (чистого сигнала) и с обработкой различными фильтрами.

В работе использованы следующие фильтры с модифицированными параметрами по диапазону и частоте среза [2, 3].

1) Эллиптический фильтр (фильтр Золотарёва) – фильтр, имеющий неравномерности (пульсации) и в полосе пропускания, и в полосе задерживания. Это обстоятельство обуславливает максимальную крутизну амплитудно-частотной характеристики, фактически минимальную ширину переходной полосы частот.

2) Фильтр Чебышёва – фильтр сигналов, реализованный в аналоговом и цифровом виде, обладающий крутым спадом амплитудно-частотной характеристики и существенными пульсациями амплитудно-частотной характеристики на частотах полос пропускания (фильтр Чебышёва I рода) и подавления (фильтр Чебышёва II рода) по сравнению с фильтрами других типов.

3) Фильтр Баттерворта – фильтр, обладающий наиболее плоской амплитудно-частотной характеристикой в полосе частот, при этом пологая кривая достигается за счет более пологого спада характеристики (в переходной области) между полосами пропускания и задерживания. Это свойство необходимо учитывать при разработке данных типов фильтров, обычно выдерживание крутизны спада достигается за счет увеличения порядка фильтра, при максимально плавной амплитудно-частотной характеристике в полосе пропускания фильтра.

4) Фильтр Бесселя – фильтр частот, обладающий максимальной плоской фазоамплитудной характеристикой (плоский участок кривой времени запаздывания в полосе пропускания), что обуславливает широкое распространение данных фильтров в электронике и в обработке сигналов в задачах, требующих линейную фазочастотную характеристику.

Исследование применения различных фильтров проводилось в среде MatLab, инструментальная среда, настроенная для итеративного анализа и проектирования процессов, с языком программирования, который непосредственно выражает математику матриц и массивов [3].

В ходе выполнения работы был разработан код для фильтрации электрокардиографического сигнала. Первоначально, в качестве модели была введена электрокардиограмма чистого сигнала (рис. 1). Это было сделано в соответствии с двумя параметрами: сам загруженный сигнал и его длительность. Чтобы ограничить сигнал, мы взяли первые 1000 значений. По оси X амплитуда электрокардиограммы определялась в милливольтках, по оси Y – время в секундах.

В качестве начальных условий описания фильтров взято универсальное описание электрических фильтров (1) и (2):

$$|H_p(j\omega)|^2 = \frac{1}{1 + \varepsilon^2 \psi^2(\Omega)}, \quad (1)$$

$$A_p(\Omega) = 10 \lg[1 + \varepsilon^2 \psi^2(\Omega)]. \quad (2)$$

Для каждого типа фильтров рассчитаны значения параметров фильтра для получения оптимальной частотной характеристики с учетом частоты среза, порядка фильтра и неравномерности в полосе частот. На основе рассчитанных параметров разработаны алгоритмы реализации передаточных функций для каждого фильтра.

Порядок фильтра определялся из условий: на граничной частоте полосы непропускания: $\Omega_s A_p(\Omega_s) \geq A_{p \min}$ или $|H_p(j\Omega)|_{\Omega=\Omega_s}^2 = e^{2A_{p \max}}$. Проведя расчеты, приходим к формуле (3)

$$m \geq \ln \left(\frac{e^{2A_{p \min}} - 1}{\varepsilon^2} \right) / 2 \ln \Omega_s. \quad (3)$$

Известно, что чем больше порядок, тем глубже (в децибелах) происходит

фильтрация. Но чем больше порядок фильтра, тем сложнее его реализовать, больше реактивных элементов необходимо использовать. На практике порядок фильтра не больше 6-7. В работе исследовались фильтры порядка 3.

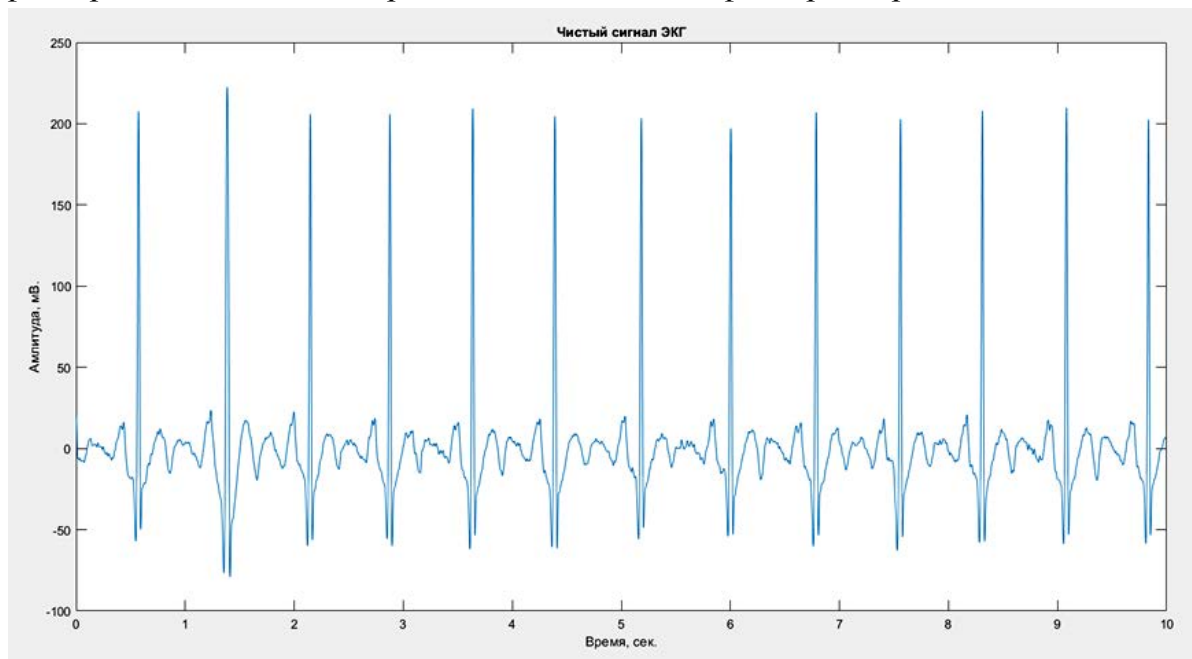


Рис. 1. Чистый сигнал электрокардиограммы в среде MatLab

Далее выделили спектр сигнала с целью задания границ диапазона частот, и наложили белый Гауссовский шум, чтобы смоделировать шумы сердца на сигнале электрокардиограммы (рис. 2). Использование белого гауссового шума – стандартная практика для имитации эффекта воздействия случайных процессов на полезный сигнал (информацию) происходящих в природе, и является базовой моделью шума в теории информации.

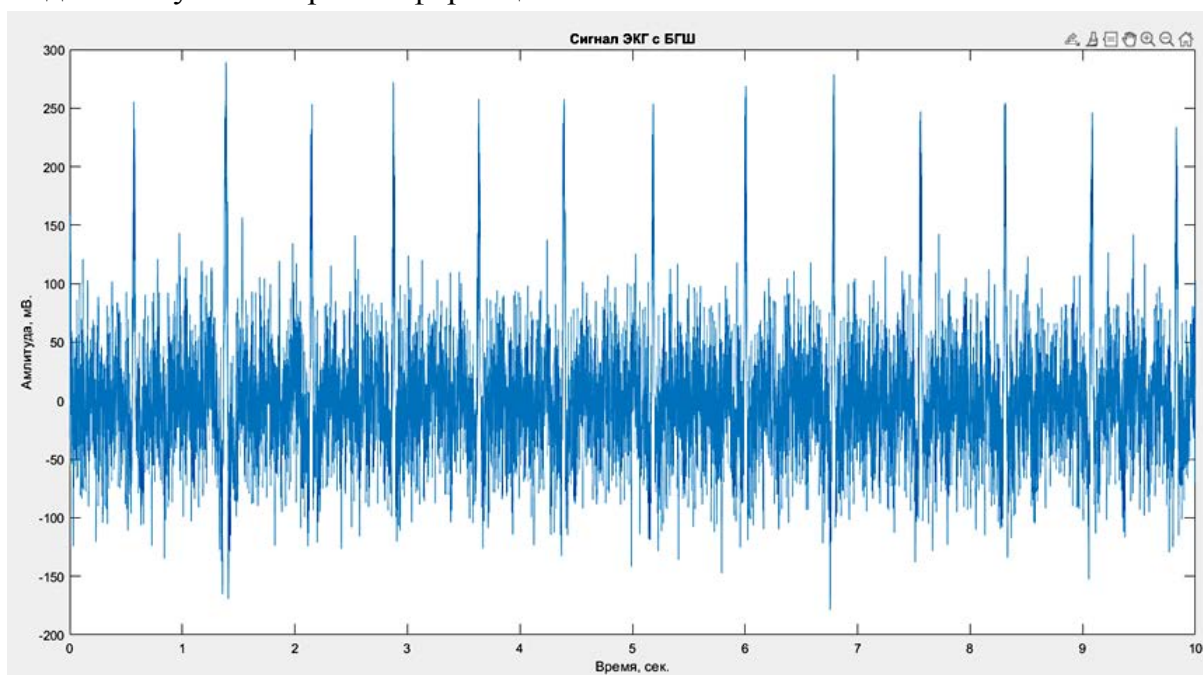


Рис. 2. Сигнал электрокардиограммы с белым Гауссовским шумом

Результаты моделирования электрокардиограммы при использовании фильтров Баттерворта, Чебышева, Бесселя и эллиптического фильтра (Золотарева) приведены на рис. 3 – 6.

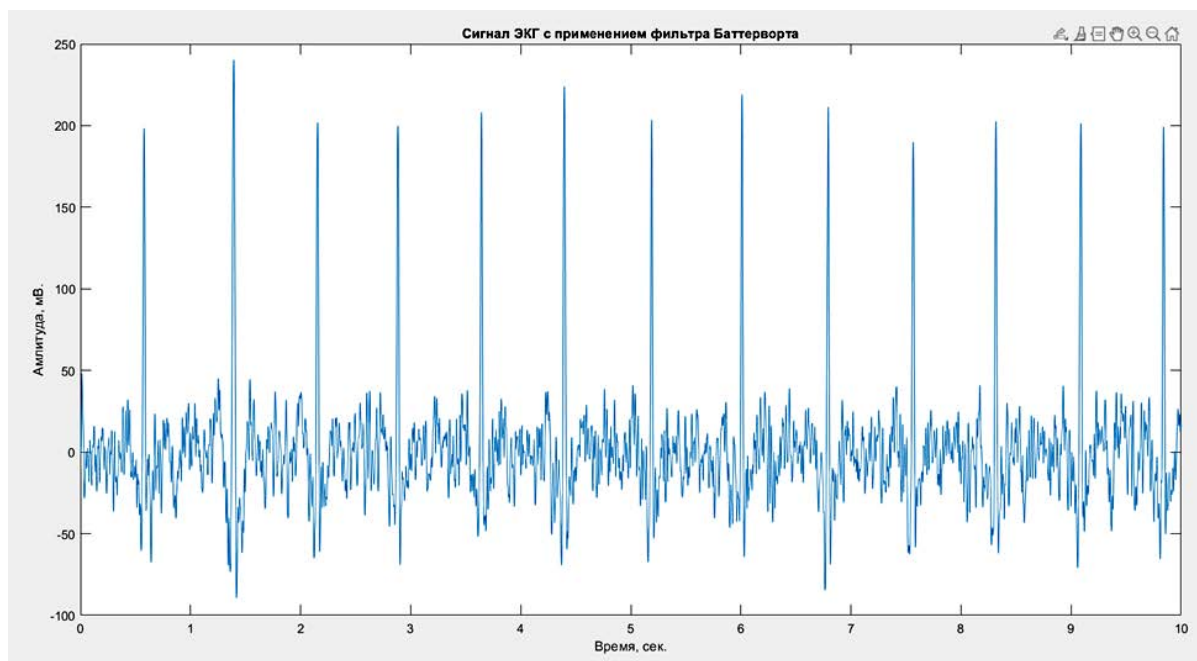


Рис. 3. Применение фильтра Баттерворта

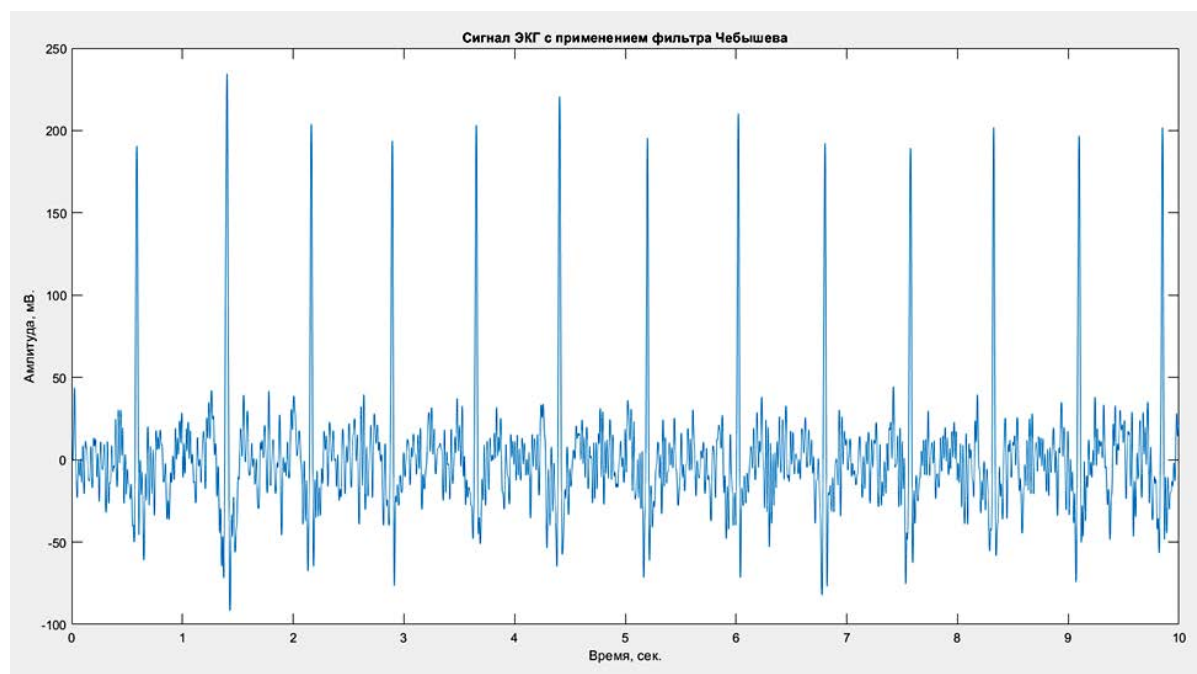


Рис. 4. Применение фильтра Чебышева

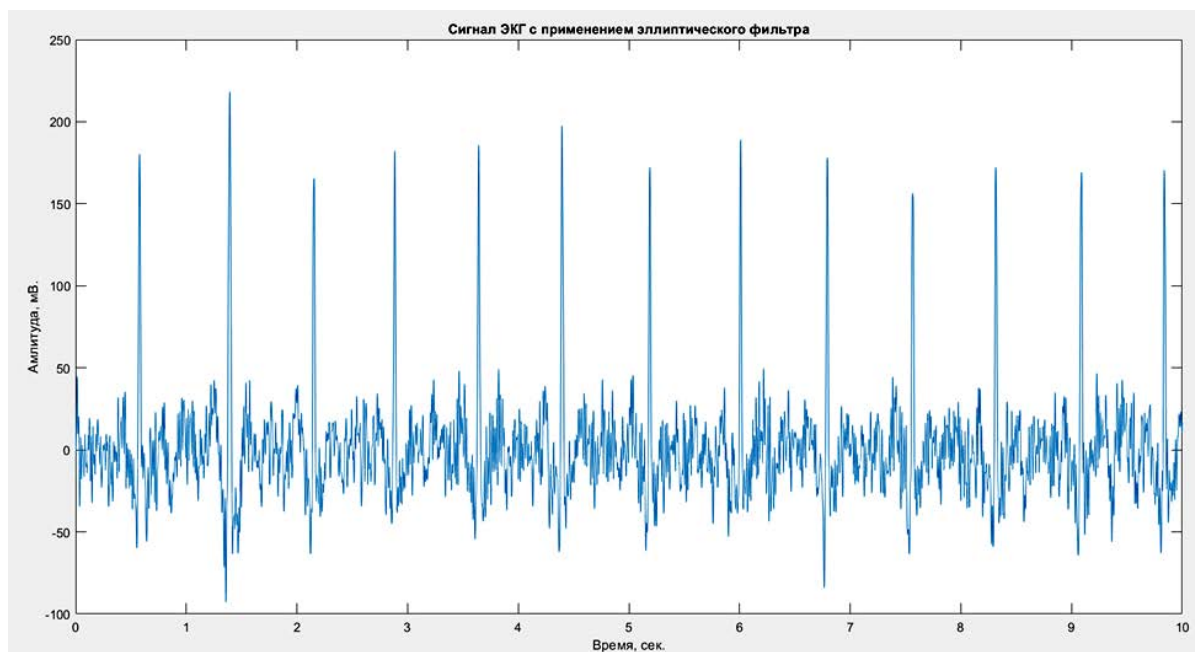


Рис. 5. Применение эллиптического фильтра

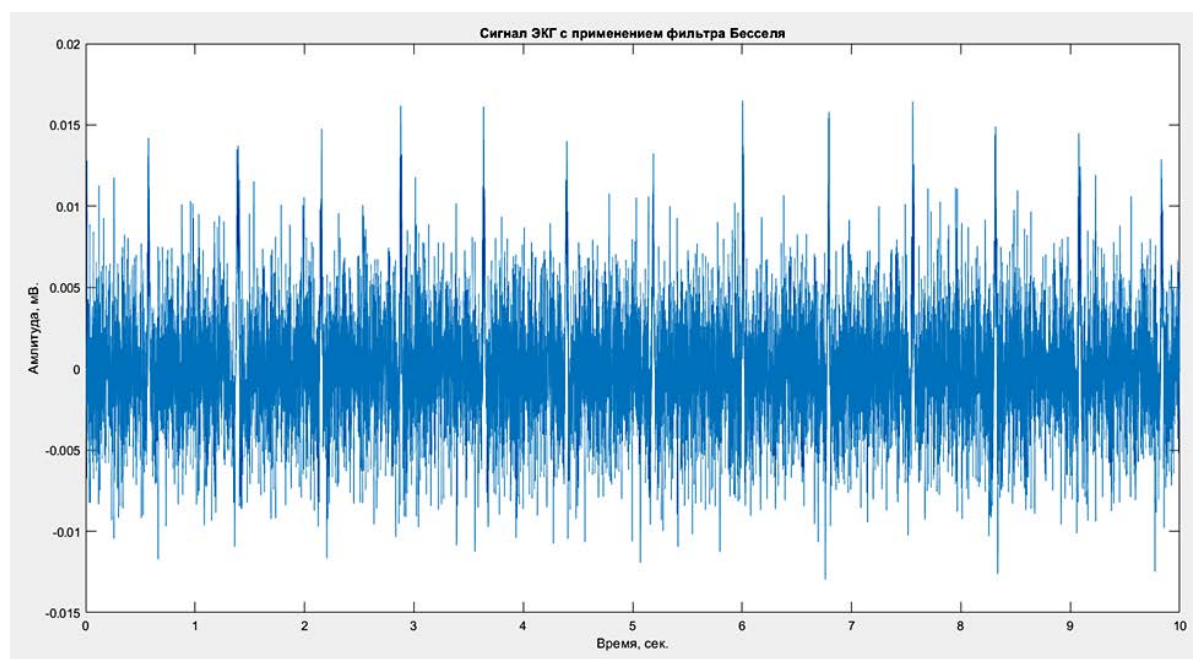


Рис. 6. Применение фильтра Бесселя

Как показало моделирование, при любых параметрах фильтр Бесселя не может обработать сигнал электрокардиограммы до необходимого уровня, в то же время остальные фильтры справляются с фильтрацией зашумленного сигнала ЭКГ.

Фильтр Баттерворта с порядком фильтра 3 и частотой среза 0,1 смог довольно точно отфильтровать сигнал. Фильтр Чебышева с порядком фильтра 6 и частотой среза 0,1 также хорошо обработал сигнал электрокардиограммы в его

первоначальном виде. Фильтр Золотарева или эллиптический фильтр с параметрами: порядком фильтра 5 и частотой среза 0,15 показали менее хорошие результаты. Отфильтрованный им сигнал изменяется даже от небольших помех.

Анализ предложенных решений реализации фильтров показал, что разработанный алгоритм фильтрации электрокардиограмм в условиях воздействия помех и шумов позволяет решить поставленную задачу выбора метода фильтрации, а также выявить положительные и отрицательные свойства различных фильтров при обработке электрокардиограмм.

Полученные результаты можно использовать и в других областях обработки измерительной информации при воздействии различного рода помех, например: в измерительных системах сбора данных сейсмических сигналов; измерительной аппаратуре низкочастотного диапазона.

Список литературы

1. Нестерова, Е. А. Основы электрокардиографии. Нормальная ЭКГ / Е. А. Нестерова. – Москва : Кардиология , 2016. – 320 с. – ISBN 978-5-7695-9569-8.
2. Артур, Б. Справочник по проектированию электронных фильтров / Б. Артур. – Москва : Наука, 1973. – 250 с.
3. Мешков, А. П. Азбука клинической электрокардиографии / А. П. Мешков. – Новочеркасск : НГМА, 2003. – 245 с. – ISBN 978-5-388-00542-7.
4. С.П. Иглин. Математические расчеты на базе Matlab. СПб.: БВХ Петербург 2005г. – 640 с.

ПРИМЕНЕНИЕ РЕКУРРЕНТНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ЭФФЕКТА ОТ ПРИМЕНЕНИЯ СТИМУЛИРУЮЩИХ АКЦИЙ В ТОРГОВЫХ СЕТЯХ

М. Г. Доррер

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

Решетнева, *dorrer_mg@sibsau.ru*

А.В. Фомин, Д.А. Логинов, А.Г. Овчинников

ООО «МаксБонус», *a.v.fomin@live.com*

Введение

Данная работа выполнена в рамках проекта «Разработка интеллектуальной системы анализа и управления программой лояльности – «Максбонус» [1], выполняющегося при поддержке Фонда содействия инновациям (Foundation for Assistance to Small Innovative Enterprises, FASIE) [2] в рамках договора о предоставлении гранта на проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в рамках проекта.

Система «МаксБонус» реализуется для оперативного уведомления владельца бизнеса об отклонениях в основных бизнес-процессах обслуживания клиентов и рекомендациях, связанных с этим. Также целью создания системы является консультативная поддержка владельца бизнеса относительно основных показателей программы лояльности и клиентского сервиса, информирование относительно основных возможностей программы лояльности и автоматическое создание настроек соответствующих процессов и акций.

Одной из важных функций системы является возможность предсказания изменения важнейших показателей торговой сети в зависимости от применения маркетинговых акций. Реализации этой функции при помощи инструментов предсказания многомерных временных рядов посвящена данная работа.

Связанные работы

Решению задач исследованию потребительских предпочтений с использованием больших данных посвящено достаточно большое количество научных работ. Статьи [3], [4], [5] посвящены анализу потребительских предпочтений при покупках онлайн. Aichner и Coletti рассматривают [6] процесс переориентации потребителей при онлайн покупок с массовых продуктов на персонализированные.

Также активно проводятся исследования по управлению спросом в торговых сетях. Так, в работе [7] предлагается аналитический механизм, который сочетает в себе методы статистического моделирования реакции рынка, сбора данных и комбинаторной оптимизации. Активно исследуется влияние цифровизации на эффективность розничных сетей [8], [9]. Авторы данного доклада также предпринимали попытки анализа потребительских предпочтений при помощи алгоритмов анализа ассоциативных правил [10] и методов кластерного анализа [11].

Прогноз влияния маркетинговых акций на показатели торговых сетей представляет собой частный случай анализа многомерных временных рядов. В

данной области ведутся активные работы по применению целого ряда методов – традиционных статистических алгоритмов, генетических алгоритмов, различных архитектур искусственных нейронных сетей. Так, в работе [12] для прогноза многомерных временных рядов использовалась архитектура адаптивной нейросложной нечеткой системы вывода.. В работе [13] описано использование техники генетического программирования для решения проблемы прогноза будущих значений качества сервисов как многомерного временного ряда. Работа [14] посвящена использованию искусственных нейронных сетей для сглаживания и прогнозирования временных рядов на примерах экономических приложений.

Таким образом, задачи оценки влияния маркетинговых акций и прогноза многомерных временных рядов актуальны и востребованы. Данная работа посвящена задаче предсказания последствий маркетинговых акций при помощи рекуррентных нейронных сетей.

Исходные данные для прогноза

Система «МаксБонус» спроектирована таким образом, что в качестве внешних данных может быть использована любая программа лояльности с идентификацией пользователя и состава покупаемых им товаров. Система обладает открытой архитектурой, позволяющей расширять функционал системы за счет добавления новых компонентов.

Компоненты системы:

1. Внешняя программа лояльности
2. Модуль загрузчик
3. Модуль хранения
4. Автоматизированное рабочее место эксперта
5. Модуль взаимодействия
6. Чат-бот пользователя
7. Модуль автоматической фиксации

Проектируемая и реализуемая система использует в качестве внешних источников данных программу лояльности. Содержащиеся в ней информация это оцифрованное покупательское поведение клиентов у конкретного партнера. Весь набор знаний, которые можно получить из этих данных представляет собой результат анализа покупательского поведения клиентов.

Исходными данными для прогнозирования является многомерный временной ряд, описывающий динамику показателей торговых сетей партнеров. Количество партнерских компаний системы лояльности – 74, временной интервал сбора данных – 2 года, с 2019 по 2021.

Временной ряд описывается плоской таблицей, строки которой представляют собой даты с дискретностью в одни сутки, столбцы – значения влияющих и прогнозируемых факторов.

Влияющие факторы – наличие применявшихся в течении данных суток в торговой сети партнера акций. Свертка выполнялась по комбинации следующих признаков:

- n_channel – тип канала коммуникации (платный – бесплатный – комбинированный);
- f_action_types – тип акции;
- f_action_subtypes – подтип акции;
- n_bonus – количество подарочных бонусов.

Если в течении каких-либо суток действовала соответствующая акция, в соответствующую ячейку заносится значение «1». Количество бонусов – целое число.

Значения прогнозируемых факторов системы потребительской лояльности:

- 1.Средняя оценка покупки
- 2.Доля оцененных чеков
- 3.Процент новых клиентов
- 4.Процент подключившихся к бесплатным каналам коммун...
- 5.Средний цикл прихода в днях
- 6.Сумма чеков
- 7.Количество чеков
- 8.Средний чек
- 9.Отклик на акцию
10. Процент лояльных клиентов
11. Кол-во не обработанных вопросов

Размер таблицы (число ненулевых столбцов и строк):

- 36 столбцов, из которых 27 – входных, 9 – прогнозируемых.
- 32034 строки по 74 партнерам и диапазонам дат с 2019 по 2021 годы.

Рекуррентные нейронные сети, сети долгой краткосрочной памяти

Для прогноза динамики показателей торговой сети под влиянием маркетинговых акций применялись рекуррентные нейронные сети. Рекуррентные нейронные сети (РНС, англ. Recurrent neural network; RNN [15]) — вид нейронных сетей, где связи между элементами образуют направленную последовательность. Благодаря этому появляется возможность обрабатывать серии событий во времени или последовательные пространственные цепочки. RNN применимы в таких задачах, где нечто целостное разбито на части, например: распознавание рукописного текста, распознавание речи, анализ временных рядов. РНС шаг за шагом обрабатывает временную последовательность данных, перебирая её элементы и сохраняя внутреннее состояние, полученное при обработке предыдущих элементов.

Разновидностью РНС являются нейронные сети долгой краткосрочная память (англ. Long short-term memory; LSTM [16]). Как и большинство рекуррентных нейронных сетей, LSTM-сеть является универсальной в том

смысле, что при достаточном числе элементов сети она может выполнить любое вычисление, на которое способен обычный компьютер, для чего необходима соответствующая матрица весов, которая может рассматриваться как программа. В отличие от традиционных рекуррентных нейронных сетей, LSTM-сеть хорошо приспособлена к обучению на задачах классификации, обработки и прогнозирования временных рядов в случаях, когда важные события разделены временными лагами с неопределённой продолжительностью и границами. Относительная невосприимчивость к длительности временных разрывов даёт LSTM преимущество по отношению к альтернативным рекуррентным нейронным сетям, скрытым марковским моделям и другим методам обучения для последовательностей в различных сферах применения.

В работе использовалась архитектура LSTM, специально разработанная для прогнозирования выходных последовательностей переменной длины. Такая модель называется Encoder-Decoder LSTM [17].

Такая модель была разработана для задач прогнозирования, в которых есть как входные, так и выходные последовательности, так называемые задачи «последовательность из последовательности» (seq2seq).

Эта модель в мировой практике применяется для многошагового прогнозирования временных рядов.

Как следует из названия, модель состоит из двух подмоделей: кодировщика и декодера. Реализация LSTM была выполнена на языке Python с применением библиотеки Keras [18].

Кодировщик – это модель, отвечающая за чтение и интерпретацию входной последовательности. Выходные данные кодировщика – это вектор фиксированной длины, который представляет интерпретацию последовательности моделью. Кодировщик традиционно является обычной моделью LSTM, хотя могут использоваться и другие модели кодировщика, такие как модели Stacked, Bidirectional и CNN.

```
model.add(LSTM(100, activation='relu', input_shape=(n_steps_in, n_features)))
```

Декодер использует выход кодера в качестве входа.

Сначала вывод кодера фиксированной длины повторяется один раз для каждого необходимого временного шага в выходной последовательности.

```
model.add(RepeatVector(n_steps_out))
```

Затем эта последовательность предоставляется модели декодера LSTM. Модель должна выводить значение для каждого значения на временном шаге вывода, которое можно интерпретировать с помощью одной модели вывода.

```
model.add(LSTM(100, activation='relu', return_sequences=True))
```

Один или тот же выходной слой или слои используется для выполнения каждого одношагового предсказания в выходной последовательности. Этого можно достичь, заключив выходную часть модели в оболочку TimeDistributed.

```
model.add(TimeDistributed(Dense(1)))
```

Таким образом, структура модели, выведенная при помощи функции `model.summary()` имеет вид, показанные на рис.1

Layer (type)	Output Shape	Param #
--------------	--------------	---------

=====		
lstm_01 (LSTM)	(None, 200)	189600
repeat_vector_01 (RepeatVecto	(None, 7, 200)	0
lstm_02 (LSTM)	(None, 7, 200)	320800
time_distributed_01 (TimeDist	(None, 7, 9)	1809
Total params: 512,209		
Trainable params: 512,209		
Non-trainable params: 0		

Рис. 1. Архитектура рекуррентной нейронной сети для прогноза векторного временного ряда

В общем виде код Python для создания такой нейронной сети, содержащей 200 нейронов в каждом слое LSTM (энкодера и декодера), а также слой повторителя на число тактов, равному количеству прогнозируемых сетью временных шагов:

```
from keras.models import Sequential
from keras.layers import LSTM
from keras.layers import Dense
from keras.layers import RepeatVector
from keras.layers import TimeDistributed
model = Sequential()
model.add(LSTM(200, activation='relu', input_shape=(back_steps, all_factors)))
model.add(RepeatVector(fore_steps))
model.add(LSTM(200, activation='relu', return_sequences=True))
model.add(TimeDistributed(Dense(input_factors)))
```

Подготовка данных для обучения РНС

LSTM требует определённой формы ввода данных, для подготовки которого используются процедуры перемешивания (shuffle), пакетирования (batch) и кэширования (cache) исходного набора данных.

Решение проблемы прогнозирования векторных временных рядов может потребовать прогнозирования нескольких временных шагов каждого временного ряда.

Для этого необходимо использовать последние N временных шага из каждого из временных рядов входных данных для модели и прогнозировать следующие M временных шагов каждого из временных рядов выходных данных.

Ниже приведен код процедуры split_sequences на языке Python, реализующей подготовку данных для обучения нейросети энкодер-декодер,

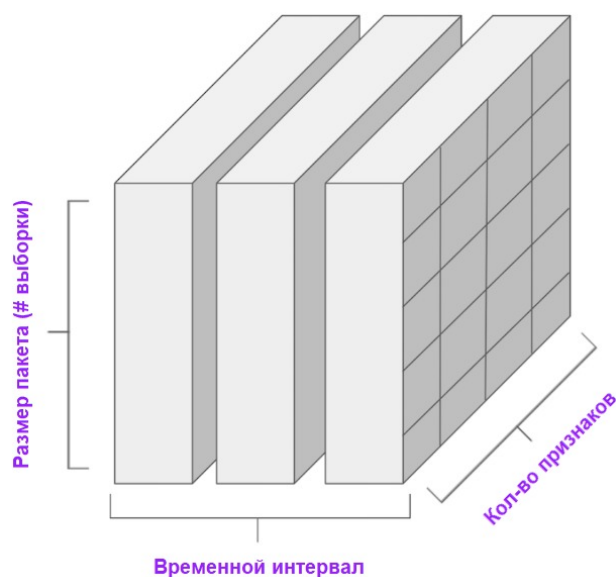


Рис. 2. Структура данных после пакетной обработки.

Ниже приведен код процедуры `split_sequences` на языке Python, реализующей подготовку данных для обучения нейросети энкодер-декодер, # разделение подпоследовательностей для временных рядов N входных M выходных строк

```
def split_sequences(sequence, fore_steps, back_steps, factors_to_predict):
# читаем из базы данных Y - полностью
# U - от factor_to_predict до последнего столбца
    X, y = list(), list()
    allfactors=sequence.shape[1]
    Y_start=allfactors-factors_to_predict
    Y_end=allfactors
    X_start=0
    X_end=allfactors #-factors_to_predict
    for i in range(len(sequence)):
        # ищем конец паттерна
        end_ix = i + back_steps
        out_end_ix = end_ix + fore_steps
        # проверяем нахождение внутри базы данных
        if out_end_ix > len(sequence):
            break
        # определяем входную и выходную часть паттерна
        seq_x, seq_y = sequence[i:end_ix, X_start:X_end], sequence[end_ix:out_end_ix,
Y_start:Y_end]
        X.append(seq_x)
        y.append(seq_y)
    return array(X), array(y)
```

Результаты

В ходе численных экспериментов проверялась прогностическая способность сети энкодер-декодер при нарастании числа нейронов и числа эпох

при обучении.

Таблица 1.

Ошибка прогноза для нейросети LSTM энкодер-декодер.

Среднеквадратичная ошибка (СКвО)	Прогнозируемый фактор								
	1	2	3	4	5	6	7	8	10
СКвО LSTM энкодер-декодер, 20 нейронов в слое, 10 эпох обучения	288,5 986	170,2 279	229,3 600	320,8 881	341,3 376	18403,21 59	272,2 505	2074,89 16	300,0 168
СКвО LSTM энкодер-декодер, 20 нейронов в слое, 20 эпох обучения	93,44 01	108,3 539	104,4 143	103,9 253	228,0 331	22834,95 15	168,1 759	2037,82 74	142,8 064
СКвО LSTM энкодер-декодер, 50 нейронов в слое, 50 эпох обучения	58,04 15	29,80 53	44,77 13	58,25 97	52,59 49	14893,59 32	37,72 07	2236,35 77	37,39 44
СКвО LSTM энкодер-декодер, 50 нейронов в слое, 100 эпох обучения	20,67 37	11,12 75	17,25 02	23,30 20	45,04 58	18680,15 04	42,93 43	2147,98 93	27,86 98
СКвО LSTM энкодер-декодер, 200 нейронов в слое, 100 эпох обучения	7,738 9	1,893 6	0,527 4	0,357 0	38,80 29	17335,43 20	31,79 02	1822,72 34	12,59 18
Выборочная дисперсия показателя	1,863 7	0,334 8	4,246 0	0,244 2	11,78 91	2 180 073,6050	470,2 998	159 590,150 3	17,27 48

Обучение сети велось на экспериментальном компьютере следующей конфигурации:

- Процессор – Intel i7
- Оперативная память – 12GB
- GPU – мобильная версия NVIDIA GeForce GTX 1060
- Видеопамять – 6GB

Обсуждение результатов

Можно видеть, что в первых экспериментах и по части прогнозируемых параметров (по 4 из 9) ошибка предсказания хуже выборочной дисперсии, то есть предсказательная способность по таким параметрам низкая. Однако, при детальном рассмотрении можно заключить, что:

1. Для большинства (5 из 9 параметров) точность предсказания можно характеризовать как достаточно высокую – ошибка прогноза на несколько порядков ниже средневывборочной дисперсии по данному показателю.

2. Неудовлетворительные показатели прогностической способности наблюдаются только для сильно разреженных временных рядов с большими пропусками.
3. По мере наращивания сложности модели (роста числа нейронов в LSTM-слоях энкодера и декодера) и длительности обучения (от 10 до 100 эпох обучения) качество предсказания заметно улучшается, сеть в 200 нейронов обладает приемлемой предсказательной способностью.
4. Можно ожидать что с нарастанием опыта системы (объема обучающей выборки), а также с наращиванием сложности системы и вычислительных ресурсов, выделяемых на обучение сети качества прогноза будет еще нарастать.

Следует также отметить, что компьютер, достаточно скромный по характеристикам, производит переобучение в течении 200 эпох в течение около 4 часов рабочего времени. Это время явно избыточно для того, чтобы переучивать систему онлайн. Однако при необходимости реализовать постоянное доучивание это ограничение можно обойти при помощи ряда простых технологических приемов:

1. Наращивание аппаратных возможностей сервера обучения нейросети, применение фермы из нескольких видеокарт, более мощных, чем мобильная версия NVIDIA GeForce GTX 1060
2. Разнесение «решающей» машины и сервера обучения.
3. Переобучение системы не онлайн, а периодически (например, один раз в сутки, в период наименьшей нагрузки на систему).

Заключение и выводы

Таким образом, рекуррентная нейронная сеть LSTM архитектуры энкодер-декодер для большинства прогнозируемых параметров показала достаточно высокую предсказательную способность при решении задачи прогноза изменения важнейших показателей торговой сети в зависимости от применения маркетинговых акций, описанных в виде многомерного временного ряда. Для реализации прототипа прогностической системы была выбрана модель нейронной сети LSTM энкодер-декодер, состоящая из 500 нейронов в каждом LSTM-слое и обученная на исторических данных 74 партнеров системы МаксБонус за период около 2 лет – с 2019 по 2021 год.

Дальнейшее развитие системы будет состоять в следующем:

1. Реализации советующей подсистемы, интегрированной непосредственно в систему управления потребительской лояльностью МаксБонус.
2. Повышение точности прогноза за счет накопления истории временных рядов, и за счет применения методов предобработки данных, позволяющих преодолеть негативный эффект от их разреженности.

Список литературы

1. Maxbonus [Electronic resource]. URL: <http://maxbonus.ru/>.
2. Foundation for Assistance to Small Innovative Enterprises (FASIE) [Electronic resource]. URL: <http://fasie.ru/>.

3. Vithayathil J., Dadgar M., Osiri J.K. Social media use and consumer shopping preferences // *Int. J. Inf. Manage.* 2020. Vol. 54. P. 102117.
4. Chen H.-J. What drives consumers' mobile shopping? 4Ps or shopping preferences? // *Asia Pacific J. Mark. Logist.* 2018. Vol. 30, № 4. P. 797–815.
5. Rajamma R.K., Neeley C.R. Antecedents to Shopping Online: A Shopping Preference Perspective // *J. Internet Commer.* 2005. Vol. 4, № 1. P. 63–78.
6. Aichner T., Coletti P. Customers' online shopping preferences in mass customization // *J. Direct, Data Digit. Mark. Pract.* 2013. Vol. 15, № 1. P. 20–35.
7. Trusov M., Bodapati A. V, Cooper L.G. Retailer promotion planning: Improving forecast accuracy and interpretability // *J. Interact. Mark.* 2006. Vol. 20, № 3. P. 71–81.
8. The coming AI revolution in retail and consumer products [Electronic resource] // IBM Institute for Business Value (IBV) & Oxford Economics. URL: <https://www.ibm.com/downloads/cas/NDE0G4LA>.
9. AI in Retail: Segment Analysis, Vendor Positioning & Market Forecasts 2019-2023 [Electronic resource] // Juniper Research. URL: <https://www.chainstoreage.com/technology/study-retailer-spending-on-ai-will-reach/>.
10. Ogurtsov D.A., Dorrer M.G. Application of association rules learning for studying the store history of a large retail chain // *Journal of Physics: Conference Series*. 2019. Vol. 1399, № 3.
11. Dorrer M.G., Fomin A. V, Loginov D.A. Clustering of participants in the {MaxBonus} loyalty system using Kohonen's self-organizing maps // *J. Phys. Conf. Ser. {IOP} Publishing*, 2020. Vol. 1679. P. 42010.
12. Yazdanbakhsh O., Dick S. Multi-variate timeseries forecasting using complex fuzzy logic // 2015 Annual Conference of the North American Fuzzy Information Processing Society (NAFIPS) held jointly with 2015 5th World Conference on Soft Computing (WConSC). 2015. P. 1–6.
13. Syu Y. et al. Quality of Service timeseries forecasting for Web Services: A machine learning, Genetic Programming-based approach // 2016 Annual Conference on Information Science and Systems (CISS). 2016. P. 343–348.
14. Vrbka J. Using Artificial Neural Networks for Timeseries Smoothing and Forecasting: Case Studies in Economics. 2021.
15. Schuster M., Paliwal K.K. Bidirectional recurrent neural networks // *IEEE Trans. Signal Process.* 1997. Vol. 45, № 11. P. 2673–2681.
16. Hochreiter S., Schmidhuber J. Long Short-Term Memory // *Neural Comput.* 1997. Vol. 9, № 8. P. 1735–1780.
17. Chandra R., Goyal S., Gupta R. Evaluation of Deep Learning Models for Multi-Step Ahead Time Series Prediction // *IEEE Access. Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE)*, 2021. Vol. 9. P. 83105–83123.
18. Keras [Electronic resource]. URL: <https://keras.io/>.

ИССЛЕДОВАНИЕ РАЗРЫВА СИНТЕТИЧЕСКОЙ ЛЕНТЫ В РАМКАХ ТЕОРИИ ПРОТЕКАНИЯ

Р.А.Козлитин, В.Н.Удодов

Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова,
кафедра программного обеспечения вычислительной техники и
автоматизированных систем,
кафедра производственных технологий и техносферной безопасности
udodov@khsu.ru

Введение

Вопросы разрыва тканей и других изделий играют важную роль при конструировании швейных изделий, поскольку эти изделия должны быть достаточно прочными. Для моделирования разрыва сложной химической ленты перспективно использовать теорию перколяции (протекания) [1, 2]. Теория протекания является сравнительно молодой теорией, применения которой давно вышли далеко за рамки физики, информатики и химии [3-11].

В рамках теории протекания (задача связей [1, 10, 11]) разрыв сложной синтетической ленты [4-8] рассмотрен как фазовый переход непрерывного типа [1-5, 8]. Цель работы: рассчитать порог протекания и сопутствующие характеристики для модели разрыва синтетической усиленной ленты в рамках теории перколяции при протекании по первым и вторым соседям.

Модель

Введем основные понятия. Узлы – это точки, в которых пересекаются и закреплены две или более нитей (проволок) [1, 3-5, 8]. Лента состоит из нескольких элементарных нитей, которые соединены друг с другом. Далее элементарную (простую) нить называем просто нитью. Из одного узла выходит несколько нитей. Нити, соединяющие узлы, называются связями. Узлы (связи) могут быть целыми или блокированными [1, 8, 11]. Нить (связь) целая, если она не разорвана и связана с двумя узлами. Разорванная нить называется блокированной.

В задаче узлов узел блокирован, если перерезаны все нити (связи), выходящие из этого узла [1, 8]. Все связи являются целыми, кроме тех, которые выходят из блокированного узла. В задаче узлов блокируются узлы случайным образом. В задаче связей все узлы целые, кроме тех, у которых блокированы все связи, выходящие из этого узла. В задаче связей блокируются отдельные связи (рвутся отдельные нити). N – полное число узлов (связей). N_1 – число целых связей (узлов). N_0 – число блокированных связей (узлов). Эти величины связаны

$$N = N_1 + N_0 .$$

Все переменные неотрицательны. Основная переменная задачи связей

$$P = \frac{N_1}{N} . \quad (1)$$

Ленту растягиваем. Постепенно рвутся элементарные нити и P уменьшается. В какой последовательности будут рваться элементарные нити (связи) предсказать нельзя из-за наличия случайных дефектов. Как только лента полностью разорвана – мы на пороге протекания $P = P_C$. До этого мы были выше порога. На пороге в задаче связей

$$P = P_C = \frac{N_1}{N} .$$

Здесь N_1 – число целых связей на пороге (оно может быть разным!), N – полное число связей.

Простейший случай – одна элементарная нить (система одномерная), но на ней есть узлы. Такая нить разорвется, если разорвется одна любая связь между узлами. И мы будем на пороге:

$$N_0 = 1, N_1 = N - 1, P_C = \frac{N - 1}{N} = 1 - \frac{1}{N} . \quad (2)$$

Если связи соединяют только ближайшие соседние узлы, то радиус протекания равен единице $R = 1$. Вторые соседи – это узлы, которые находятся на минимальном (наименьшем) расстоянии от данного узла, но дальше, чем ближайшие соседи. Если связи соединяют первых и вторых соседей, то радиус протекания равен двум $R = 2$ [1]. Связи между узлами перенумеруем натуральными числами.

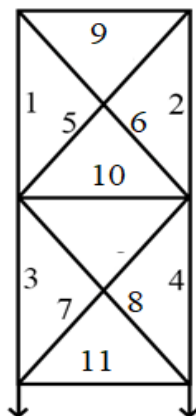


Рис.1. Лента с 11 связями при протекании по первым и вторым соседям

$$R = 2 .$$

На рисунке 1 представлена модель растяжения ленты (за нижнюю сторону сила действует вниз). Для расчета зададим упрощающее условие, что горизонтальные связи нерастяжимы и абсолютно прочные (нити 9, 10, 11 на рисунке 1). Узлы решетки расположены только в вершинах квадратов, то есть, в

центрах квадратов связи не пересекаются. Количество блоков (квадратов) ленты (N_b) может быть произвольным (на рис. 1 количество блоков $N_b = 2$). Количество опытов бралось равным $Q = N_b * 100$.

Результаты

Результаты моделирования представлены на рисунках 2 и 3.

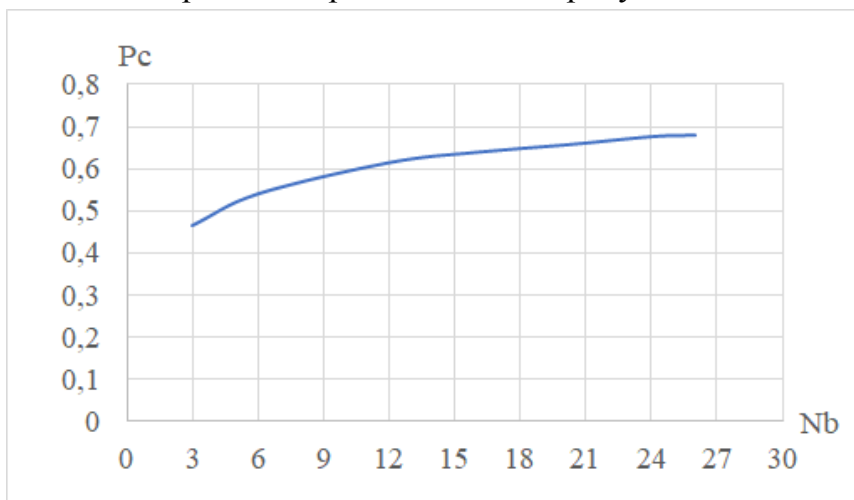


Рис.2. Среднее значение порога протекания в зависимости от размеров ленты

Далее находим относительное отклонение порога Δ по формуле

$$\Delta = \frac{\delta}{P_c}, \quad (3)$$

где δ – среднеквадратичное отклонение порога протекания.

На рис. 3 представлены полученные значения относительного отклонения в зависимости от количества блоков ленты.

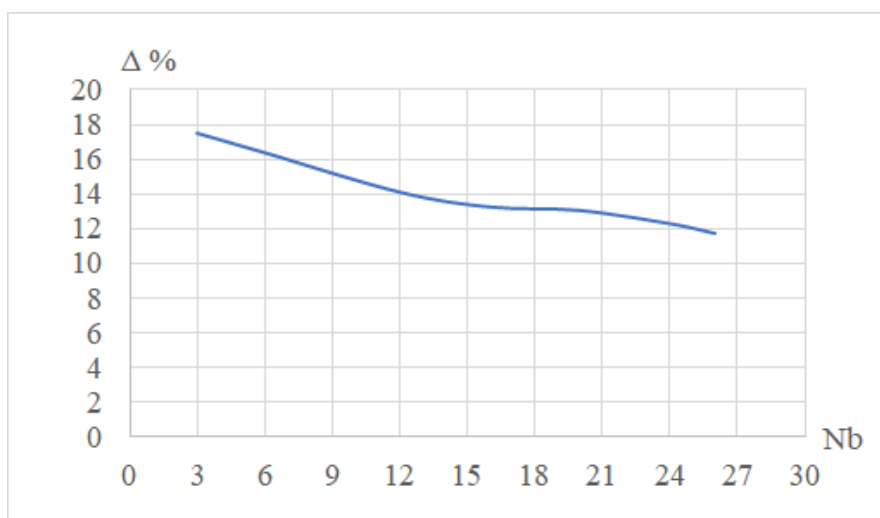


Рис.3. Относительное отклонение порога протекания как функция количества блоков в ленте.

Система имеет малый размер, поэтому относительное отклонение порога протекания получилось достаточно большим. Для более реалистичной модели относительное отклонение порога будет существенно меньше.

Для определения порога протекания в случае достаточно большой системы нужно менять число блоков в ленте и получить зависимость $P_C(N_b)$. Эту зависимость хорошо описывает следующее аналитическое выражение [1] ($N_b \equiv N$)

$$y = P_C(N_b) = P_C(\infty) + \frac{D}{N^\gamma} = P_C + \frac{D}{N^\gamma}. \quad (4)$$

Здесь $P_C(\infty) = P_C$ – порог протекания для системы бесконечного размера, D и γ – некоторые константы, γ называется критическим индексом восприимчивости [1, 2]. Обратим внимание на то, что выражение (2) для одномерного протекания по ближайшим соседям имеет вид (4), причем критический индекс восприимчивости γ равен единице и порог протекания для бесконечной системы также равен единице. В этом значении порога перколяции ($P_C(\infty) = 1$) заключается специфика одномерной задачи при конечном радиусе протекания.

Для двух размеров системы получим

$$y_1 = P_C + \frac{D}{(N_1)^\gamma}. \quad (5)$$

$$y_2 = P_C + \frac{D}{(N_2)^\gamma}. \quad (6)$$

Вычитаем из (5) равенство (6):

$$y_1 - y_2 = D \left(\frac{1}{(N_1)^\gamma} - \frac{1}{(N_2)^\gamma} \right) = D f_{12}. \quad (7)$$

Аналогично

$$y_1 - y_3 = D \left(\frac{1}{(N_1)^\gamma} - \frac{1}{(N_3)^\gamma} \right) = D f_{13}. \quad (8)$$

Делим (7) на (8)

$$L(123) = \frac{y_1 - y_2}{y_1 - y_3} = \frac{f_{12}}{f_{13}} = f_{123}(\gamma). \quad (9)$$

(9) запишем в виде

$$L(123) - f_{123}(\gamma) = 0. \quad (10)$$

Меняя индекс γ , найдем решения этого уравнения. Далее можно найти порог протекания для бесконечной системы и значение константы D . Результаты имеют следующий вид

$$P_C(N_b) = P_C(\infty) + \frac{D}{(N_b)^\gamma} \approx 1 - \frac{0.7}{(N_b)^{0.25}}, \quad (11)$$

где $D \approx -0.7$, $\gamma \approx 0.25$ (ошибка по индексу восприимчивости порядка 10%). Порог протекания для системы бесконечного размера получился близким к единице, что естественно (см. (2) и (4)), поскольку рассмотренная модель является одномерной (квазиодномерной). Результаты по индексу восприимчивости являются нетривиальными, так как для двумерного и трехмерного пространства этот индекс больше единицы (правда, при протекании по ближайшим соседям), причем растет при уменьшении размерности пространства [1].

Выводы

Впервые для простейшего случая проанализирована новая модель разрыва сложной синтетической (химической) ленты в рамках теории перколяции при радиусе протекания, равном двум. Рассмотрение проведено в рамках задачи связей. Методом компьютерного моделирования рассчитаны порог перколяции, среднее квадратичное и относительное отклонения порога. Рассчитан также критический индекс восприимчивости. В отличие от обычной задачи протекания в предложенной модели имеет смысл рассматривать только область выше порога перколяции.

Если кроме разорванных связей повреждена (блокирована) часть узлов, то мы приходим к смешанной задаче перколяции, которая более соответствует реальной ситуации [11]. Разрыв ленты в рамках смешанной задачи предполагается рассмотреть в дальнейшем. В рамках предложенного подхода возможно вычисление других критических индексов и проверка соотношений скейлинга (подобия) [1, 2, 7, 8].

Рассмотренные сложные усиленные химические ленты, видимо, можно использовать при создании тканей и материалов специального назначения для эксплуатации в экстремальных условиях: в космосе, в полярных областях, для создания альпинистского снаряжения и парашютов, для подводных работ, при создании материалов для армии и флота.

Список литературы

1. Эфрос А.Л. Физика и геометрия беспорядка / А.Л.Эфрос. — М., Наука, 1982. — 176 с.
2. 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.
3. Тарасевич Ю.Ю. Математическое и компьютерное моделирование. Вводный курс: учеб. Пособие для вузов / Ю.Ю.Тарасевич. — Изд. 3-е, испр. — М.,

Едиториал УРСС, 2003. — 144 с.

4. Тарасевич Ю.Ю. Перколяция: теория, приложения. Учебное пособие / Ю.Ю.Тарасевич. — М., Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2012. — 112 с.
5. Соколов И.М. Размерности и другие геометрические критические показатели в теории протекания / И.М.Соколов // УФН. — 1985. — Т. 150. — №2. С. 221–225.
6. Галлямов С.Р. Порог протекания простой кубической решетки в задаче узлов в модели решетки Бёте / С.П.Галлямов // Вестник Удмуртского университета. Математика, механика, компьютерные науки. — 2008. — Вып. 3. С. 109–115.
7. Галлямов С.Р. О нескейлинге вероятности протекания простой кубической решетки: теория и компьютерный эксперимент / С.Р.Галлямов, С.А.Мельчуков // Вестник Удмуртского университета. Математика, механика, компьютерные науки. — 2009 — Вып. 2. — С. 29–36.
8. Левинштейн М.Е. О связи между критическими индексами теории протекания / М.Е.Левинштейн, М.С.Шур, Б.И.Шкловский, А.Л.Эфрос // ЖЭТФ. — 1975. — Т. 9. — С. 386.
9. Spirin D.V. Percolation effects in quasi-one-dimensional Ising ragged magnet / D.V.Spirin, V.N.Udodov // Letters on Materials. — 10 (3), 2020. — PP. 334-339.
10. Yakunina T.V. Distribution law of the percolation threshold in one-dimensional bond problems / T.V.Yakunina, V.N.Udodov. — 2020. — J. Phys.: Conf. Ser. — **1679** 032073.
11. Усатова М.Г. Смешанная задача в одномерной теории перколяции для конечных систем / М.Г.Усатова, Р.А.Козлитин, В.Н.Удодов // Математическое моделирование. — 2015. — Т. 27. — № 12. С. 88-95.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КАРТИНЫ ТЕЧЕНИЯ ПО ДАННЫМ ЛОКАЛЬНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ СКОРОСТИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА ГЛАВНЫХ КРИВЫХ

Л.А.Компаниец, О.С.Володько

Институт вычислительного моделирования СО РАН, kla@icm.krasn.ru

Методы обработки данных, полученных экспериментальным путем, имеют широкое применение, что связано с математизацией биологических, социологических и других наук. Такие методы начали появляться около двух веков назад, для решения практических задач по медицине, экономике и других науках.

В последние годы обработка экспериментальных данных получила большое развитие, так как человечество с его технологиями научилось обрабатывать огромный поток данных за минимальный промежуток времени.



Рис. 1. Расположение датчиков в 2018 году.

В летний период 2018 года на озере Шира были проведены измерения скорости акустическим доплеровским профилографом течения ADCP 600 кГц в разных географических точках озера, указанных на рис. 1. Профилограф течения ADCP измеряет трёхмерную скорость течения вдоль всего столба жидкости. Скорости течения регистрировались каждые 15 секунд по всей глубине с интервалом в 1 м.

Пример данных измерений 2018 г. в июле месяце приведен на рис. 2. В представленных данных содержится информация о скоростях течения в определенный момент времени и на конкретной глубине.

В результате натурных измерений данные скорости получают с некоторой погрешностью, что происходит в силу турбулентного характера течения в озере и приближенного измерения скорости приборами.

YR	MO	DA	HH	MM	SS				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
18	7	13	7	33	44				10	6	30	75	56	37	32	16	72	17	24
18	7	13	7	33	59				78	42	54	25	24	45	44	33	69	40	23
18	7	13	7	34	14				39	25	18	82	71	18	20	67	35	16	44
18	7	13	7	34	29				23	12	56	78	38	21	12	91	39	42	33
18	7	13	7	34	44				8	28	54	50	46	8	82	6	15	69	67
18	7	13	7	34	59				56	-31	43	29	61	32	44	42	30	25	54
18	7	13	7	35	14				34	50	55	77	42	11	35	0	43	51	27
18	7	13	7	35	29				67	23	32	33	22	35	64	39	52	-1	37
18	7	13	7	35	44				12	10	56	92	75	72	27	33	59	38	45
18	7	13	7	35	59				60	52	47	61	36	62	58	43	49	48	28
18	7	13	7	36	14				89	-30	15	88	65	22	67	54	11	45	42
18	7	13	7	36	29				53	37	52	59	65	27	53	12	81	72	45
18	7	13	7	36	44				-7	21	45	50	33	16	24	20	61	29	29
18	7	13	7	36	59				-17	8	34	39	33	21	11	8	3	29	13
18	7	13	7	37	14				24	42	18	76	72	45	16	26	7	16	5

Рис. 2. Пример данных измерений восточной компоненты скорости течения в 2018 году.

Течение в озере Шира сильно меняется со временем даже за промежуток 15 секунд (рис. 3).

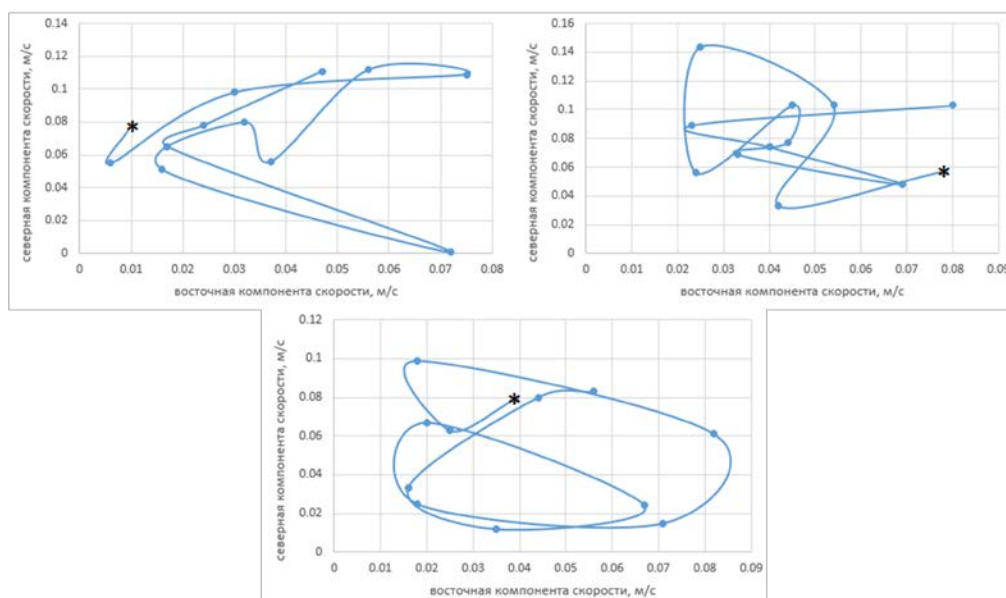


Рис. 3. Точка Т4, годографы скорости (слева-направо, сверху-вниз) на моменты времени: 07:33:44, 07:33:59, 07:34:14.

Данные проанализированы в пяти географических точках: Т3, Т4, Т7, Т8, Т9 с глубинами 18,7 м, 24,6 м, 13 м, 18,1 м, 18,3 м соответственно. Был взят промежуток времени 13.07.2018 и 5 последовательных измерений по времени.

Данные измерений скоростей течений были обработаны на двух промежутках по глубине: с 1,9 м до 6,9 м и по всей глубине измерения с 1,9 м до 12,9 м. Первый диапазон глубин рассматривался ввиду того, что в 2018 г. глубина верхнего однородного слоя была 7 м.

Для анализа были использованы два метода: метод наименьших квадратов и метод главных кривых.

Метод наименьших квадратов – это метод аппроксимации, позволяющий найти уравнение кривой, которая наиболее точно соответствует исходному набору данных. В данном исследовании мы будем пользоваться полиномиальной моделью аппроксимации.

Метод наименьших квадратов был применен для анализа данных измерений в географической точке Т3 для 5-ти последовательных измерений скорости течения в верхнем слое с 1,9 м до 6,9 м (рис. 4).

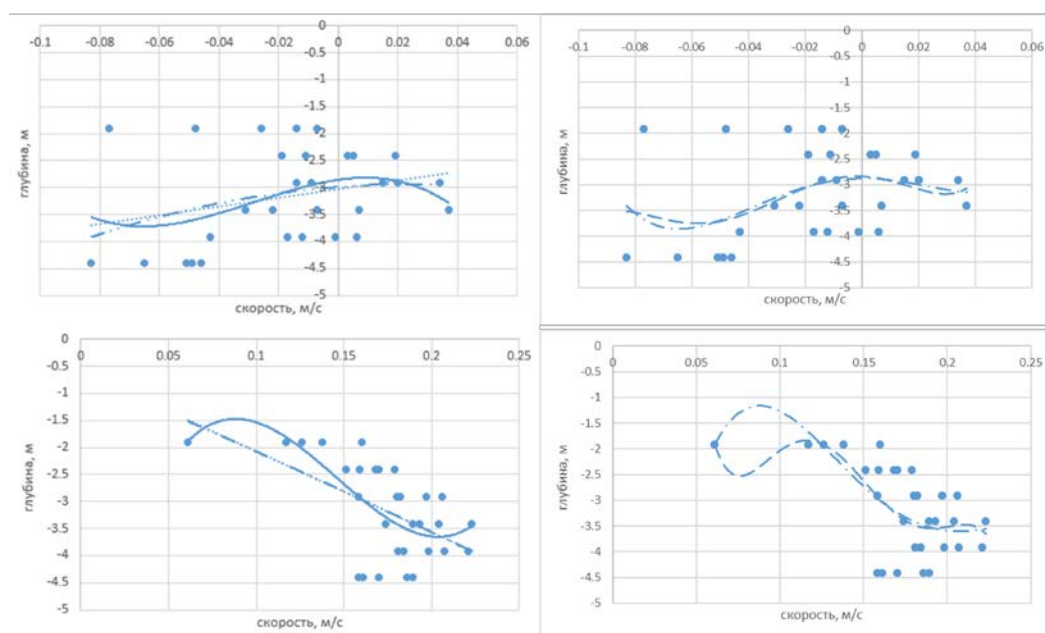


Рис. 4 – Точка Т3, сверху: восточная компонента скорости, снизу: северная компонента скорости. Пунктирной линией обозначен полином 1-й степени, штрих-двойной-пунктир – полином 2-й степени, сплошная линия – полином 3-й степени, штрих-пунктирная линия – полином 4-й степени, штриховая линия – полином 5-й степени.

Метод показал неудовлетворительные результаты, так как он не определяет скорости на некоторых горизонтах измерения. Увеличение числа

используемых измерений на одном горизонте до 10-15 не меняет ситуацию (рис. 5).

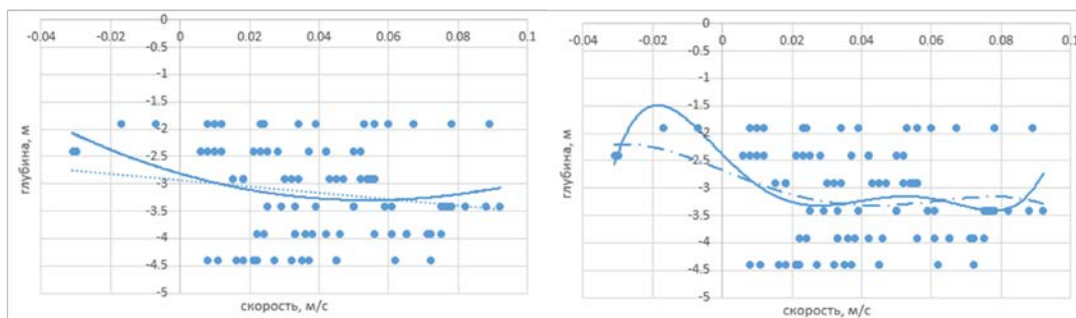


Рис. 5. Восточная компонента скорости, слева: пунктирной линией обозначен полином 1-й степени, точкой-тире – полином 2-й степени, сплошной линией – полином 3-й степени, справа: точка-тире – полином 4-й степени, сплошная линия – полином 5-й степени.

Метод главных кривых был первоначально разработан Hastie [1]. Главные кривые – это гладкие одномерные кривые, которые проходят через середину набора данных. В методе главных кривых в качестве начального приближения используется прямая линия, которая обычно является первой главной компонентой. Главные кривые являются самосогласованными для набора данных. Самосогласованность означает, что любая точка на главной кривой является средним значением всех точек, которые в нее проецируются.

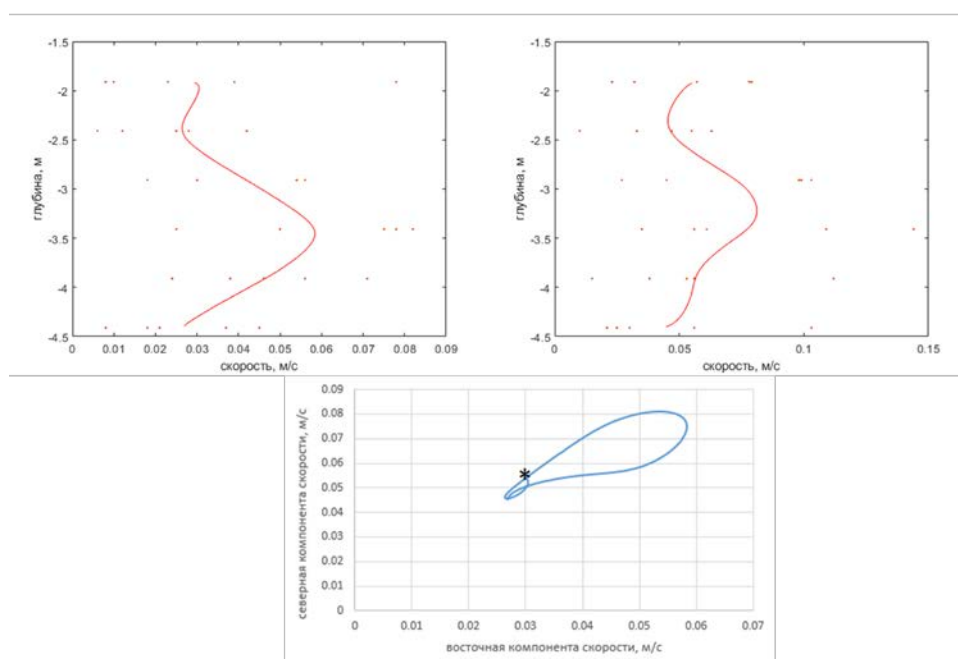


Рис. 6. В точке Т4 (слева-направо, сверху-вниз): восточная компонента скорости, северная компонента скорости, годограф скорости, полученные по методу главных кривых.

В нашей работе был применен один из методов реализации главных кривых – метод k-сегментов. Алгоритм этого метода изложен в статье [2], а программная реализация представлена в [3].

Метод главных кривых был применен для анализа данных измерений в географических точках Т3, Т4, Т7, Т8, Т9 для 5-ти последовательных измерений скорости течения в верхнем слое с 1,9 м до 6,9 м (рис. 6 – рис. 9).

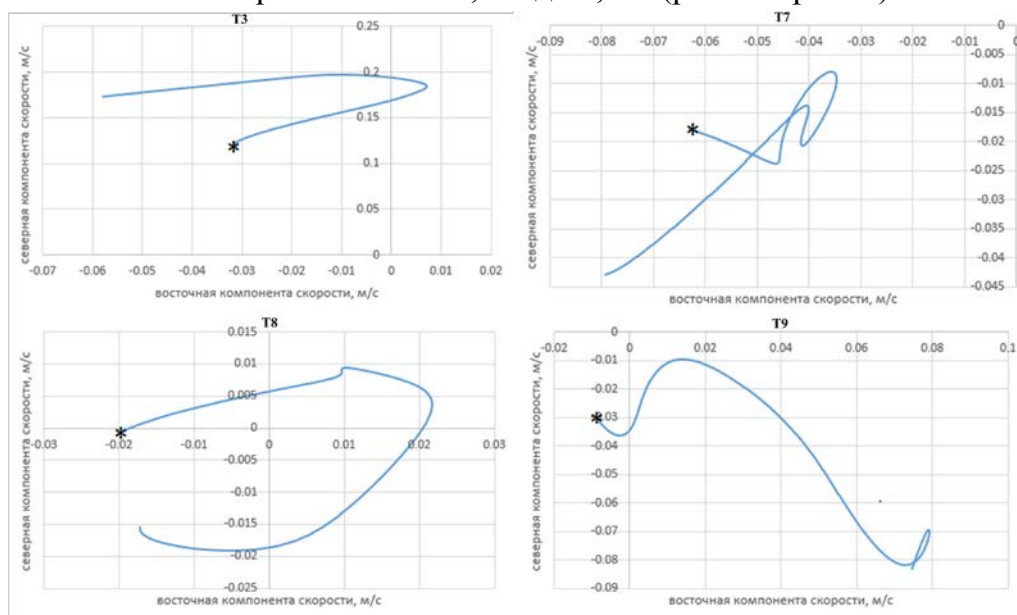


Рис. 7. Годографы скорости (слева-направо, сверху-вниз) в точках Т3, Т7, Т8, Т9.

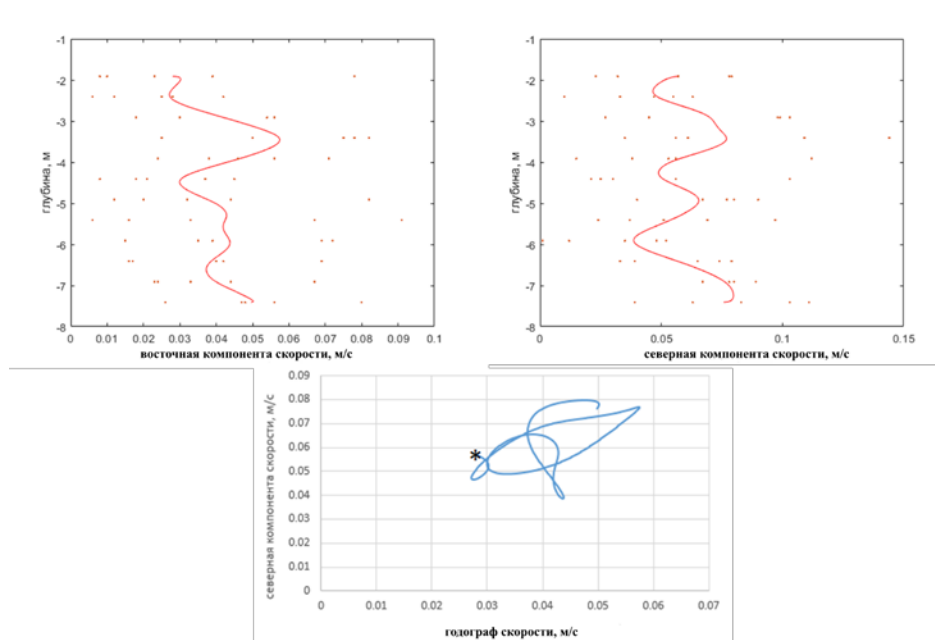


Рис. 8. В точке Т4 (слева-направо, сверху-вниз): восточная компонента скорости, северная компонента скорости, годограф скорости, полученные по методу главных кривых для 5-ти последовательных измерений скорости.

В верхнем однородном слое максимальная величина модуля восточной компоненты скорости не превышает 7,7 см/с, северной компоненты скорости – 12,4 см/с.

В точках Т4, Т8, Т9 в верхнем однородном слое происходит поворот скорости по глубине по часовой стрелке, как и в модели стационарного течения однородной жидкости. В точке Т3 этот поворот осуществляется против часовой стрелки. Интерпретировать годограф в точке Т7 сложно, так как это точка с наименьшей глубиной.

При применении метода главных кривых для анализа данных измерений по всей глубине озера имеем следующую картину (рис. 8 – рис. 9).

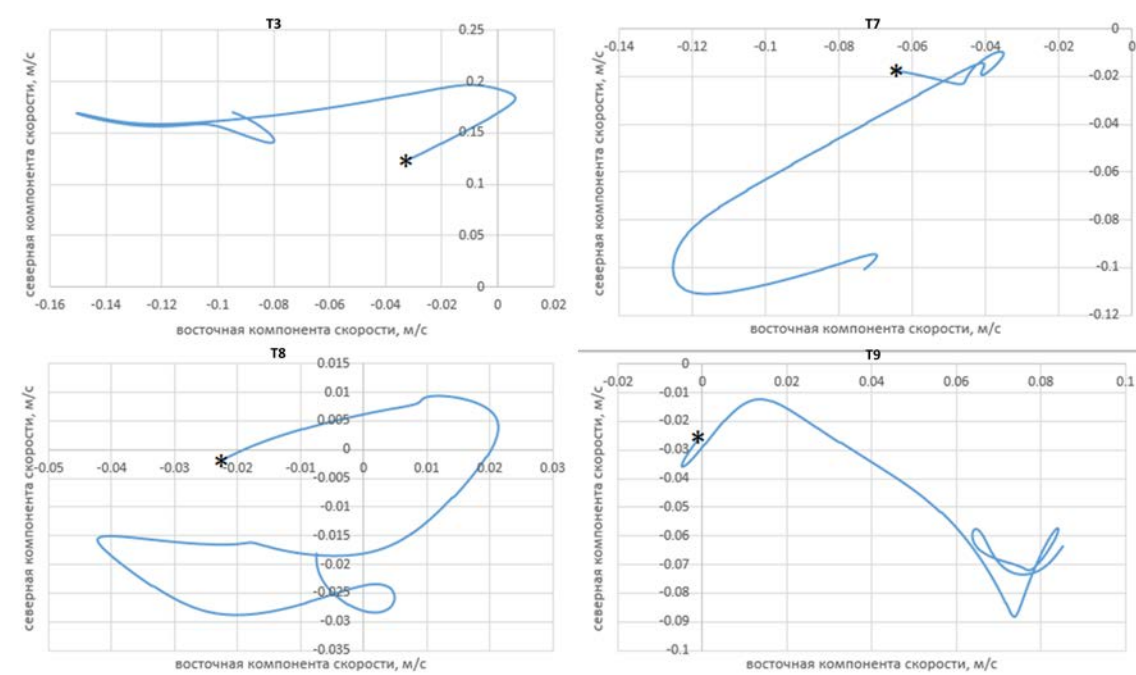


Рис. 9. Годографы скорости (слева-направо, сверху-вниз) в точках Т3, Т7, Т8, Т9.

По всей глубине измерения с 1,9 м до 12,9 м максимальная величина модуля восточной компоненты скорости не превышала 9,3 см/с, северной компоненты скорости – 11,8 см/с.

Анализ течения по всей измеряемой глубине показывает, что в точке Т3 в верхнем слое происходит поворот скорости по глубине против часовой стрелки, а знаки скоростей сохраняются по всей глубине, кроме одной точки. В точке Т4 обе скорости по всей глубине сохраняют знак. В точке Т7 сложное течение в верхнем слое, потом поворот скорости с глубиной. Скорости сохраняют знак также как в точке Т9. В точке Т8 осуществляется смена знака у двух скоростей.

В точке Т4 с помощью метода главных кривых были также

проанализированы данные 15-ти последовательных измерений скорости течения (рис. 10).

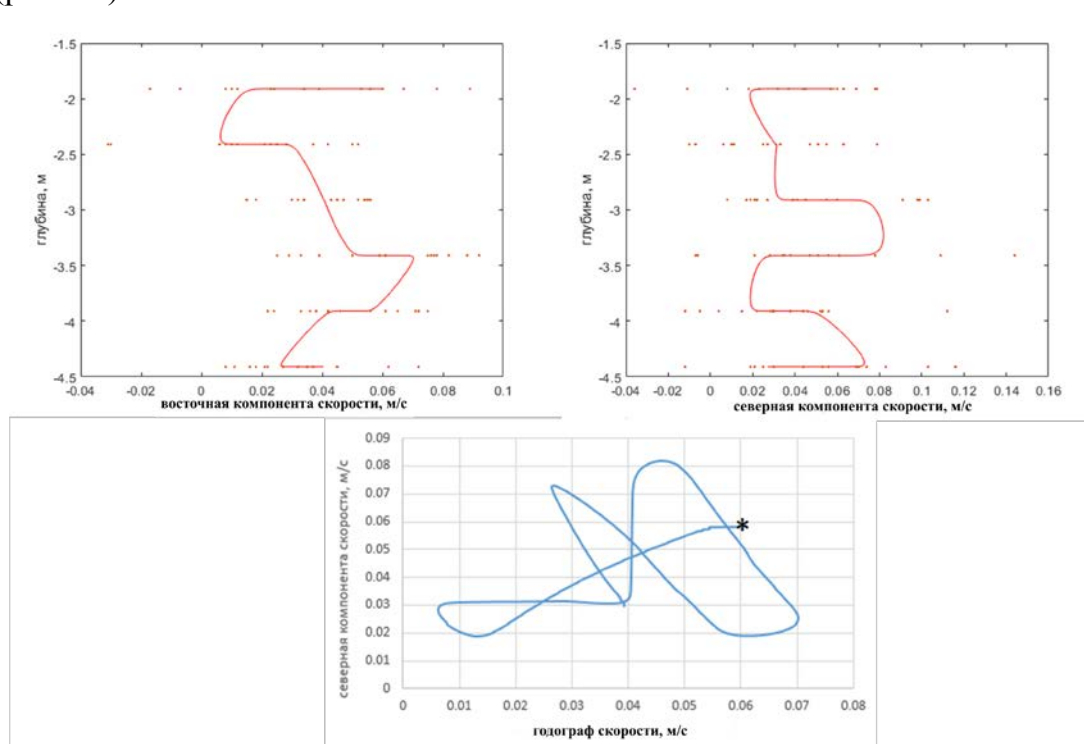


Рис. 10. В точке Т4 (слева-направо, сверху-вниз): восточная компонента скорости, северная компонента скорости, годограф скорости, полученные по методу главных кривых для 15-ти последовательных измерений скорости.

Обработка данных 15-ти последовательных измерений скорости течений даёт неудовлетворительный результат, так как определение значения скорости на нескольких горизонтах перестает быть однозначным.

Таким образом, с помощью метода главных кривых для 5-ти последовательных измерений скорости получены годографы скорости, которым можно дать физическую интерпретацию – структура течения в один момент времени в пяти различных географических точках озера. Такой результат получен впервые и может быть использован для анализа распределения фитопланктона в озере Шира.

Список литературы

1. Hastie T., Stuetzle W. Principal curves //Journal of the American Statistical Association. – 1989. – Т. 84. – №. 406. – P. 502-516
2. Verbeek J. J., Vlassis N., Kröse B. A k-segments algorithm for finding principal curves //Pattern Recognition Letters. – 2002. – Т. 23. – №. 8. – P. 1009-1017.
3. Homepage J. J. Verbeek. [Электрон. Ресурс] <http://thoth.inrialpes.fr/~verbeek/software.php> (дата обращения 24.08.2021).

СТРУКТУРНЫЕ МОДИФИКАЦИИ НАНОКЛАСТЕРОВ Ag_{75} РАЗЛИЧНОЙ НАЧАЛЬНОЙ КОНФИГУРАЦИИ ²

Д.А.Рыжкова, С.Л.Гафнер, Ю.Я.Гафнер

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

1. Введение

Нанокластеры серебра находят широкое практическое применение в различных областях промышленности. Их используют, например, в качестве добавок к композиционным волокнам, ингибиторов роста патогенных микроорганизмов на медицинских изделиях, при катализе химических реакций, в оптических сенсорах [1, 2] и т.д. При этом известно, что свойства наночастиц зависят от их размеров и формы. Последнее во многом определяет эффективность бактерицидного действия. Например, в работе [3] было показано, что наночастицы серебра в виде усеченных октаэдров проявляют большую антимикробную активность по сравнению со сферическими. В свою очередь от диаметра наночастиц серебра зависит их спектральный отклик: по мере увеличения размеров кластеров пик поверхностного плазмонного резонанса смещается в сторону длинных волн и расширяется [4].

Исследования нанокластеров при помощи микроскопа высокого разрешения показывают возможность самопроизвольного изменения структуры нанокластеров с течением времени. Этот эффект обусловлен подвижностью поверхностных атомов в сравнении с внутренними, колебания которых более ограничена ближайшими соседями. В случае малых нанокластеров повышенной устойчивостью обладают конфигурации, которые отвечают правилам плотной упаковки и представляют собой определенные завершенные геометрические типы, т.е. число атомов в которых соответствует, так называемым, структурным «магическим» числам. Кроме того, существуют электронные «магические» числа, соответствующие характерным электронным конфигурациям частиц. Возможность реализации таких модификаций была показана и для нанокластеров серебра [5].

В настоящее время нет ясности в понимании механизмов образования той или иной кристаллической структуры. Однако очевидно, что изменение морфологии наночастиц способно существенно повлиять на их свойства. Поэтому исследование устойчивости внутренней структуры нанокластеров является важной задачей. Одним из аспектов этой проблемы выступает изучение термической стабильности. Изменение характеристик системы в следствии отжига нестабильных изомеров может стать критичным в случае высокотемпературных узлов трения, диффузионных барьерных компонентов, сенсоров и т.д.

Данная работа посвящена исследованию характера термически индуцированных структурных переходов в нанокластерах Ag_{75} различной

² Представляемая работа была выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, номер гранта 19-48-190002.

начальной морфологии: ГЦК и аморфной. Число атомов в данной частице соответствует «магическому» числу декаэдра, а диаметр составляет $d \approx 1,3$ нм. При столь малом размере частиц их экспериментальное изучение оказывается связанным с рядом существенных трудностей. Для решения данной задачи эффективными оказываются методы компьютерного моделирования. В данной работе моделирование проводилось с использованием метода молекулярной динамики, который, на наш взгляд, является наиболее перспективным при исследовании структурных превращений, механизмов образования и роста НК, определении равновесных конфигураций, термодинамических свойств и кинетики проходящих процессов, динамики их изменения под влиянием внешних условий: температуры, давления и т.д.

2. Компьютерная модель

Моделирование нанокластеров проводилось методом молекулярной динамики с использованием модифицированного потенциала сильной связи TB-SMA [6]. Температура системы определялась при помощи скоростного алгоритма Верле [7] с шагом по времени 1 фс. Моделирование проводилось с использованием компьютерной программы MDNTP, разработанной Dr. Ralf Meyer, University Duisburg Germany. Наличие структурных переходов определялось по калорическим кривым зависимости удельной (в расчете на один атом) потенциальной энергии нанокластеров от температуры и программы-визуализатора OVITO [8].

Первый ансамбль исследуемых частиц – сферические ГЦК кластеры – был получен путем вырезания из идеальной ГЦК решетки с последующей термической релаксацией при 20 К. Затем данные нанокластеры ступенчато нагревались с целью полного разрушения дальнего порядка в них, а после плавно охлаждались с высоким темпом отвода тепловой энергии до начальной температуры. Из полученного массива наночастиц были выделены те, что имели аморфное строение. Таким образом был сформирован второй ансамбль нанокластеров. Исследование характера структурных переходов этих двух групп нанокластеров проводилось при помощи их ступенчатого нагрева до температуры 1000 К с шагом 20 К (в области структурных переходов с шагом 5 К). При каждом фиксированном значении частицы выдерживались в течение 1 нс.

Для сравнительного анализа также было произведено моделирование процесса охлаждения наночастиц из расплава аналогично процедуре нагрева: температура системы ступенчато уменьшалась от 1000 К до 20 К с шагом 20 К, и при каждом значении температуры нанокластер выдерживался в течении 1 нс.

3. Результаты и обсуждения

Для начала рассмотрим процесс нагрева нанокластеров Ag₇₅ с начальной ГЦК структурой. На рисунке 1 зеленым цветом показана типичная калорическая кривая. После процедуры термической релаксации частицы сохраняют исходную структуру (рисунок 2а). Она остается стабильной до температуры в среднем 370 К. После имеют место незначительные скачки потенциальной энергии, но изменения типа внутреннего строения не наблюдается. Лишь при температуре около 520 К происходит плавление нанокластера.

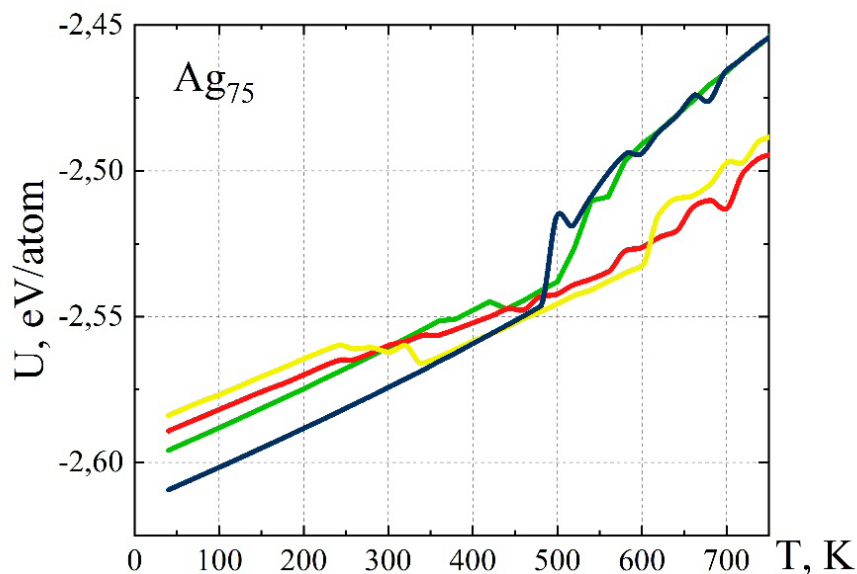


Рис. 1. Зависимость удельной потенциальной энергии нанокластеров Ag_{75} : зеленый – нагрев ГЦК частиц; красный – нагрев аморфных частиц с сохранением исходного строения; желтый – нагрев аморфных частиц с переходом к Dh-модификации; синий – охлаждение частиц из расплава с формированием Dh-строения.

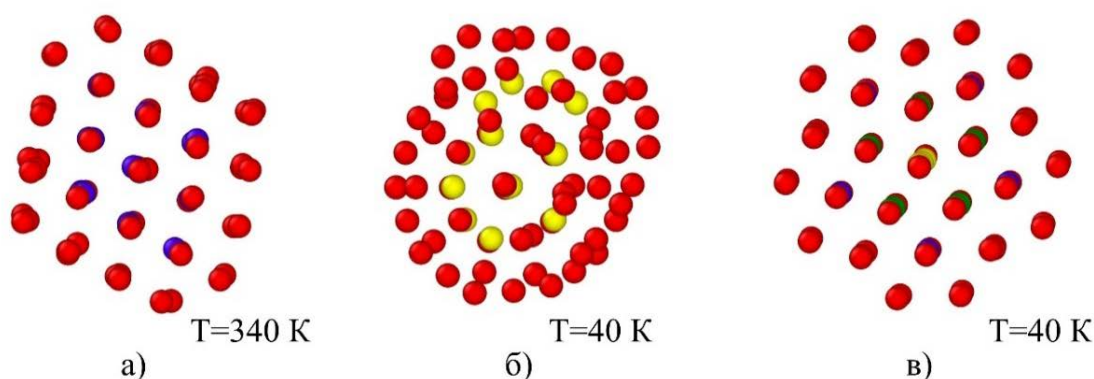


Рис. 2. Структурные модификации нанокластеров Ag_{75} : а – нагрев ГЦК частиц; б – охлаждение из расплава, Ih-структура; в – охлаждение из расплава, Dh-структура.

Число атомов в данных частицах соответствует «магическому» числу декаэдра (Dh). Логично было бы предположить, что в ходе нагрева ГЦК частицы, при достижении определенных значений температуры, нанокластеру было бы энергетически выгодней произвести переход к Dh-модификации. Однако этого не происходит. Поэтому, прежде чем переходить к рассмотрению второго ансамбля частиц, проанализируем процесс ступенчатого охлаждения нанокластера Ag_{75} из расплава. В данном случае реализуются две структуры: икосаэдрическая (Ih) модификация с незавершенной внешней оболочкой (рисунок 2б) и Dh-структура (рисунок 2в). Причем именно второй случай характеризуется минимальной удельной потенциальной энергией нанокластера

(рисунок 1, синяя линия): $\Delta U = 13,6$ мэВ/атом в сравнении с ГЦК-модификацией, против $\Delta U = 3,3$ мэВ/атом для Ih-модификации.

Далее рассмотрим процесс нагрева нанокластера Ag_{75} с начальной аморфной структурой. Наиболее характерным поведением для данных частиц (60% опытов) является сохранение аморфной морфологии (рисунок 3а). При этом калорическая кривая характеризуется плавным увеличением потенциальной энергии без резких скачков (рисунок 1, красная линия). Наиболее редкий вариант эволюции (10% опытов) – формирование Ih-модификации. Причем здесь уместнее говорить об образовании некоторого зародыша данной структуры (рисунок 3б), внешний слой атомов остается подвижным и нестабильным. Третьим сценарием выступает формирование Dh-модификации (рисунок 3в) в интервале температур от 300 до 400 К, которое наблюдается в 30% опытов (желтая кривая на рисунке 1). Данная структура отвечает стабильной конфигурации, что видно при сравнении с калорической кривой для случая охлаждения нанокластера из расплава. При этом наблюдается повышение температуры плавления до значений около 600 К. Здесь можно отметить, что удельные потенциальные энергии нанокластеров в Dh-строении и аморфной морфологией при $T > 500$ К различаются незначительно (на величину $\Delta U \approx 3,5$ мэВ/атом).

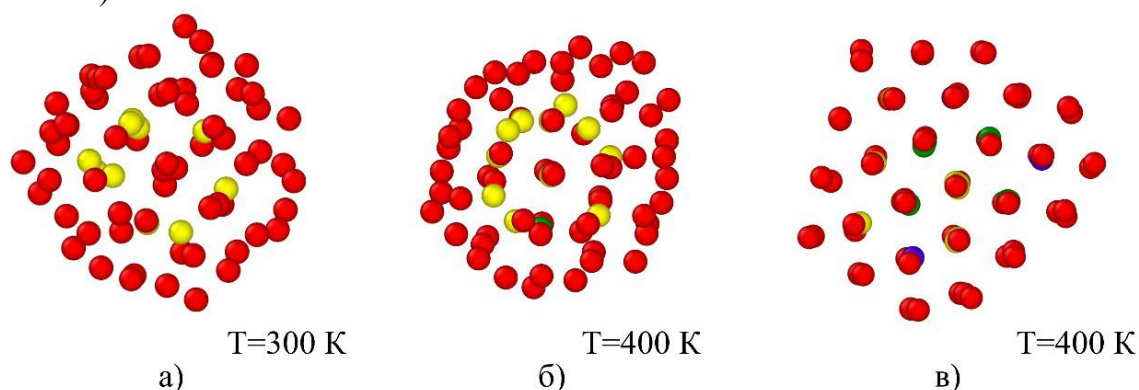


Рис. 3. Структурные модификации нанокластеров Ag_{75} начальной аморфной морфологии: а – аморфный; б – Ih-структура; в – Dh-структура.

4. Заключение

В данной работе методом молекулярной динамики с использованием модифицированного потенциала сильной связи TB-SMA было произведено исследование характера термически индуцированных структурных переходов в нанокластерах Ag_{75} при вариации их начальной морфологии.

Число атомов в данной частице соответствует «магическому» числу декаэдра. Именно Dh-конфигурация является наиболее энергетически выгодной по сравнению с другими реализуемыми вариантами. Однако ее формирование оказывается значительно затруднено. Так при охлаждении нанокластеров из расплава Dh-структура реализуется только в 20% опытов, несмотря на значительное энергетическое преимущество. Возможно это связано непосредственно с условиями охлаждения, а поэтому этот аспект требует дополнительного отдельного рассмотрения.

В рамках данного исследования очевидно, что начальная структура

нанокластера во многом определяет путь, по которому будет в дальнейшем проходить его структурная эволюция. Так частицы Ag_{75} с ГЦК строением обладают высокой стабильностью вплоть до точки плавления. А нанокластеры с начальной аморфной морфологии характеризуются несколькими реализуемыми модификациями: могут сохранять исходное строение, формировать структуру близкую к Ih-модификации или Dh-конфигурацию. Такое разнообразие, по всей видимости, обусловлено изначальным разупорядочиванием атомов в нанокластере, обеспечивающим большее разнообразие вариантов структурной эволюции частицы.

Список литературы

1. Garcia, A.M. Direct evaluation of microbial growth dynamics and colloidal stability of silver nanoparticles stabilized by poly(vinyl pyrrolidone) and poly(vinyl alcohol) / A.M. Garcia, M.A. Bizeto, V.B. Ferrari, et al. // *Journal of Nanoparticle Research*. – 2020. – V. 22. – I. 6. – Art. № 137. – 14 p.
2. Syafiuddin, A. Review of silver nanoparticles: research trends, global consumption, synthesis, properties, and future challenges / A. Syafiuddin, Salmiati, M.R. Salim et al. // *Journal of the Chinese Chemical Society*. – 2017. – V. 64. – I. 7. – P. 732–756.
3. Kim, D.H. Effect of the size and shape of silver nanoparticles on bacterial growth and metabolism by monitoring optical density and fluorescence intensity / D.H. Kim, J.C. Park, G.E. Jeon et al. // *Biotechnology and Bioprocess Engineering*. – 2017. – V. 22. – P. 210–217.
4. Mogensen, K.B. Size-Dependent Shifts of Plasmon Resonance in Silver Nanoparticle Films Using Controlled Dissolution: Monitoring the Onset of Surface Screening Effects / K.B. Mogensen, K. Kneipp // *The Journal of Physical Chemistry C*. – 2014. – V. 118(48). – P. 28075–28083.
5. Kaatz, F.H. Magic Mathematical Relationships for Nanoclusters / F.H. Kaatz, A. Bultheel // *Nanoscale Research Letters*. – 2019. – V. 14. – Art. No. 150.
6. Cleri, F. Tight binding potentials for transition metals and alloys / F. Cleri, V. Rosato // *Physical Review B*. – 1993. – V. 48. – I. 1. – P. 22–33.
7. Verlet, L. Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules / L. Verlet // *Physical Review*. – 1967. – V. 159. – I. 1. – P. 98–103.
8. Stukowski, A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the open visualization tool / A. Stukowski // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2010. – V. 18. – I. 1. – P. 015012-1–015012-7.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ ГЕНОВ ФОТОСИНТЕТИЧЕСКИХ СИСТЕМ I И II ХЛОРОПЛАСТОВ И ЦИАНОБАКТЕРИЙ

М.Ю. Сенашова

Институт вычислительного моделирования СО РАН, msen@icm.krasn.ru

Введение.

Солнце является основным источником энергии на Земле, и ряд организмов приспособился использовать эту энергию для своих нужд. Растения, водоросли и цианобактерии растут благодаря своей способности использовать солнечный свет для извлечения электронов из воды. Так возник фотосинтез и, соответственно, фототрофное питание. К фотосинтезирующим организмам относятся фототрофные бактерии и зеленые растения. Изучение структуры и функций фотосинтетической системы играет важную роль, поскольку растения являются основными поставщиками кислорода и продовольствия. Поэтому всестороннее изучение процесса фотосинтеза и фотосинтетических систем очень актуально. В последнее время достигнут значительный прогресс в определении пространственных структур фотосистемы как хлоропластов наземных растений, так и цианобактерий. Однако, они продолжают привлекать интерес исследователей. Большое количество работ посвящено изучению различных аспектов структуры фотосинтетических систем I и II как математическими, так и биологическими методами [1-20].

В данной работе рассматривается пространственная структура генов хлоропластов, относящихся к фотосинтетической системе I и II. Под структурой будем понимать распределение точек, соответствующих частотным словарям генов фотосинтетических систем в 64-мерном пространстве триплетов. Этот подход отличается от рассмотрения структуры этих генов с точки зрения биологии.

Материалы и методы.

Введём основные понятия. Мы будем рассматривать гены фотосинтетических систем как символьные последовательности различной длины, состоящие из символов алфавита $\mathfrak{M} = \{A, C, G, T\}$. Если последовательность содержит символы, отличающиеся от символов алфавита $\mathfrak{M}$, то такие символы из последовательности удаляются, а длина последовательности уменьшается на число таких символов. Каждой из этих последовательностей мы будем ставить в соответствие частотный словарь толщины 3. Частотный словарь толщины 3 символьной последовательности, соответствующей ДНК — это список всех троек $v_1v_2v_3$ идущих подряд нуклеотидов с указанием частот этих троек; всего может быть 64 триплета. Частота f_ω — это отношение числа копий n_ω данного слова к общему числу

всех триплетов N , где N — сумма всех n_ω :

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

Всякий частотный словарь W_3 отображает символьную последовательность в 64-мерное метрическое пространство; близость двух геномов задается естественным образом — например, как близость двух точек в Евклидовой метрике:

$$\rho(W_3^1, W_3^2) = \sqrt{\sum_{\omega=AAA}^{TTT} (f_\omega^1 - f_\omega^2)^2}. \quad (2)$$

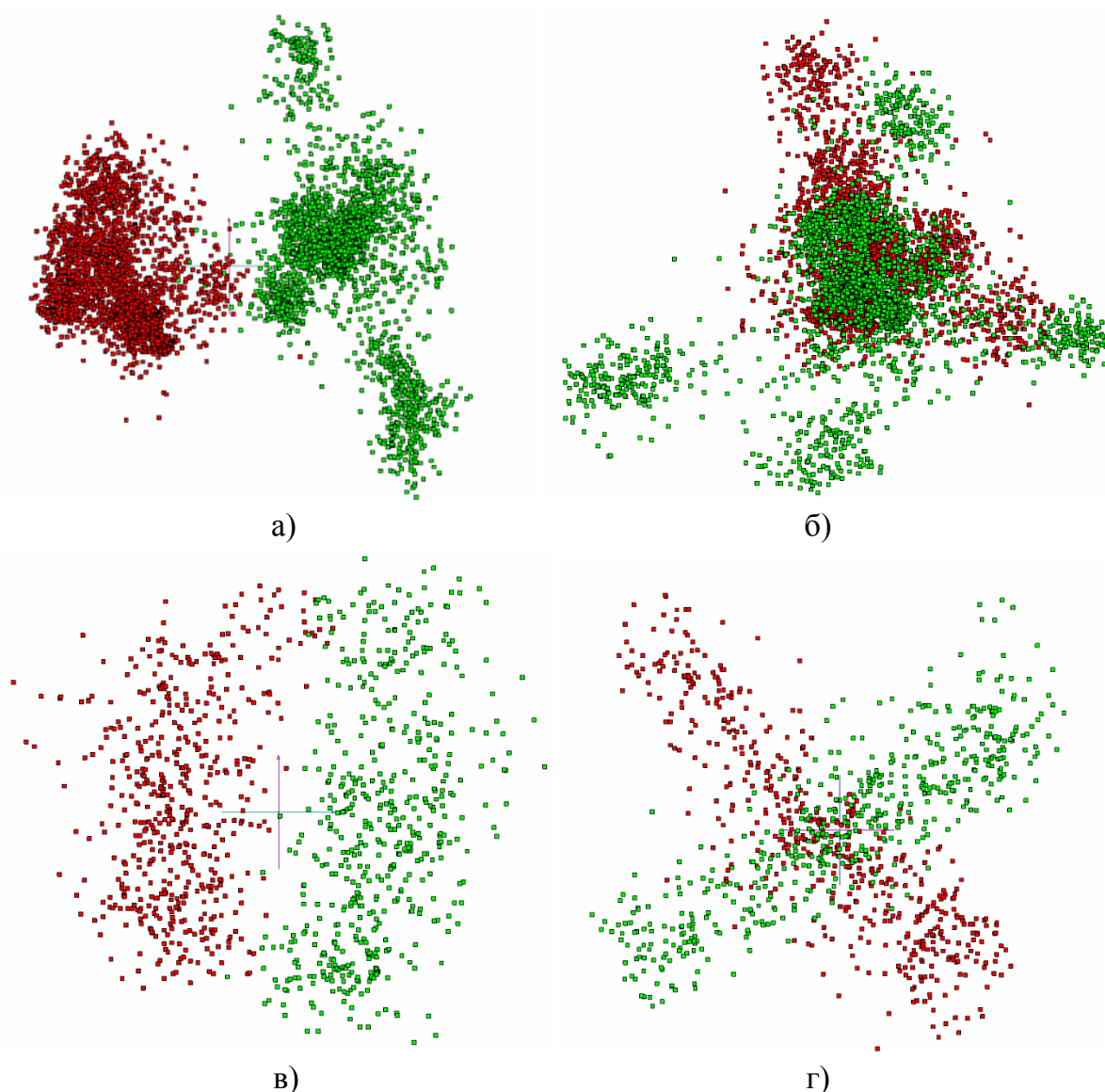


Рис. 1. Проекция генов фотосистемы хлоропластов в плоскость первой и второй главных компонент а) и второй и третьей главных компонент б). Проекция генов фотосистемы цианобактерий в плоскость первой и второй главных компонент в) и в плоскость второй и третьей главных компонент г). Гены, лежащие в прямом стренде, обозначены красным цветом, гены, лежащие в обратном стренде, обозначены зеленым цветом.

Для выявления структуры в наборе генов проводилась предварительная обработка, которая ставила в соответствие данному набору символьных последовательностей множество точек в 64-мерном пространстве триплетов. Каждому гену соответствует своя точка. Кроме названия гена, с точкой связаны название вида, которому принадлежит ген, к какому стренду ген относится – прямому или обратному, GC -состав гена. По полученному множеству точек в программе *VidaExpert* (<http://bioinfo-out.curie.fr/projects/vidaexpert/>) строился вид данных в пространстве первых трёх главных компонент, вычисленных для 64-мерного пространства триплетов. Рассматривались проекции на плоскости пространства первых главных компонент.

Результаты.

У 570 геномов хлоропластов, имеющих на настоящий момент в EMBL-банке, были выделены гены фотосинтетической системы I и II. В исследуемом наборе геномов были обнаружены следующие гены: *psaA*, *psaB*, *psaC*, *psaI*, *psaJ*, *psaM*, *psbA*, *psbB*, *psbC*, *psbD*, *psbE*, *psbF*, *psbG*, *psbH*, *psbI*, *psbJ*, *psbK*, *psbL*, *psbM*, *psbN*, *psbT*, *psbT*. У рассмотренных 45 геномов цианобактерий кроме указанных выше были обнаружены следующие гены: *psaD*, *psaE*, *psaF*, *psaK*, *psaL*, *psaX*, *psbO*, *psbP*, *psbQ*, *psbU*, *psbV*, *psbW*, *psbX*, *psbY*, *psbZ*.

Для каждого гена был построен частотный словарь $W_{(3,3)}$. Частотный словарь $W_{(3,3)}$ представляет собой множество частот триплетов, причем триплеты в гене брались без пересечения троек символов. Частотный словарь соответствует точке в 64-мерном пространстве. Таким образом, каждому гену соответствует точка в пространстве частот триплетов. Для визуализации пространственной структуры, образованной множеством этих точек, была построена проекция в пространство первых трех главных компонент. Было обнаружено, что как в случае генов фотосистемы хлоропластов, так и в случае генов фотосистемы цианобактерий множество точек образует два больших кластера, один из которых включает точки, относящиеся к генам прямого стренда, а другой – точки, относящиеся к генам обратного стренда (рис. 1). Это существенно отличает пространственную структуру генов фотосинтетических систем I и II хлоропластов и цианобактерий от пространственной структуры полных геномов хлоропластов, митохондрий и бактерий, где такой кластеризации не наблюдается [21-23].

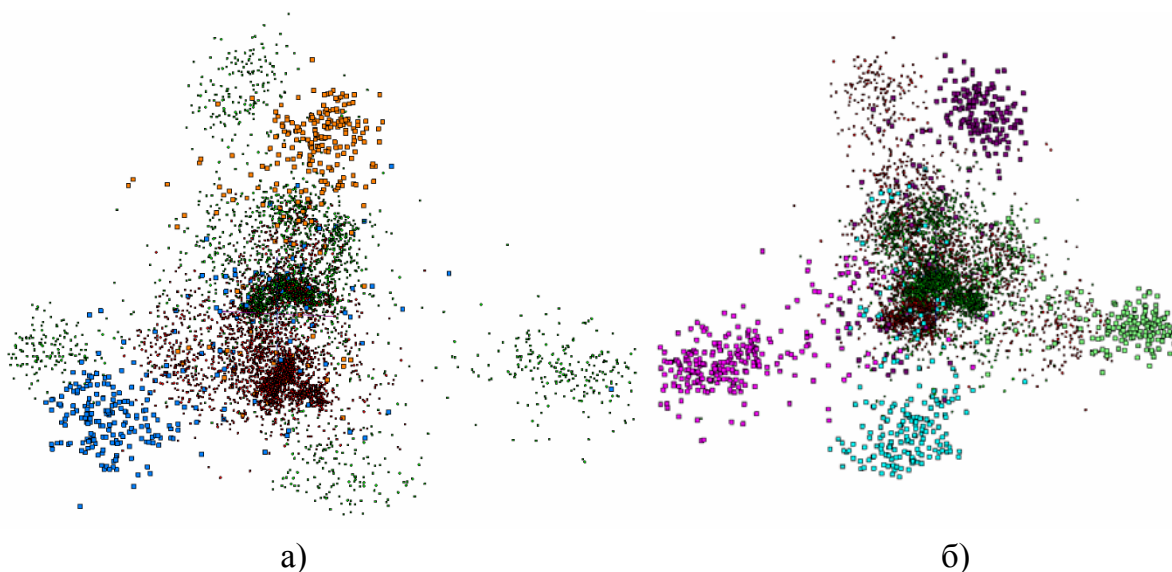


Рис. 2. Гены, образующие группы точек, отстоящих от основных кластеров в плоскости второй и третьей главных компонент.

Кроме того, было обнаружено, что у генов фотосистемы хлоропластов кроме двух основных кластеров, соответствующих прямому и обратному стренду, выделяются 6 групп точек, достаточно далеко отстоящих от основных кластеров. Эти группы точек соответствуют генам *psaI* и *psbI*, которые относятся к прямому стренду (рис. 2а), и генам *psbF*, *psbJ*, *psbL* и *psbN*, которые относятся к обратному стренду (рис. 2б). На рис. 2. эти группы точек выделены каждая своим цветом. Гену *psaI* соответствуют точки синего цвета, гену *psbI* – оранжевого цвета, гену *psbF* – бирюзового цвета, гену *psbJ* – малинового цвета, гену *psbL* – светло-зеленого цвета и гену *psbN* – фиолетового цвета. Остальные точки окрашены по принадлежности к стрендам и имеют меньший размер для наглядности. Эти гены присутствуют и в кластере, относящемся к прямому стренду, но там их достаточно мало. Ген *psbF* у высших растений состоит примерно из 38 аминокислот, β -субъединица цитохрома b_{559} . Ген *psbJ* важен для сборки ФСII, регулирует поток электронов на пул пластохинонов. Ген *psbL* необходим для работы сайта Q_a , предотвращает возврат электрона с сайта Q_b на Q_a . Ген *psbN* участвует в сборке реакционного центра фотосистемы II. Ген *psaI* взаимодействует с геном *psaH*, связывается со светособирающим комплексом фотосистемы II. Ген *psbI* необходим для сборки и функционирования фотосистемы II. Почему именно эти гены достаточно далеко отстоят от основных кластеров требует дополнительного изучения.

У генов фотосистемы цианобактерий не обнаружено групп точек, которые образуют отдельные группы.

Отличается и признак, по которому точки группируются внутри основных кластеров. Гены фотосистемы хлоропластов группируются по типу генов. Нужно

отметить, что гены одного типа у хлоропластов расположены очень компактно, даже если они находятся в крупных кластерах, относящихся к прямому и обратному стренду, они скорее «соседствуют», чем пересекаются с генами других типов. На рис. 3а мелкими красными и зелеными квадратиками обозначены точки, относящиеся к прямому и обратному стренду, соответственно. Для наглядности несколько типов генов хлоропластов выделены цветом. Малиновым цветом обозначены точки, соответствующие гену *psbE*, бирюзовым - *psbK*, фиолетовым - *psaB*, синим - *psaC*. Напротив, гены, относящиеся к цианобактериям одного вида, образуют группы внутри стрендов. На рис. 3б показаны гены, относящиеся к *Gloeobacter kilaueensis* (идентификатор в EMBL-банке CP003587) и *Gloeobacter violaceus* (BA000045), они обозначены фиолетовым цветом, *Synechocystis* (AP012205, AP012276, AP012277, AP012278, BA000022, CP003265) обозначены малиновым цветом, *Nostoc* (CP002059, CP003552, BA000019, CP003548, CP001037) обозначены бирюзовым цветом, *Prochlorococcus marinus* (CP000551, CP00552, CP000553) обозначены светло-зеленым цветом.

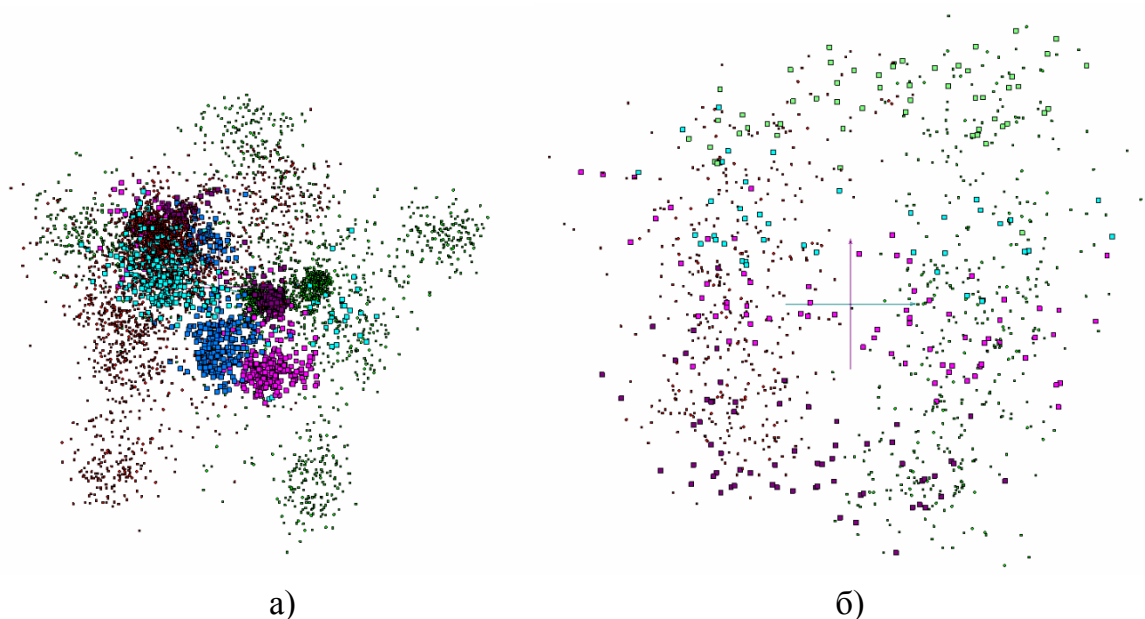


Рис. 3. Группировка точек по типу генов фотосистемы для хлоропластов а) и по виду организмов для цианобактерий б).

Было рассмотрено пространственное расположение значений GC-состава для генов фотосистемы хлоропластов и цианобактерий. Для каждого гена вычислялся его GC-состав, то есть отношение количества нуклеотидов G и C к общему числу нуклеотидов в гене. Точки, соответствующие генам со значением GC-состава меньше среднего, обозначены на рис. 4 зеленым цветом, точки, соответствующие генам со средним значением GC-состава, обозначены желтым цветом и точки со значением GC-состава больше среднего обозначены красным

цветом. Было обнаружено, что в распределении GC-состава генов фотосинтетических систем хлоропластов не наблюдается какой-либо упорядоченности. Это тоже отличает рассматриваемые гены от полных геномов хлоропластов, митохондрий и бактерий для которых характерны два типа распределения: градиентный и центральносимметричный. Для величины GC-состава генов фотосистемы цианобактерий имеет место градиентное распределение в пространстве частот триплетов. Такой тип распределения часто встречается у полных геномов. В частности, он встречается у геномов хлоропластов [23], у геномов митохондрий высших растений, водорослей, мхов, лишайников и грибов [22] и у GC-богатых бактерий.

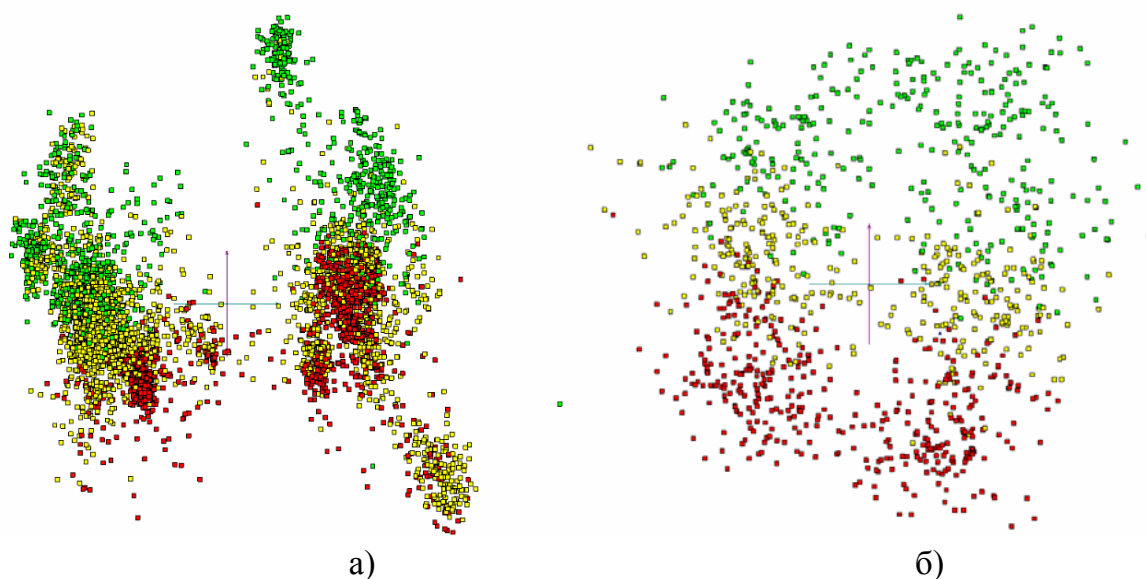


Рис. 4. Пространственное расположение значений GC-состава генов фотосинтетических систем хлоропластов а) и цианобактерий б) в плоскости первой и второй главных компонент.

Выводы.

Пространственная структура генов фотосинтетических систем хлоропластов в пространстве частот триплетов достаточно сильно отличается от подобных структур изученных ранее полных геномов хлоропластов, митохондрий и бактерий. Это касается взаимного расположения генов прямого и обратного стренда и пространственного распределения значений GC-состава генов. Кроме того, обнаружено, что точки, соответствующие генам, группируются в пространстве частот триплетов по типу генов, а не по видам соответствующих им организмов.

Список литературы.

1. Allen J. F. et al. A structural phylogenetic map for chloroplast photosynthesis //Trends in plant science. – 2011. – Т. 16. – №. 12. – С. 645-655.

2. Anderson J. M., Melis A. Localization of different photosystems in separate regions of chloroplast membranes //Proceedings of the National Academy of Sciences. – 1983. – T. 80. – №. 3. – C. 745-749.
3. Chowdhury F. A. et al. A photochemical diode artificial photosynthesis system for unassisted high efficiency overall pure water splitting //Nature communications. – 2018. – T. 9. – №. 1. – C. 1-9.
4. Hankamer B., Barber J., Boekema E. J. Structure and membrane organization of photosystem II in green plants //Annual review of plant biology. – 1997. – T. 48. – №. 1. – C. 641-671.
5. Kirchhoff H. et al. Supramolecular photosystem II organization in grana thylakoid membranes: evidence for a structured arrangement //Biochemistry. – 2004. – T. 43. – №. 28. – C. 9204-9213.
6. Kirchhoff H. et al. Low-light-induced formation of semicrystalline photosystem II arrays in higher plant chloroplasts //Biochemistry. – 2007. – T. 46. – №. 39. – C. 11169-11176.
7. Melis A., Harvey G. W. Regulation of photosystem stoichiometry, chlorophyll a and chlorophyll b content and relation to chloroplast ultrastructure //Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Bioenergetics. – 1981. – T. 637. – №. 1. – C. 138-145.
8. Nelson N., Ben-Shem A. The complex architecture of oxygenic photosynthesis //Nature Reviews Molecular Cell Biology. – 2004. – T. 5. – №. 12. – C. 971-982.
9. Staehelin L. A., Arntzen C. J. Regulation of chloroplast membrane function: protein phosphorylation changes the spatial organization of membrane components //The Journal of cell biology. – 1983. – T. 97. – №. 5. – C. 1327-1337.
10. Wang Y. et al. A quadruple-band metal–nitride nanowire artificial photosynthesis system for high efficiency photocatalytic overall solar water splitting //Materials Horizons. – 2019. – T. 6. – №. 7. – C. 1454-1462/
11. Zhang S. et al. An artificial photosynthesis system comprising a covalent triazine framework as an electron relay facilitator for photochemical carbon dioxide reduction //Journal of Materials Chemistry C. – 2020. – T. 8. – №. 1. – C. 192-200.
12. Casella S. et al. Dissecting the native architecture and dynamics of cyanobacterial photosynthetic machinery //Molecular plant. – 2017. – T. 10. – №. 11. – C. 1434-1448.
13. Gabdulkhakov A. G., Dontsova M. V. Structural studies on photosystem II of cyanobacteria //Biochemistry (Moscow). – 2013. – T. 78. – №. 13. – C. 1524-1538.

14. Heinz S. et al. Analysis of photosystem II biogenesis in cyanobacteria // *Biochimica Et Biophysica Acta (BBA)-Bioenergetics*. – 2016. – T. 1857. – №. 3. – C. 274-287.
15. Inoue-Kashino N. et al. PsbU provides a stable architecture for the oxygen-evolving system in cyanobacterial photosystem II // *Biochemistry*. – 2005. – T. 44. – №. 36. – C. 12214-12228.
16. Karapetyan N.V. Photosystem 1 of cyanobacteria: organization and functions // *Advances in biological chemistry*. - 2001. -- V. 41. -- P. 39-76.
17. Mabbitt P. D., Wilbanks S. M., Eaton-Rye J. J. Structure and function of the hydrophilic Photosystem II assembly proteins: Psb27, Psb28 and Ycf48 // *Plant Physiology and Biochemistry*. – 2014. – T. 81. – C. 96-107.
18. Nelson N., Yocum C. F. Structure and function of photosystems I and II // *Annu. Rev. Plant Biol.* – 2006. – T. 57. – C. 521-565.
19. Shen J. R. The structure of photosystem II and the mechanism of water oxidation in photosynthesis // *Annual review of plant biology*. – 2015. – T. 66. – C. 23-48.
20. Zlenko D. V. et al. Coupled rows of PBS cores and PSII dimers in cyanobacteria: symmetry and structure // *Photosynthesis research*. – 2017. – T. 133. – №. 1. – C. 245-260.
21. Gorban A.N., Zinovyev A. Yu., Popova T. G., 2005. Four basic symmetry types in the universal 7-cluster structure of microbial genomic sequences // *Silico Biology*. V.5. № 3. P.265-282.
22. Kosarev R., Senashova M., Sadovsky M. Intrinsic Structuredness of Mitochondria Genomes // *CEUR Workshop Proceedings, The 1st Siberian Scientific Workshop on Data Analysis Technologies with Applications*, 2020, V.2727, pp. 66-74.
23. Sadovsky M.G., Senashova M.Yu., Malyshev A.V. Amazing symmetrical clustering in chloroplast genomes // *BMC Bioinformatics*, 2020, 21(Suppl 2):83

ФИЗИКА ЭВОЛЮЦИИ И ЕДИНСТВО ФИЗИКИ

В.М. Сомсиков, А. М. Абылай, Д. Б. Куватова

¹Казахский национальный университет имени аль-Фараби

Многообразие объектов природы и материи, а также их форм и физических свойств привели к появлению значительного количества разделов физики, использующих, как правило, различные методы изучения природных явлений. Однако такое разделение физики, хотя и упростило ее развитие, столкнулось с большими трудностями, продиктованными единством явлений природы и взаимосвязью эволюционных процессов. К примеру, эволюция Вселенной неразрывно связана с движением ее объектов в неоднородных самосогласованных гравитационных и других полях сил, создаваемых самими объектами. С другой стороны, сами движения объектов взаимосвязаны с их внутренними состояниями. Поэтому раздельное описание динамики объектов Вселенной и изменений их внутренних состояний сталкивается с множеством проблем. Преодолеть их можно, если только иметь единую физику на общей фундаментальной основе. Но прежде, чем создавать единую физику, вначале нужно устранить существующие противоречия между самими разделами физики. Например, согласно классической механике движения тел обратимы, а согласно второму закону термодинамики их движение необратимо. Причем, устранить эти противоречия необходимо в рамках фундаментальных законов физики без привлечения каких-либо сторонних вероятностных гипотез. Естественно, что вопрос о построении единой физики существовал относительно давно и неоднократно предпринимались попытки к построению единой физической теории. Отметим только, что относительно недавно были предложены «Единая теория», «Единая теория поля», «Единая геометризованная теория поля», «Окончательная теория», «Квантовая гравитация», «Теория всего» и др. [1,2]. В них, как правило, обсуждается сам вопрос о возможности построения единой фундаментальной основы физики и пути ее построения, но сама единая физика пока не предлагается. Это, прежде всего, обусловлено тем, что процесс создания физики на единой основе сталкивается с большими трудностями. В определенной степени это обусловлено, как уже отмечалось, противоречиями разделов физики, а также тем, что теории строились в рамках различных методов и на основе тех знаний, которыми владели физики соответствующего времени.

Построение единой физики можно осуществлять и поэтапно. Например, начиная с объединения классической механики, термодинамики, **статистической физики (СФ)** и кинетики. Действительно, методы описания материи в рамках этих разделов физики охватывают практически все известные в природе макропроцессы. В соответствии с этими методами в физике можно

выделить два качественно различных подхода к изучению материи. **К первому отнесем подход**, реализуемый в классической механике. Он опирается на фундаментальные законы физики. В нем на основе формализмов классической механики описывается движение тел в пространстве. При этом процессы изменения внутренних состояний тел, возникающие при их движении, не рассматриваются. **Второй подход** реализуется в термодинамике, СФ, кинетике. Он опирается на феноменологические и статистические методы изучения внутренних состояний макроскопических систем. При этом движения тел не учитываются. Объединение этих разделов физики можно осуществить, если найти путь объединения этих двух подходов.

Относительно недавно был предложен подход, позволяющий описывать процессы эволюции материи в рамках законов физики. Он опирается на **полное описание** процессов в материи, то есть, на совместное описание, как динамики тел, так и описание их внутренних процессов. Этот подход строится на основе механики структурированных тел (СТ), когда СТ представлены потенциально взаимодействующими **материальными точками (МТ)**. Механика СТ построена путем макро-описания движения СТ на основе микро-описания движения его элементов. Такое построение реализуется, используя **принцип дуализма симметрии (ПДС)**. ПДС утверждает, что динамика тел определяется, как **симметриями пространства, так и их симметриями**. Согласно ПДС, динамика СТ определяется законом сохранения энергии тела. Причем энергия представляет собой сумму внутренней энергии и энергии движения тела. Такое описание названо «**полным описанием**», поскольку в нем макропараметры, определяющие динамику тел, выражаются через микропараметры, определяющие динамику их элементов. В общем случае механика СТ позволяет изучать **открытые неравновесные динамические системы (ОНДС)**, заданные **статистическим ансамблем (СА)**. Причем СА представляет собой совокупность движущихся относительно друг друга взаимодействующих равновесных СТ. В отличие от механики Ньютона для МТ, эта механика строится на основе уравнения движения для тела в виде системы, что позволило учесть взаимосвязь динамики системы и изменений ее внутреннего состояния [3]. Полное описание открыло возможность построения "**физики эволюции**", то есть физики, описывающей процессы возникновения, развития и распада систем.

Здесь рассмотрим вопрос о построении общей теоретической основы для классической механики и эмпирических разделов, таких, как термодинамика, СФ, кинетика. Покажем, что создание такой основы возможно в рамках «**полного описания**» [3]. Для этого вначале приведем и сопоставим принципы построения классической механики, термодинамики, СФ, кинетики, а также принципы построения физики эволюции на основе механики СТ. Затем

рассмотрим, как эмпирические принципы феноменологических разделов физики непосредственно следуют из законов физики. Это позволит объединить два упомянутых выше подхода к изучению материи на единой основе фундаментальных законов физики.

Принципы построения классической механики

Основы современной классической механики были заложены Ньютоном. Ключевым для нее является его уравнение движения для МТ:

$$m\dot{\vec{v}} = -\partial U / \partial \vec{r}. \quad (1)$$

Здесь m -масса МТ, v - скорость МТ, U -потенциальная энергия, r -координаты МТ.

Ур. (1) можно построить из закона сохранения энергии движения, который следует из симметрий пространства. Ур. (1) обратимо. Согласно однородности времени, энергия движения МТ сохраняется. Причем энергия движения представляет собой сумму кинетической и потенциальной энергий МТ. Положение МТ однозначно определяется потенциальной и кинетической составляющими энергиями, а значит, точками фазового пространства (ФП).

В основах классической механики лежат канонические формализмы. Для их построения при условии голономности связей и потенциальности коллективных сил, помимо ур. (1), использовались принцип Даламбера, законы сохранения энергии, импульса, момента импульса [4-6]. Эти формализмы позволяют получать уравнения движения систем МТ в полном соответствии с законами Ньютона. Поэтому классическую механику можно назвать обратимой Ньютоновской механикой.

В рамках формализмов классической механики выводится уравнение Лиувилля для функции распределения СТ в ФП:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^N (\dot{R}_i \frac{\partial f}{\partial R_i} + P_i \frac{\partial f}{\partial P_i}) = 0 \quad (2)$$

Согласно ур. (2), в следствие закона сохранения энергии, объем ФП сохраняется, а динамика гамильтоновых систем обратима. Поскольку формализм Гамильтона, построенный на основе закона сохранения энергии при условии выполнения требования голономности связей, лег в основу уравнения Шредингера квантовой механики, то и квантовая механика также обратима. В целом, механика Ньютона позволила решить огромный ряд актуальных проблем, включая проблемы движения планет. Причем, законы сохранения энергии, принцип наименьшего легли в основы всей физики.

Как оказалось, бесструктурность модели тела в ур. (1), требования выполнения условий голономности связей и потенциальности коллективных сил, используемые при выводах формализмов классической механики, исключают возможность учета работы непотенциальных внешних сил, типа трения. Но

именно эти силы отвечают за изменение внутренней энергии СТ при его движении в неоднородных полях внешних сил и за необратимость [3]. В результате возникла проблема объяснения процессов эволюции, которые подчиняются второму закону термодинамики. Вследствие этого формализмы классической механики применимы лишь для частных случаев движения систем, когда можно пренебречь изменениями их внутренней энергии или состояний. По этой причине все попытки объяснения термодинамических законов, опираясь на формализмы классической механики, оказывались безуспешными. Наибольшую трудность здесь сопряжены с объяснением второго закона термодинамики.

Чтобы определить связь законов термодинамики с законами классической механики, рассмотрим основные принципы термодинамики.

Принципы построения термодинамики

Термодинамические методы изучения состояний макроскопических тел являются феноменологическими. Задача термодинамики состоит в определении экспериментальным образом закономерных связей между такими измеряемыми параметрами тел, как давление, плотность, температура и т.д.

Как и в классической механике, в основах термодинамики лежат законы сохранения энергии и понятие работы, осуществляемой над СТ внешними силами. При этом отличие понятия работы в термодинамике от понятия работы в классической механике состоит в том, что эта работа идет на изменение внутреннего состояния системы, а не на ее перемещение в пространстве. То есть, рассматриваются только такие процессы, определяемые внешними воздействиями на СТ, при которых его центр масс покоится.

В результате опыта было установлено, что передаваемая равновесной СТ энергия, или работа внешних сил, совершаемая над неподвижным СТ, определяется следующим уравнением [7, 8]:

$$dE = dQ - PdY, \quad (3)$$

Где P – давление, Y – объем, Q – количество тепла. Полный дифференциал dE , который эквивалентен дифференциалу от термодинамического адиабатического потенциала.

Ур. (3) выражает основной принцип энергии в термодинамике. В нем используются отсутствующие в классической механике параметры, характеризующие коллективные состояния элементов тела, такие, как давление, тепло, температура и энтропия. Согласно (3), работа внешних сил, осуществляемая над СТ, распадается на две части. Первый член в правой части (3) определяет работу внешних сил, которая идет на нагрев СТ. Для близких к равновесию систем этот член (3) может быть представлен следующим образом:

$$dQ = TdS \quad (4)$$

Здесь T – температура, S – энтропия.

Согласно установленному эмпирическим образом второму закону термодинамики при любых термодинамических процессах имеет место неравенство:

$$dS / dt \geq 0 \quad (5)$$

Условие (5) свидетельствует о необратимости термодинамических процессов. Второй член в (3) зависит от давления и объема. Он определяет работу, которая идет на изменение объема СТ.

Таким образом, согласно принципу энергии, работа внешних сил распадается на две части. Одна часть необратимо идет на нагрев СТ, а вторая часть работы, как и в классической механике, может быть обратимой. В соответствии с этим существуют процессы и соответствующие им функции состояния, при которых температура и энтропия могут оставаться постоянными. Эти процессы являются изотермическими и адиабатическими соответственно. При этом, если температура была на интуитивном уровне понятна, то понятие энтропии требовало объяснения. В связи с необходимостью обоснования эмпирических закономерностей термодинамики и трудностями описания необратимой динамики СТ с огромным числом элементов в рамках детерминированных законов классической механики, возникла **СФ**. В ее основе используется предложенная и разработанная Больцманом молекулярно-кинетическая теория строения тел и соответствующая ей модель СА [8]. Основными задачами СФ являются обоснование термодинамики в рамках молекулярно-кинетической модели тела, а также изучение эволюции неравновесных систем.

Принципы статистической физики

Рассмотрим принципы построения СФ, начиная с введения понятий вероятности для состояний систем, функции распределения элементов системы, взаимосвязи понятий энергии и энтропии. Это необходимо, чтобы определить взаимосвязь закономерностей поведения СТ, полученных статистическим образом с их закономерностями, которые следуют из физики эволюции. В частности, это позволит проследить, как в СФ приходят к диссипативному уравнению движения на основе статистических закономерностей, и сопоставить это уравнение с уравнением движения СТ, полученным детерминированным образом.

Поставленные перед СФ задачи определили подходы и круг принципов ее построения. Так, изучение внутренних состояний тел и их изменений, обусловленных внешними воздействиями, строится на основе законов статистики. **При этом вопрос о движении тел в результате внешних воздействий, который является основным для классической механики, исключается из рассмотрения.** То есть, в рамках СФ изучаются внутренние

состояния покоящихся тел. Статистический метод изучения состояний тел, основанный на их модели в виде СА, позволил обосновать законы термодинамики и объяснить природу установления равновесия в рамках статистических закономерностей.

Огромность количества элементов, из которых состоят тела, послужило основанием ключевым для СФ утверждения, что **для описания поведения и свойств макроскопических тел невозможно использование уравнений движения классической механики**. Именно это утверждение определило статистические подходы к развитию методов СФ. Они оказались удобными для описания состояний квантовых и классических систем на основе функции распределения, зависящей от обобщенных координат и импульсов. Это позволило строить статистические методы на основе представления тела в виде системы бесструктурных элементов. При этом, как правило, используется условие, что тела являются замкнутыми и неподвижными. Чтобы преодолеть трудности, связанные с постоянством энергии замкнутого тела, используется еще одна ключевая гипотеза. Она заключается в том, что **любую замкнутую систему можно задать в виде СА, представленную перемещающимися относительно друг друга открытыми равновесными СТ**. В СТ флуктуируют все параметры, включая энергию. Причем для близких к равновесию СА **каждая СТ отображает свойство СА**. Это чрезвычайно важное свойство равновесных СТ позволяет использовать условие эргодичности, согласно которому усреднение по ФП эквивалентно усреднению по времени [Синай].

Статистические закономерности в СФ вводятся с помощью условия, согласно которому для замкнутого близкого к равновесию СТ при стремлении времени $T \rightarrow \infty$ можно ввести понятие вероятности нахождения СТ в заданном достаточно малом объеме ФП.

$$\omega = \lim_{T \rightarrow \infty} \Delta t / T \quad (6)$$

Очевидно, что (6) справедливо либо для равновесного СТ, либо для **открытой неравновесной динамической системы (ОНДС)**, стационарность которой поддерживается внешними ограничениями.

В соответствии с (6) вводится понятие плотности вероятности ρ :

$$\omega = \rho(p, q) \Delta p \Delta q \quad (7)$$

Отсюда, при принятых ограничениях на систему, имеет место условие:

$$\int \rho(p, q) \Delta p \Delta q = 1 \quad (8)$$

Очевидно, что в этом случае среднее значение какой-либо функции координат и импульсов будет равно:

$$\bar{f} = \int f(p, q) \rho(p, q) \Delta p \Delta q \quad (9)$$

Согласно (9), усреднение по ФП равно усреднению по времени, что

соответствует условию эргодичности процесса. В рамках принятых ограничений для статистического ансамбля выполняется уравнение Лиувилля:

$$d\rho / dt = \sum_{i=1}^s [(\partial\rho / \partial q_i) \dot{q}_i + (\partial\rho / \partial p_i) \dot{p}_i] = 0 \quad (10)$$

Здесь p_i, q_i - импульсы и координаты одной из s подсистемы статистического ансамбля, ρ - плотность вероятности.

Уравнение Лиувилля справедливо для гамильтоновых систем, что верно вблизи состояния равновесия системы. Из (10) следует сохранения объема ФП вдоль фазовой траектории.

Сохранение плотности вероятности вдоль фазовой траектории означает, что ρ является функцией интегралов движения. То есть, аддитивные интегралы движения полностью определяют статистические свойства системы. Отсюда следует главное для СФ микроканоническое распределение системы:

$$\rho = \text{const} \delta(E - E_0) \quad (11)$$

Подчеркнем, что плотность вероятности « ρ » была введена для классических систем. Для квантовых систем необходимо учесть дискретность микросостояний. Поэтому для них вместо элемента ФП $\Delta p \Delta q$ вводится величина $\Delta \Gamma_\alpha$, определяющая число квантовых состояний в α -й СТ. В этом случае для вероятности $d\omega$ нахождения системы в каком-либо состоянии $d\Gamma$ справедливо условие:

$$d\omega = \text{const} \delta(E - E_0) \prod_{\alpha} d\Gamma_{\alpha} \quad (12)$$

Это выражение имеет место, когда для СА можно пренебречь взаимодействиями СТ. Тогда для числа микросостояний в бесконечно малом интервале энергий СТ, $d\Gamma$ выполняется условие: $d\Gamma_{\alpha} = \prod_{\alpha} d\Gamma_{\alpha}$. В этом случае взаимосвязь между числом квантовых состояний $\Delta \Gamma$ и классическим объемом ФП определяется так:

$$\Delta \Gamma = \Delta p \Delta q / (2\pi\hbar)^s \quad (13)$$

Отсюда появляется возможность ввести статистическим образом понятие энтропии в СФ. Оно вводится на основе идеи Больцмана о вероятности заполнения квантовых состояний через *статистический вес* $\Delta \Gamma$:

$$S = \ln \Delta \Gamma \quad (14)$$

Формула (14) дает статистическое определение энтропии через объем ФП. Из нее следует возможность определения вероятности $d\omega$ состояния системы через энергию:

$$d\omega = \text{const} \delta(E - E_0) e^{S(E)} \prod_{\alpha} dE_{\alpha} \quad (15)$$

Отсюда при принятых условиях имеем, что энтропия системы выражается через ее энергию. Важно отметить, что это верно только для СА вблизи

равновесия, когда можно пренебречь взаимодействиями СТ. Именно эти условия приводят к возможности построения термодинамики в рамках СФ.

Для СФ важным является распределение Гиббса или каноническое распределение. Оно лежит в основах статистического обоснования термодинамики. Это распределение определяет вероятность для выделенной из замкнутой СТ иметь энергию , определяемую ее микросостояниями. Распределение Гиббса имеет вид:

$$\omega_n = A \exp(-E_n / T) \quad (16)$$

Здесь температура « T » появляется, как производная от энтропии системы по энергии (считается, что температуры СА и всех СТ одинаковы).

Важным для СФ также является распределение Гаусса для флуктуаций физических величин, которое лежит в основе статистической теории флуктуаций. Оно строится из тех соображений, что энтропия однозначно определяется не только энергией, но и какой-либо величиной x , однозначно зависящей от энергии. В этом случае для x можно записать:

$$\omega(x) = \text{const} e^{S(x)} \quad (17)$$

Учитывая то, что энтропия вблизи равновесия имеет максимум, ее можно представить так: $S(x) = S(0) - (\beta / 2)x^2$. Отсюда имеем:

$$\omega(x)dx = \sqrt{\beta / 2\pi} \exp[-(\beta / 2)x^2]dx \quad (18)$$

Это распределением Гаусса для величины x .

Распределение Гаусса для отклонения ряда термодинамических величин от своих средних значений, которые удобно обозначить $x_1, x_2, \dots, x_n$, строится на основе энтропии $S(x_1, \dots, x_n)$, как функции этих величин. Разложение энтропии с точностью до второго порядка малости имеет вид:

$$S - S_0 = -(1/2) \sum_{i,k=1}^n \beta_{ik} x_i x_k \quad (19)$$

Отсюда при принятых ранее допущениях получаем формулу Гаусса для нескольких величин в виде:

$$\omega = \frac{\sqrt{\beta}}{(2\pi)^{n/2}} \exp(-\frac{1}{2} \beta_{ik} x_i x_k) \quad (20)$$

Важным для СФ является возможность изучения состояний неполного равновесия, когда отклонение величины x существенно превышает ее среднюю величину флуктуации, но время релаксации флуктуаций для установления неполного равновесия много меньше времени установления равновесного значения самой величины x . Флуктуации таких величин называют квазистационарными. Если в процессе приближения СА к полному равновесию в каждый момент времени его состояние определяется величиной x , то для малых значений x можно написать [6]:

$$\dot{x}_i = -\lambda_{ik} x_k \quad (21)$$

Это уравнение описывает релаксация слабо неравновесного СА.

Рассмотрим, как в СФ решается проблема описания динамики СТ с учетом трения при движении во внешней неоднородной среде, когда энергия движения СТ переходит в тепло. Эту задачу нельзя решить в рамках методов классической механики.

При диссипативных процессах канонической функции Лагранжа для макроскопического движения тела не существует. Но для достаточно малых скоростей тела $\dot{Q}_i$, когда движение СТ представляет собой малые колебания вблизи равновесия, когда для координат СТ имеет место условие $Q_i = 0$, кинетическая и потенциальная энергии СТ, как для маятника в классической механике, являются квадратичными функциями скоростей и координат соответственно. В этом случае уравнение движения СТ имеет вид:

$$\dot{P}_i = -\partial U / \partial Q_i - \sum_{k=1}^s \gamma_{ik} \partial K / \partial P_k \quad (22)$$

где Q_i – координаты СТ, $\dot{Q}_i$ – скорости, $i = 1, 2, 3 \dots 2s$ – количество степеней свободы, $U(Q_i)$ – потенциальная энергия СТ, $K(P_i)$ – кинетическая энергия СТ, постоянные γ_{ik} – коэффициенты, для которых имеет место условие $\gamma_{ik} = \gamma_{ki}$. Но так как $\partial K / \partial P_k = \dot{Q}_k$, то имеем:

$$\dot{P}_i = -\partial U / \partial Q_i - \sum_{k=1}^s \gamma_{ik} \dot{Q}_k \quad (23)$$

Согласно доказанному в СФ условию $\gamma_{ik} = \gamma_{ki}$. И силы трения можно записать так: $f_i = 1/2 \sum_{i,k} \gamma_{ik} \dot{Q}_i \dot{Q}_k$, где f_i называется *диссипативной функцией*. Тогда уравнение движения СТ приобретает вид:

$$\dot{P}_i = -\partial U / \partial Q_i - \partial f / \partial \dot{Q}_i \quad (24)$$

Первый член в правой части (24) определяет результирующую силу. Второй связан с диссипативными процессами, определяемыми внутренними свойствами СТ.

Принципы построения кинетики, включая неравновесную термодинамику

В рамках СФ изучаются равновесные или стационарные СА вблизи равновесия. Значительно более сложная задача, которая также опирается на молекулярно-кинетическую теорию, является изучение неравновесных СА и процессов установления равновесия. Здесь возникло два подхода.

Первый подход феноменологический. Он опирается на использование уравнений неравновесной термодинамики, которые представляют собой систему уравнений гидродинамики, дополненных членами, описывающими потоки различных термодинамических величин – энергии, импульса, массы, заряда и т.д. Эти члены, являющиеся эмпирическими, характеризуют неравновесные системы.

Второй подход представляет развитие статистических методов описания неравновесных процессов. Здесь, как и в СФ, опираются на молекулярно-кинетическую теорию. В нем также используется понятие функции распределения элементов СТ в ФП. Но поскольку СА неравновесна, то в отличие от СФ здесь СА - функция распределения не совпадает с равновесными функциями распределения в СФ. В рамках этого подхода выполняются расчеты диффузии, теплопроводности, вязкости, электропроводности.

Сложность описания эволюции неравновесных СА путем построения функции распределения частиц в ФП приводит к необходимости введения серьезных ограничений даже для самых простейших систем, таких как одноатомный газ. Здесь используется предложенная Больцманом идея рассмотрения изменения функции распределения в результате столкновений частиц и перехода из одного объема ФП в другой. При этом опираются на понятие вероятности перехода частиц. Она определяется так:

$$d\omega = W(y, x/\tau, t)dy \quad (25)$$

Здесь t - время выхода изображающей точки из x , W - плотность вероятности перехода в точку y за время τ .

Если плотность частиц велика, то для каждой частицы внешнее поле сил не зависит от ее движения, и движение частиц является стохастическим. Считая процесс Марковским, рассматривая переход частицы из x в y через точки z , приходят к нелинейному интегральному уравнению Смолуховского [8, 9]:

$$W(y, x/t + \tau, t_0) = \int dz W(y, z/\tau, t_0 + t) W(z, x/t, t_0) \quad (26)$$

Преобразуя (26) в линейное дифференциальное уравнение, получают уравнение Фоккера-Планка, из которого можно получить уравнение диффузии.

Предполагая τ малым и разлагая по нему плотность вероятности перехода (25), получают уравнение кинетического баланса. Из него следует формула Планка.

Ключевым для кинетики является уравнение Больцмана. Оно применимо для расчетов функции распределения газов при выполнении условия парных столкновений. Для вывода этого уравнения Больцман использовал уравнение Лиувилля, добавив в правую часть интеграл столкновения. Суть этого интеграла состоит в том, что он описывает переход частиц в результате парных столкновений из одной ячейки ФП в другую. Уравнение Больцмана достаточно хорошо описывает процессы установления равновесия в различных средах, включая плазму, хотя обладает рядом недостатков [8].

С целью исключения недостатков уравнения Больцмана, был предложен вывод кинетического уравнения для функции распределения $F^N(x_1, x_2, \dots, x_N, t)$ системы N одинаковых частиц в $6N$ -мерном ФП путем интегрирования уравнения Лиувилля [8, 9]. Метод получения решения уравнения Лиувилля опирается на n -

частичные функции распределения газа. Он приводит к уравнению ББГКИ (Борн, Боголюбов, Кирквуд, Грин, Ивон):

$$\frac{\partial F_n(x_1, x_2, \dots, x_n, t)}{\partial t} + \hat{L}_n F_n(x_1, x_2, \dots, x_n, t) = - (N - n) / V \sum_{i=1}^n \int w_{i,n+1} [\partial F_{n+1}(x_1, x_2, \dots, x_{n+1}, t) / \partial v_i] dx_{n+1} \quad (26)$$

Здесь $F_n(x_1, x_2, \dots, x_n, t)$ - n -частичная функция распределения, $\hat{L}_n = \sum_i v_i \partial / \partial r_i + \sum_i w_i \partial / \partial v_i$ - оператор Лиувилля.

Одночастичные и двухчастичные функции распределения, полученные из (26), позволяют найти необходимые для газодинамического описания величины: среднюю плотность частиц, среднюю скорость потока частиц, среднюю кинетическую энергию. Более того, из этого уравнения следуют все необходимые уравнения для неравновесной термодинамики. Подчеркнем, что уравнение Больцмана и уравнение Фоккера –Планка являются частными случаями уравнения ББГКИ.

Принципы построения механики СТ и основ физики эволюции

Мы отметили выше, что основной проблемой на пути единства классической механики, термодинамики, СФ и кинетики лежит проблема объяснения ДМН, то есть, объяснение необратимости в рамках фундаментальных законов физики. Хотя вероятностно-статистическое объяснение необратимости известно относительно давно [10, 11], ДМН был предложен сравнительно недавно [3]. Он следует из уравнения движения СТ. Ключевым принципом, на котором строилось это уравнение, является ПДС. ПДС продиктован тем, что все природные тела обладают структурой, а, значит, этой структуре также соответствует своя симметрия, определяющая динамику тела. То есть, **динамика тел определяется как симметрией пространства, так и симметрией тел**. Это означает, что полная энергия тела должна быть представлена как сумма энергии движения СТ и его внутренней энергии. Энергия движения СТ соответствует сумме потенциальной и кинетической составляющих энергий его центра масс. Внутренняя энергия соответствует потенциальной и кинетической энергии, обусловленной взаимодействиями элементов СТ и их движению относительно центра масс СТ. Причем суммарный импульс элементов, соответствующий внутренней энергии равен нулю. Такое представление энергии может быть реализовано с использованием двух групп динамических переменных: микропеременных, определяющих внутреннюю энергию, и макропеременных, определяющих энергию движения СТ. Возможность такого представления энергии обусловлена тем, что для скалярной суммы квадратов векторов выполняется следующее равенство [3]:

$$N \sum_{i=1}^N v_i^2 = N M_N V_N^2 + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N v_{ij}^2 \quad (27)$$

Вектора v_i определяют скорости МТ в лабораторной системе координат;

$i, j = 1, 2, 3, \dots, N$ - номера взаимодействующих МТ; i, j пробегает значения от 1 до N и $i \neq j$; $v_{ij} = v_i - v_j$; $V_N = (\sum_{i=1}^N v_i) / N$ - скорость центра масс СТ; $M_N = Nm$; $m=1$, и $M_N = N$; $U_N^{ins}(r_{ij}) = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N U_{ij}(r_{ij})$ - потенциальная энергия взаимодействия МТ, причем $r_{ij} = r_i - r_j$.

Это уравнение отражает глубокую связь между структурой материи, ее энергией и геометрией пространства. Первый член в правой части (27) соответствует мере «**Порядка**», а второй - соответствует мере «**Хаоса**» [3]. Второе слагаемое равно нулю, когда все векторы скорости МТ равны и совпадают по направлению. Этот случай имеет место для синхронного движения всех МТ. И наоборот, когда сумма всех векторов скоростей МТ равна нулю, первый член равен нулю. Этот случай соответствует покоящемуся СТ.

Согласно (27) кинетическая энергия СТ в микро – и макропеременных распадается на энергию движения СТ и энергии движения МТ относительно его центра масс.

$$T_N = \sum_{i=1}^N m v_i^2 / 2 = M_N V_N^2 / 2 + \sum_{i=1}^N m \tilde{v}_i^2 / 2 \quad (28)$$

В этом случае уравнение движения СТ имеет вид [8, 9]:

$$M_N \dot{V}_N = -F_N^0 - \mu V_N \quad (29)$$

Здесь M_N - масса всего СТ, состоящего из N потенциально взаимодействующих МТ, $F_N^0 = -\sum_{i=1}^N F_i^0$; F_i^0 - внешние силы, действующие на i -ю МТ; $\mu = \dot{E}_N^{int} / (V_N^{max})^2$; F_{ij} - силы взаимодействия i и j МТ; $F_{ij}^0 = F_i^0 - F_j^0$; $\dot{E}_N^{int} = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \tilde{v}_{ij} (m \tilde{v}_{ij} + F_{ij}^0 + N F_{ij})$; $V_N^{max} + \dot{E}_N^{int} / F_N^0 = 0$.

Таким образом, (29) получено из закона сохранения полной энергии СТ, равной сумме энергии движения и внутренней энергии. Согласно (29), внутренняя энергия СТ может меняться только в том случае, когда СТ движется в неоднородном пространстве. Инвариантность энергии движения СТ возможна в случае бесструктурного тела или при движении СТ в однородном пространстве. Уравнение (29) учитывает диссипативные силы, возникающие при движении СТ в неоднородных полях подобных им СТ.

Из (29) следует ДМН. Он обусловлен трансформацией энергии движения СТ в его внутреннюю энергию. Такая трансформация определяется билинейным членом (29), зависящим от микро- и макропеременных. Сам билинейный член обусловлен зацеплением микро- и макропеременных. Зацепление возникает при движении СТ в неоднородном поле сил. Билинейный член определяет нарушение симметрии времени из-за преобразования энергии движения СТ в ее внутреннюю энергию. Нелинейность, определяющая нарушение закона сохранения энергии движения была названа «**эволюционной нелинейностью**»

[3].

Эволюционная нелинейность позволила ввести понятие Д-энтропии, как отношение приращения внутренней энергии СТ к ее величине. Частным случаем Д-энтропии для неподвижного и неоднородного СТ является энтропия Клаузиуса. Д-энтропия в отличие от существующих понятий энтропии, определяется динамическими параметрами СТ. Она позволяет описывать процессы эволюции ОНДС, которые заданы совокупностью перемещающихся относительно друг друга СТ.

Важным выводом, вытекающим из механики СТ, является бесконечная делимость материи [3]. Этот вывод следует из того, что энергия движения может уменьшаться только при движении одних структурированных объектов в неоднородных полях других объектов. Только в этом случае могут возникать аттракторы, которые эквивалентны новым системам. То есть, бесструктурные объекты не эволюционируют и не могут возникать. Это означает, что **структурность материи- ее неотъемлемое свойство, без учета которого нельзя построить физическую картину материи.**

Используя (29), строится физика эволюции. Она включает в себя расширенные формализмы классической механики, в основу которых входят расширенные уравнения Лагранжа, Гамильтона, Лиувилля, а также скобки Пуассона. Построение формализмов физики эволюции выполняется подобным образом, как и построение канонических формализмов на основе фундаментальных законов сохранения энергии и импульса. Только вместо уравнения движения Ньютона, используется (29). Достоинства расширенного формализма в том, что оно применимо для описания диссипативных процессов, без которых невозможна эволюция материи. То есть, учет структурности материи открыл возможность построения эволюционной картины мира. Без учета структурности можно строить только статичную модель мира.

Физика эволюции в общем случае строится на основе модели тел, элементом которых являются **ОНДС**. Общность такой модели связана с тем, что материя, включая Вселенную, представляет собой бесконечную иерархию ОНДС, которую можно отобразить в виде иерархической лестницы. Причем, каждая ее верхняя ступень является ОНДС, элементами которой служит ОНДС на нижней ступени этой лестницы. Такая иерархичность указывает на относительность понятий энергии и энтропии. Энергия – мера порядка, энтропия-мера хаоса. Так, мерой Д-энтропии верхней ступени лестницы служит энергия движения СТ нижней ступени. Согласно физики эволюции существуют универсальные принципы, позволяющие строить модель материи.

Интегрирование уравнения (29) в общем случае невозможно. Но его важность в другом. Оно, во-первых, оно раскрывает суть энтропии динамических

систем, учитывая роль движения тел в изменении энтропии. Это нельзя сделать в рамках классической механики или в рамках СФ и кинетики. Во-вторых, изучение (29) позволило найти ДМН, установить подобие закона сохранения энергии системы и первого закона термодинамики, выявить универсальность природы нарушения симметрии, установить единство и противоположность понятий «хаоса» и «порядка», и как эти понятия определяют эволюцию материи.

Объединение разделов физики

Трудности объединения указанных нами разделов физики были связаны со следующими важными причинами. Прежде всего, в рамках классической механики не было известно объяснения ДМН. Другая трудность связана с тем, что описание огромного количества частиц для жидкости и газа не только невозможно, но и бессмысленно. Но, как оказалось, уравнение движения СТ, построенное, опираясь на принцип ПДС, благодаря наличию внутренней симметрии СТ, обладает новым свойством относительно уравнения Ньютона для МТ. В общем случае движение СТ необратимо, причем необратимость детерминированная. Это снимает ключевое противоречие между механикой и термодинамикой.

Вторая трудность, связанная с огромным количеством частиц в веществе, на самом деле, не принципиальная. Ведь сам вид уравнения движения СТ уже определяет фундаментальные свойства динамики вещества без каких-либо аналитических и численных расчетов. Покажем, как механика СТ и основанная на ней физика эволюции позволяют обосновать СФ, кинетику и термодинамику.

СФ и кинетика построены на основе модели тел в виде СА, элементом которого является СТ. Свойства СА определяются уравнением (29). То, что из (29) следует ДМН для СТ, снимает проблему обоснования второго закона термодинамики. Этот закон является ключевым для эволюции природы, поскольку эволюция невозможна без необратимости, как невозможно установление равновесия в природных системах. Согласно (29), диссипативные силы трения обусловлены увеличением внутренней энергии СТ при его движении в неоднородном поле внешних сил. Эти силы пропорциональны градиентам потенциальных сил.

Принципы, на основе которых строится механика СТ и физика эволюции, определяют феноменологические и статистические принципы термодинамики, СФ и кинетики. Основным здесь является ПДС. Согласно ПДС, энергия тел должна быть представлена, как сумма энергии движения и внутренней энергии. Причем энергия движения определяется макропараметрами, а внутренняя энергия, обусловленная взаимодействиями движущихся относительно центра масс элементов тела, определяется микропараметрами. Такое представление энергии соответствует первому закону термодинамики [3]. То есть, форма этого

феноменологического закона, представленная в виде суммы двух членов, определяющих изменение внутренней энергии, на самом деле обусловлена ПДС. В области градиентов внешних потенциальных сил возникает зацепление микро- и макропеременных, что обуславливает преобразование энергии движения, то есть, энергии «**Порядка**» во внутреннюю энергию «**Хаоса**».

Трансформация энергии движения во внутреннюю энергию обусловила возможность предложить в классической механике понятие Д-энтропии. Она определяется отношением приращения внутренней энергии СТ к ее полной величине. Д-энтропия, в отличие от известных понятий энтропии, определяется только динамическими параметрами СТ и учитывает роль динамики элементов СА в изменении их внутренних энергий. Так как Д-энтропия учитывает роль движения СТ в изменении его внутренней энергии, то она применима для эволюции ОНДС.

Отметим, что (29) справедливо для равновесного СТ. Очевидно, что равновесное СТ, для которого определена термодинамика, является частным случаем ОНДС. Такое представление тел лежит и в основах построения методов изучения СФ.

Сопоставим (24) с (29). Видим, что первый член в правой части (24) соответствует первому члену правой части (29), который определяет движение центра масс СТ. Второй член в (24) соответствует диссипативному члену (29), определяющему трансформацию энергии движения СТ во внутреннюю энергию. Этот член также определяет диссипацию. Но, в отличие от статистического аналога, он детерминированный и справедлив для любых систем. Это означает, что с его помощью можно определить константы, γ_{ik} , которые определяют характер эволюции системы на основе статистических законов.

Аналогичным образом можно сопоставить уравнение Лагранжа, полученное статистическим образом, и полученное на основе механики СТ. Если ввести функцию Лагранжа $L = K - U$, то уравнение движения (24) может быть переписано так:

$$d/dt(\partial L / \partial \dot{Q}_i) - \partial L / \partial Q_i = -\partial f / \partial \dot{Q}_i, \quad (30)$$

Как показано в СФ, функция Лагранжа для диссипативных процессов содержит ненулевую правую часть, равную производной от диссипативной функции. Как видим, форма (30) полностью совпадает с расширенным уравнением Лагранжа для СТ [3]. Отличие состоит в том, что правая часть расширенного уравнения Лагранжа представляет собой строгую аналитическую форму координат и скоростей МТ, а в (30) правая часть определяется диссипативной функцией, полученной при ряде ограничений. В целом, статистическая теория

флуктуации позволяет определять в пределах возмущений характер изменения внутренних состояний тел при изменении внешних воздействий.

СФ строится на основе модели системы в виде СА. Все СТ, входящие в СА вблизи от равновесия идентичны. Вблизи равновесия, энергия СА равна сумме энергий СТ. Как видно из представленных выше формул, это позволило статистическим образом определить энтропию через энергию. Это также позволило в линейном приближении найти взаимосвязь внутренних состояний СА с внешними воздействиями. Но все эти формулы следуют из уравнения движения СТ.

В классической механике динамика тел также определяется взаимосвязью движения тел с характером оказываемых на них внешних воздействий, но при этом пренебрегалось изменением внутреннего состояния СТ. В механике СТ, наоборот, учитывается, что внешнее воздействие приводит, как к изменениям импульса системы, так и к изменениям внутренних состояний. При этом любая подсистема СА, используемая в СФ для статистического описания, как раз и является СТ, для которого получено уравнение движения в механике СТ. В результате механика СТ позволяет описывать характер изменений состояния СА, включая при этом в описание изменения внутренних состояний и изменения движения СА в пространстве, не используя при этом статистические законы физики. То есть, выполняется **полное описание** динамики, которое имеет место для любых неравновесных систем, а не только для СА вблизи к равновесию, как в СФ. Именно это делает универсальным «физику эволюции», построенную на основах механики СТ.

Физика эволюции имеет большие возможности для описания неравновесных СА. Так, расширенное уравнение Лиувилля дает точное выражение для кинетического уравнения Больцмана, которое является его приближением. Кроме того, именно расширенное уравнение Лиувилля следует использовать для поиска и анализа функции распределения неравновесной СА, поскольку каноническое уравнение Лиувилля не учитывает диссипативные факторы, обуславливающие приближение СА к равновесию. Важность обобщенного уравнения Лиувилля еще заключается и в том, что оно позволяет перейти от детерминированного описания процессов эволюции к его статистическому описанию, благодаря операциям усреднения при определении моментов.

Выводы.

Полное описание движения тел позволяет объединить ключевые разделы физики макропроцессов на единой фундаментальной основе законов классической механики. Это, во-первых, обусловлено существованием ДМН в рамках законов физики. Он имеет свое объяснение только при учете роли

структуры тел в их динамике. Во-вторых, это связано с возможностью объяснения диссипативных сил в рамках законов классической механики без использования статистической теории флуктуаций.

Учет роли структуры тел в его динамике и эволюции внутренней структуры на основе ПДС. привел к понятию Д-энтропии, которая полностью задается динамическими параметрами. Д-энтропии позволяет описывать изменение внутренних состояний систем при их относительных движениях. Она пропорциональна градиентам потенциальных сил взаимодействия СТ.

Согласно полному описания, нарушение симметрии времени с математической точки зрения обусловлено динамической взаимосвязью групп симметрии. Такое нарушение возникает при движении СТ в неоднородном поле сил. Полное описание особенно важно при изучении эволюции Вселенной, в которой изменения структур ее объектов неразрывно связано с их относительным движением.

Список литературы

1. Hooft G. W't. Free will in the theory of everything. E-print: <https://arxiv.org/abs/1709.02874>
2. Weinberg. Dreams of a Final Theory, Vintage, New York, 1992.
3. Сомсиков В.М. Основы физики эволюции. Монография. Алматы. КазНУ. 2021.
4. Ланцош К. Вариационные принципы механики. Мир. М. 1962. 408 с.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. М. Наука. 1973. 215 с.
6. Goldstein H. Classical Mechanics. Nauka. Moscow. 1975. 416 p
7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика.Т.5. М. 1976.583 с.
8. Rumer Yu. B., Rivkin M. Sh. Thermodynamics, Stat. physics and Kinematics, Nauka, Moscow, 1977.
9. Ландау. Л.Д., Лифшиц Е.М. Физическая кинетика. М. Наука. 1979. 528 с.
10. Prigogine I. From Being to Becoming. Nauka. Moscow. 1980. 342 p.
11. Zaslavsky G.M. The physics of chaos in Hamiltonian systems. London. Imperial College Press. 2007. 269 p.

СФЕРИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И КВАНТОВЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

В.Н. Удодов

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

Рассмотрена сферическая модель Берлина-Каца [1] в рамках эпсилон-разложения [2-11]. Для двумерного и трехмерного случая в этой модели получено точное решение [1, 2], причем для двумерного случая критическая температура равна нулю, то есть, наблюдается «квантовый» фазовый переход [5, 6]. С другой стороны известно эпсилон-разложение критических индексов с произвольным числом компонентов параметра порядка [10]. Этот подход согласуется с парадигмой скейлинга (подобия) [10-13]). В работе найдены некоторые критические индексы для сферической модели в соответствии с обобщенной парадигмой скейлинга [11, 12] и идеями квантовых ФП.

1. Введение

Фазовые переходы (ФП) уже более 60 лет изучают в рамках концепции критических индексов и парадигмы скейлинга [1-12]. Для трехмерных систем (и даже двумерных систем в поле) точных решений не найдено [1-3]. Есть только одно исключение из этого правила – это так называемая сферическая модель Берлина-Каца [1, 2], для которой найдены точные решения для равновесных состояний для двумерного и трехмерного случаев при наличии поля. Интересно, что в двумерном случае (в отличие от обычной модели Изинга) критическая температура в этой модели равна нулю [1].

Цель работы: рассмотреть сферическую модель при нулевой критической температуре при учете идей квантовых ФП и обобщенной парадигмы скейлинга [8, 11-13].

2. Сферическая модель

Сферическая модель в некотором смысле является обобщением модели Изинга или модели Гейзенберга [1, 2]. Сферической модели посвящена обширная литература (см. ссылки в [1, 2]). Гамильтониан модели в нулевом поле имеет вид [1, 2]

$$H^{(D)} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \vec{s}_i^{(D)} \cdot \vec{s}_j^{(D)} . \quad (1)$$

Здесь суммирование проводится по парам ближайших соседей, i, j – номера узлов решетки, точка обозначает скалярное произведение, J – положительная константа. Однако, если в моделях Изинга и Гейзенберга $\vec{s}^{(D)}$ – D -мерные единичные векторы, то для сферической модели есть только одно условие на

длину векторов [1] (N - полное число узлов решетки)

$$\sum_{i=1,2,\dots}^N s_i^2 = N, \quad (2)$$

которое определяет поверхность гиперболы в N -мерном пространстве, по которой проводится усреднение. Это условие вводит в рассмотрение континуум состояний даже для модели конечного размера в отличие от счетного множества состояний для модели Изинга [1], поэтому суммирование заменяется интегрированием. Это приводит к тому, что для сферической модели параметр порядка имеет бесконечное число компонент [1], что соответствует пределу

$$D \rightarrow +\infty. \quad (3)$$

Для одного, двух и трех измерений для сферической модели получены точные решения [1], причем для трехмерного случая это – единственное полученное точное решение (для равновесных состояний). Этим определяется интерес к этой модели, кстати, соотношения статического скейлинга выполняются для сферической модели [1, 2]. Точные решения получены в термодинамическом пределе (для системы бесконечного размера). К сожалению, пока не найдена физическая или иная система, соответствующая сферической модели [1, 2].

Для двумерного случая для сферической модели критическая температура равна нулю (кстати, как и для одномерной модели Изинга) [1, 2], то есть в ней происходит «квантовый» фазовый переход (ФП) [4-8].

3. Квантовые фазовые переходы

Квантовыми ФП обычно называют ФП при температуре абсолютного нуля [5, 6], когда поведение системы определяется квантовыми флуктуациями. Однако квантовые ФП проявляются и при конечных температурах, иногда даже близких к комнатным [6, 12]. Оказывается, в этом случае статику нельзя отделить от динамики и свойства зависят от динамического критического индекса z [5, 6]

$$\tau \propto \xi^z, \quad (4)$$

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

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

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

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

$$d_{eff} = d + z. \quad (5)$$

Здесь динамический индекс z играет роль дополнительных пространственных измерений из-за неравновесных процессов вблизи квантовой критической точки при нулевой температуре ФП.

4. Эпсилон-разложение и квантовые ФП

В рамках так называемого ε -разложения получены разложения критических индексов при произвольном числе компонент D параметра порядка [10]. Например, для индекса Фишера M имеем [10]

$$\eta = \frac{\varepsilon^2(D+2)}{2(D+8)^2} \left\{ 1 + \frac{\varepsilon}{4(D+8)^2} [-D^2 + \dots] + \frac{\varepsilon^2}{16(D+8)^4} [-5D^4 + \dots] + \dots \right\} \quad (6)$$

Здесь [9, 10]

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

Многоточия в (6) обозначают степени D меньше, чем предыдущие. Сферической модели соответствует предел (3), в этом пределе фигурная скобка в (6) остается конечной. Множитель перед скобкой при $D \rightarrow +\infty$ стремится к нулю, следовательно, индекс Фишера для сферической модели равен нулю, причем при любой размерности пространства, это согласуется с [1]. Индекс Фишера η определяет поведение парной корреляционной функции $G = \langle \varphi(x)\varphi(x') \rangle - \langle \varphi(x) \rangle \langle \varphi(x') \rangle$ [2, 3, 10]

$$G \propto r^{2-d-\eta} f\left(\frac{r}{\xi}\right), \quad r = |x - x'|.$$

Здесь φ - флуктуирующий параметр порядка, зависящий от координат x .

Более интересные результаты получаются для других индексов. Для критического индекса корреляционной длины ν имеем [10]

$$\frac{1}{\nu} = 2 - \frac{\varepsilon(D+2)}{(D+8)} \left\{ 1 + \frac{\varepsilon}{2(D+8)^2} [13D + 44] + \frac{\varepsilon^2}{8(D+8)^4} [-3D^3 + \dots] + O(\varepsilon^3) \right\} . \quad (8)$$

В пределе (3) для сферической модели получим

$$\frac{1}{\nu} = 2 - \varepsilon = 2 - (4 - d) \quad , \quad (9)$$

откуда

$$\nu = \frac{1}{d - 2} \quad , \quad (10)$$

что согласуется с [1] для трехмерного пространства и с [10]. (10) верно для положительной критической температуры, если температура ФП $T_c = 0$, то для квантового ФП формула принимает вид (см. (5))

$$\nu = \frac{1}{d_{eff} - 2} \quad . \quad (11)$$

Для сферической модели в двумерном пространстве ($T_c = 0$) найдем, что индекс корреляционной длины связан с динамическим критическим индексом

$$\nu = \frac{1}{z} (d = 2, T_c = 0, D = +\infty) . \quad (12)$$

Для сферической модели в одномерном случае (11) примет вид

$$\nu = \frac{1}{z-1} (d = 1, T_c = 0, D = +\infty) . \quad (13)$$

Еще более интересные результаты получаются для критического индекса теплоемкости α . Согласно [1-12] имеем для обычного случая $T_c > 0$ классическое соотношение скейлинга

$$\alpha = 2 - d\nu (T_c > 0) . \quad (14)$$

Подставив сюда (10), найдем

$$\alpha = \frac{d-4}{d-2} (T_c > 0, D = +\infty) , \quad (15)$$

что согласуется с [10]. Однако для нулевой критической температуры ФП (14) меняет вид [8, 11, 12]

$$\alpha = 1 - d\nu (T_c = 0) . \quad (16)$$

Используя (10) получим новую формулу

$$\alpha = \frac{2}{2-d} = -2\nu (T_c = 0, D = +\infty) . \quad (17)$$

Для квантового ФП выражение примет вид

$$\alpha = \frac{2}{2-d_{eff}} = -2\nu (T_c = 0, D = +\infty) . \quad (18)$$

Для двумерной сферической модели вблизи абсолютного нуля индекс теплоемкости равен (см. (5))

$$\alpha = \frac{2}{-z} < 0 (T_c = 0, d = 2, D = +\infty) . \quad (19)$$

Для одномерного случая результат изменится

$$\alpha = \frac{2}{1-z} < 0 (T_c = 0, d = 1, D = +\infty) . \quad (20)$$

5. Род ФП и индекс z

Для положительной критической температуры род ФП согласно Р. Бэкстеру [2, 11, 13] равен (предполагается, что ФП происходит при изменении температуры)

$$r = 2 - \alpha (T_c > 0) . \quad (21)$$

Однако это выражение меняется, если критическая температура равна нулю [8, 11, 13], что будет для квантовых ФП при понижении температуры

$$r = 1 - \alpha (T_c = 0) . \quad (22)$$

Подставим сюда (5) и (18)

$$r = \frac{d_{eff}}{d_{eff} - 2} = \frac{1}{1 - \frac{2}{d_{eff}}} = \frac{1}{1 - \frac{2}{(d+z)}} (T_c = 0, D = +\infty) . \quad (23)$$

Это выражение имеет смысл для сферической модели для одномерного и двумерного случая (в трехмерном случае $T_c > 0$ [1, 2]).

Сначала выясним возможные значения кинетического индекса z [10]. Вычисление этого индекса связано с моделированием неравновесных (кинетических) процессов и представляет существенно более сложную задачу, чем вычисление статических индексов (например, индекса корреляционной длины ν). Это тем более сложно для квантовых ФП, для которых далеко не все ясно, поэтому ограничимся предварительными соображениями.

Вариантов динамики может быть много, рассмотрим два варианта. Согласно первому варианту для любого числа компонент параметра порядка D верна формула [10]

$$z = 2 + R\eta. \quad (24)$$

Здесь η - критический индекс Фишера (см. раздел 4), а R определяется следующим образом [10]

$$R = 0.76(1 - 0.19(4 - d) + \dots). \quad (25)$$

Для одномерного и двумерного пространства коэффициент R остается конечным, а индекс Фишера для сферической модели равен нулю (см. раздел 4), следовательно, для сферической модели в первом варианте динамический индекс z

$$z_1 = 2. \quad (26)$$

Во втором варианте динамики [10]

$$z_2 = 4 - \eta = 4. \quad (27)$$

Теперь найдем род квантового ФП для сферической модели. Для одномерного пространства в первом варианте динамики род ФП равен (см. (23))

$$r = 3, \quad (28)$$

то есть, наблюдается ФП 3-го рода с нулевым скачком теплоемкости и энтропии. Во втором варианте динамики для одномерной сферической модели получим

$$r = \frac{5}{3} > 1. \quad (29)$$

Это соответствует непрерывному ФП с нулевым скачком теплоемкости и энтропии [13].

Для двумерного пространства в первом варианте динамики для сферической модели род ФП равен двойке

$$r = 2, \quad (30)$$

однако скачок теплоемкости при этом равен нулю. Во втором варианте динамики для двумерной сферической модели род ФП равен

$$r = \frac{3}{2} > 1. \quad (31)$$

Здесь также наблюдается непрерывный ФП с нулевым скачком теплоемкости [13]. Все эти ФП являются непрерывными (скачок состояния при ФП равен нулю), односторонними и происходят при понижении температуры при постоянном нулевом поле и других параметрах (например, давлении). Низкотемпературная фаза, которая существует теоретически при абсолютном нуле, экспериментально ненаблюдаема. Во всех рассмотренных случаях критический индекс теплоемкости отрицателен, что согласуется с третьим началом термодинамики [3]. Желателен, разумеется, прямой расчет кинетического индекса z для сферической модели, в том числе для одномерного и двумерного пространства.

Говоря о других квантовых ФП (например, о переходе в сверхпроводящее состояние), заметим следующее. В таких случаях существует линия ФП, которая начинается при конечных температурах, а далее при изменении параметров температура ФП плавно уменьшается и обращается в ноль [1, 9]. В этом случае выражение (5) для эффективной размерности пространства должно быть модифицировано. Может быть предложена следующая интерполяционная формула

$$d_{eff} = d + z(1 - S_I) . \quad (32)$$

S_I -функция равна [13]

$$S_I = (1 + A_1 |t|^m) \left(\frac{T_c}{T} \right)^n , \quad T_c \geq 0 , \quad (33)$$

где $t = T - T_c$, $T_c \geq 0$, A_1 – константа любого знака; m , n – положительные константы. Константы A_1 , m , n , T_c можно найти при компьютерной обработке точных экспериментальных данных для определенного ФП или методами компьютерного моделирования (на основе экспериментальных данных). Тогда при приближении к положительной критической температуре S_I -функция стремится к единице и эффективная размерность пространства стремится к обычной размерности пространства d . Если же критическая температура равна нулю (как для сферической модели в одном и в двух измерениях или для сверхпроводимости в магнитном поле), то S_I -функция равна нулю и получим формулу (5) для квантового ФП.

6. ФП при изменении поля

Рассмотрим ФП при изменении поля при критической температуре (равной нулю), что соответствует обычной постановке задачи о квантовом ФП [5, 6]. Сначала введем некоторые понятия для сферической модели [2]. Свободная энергия модели зависит от функции [2]

$$\Phi(z) = Kz + Kd - (g(z))/2 + \frac{h^2}{4Kz} . \quad (34)$$

Здесь z – комплексная переменная (не путать с динамическим индексом!);

$$K = J / (T); h = H / T, \quad (35)$$

H - проекция напряженности магнитного поля на выделенную ось; $g(z)$ - определенная функция [2], температура измеряется в энергетических единицах. Если z действительное и положительное число, то $\Phi(z)$ имеет один минимум при положительном значении $z_0 > 0$ ($h \neq 0, K > 0$) [2], в точке которого производная равна нулю (соответствует равновесию)

$$\Phi'(z) = K - \frac{g'(z_0)}{2} - \frac{h^2}{4Kz_0^2} = 0. \quad (36)$$

(36) можно привести к виду

$$J(J - \frac{Tg'(z_0)}{2}) = \frac{H^2}{4z_0^2}. \quad (37)$$

При некоторых предположениях для сферической модели [2]

$$g'(z) = c_1 z^{(d/2)-1}. \quad (38)$$

Известно, что намагниченность для этой модели равна [2]

$$M = \frac{H}{2Jz_0}. \quad (39)$$

При критической температуре верна формула [1-3]

$$M \propto H^{1/\delta}, H \rightarrow 0, T = T_C. \quad (40)$$

δ - еще один критический индекс. Используя (39), найдем для сферической модели

$$M \propto H^{1/\delta} \propto \frac{H}{z_0}, \quad (41)$$

отсюда

$$z_0 \propto H^{1-1/\delta}. \quad (42)$$

С другой стороны для одномерного пространства (см. (38))

$$g'(z) = c_1 z^{-1/2} \quad (43)$$

и (37) приобретает вид

$$J(J - \frac{c_2 T}{z_0^{1/2}}) = \frac{H^2}{4z_0^2}. \quad (44)$$

Но для одномерного пространства критическая температура равна нулю для сферической модели [1, 2], следовательно, (44) дает

$$\frac{H}{2z_0} = J, T = T_C = 0 \quad (45)$$

или, используя (42)

$$H \propto z_0 \propto H^{1-1/\delta}. \quad (46)$$

В виде равенства получим (c_2 - некоторая константа)

$$H = c_2 H^{1-1/\delta}, H \rightarrow 0, T = T_C = 0. \quad (47)$$

Отсюда можно показать, что для одномерной сферической модели без учета квантовых флуктуаций

$$\delta = \infty, d = 1, 2 \quad . \quad (48)$$

Покажем, что такой же результат верен и для двумерного пространства, в этом случае (см. (38))

$$g'(z) = c_1 z^{(2/2)-1} = c_1 > 0 \quad . \quad (49)$$

(37) примет вид

$$J(J - c_2 T) = \frac{H^2}{4z_0^2}, d = 2 \quad . \quad (50)$$

В случае $d = 2$ для сферической модели критическая температура равна нулю [1, 2] и получим снова (45), следовательно, опять приходим к (48). Этот же результат получается из общей формулы для индекса δ [2, стр. 77] (хотя Бэкстер считает, что формула верна для $2 < d < 4$)

$$\delta = \frac{d+2}{d-2} \quad . \quad (51)$$

Если $d \rightarrow 2$, то отсюда получим (48). Однако, поскольку в одномерном и двумерном пространстве для сферической модели критическая температура равна нулю [1, 2], то необходимо использовать формулу (5), что приводит к результату

$$\delta = \frac{d_{eff} + 2}{d_{eff} - 2} \quad . \quad (52)$$

Для двумерного пространства получим

$$\delta = \frac{4+z}{z}; d = 2, T = T_c = 0 \quad . \quad (53)$$

Более того, в одном из вариантов кинетики $z = 2$ (см. раздел 5) и

$$\delta = 3; d = 2, d_{eff} = 4, T = T_c = 0 \quad . \quad (54)$$

Это согласуется с (51) для четырехмерного пространства. Таким образом, учет квантовых эффектов и кинетики приводит к тому, что критический индекс δ остается конечным, по крайней мере, для двумерной сферической модели. Этот же квантовый эффект может проявиться и для одномерного случая.

7. Заключение

Предложен новый подход к рассмотрению сферической модели для одномерного и двумерного пространства, когда критическая температура равна нулю. В этом случае необходимо учитывать динамический критический индекс z . Впервые определен возможный род фазового перехода в сферической модели для одномерного и двумерного случаев при изменении температуры. Желателен прямой расчет динамического индекса z для сферической модели.

Предложено выражение для эффективной размерности пространства при приближении к точке квантового ФП, когда критическая температура равна нулю или стремится к нулю. Это выражение имеет общий характер.

Рассмотрены также ФП при изменении поля при критической температуре, равной абсолютному нулю. Вычислен критический индекс δ для двумерной сферической модели, зависящий от динамического критического индекса z .

Рассмотренный подход может быть применен к другим квантовым фазовым переходам [5, 6], например, к переходу в сверхпроводящее или сверхтекучее состояния (в смеси изотопов гелия) вблизи абсолютного нуля.

Список литературы

1. Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления / Г.Стенли. — М. Мир, 1973. — 425 с.
2. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике / Р.Бэкстер. — М.: Мир, 1985. — 488 с.
3. Ландау Л.Д. Теоретическая физика. Т. 5. Статистическая физика. Ч. 1. 4-е изд. / Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. — М., Наука, 1995. — 608 с.
4. Rechester A.B. Contribution to the theory of second-order phase transitions at low temperatures / A.B.Rechester // Soviet physics JETP. — 1971. — Т.33. — № 2. С.782 – 796.
5. Sachdev S. Quantum phase transitions / S.Sachdev. — New Haven, USA, Yale University, 1999. — 488 p.
6. Стишов С.М. Квантовые фазовые переходы / С.М.Стишов // УФН. — 2004. — Т. 174. — №8. С. 853-860.
7. Cano A. On Low-Temperature Structural Phase Transitions / A.Cano, A.P.Levanyuk // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. — 2006. — V. 19. — № 3–5. P. 417–426.
8. Udodov V. Violating of the Essam-Fisher and Rushbrooke Relationships at Low Temperatures / V.Udodov // World Journal of Condensed Matter Physics. — 2015. — V.5, №2. — P.55-59. DOI: [10.4236 / wjcmp.2015.52008](https://doi.org/10.4236/wjcmp.2015.52008)
- 9 Паташинский А.З. Флуктуационная теория фазовых переходов. / А.З.Паташинский, В.Л.Покровский. — М., Наука, 1982. — 382 с.
- 10 Васильев А.Н. Квантовополевая ренормгруппа в теории критического поведения и стохастической динамике / А.Н.Васильев. — ПИЯФ РАН, СПб., 1998. — 774 с.
- 11 Удодов В.Н. Новые следствия гипотезы статического подобия при низких температурах / В.Н.Удодов // Физика твердого тела. — 2015. — Т. 57. — Вып.10. С. 2018-2022. DOI 10.1134/S1063783415100340.
- 12 Udodov V.N. The epsilon expansion near absolute zero /V.N.Udodov // Journal of Physics: Conference Series. — 2020. — **1679** 042061.
- 13 Удодов В.Н. Новая модельная классификация равновесных фазовых переходов / В.Н.Удодов // Южно-сибирский научный вестник. — 2019. — №1(25). — С. 131-136.

ГРАНИЧНЫЕ ЗАДАЧИ НА КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТАХ

Д.П. Федченко^{1,2,a}, В.В. Новиков^{1,b}, И.В. Тимофеев^{2,1,c}.

¹Сибирский федеральный университет

²Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН –
обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН

^a*fdp@iph.krasn.ru*, ^b*work_vladimir_novikov@mail.ru*, ^c*tiv@iph.krasn.ru*

В физике топологическим изолятором называется материал, одновременно проявляющий свойства проводника на поверхности и изолятора в объеме. В статье описывается абстрактная модель двумерного топологического изолятора на языке трехцветных клеточных автоматов, а также намечается классификация особых граничных клеток.

Введение

О клеточных автоматах заговорили после того как математик Джон Конвей в 1970 году придумал игру жизнь. Позднее Стивен Вольфрам в своих работах дал описание класса элементарных клеточных автоматов. После стало ясно, что игра жизнь — всего лишь одно правило (вероятно самое выдающееся), из 2^{2^8} возможных, двумерного клеточного автомата с окрестностью Мура. Клеточные автоматы применяются при моделировании экосистем и популяционной динамики. Раскраска раковин ряда морских моллюсков напоминает правило номер 30 одномерного клеточного автомата. На основе клеточных автоматов пытаются проектировать процессоры и создают способы шифрования данных.

Код Вольфрама

Код Вольфрама является универсальным и весьма компактным способом задания клеточного автомата, см. [1] и [2]. Рассмотрим одномерную (или двумерную) однородную структуру. Речь идет о бесконечной линии или поле из одинаковых ячеек, заполненных нулями и единицами (начальное состояние клеточного автомата). Введем в систему абстрактный тактовый генератор, и на каждом такте зададим единое для всех ячеек правило преобразования. Подобные структуры в работах Стивена Вольфрама называются классом элементарных клеточных автоматов. Рассмотрим одномерные и двумерные (с окрестностями Неймана и Мура) элементарные клеточные автоматы. Правила одномерного клеточного автомата задаются в виде восьмимерных двоичных векторов, см. рис. 1.



Рис. 1. Здесь желтым цветом обозначены единицы, а фиолетовым нули. Три верхние клетки назовем окрестностью. На рисунке изображено правило (0, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1) равное 254 в десятичной форме записи.

Функция `code_to_int` на языке Python переводит двоичный вектор правила в десятичное число.

```
def code_to_int(list):
    x = 0
    for j in range(len(list)):
        x += list[j] * 2**j

    return x
```

Функция `code_to_int` вернет целое число 254 для списка `list` равного `[0, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1]`. Динамика клеточного автомата в соответствии с правилом 254 представлена на рисунках 2 и 3.

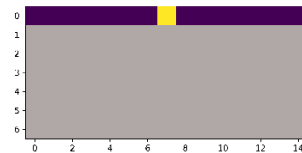


Рис. 2. Начальное состояние клеточного автомата.

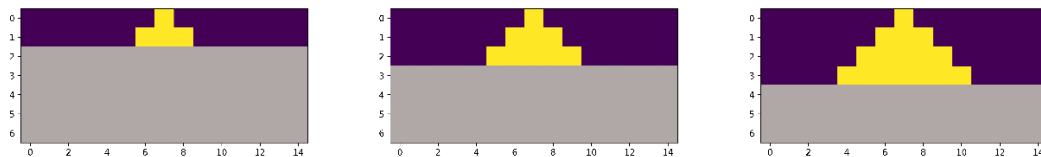


Рис. 3. Такты работы клеточного автомата в соответствии с правилом 254. Окрестность клетки закрашивает клетку снизу по схеме, представленной на рисунке 1.

Перевод из целого числа в двоичный вектор может быть реализован с помощью функции `int_to_code`.

```
def int_to_code(n, x):
    rule = []
    while x > 0:
        rule.append(x % 2)
        x = x // 2
    while len(rule) < n:
        rule.append(0)

    return rule
```

Если вызвать функцию `print (int_to_code(8, 254))` с параметрами `n = 8` и `x = 254`, то мы получим на выходе список `[0, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1]`. Параметр `n` отвечает

за количество битов в записи числа x . Вызов `print(int_to_digits(8, 30))` выдаст список `[0, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 0]`. Параметр n важен при переносе кода Вольфрама на двумерный и трехмерный случай.

Далее представлен довольно универсальный программный код функции, совершающей конечное число шагов клеточного автомата с правилом `rule_number` в ограниченной области.

```
def draw_rule(length, rule_number):
    r = (length - 1)//2 - 1
    cellular_automaton = []
    tmp_list = []
    row = []
    for l in range(length):
        if l != (length - 1) // 2:
            row.append(0)
        else:
            row.append(1)
    cellular_automaton.append(row)
    rule = int_to_code(8, rule_number)
    for k in range(r):
        tmp_list.append(0)
        for i in range(length - 2):
            tmp_list.append(rule[row[i] * 2**2 +
                                row[i + 1] * 2**1 +
                                row[i + 2] * 2**0])
        tmp_list.append(0)
        cellular_automaton.append(tmp_list)
        row = list(tmp_list)
        tmp_list=[]

    return cellular_automaton
```

Из-за ограниченности рассматриваемой области изменения клеточных автоматов, изображения на рисунке 4 содержат граничный дефект. В правиле 26 (и во всех четных правилах) он есть, но мы его не видим, а в нечетных правилах он значительно искажает картинку. Этот эффект можно, конечно, устранять средствами программирования. Нам же кажется, что здесь может быть развита теория дискретных граничных задач.

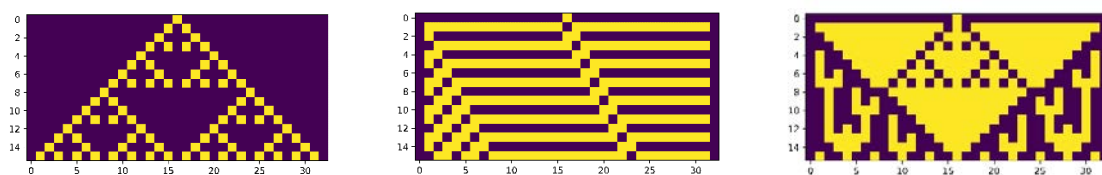


Рис. 4. Примеры визуализации функции draw_rule(length, rule_number). Правила 26, 59 и 165 (слева направо).

Аналогично строятся двумерные клеточные автоматы. Окрестностью Неймана ячейки назовем четырех ее соседей (над, под, слева, справа). Правила задаются 16-мерным вектором в соответствии с рисунком 5. Окрестностью Мура назовем восемь соседей смежных по ребру или вершине с данной клеткой. Игра жизнь является клеточным автоматом с окрестностью Мура.

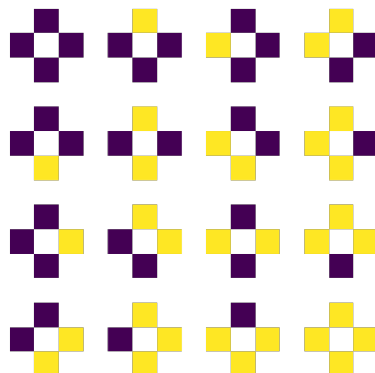


Рис. 5. Окрестность Неймана. Всего 16 компонент (0 или 1) в векторе. Нумерация компонент: сверху вниз и слева направо.

Абстрактный топологический изолятор

Строя модель абстрактного топологического изолятора, мы пришли к рассмотрению трехцветных клеточных автоматов с меняющимся правилом с периодом 4.

Rule 1 =

8718964248596095820291107058586077169685819630062952928588471702570724
5184955461514567350134642761960475397463135221,

Rule 2 =

8718964248596095820291107058586077169686562900693751685664642053530708
3748847009511688466704807114187492178155124653,

Rule 3 =

8718964248596095820291107058586077169686575887924022212825477616423051
1032271591445048493784239863824054082719415381,

Rule 4 =

8718964248596095820291107058586077169686575887949397362871618148203681
5078820525046538331816246773325439025350595533.

Устройство абстрактного топологического изолятора изображено на рисунке 6. В соответствии с определением топологического изолятора 1. сигнал распространяется вдоль поверхности; 2. сигнал, не попавший на границу, заиклиивается, т.е. в объеме клеточный автомат проявляет свойства изолятора. Эти два свойства инвариантны относительно сохраняющих топологию нарушений границы.

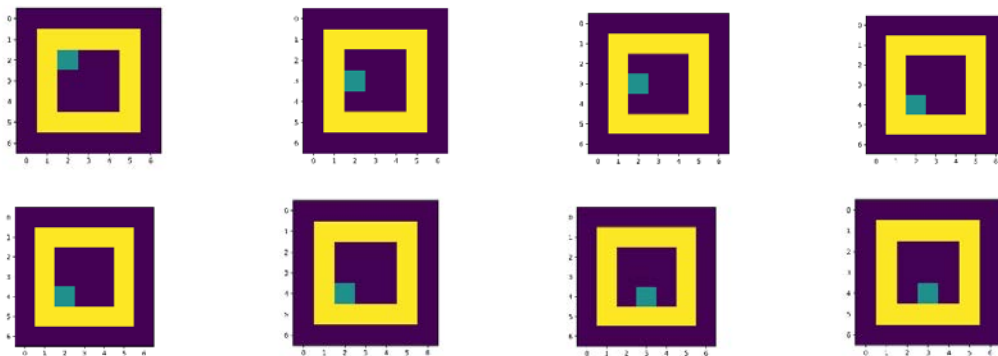


Рис. 6. Фиолетовым цветом обозначены пустые ячейки (0), голубым – ячейки с единицей (1), желтым обозначена граница (2). Сигнал, попавший на границу, бежит вдоль нее, а оказавшись внутри пустой области перемещается по циклу из четырех ячеек (изолируется). На некоторых тактах сигнал может оставаться на месте.

Мы реализовали абстрактный топологический изолятор на языке трехцветного клеточного автомата с периодически меняющимися правилами.

В ходе реализации данной модели у нас возникли некоторые вопросы:

- Являются ли приведенные четыре числа единственной реализацией абстрактного топологического изолятора;
- Какова исчерпывающая классификация граничных ячеек в данной дискретной модели;
- Как связана данная модель с задачей обхода лабиринта.

Для ответа на эти вопросы, среди прочего, необходимо правильно ввести классификацию граничных точек. В классическом определении мы называем точку граничной, если в любую ее окрестность попадают, как точки из множества, так и из дополнения к нему.

Список литературы

1. Wolfram S. // Los Alamos Science. – 1983. – Т. 9. – №. 2-21. – P. 42.
2. Wolfram S. A new kind of science. – Champaign, IL: Wolfram media, 2002. – Т. 5. – P. 130.

ВОЗМУЩЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ЛИНИИ РОСТА ДЕНДРИТА ПРИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ИЗ ПЕРЕОХЛАЖДЕННОГО РАСПЛАВА

О. Н. Шабловский, Д. Г. Кроль

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

Введение. Современные методы высокоскоростного затвердевания глубоко переохлажденного расплава чистого металла имеют целью получение материалов с улучшенными эксплуатационными свойствами. Известные в литературе экспериментальные и теоретические результаты исследований дендритного роста кристалла указывают на важность тщательного изучения морфологических свойств и пространственно-временной эволюции фазовых границ. Библиография этой проблемы представлена в работах [1-5]. Цель данного исследования: анализ динамических свойств возмущения линии роста и определение условий появления неустойчивых состояний, предшествующих началу бокового ветвления дендрита.

Уравнение роста дендрита. Рассмотрим двухмерную плоскую фазовую границу кристаллизации (ФГК) $x - F(y, t) = 0$. Уравнение роста дендрита имеет вид [6]:

$$\frac{1}{\varphi} \frac{\partial^2 F}{\partial y^2} = \mu B G^{3-\delta} + \frac{\partial F}{\partial t} \left[1 + \left(\frac{\partial F}{\partial y} \right)^2 \right], \quad G = \left[1 + \left(\frac{\partial F}{\partial y} \right)^2 \right]^{1/2}; \quad (1)$$

где координата x направлена вдоль оси симметрии дендрита в сторону твердой фазы; y - поперечная декартова координата; $\varphi = \alpha / \mu$; $\alpha = L / (U T_c)$. Кинетическая связь $|N| = \mu(T_e - T_j)$, $T_e = T_c[1 - (UK/L)]$ определяет нормальный механизм роста из расплава; здесь μ - кинетический коэффициент; T_e - температура равновесия между твердой и жидкой фазами; T_c - равновесная температура кристаллизации; U - поверхностная энергия границы раздела фаз; L - теплота фазового перехода единицы объема вещества; $K = (\partial^2 F / \partial^2 y) / G^3$ - средняя кривизна ФГК. Отклонение температуры кристалла T_j от равновесного значения представляется в виде [7]:

$$T_c - T_j = (\cos \theta)^\delta B, \quad \cos \theta = 1/G,$$

где $B = T_c - T_j(y=0)$ - переохлаждение на вершине дендрита; δ - параметр неоднородности переохлаждения ФГК по отношению к угловой координате θ . ФГК моделируем линией сильного разрыва, на которой баланс энергии представляется в форме

$$q_j = N(c_j T_j - c_* T_*) + N T_c (c_* - c_j) - Q, \quad Q = L \left(N + \gamma_j \frac{\partial N}{\partial t} \right), \quad N = (\partial F / \partial t) / G,$$

где γ - время релаксации теплового потока; звездочкой отмечены параметры расплава перед ФГК; индекс j указывает, что значение функции определено на правой стороне сильного разрыва, в твердой фазе; c - объемная теплоемкость; q_j - нормальная к границе составляющая вектора теплового потока; расплав находится в однородном отрелаксировавшем состоянии: $q_* \equiv 0$, $T_* \equiv \text{const}$. Теплофизические свойства расплава и кристалла берем постоянными. Это допущение оправдано тем, что относится к уже сформировавшемуся сильному разрыву. ФГК перемещается справа налево со скоростью $N < 0$. В данной работе мы изучаем уравнение (1) при $\delta = 3$: в этом случае существует точное аналитическое решение

$$F^0(y, t) = A_1 t + A_2(y), \quad A_2(y) = \frac{1}{a^2} \ln \left(\frac{1+E}{2} \right) - \frac{b}{a} y, \quad E = \exp(2aby),$$

определяющее плоский стационарный контур $A_2 = A_2(y)$, скорость перемещения которого не зависит от времени; $A_1 \equiv \text{const} < 0$. Изучим примеры возмущенных состояний этой стационарной линии роста.

Колебания вершины дендрита. Возьмем за основу следующее аналитическое выражение $F(y, t) = A_1 t + A_2(y) + f(y, t)$, где $f(y, t)$ - малое возмущение стационарного контура. После линеаризации получаем уравнение

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = \varphi(1 + A^2) \frac{\partial f}{\partial t} + 2A_1 \varphi A \frac{\partial f}{\partial y}, \quad \frac{dA_2(y)}{dy} \equiv A(y) = \frac{b(E-1)}{a(E+1)}.$$

Решение строим в виде

$$f(y, t) = [B_2(y) \sin kt + D_2(y) \cos kt] \exp(rt), \quad t \geq 0; r < 0, k \geq 0, y \geq 0, \quad (2)$$

$$\frac{1}{\varphi} \frac{d^2 B_2}{dy^2} = (1 + A^2)(B_2 r - D_2 k) + 2A_1 A \frac{dB_2}{dy}, \quad (3)$$

$$\frac{1}{\varphi} \frac{d^2 D_2}{dy^2} = (1 + A^2)(B_2 k + D_2 r) + 2A_1 A \frac{dD_2}{dy}. \quad (4)$$

Будем рассматривать аperiодический и периодический по времени режимы возмущения вершины дендрита, когда испытывают возмущение кривизна и скорость роста. Аperiодическое возмущение имеет вид: $k = 0$,

$$f(y, t) = D_2(y) \exp(rt), \quad \frac{d^2 D_2}{dy^2} = \varphi \left[(1 + A^2) D_2 r + 2A_1 A \frac{dD_2}{dy} \right], \quad y = 0, \quad D_2(0) = D_2^0;$$

$$dD_2/dy = 0.$$

Если $D_2^0 > 0$, то носик дендрита вытянут вперед (в направлении роста), если $D_2^0 < 0$, то в начальном состоянии ($t = 0$) носик втянут внутрь. Периодическое ($k > 0$) возмущение (2) определяется решением системы обыкновенных дифференциальных уравнений (3), (4) с начальными условиями $y = 0$, $D_2 = D_2^0$, $B_2 = B_2^0$, $dD_2/dy = 0$, $dB_2/dy = 0$.

Приведем результаты расчетов для никеля и меди. Входные параметры:
 Никель, Ni: $\Delta T = 166 \text{ К}$, $N = 5,3 \text{ м/с}$, $T_c = 1728 \text{ К}$, $L = 2,14 \cdot 10^9 \text{ Дж/м}^3$,
 $c = 5,62 \cdot 10^6 \text{ Дж/(м}^3 \cdot \text{К)}$, $\lambda = 69 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$, $U = 1,81 \text{ Дж/м}^2$, $\mu = 9,53 \text{ м/(К} \cdot \text{с)}$.
 Медь, Cu: $\Delta T = 180 \text{ К}$, $N = 11,0 \text{ м/с}$, $T_c = 1357 \text{ К}$, $L = 1,77 \cdot 10^9 \text{ Дж/м}^3$,
 $c = 4,17 \cdot 10^6 \text{ Дж/(м}^3 \cdot \text{К)}$, $\lambda = 317 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$, $U = 1,35 \text{ Дж/м}^2$, $\mu = 10,056 \text{ м/(К} \cdot \text{с)}$.

Масштабы величин: $y_b = 10^{-6} \text{ м}$, $t_b = 10^{-7} \text{ с}$. Расчеты проведены в безразмерных переменных. Сопоставление друг с другом рисунков 1А, 1Б, 1В говорит о том, что при фиксированных значениях параметра затухания r частота k колебаний по времени принципиальным образом влияет на характер поведения возмущения $f(y, t)$ по отношению к координате y . А именно: наблюдается последовательная смена режимов «периодический процесс затухания» - «гармонические колебания» - «резонансная неустойчивость». На рисунке 2 дан пример апериодической устойчивости по времени, существующей на фоне затухающих периодических возмущений по координате.

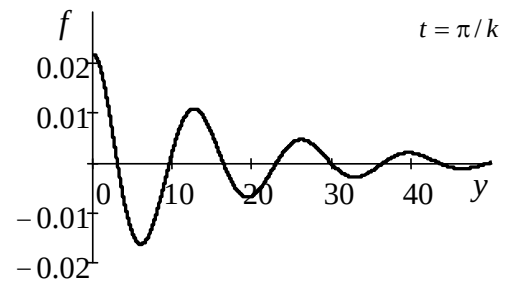
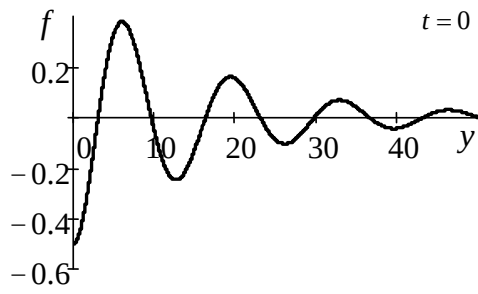
Формирование боковой ветви. Перейдем к анализу системы уравнений (3), (4) при больших $y \gg 1$, когда $(E - 1)/(E + 1) \cong 1$, т.е. $A \cong (b/a) \equiv \text{const}$. В этом случае имеем:

$$\frac{d^2 B_2}{dy^2} = \alpha_1 (B_2 r - D_2 k) - 2\varphi_1 \frac{dB_2}{dy}, \quad \frac{d^2 D_2}{dy^2} = \alpha_1 (B_2 k + D_2 r) - 2\varphi_1 \frac{dD_2}{dy}$$

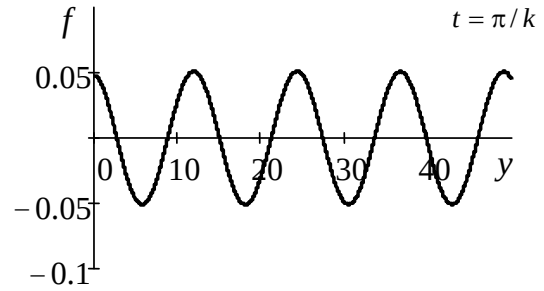
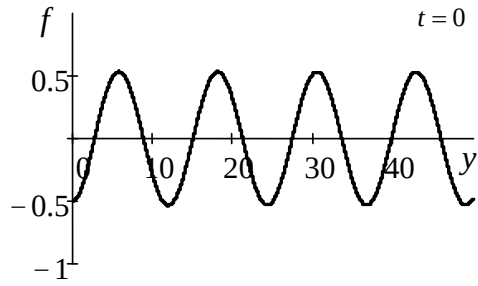
$$\alpha_1 = \alpha B / (-A_1) > 0, \quad \varphi_1 = -\varphi A_1 b / a > 0.$$

Апериодический по времени режим ($k = 0$, см. (2)) приводит при $r < 0$ к обычному уравнению затухающих колебаний. Затухание по координате y происходит в периодическом режиме, если $\varphi_1^2 + \alpha_1 r < 0$; процесс затухания апериодический, если $\varphi_1^2 + \alpha_1 r > 0$. Следовательно, устойчивость по времени $[r < 0; \exp(rt) \rightarrow 0, t \rightarrow \infty]$ соотносится с устойчивостью по координате y .

$$\text{А) } r = -0.2, k = 0.2, D_2^0 = -0.5, B_2^0 = 0.5$$



Б) $r = -0.2, k = 0.2674, D_2^0 = -0.5, B_2^0 = 0.5$



В) $r = -0.2, k = 0.34, D_2^0 = -0.5, B_2^0 = 0.5$

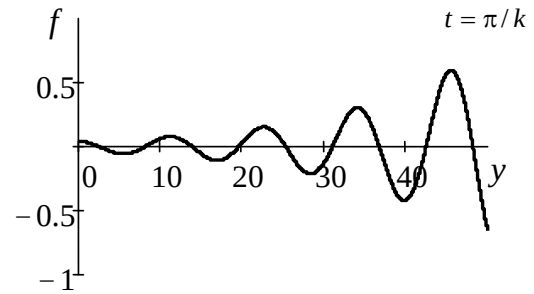
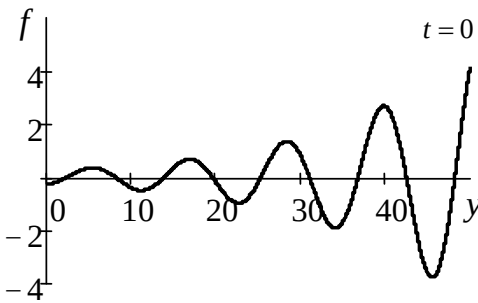
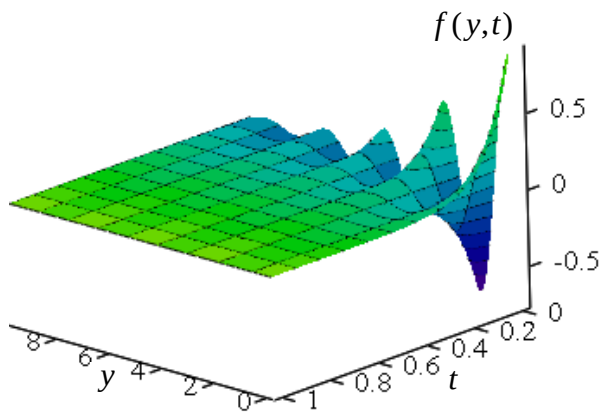


Рис. 1. Никель. Затухающий периодический (А), гармонический (Б) и неустойчивый по резонансному типу (В) режимы возмущения линии роста

$r = -10, D_2^0 = 0.9$



$r = -1, D_2^0 = 1$

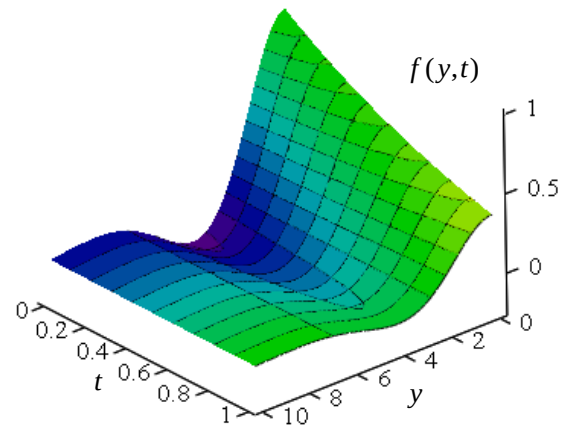


Рис. 2. Медь. Возмущенное состояние вершины дендрита – аperiodическая устойчивость по времени

Ситуация меняется при $r > 0$: неустойчивость по времени $[\exp(rt) \rightarrow \infty, t \rightarrow \infty]$ соотносится с неустойчивостью по координате. Функция $B_2(y)$ определяется из дифференциального уравнения четвертого порядка:

$$\frac{d^4 B_2}{dy^4} + 4\varphi_1 \frac{d^3 B_2}{dy^3} + (4\varphi_1^2 - 2\alpha_1 r) \frac{d^2 B_2}{dy^2} - 4\alpha_1 \varphi_1 r \frac{dB_2}{dy} + \alpha_1^2 (k^2 + r^2) B_2 = 0.$$

Частное решение ищем в виде $B_2(y) = \exp(yZ)$, и получаем характеристическое уравнение $Z^4 + 4\varphi_1 Z^3 + (4\varphi_1^2 - 2\alpha_1 r)Z^2 - 4\alpha_1 \varphi_1 r Z + \alpha_1^2 (k^2 + r^2) = 0$. Корень этого уравнения запишем в виде $Z = Z_1 + iZ_2$, а затем выделим действительную и мнимую части. В результате находим:

$$r = \frac{Z_1(Z_1^2 - Z_2^2) + \varphi_1(3Z_1^2 - Z_2^2) + 2\varphi_1^2 Z_1}{\alpha_1(\varphi_1 + Z_1)}, \quad g_2 = Z_1^2 - Z_2^2, \quad h_2 = 2Z_1 Z_2,$$

$$k^2 + r^2 = \frac{1}{\alpha_1^2} [4\alpha_1 \varphi_1 Z_1 r + 2\alpha_1 Z_2 r - 4\varphi_1^2 g_2 - 4\varphi_1 g_3 - g_4], \quad (5)$$

$$g_3 = Z_1(Z_1^2 - 3Z_2^2), \quad h_3 = Z_2(3Z_1^2 - Z_2^2), \quad g_4 = g_2^2 - h_2^2, \quad h_4 = 2g_2 h_2.$$

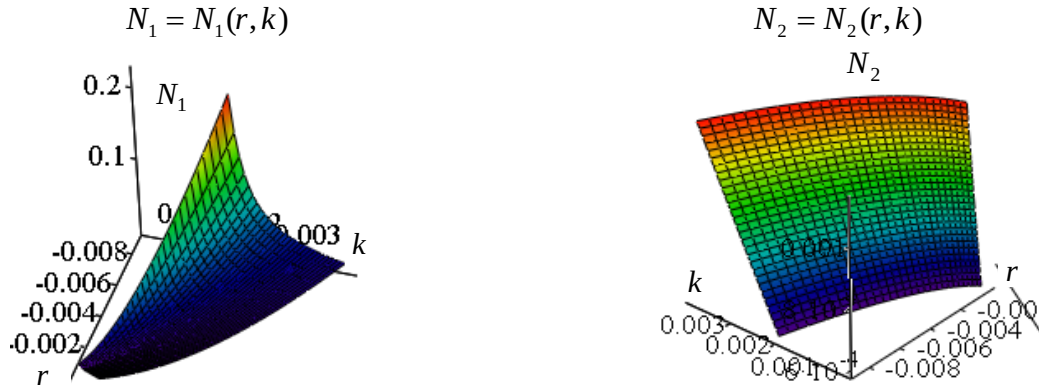


Рис. 3. Никель. Свойства скоростей волн возбуждения боковой ветви линии роста.

$$D_2^0 = 0,1, \quad B_2^0 = 0,1.$$

Возмущение $f(y, t)$ содержит в качестве аргументов волновые координаты $yZ_1 + rt$, $yZ_2 \pm kt$. Скорость $N_1 = -r/Z_1 > 0$ вычисляется при $r < 0$, $Z_1 > 0$, а для скорости $N_2 = k/Z_2$ следует принять $k > 0$, $Z_2 > 0$. Таким образом, Z_1 - параметр затухания по координате y , Z_2 - частота колебаний по y . Условие $r < 0$ дает неравенство $Z_1^2 + 2\varphi_1 Z_1 < Z_2^2$. Именно в этом случае существуют бегущие волны со скоростями перемещения N_1 и N_2 , и на фоне затухающих по времени колебаний линии роста $[r < 0, \exp(rt) \rightarrow 0, t \rightarrow \infty]$ эти волны возбуждают боковую ветвь дендрита: $Z_1 > 0$, $\exp(yZ_1) \rightarrow \infty$, $y \rightarrow \infty$. Пусть $r = 0$, т.е. линия роста гармонически колеблется по t с частотой k ; тогда параметры Z_1 и Z_2 связаны соотношением $Z_2^2 = Z_1^2 + 2\varphi_1 Z_1$, а формула (5) записывается так:

$\alpha_1^2 k^2 = 4(Z_1 + 2\varphi_1)Z_1(\varphi_1^2 + Z_2^2) > 0$, и решение неустойчивое по отношению к координате y . На рисунке 3 показаны зависимости скоростей N_1 и N_2 от параметров r, k , характеризующих поведение возмущения по времени t .

Заключение. На вершине дендрита рассмотрены аperiодический и периодический по времени режимы возмущения скорости и кривизны ФГК. Обнаружено, что при росте частоты колебаний по времени происходит последовательная смена режимов возмущения по отношению к поперечной координате: «периодический процесс затухания» - «гармонические колебания» - «неустойчивость по резонансному типу». Даны оценки скорости волны, бегущих вдоль линии роста и возбуждающих боковую ветвь дендрита. Представлены результаты численных расчетов для чистых расплавов никеля и меди.

Список литературы

1. Brener, E.A. Pattern selection in two-dimensional dendritic growth / E.A. Brener, V.I. Mel'nikov // *Advances in Physics*. – 1991. – Vol. 40. – №1. – P. 53-97.
2. Veenendaal, E. Simulation of crystal shape evolution in two dimensions / E. Veenendaal, A.J. Nijdam, J. Suchtelen // *Journal of Crystal Growth*. – 2002. – Vol. 235. – P. 603–618.
3. Mullis, A.M. Deterministic side-branching during thermal dendritic growth / A.M. Mullis // *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering*. – 2015. – Vol. 84. – 012071. – P. 1-9.
4. Glicksman, M.E. Capillary-mediated interface perturbations: Deterministic pattern formation / M.E. Glicksman // *Journal of Crystal Growth*. – 2016. – Vol. 450. – P. 119–139.
5. Шабловский, О.Н. Форма поверхности роста и предвестники ветвления дендрита в переохлажденном расплаве / О.Н. Шабловский, Д.Г. Кроль // *Успехи прикладной физики*. – 2018. – №4. – С. 316-324.
6. Шабловский, О.Н. Морфологические свойства линии роста двумерного дендрита в переохлажденном расплаве / О.Н. Шабловский // *Прикладная физика*. – 2012. – №4. – С. 40–46.
7. Шабловский О. Н. Производство энтропии на фазовой границе кристаллизации // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2010. №12. С. 81-87.

КРИТИЧЕСКИЙ ИНДЕКС КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ДЛИНЫ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ РАДИУСА ПЕРКОЛЯЦИИ ДЛЯ ОДНОМЕРНЫХ ЦЕПОЧЕК В ЗАДАЧАХ СВЯЗЕЙ

Т.В.Якунина¹, В.Н.Удодов²

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

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

В классической и периодической литературе по теории перколяции описывается протекание по ближайшим соседям [1] на двумерных или трехмерных решетках, так как на одномерных решетках случай перколяции по ближайшим соседям тривиален. Однако он перестает быть таковым, если рассматривать перколяцию по неближайшим соседям.

В работе рассчитан критический индекс корреляционной длины в одномерной задаче связей при протекании по неближайшим соседям.

Рассмотрим одномерную перколяционную модель в задаче связей. Узлы (в количестве N штук), которые расположены друг от друга на одном расстоянии, представляют собой горизонтальную цепочку. Из каждого узла выходит одно и то же число связей. Количество связей не зависит от расположения самого узла в решетке, число связей зависит только от радиуса протекания. Вероятность блокировки произвольно выбранной связи одинакова, все связи в модели равноценны. Нумерация связей цепочки осуществляется с левого края.

Связи между узлами могут быть только двух видов: целыми и блокированными (разорванными, по которым ток не течёт – в задаче об электропроводности). В задаче связей блокируется только одна связь за один шаг, а все узлы считаются целыми. Два узла решетки считаются связанными друг с другом, если их соединяет цепочка целых связей. Совокупность связанных друг с другом узлов называется кластером [1, 2]. Если доля целых связей мала, они образуют небольшие отдельные кластеры. С увеличением числа целых связей кластеры растут, объединяются, и возникает пронизывающий всю решетку, так называемый, соединяющий («бесконечный») кластер, по которому осуществляется протекание с одного конца решетки на другой.

Средняя максимальная доля целых связей, при которой нет соединяющего кластера – это порог перколяции (протекания) p_{cb} . Он зависит от радиуса перколяции, размерности решетки, ее типа и числа узлов N [1-4].

Таким образом, решетка представляет собой горизонтальную одномерную

цепочку, состоящую из N узлов, при радиусе протекания $R > 1$.

Цель данной работы заключается в том, чтобы получить средние значения индекса корреляционной длины в задаче связей для одномерных цепочек различного размера. При этом использовались данные о значениях перколяционного порога с соответствующей минимальной погрешностью в одномерных решетках разной длины при различных радиусах протекания.

Перколяционный порог, разделяет две фазы: в одной фазе существуют только конечные кластеры и бесконечного (соединяющего) кластера нет, в другой фазе соединяющий кластер существует [5]. Эта фаза аналогична ферромагнитной фазе для магнитного фазового перехода.

Возникновение бесконечного кластера в данных задачах во многом аналогично фазовому переходу второго рода (точнее, даже фазовому переходу третьего рода по Эренфесту). Порог протекания существенно зависит от типа перколяционных задач, но критические индексы одинаковы для различных задач и определяются лишь размерностью пространства d . Представления, заимствованные из теории непрерывных фазовых переходов второго рода, позволяют получить соотношения, связывающие различные критические индексы (соотношения подобия (скейлинга)) [2 – 4].

В конечной системе порог протекания меняется от опыта к опыту, т.е. является величиной случайной. Однако, значения, которые принимает эта случайная величина, с подавляющей вероятностью попадают в некоторую область с шириной $\delta(N)$, которая называется критической областью [3].

При увеличении числа узлов в системе N ширина этой области уменьшается по степенному закону, так что при $N \rightarrow \infty$ порог протекания приобретает четкий смысл, превращаясь из случайной величины в величину достоверную [3-5].

Ширина критической области для объемных задач (двухмерных, трехмерных и т.д.) также определяется, как и для одномерных.

Небольшая разница возникает, если выразить ширину δ не через размер системы L , а через полное число узлов N . Дело в том, что

$$N = \left(\frac{L}{a} \right)^d, \quad (1)$$

где a – период решетки, а d – размерность пространства [3]. С учетом этого справедлива следующая формула

$$\delta(N) = \frac{C}{N^{\frac{1}{vd}}}, \quad (2)$$

где C – численный коэффициент, который не может быть определен из столь простых соображений. В плоском случае (двухмерные задачи $d = 2$) в результате исследования найденной на ЭВМ зависимости $\delta(N)$ был впервые определен индекс радиуса корреляции плоской задачи. Оказалось, что $\nu_2 = 1,33$ (Здесь и ниже число 2 показывает, что речь идет об индексе двумерной системы). Для трехмерных задач индекс ν иной: $\nu_3 = 0,8 - 0,9$ (число 3 означает, что индекс относится к трехмерным задачам) [3].

Таким образом, рассматривая случай одномерной системы (одномерная цепочка), при которой $d = 1$ формула (2) переписывается в следующем виде

$$\delta(N) = \frac{C}{N^{\frac{1}{\nu}}}, \quad (3)$$

отсюда критический индекс корреляционной длины будет находиться по формуле

$$\nu = \frac{\ln\left(\frac{N_2}{N_1}\right)}{\ln\left(\frac{\delta_1}{\delta_2}\right)}. \quad (4)$$

Для вычисления индекса корреляционной длины необходимо знать перколяционный порог для данной решетки. Суть метода нахождения порога протекания в задаче связей заключается в том, чтобы найти достижимые узлы (это узел, в который можно попасть по целым связям с левого края цепочки). Если среди них есть хотя бы один из числа R последних узлов, и из него выходит целая связь к правому краю решетки, то порог не достигнут, и процесс продолжается [6, 7]. В процессе работы программы были получены значения перколяционного порога при различных конфигурациях из числа узлов и радиуса [7]. Используя формулу (4) получаем значения критического индекса корреляционной длины при различных перколяционных радиусах.

Таблица 1
Значения критического индекса корреляционной длины
в задаче связей до $R = 6$.

N1	N2	R=2	R=3	R=4	R=5	R=6
		□	□	□	□	□
40	80	3,85	8,96	26,34	42,63	33,62
80	150	3,11	5,76	11,47	12,46	-
150	250	3,44	6,38	8,81	14,56	24,26
200	300	3,37	5,80	13,58	11,55	9,53
300	500	3,17	6,79	10,98	14,05	23,24

Среднее значение ☐	3,39	6,74	14,24	19,05	22,66
--	------	------	-------	-------	-------

Из полученных данных видно, что критический индекс ν увеличивается с увеличением перколяционного радиуса в одномерных задачах связей. Эта зависимость будет верна, как для конечных цепочек, так и для бесконечных одномерных цепочек.

Для критического индекса корреляционной длины погрешность составляет 3–16% (с увеличением размера решетки погрешность уменьшается).

Таким образом, впервые рассчитан критический индекс корреляционной длины в зависимости от радиуса перколяции (протекания) для одномерной задачи связей. Показано, что при увеличении радиуса протекания индекс корреляционной длины растет, причем этот индекс для одномерной задачи связей существенно больше, чем для трехмерного и двумерного случая. Это свидетельствует о том, что зависимость корреляционной длины от температуры сильнее для одномерной задачи связей, чем для двумерного и трехмерного пространства.

В рамках предложенного подхода возможен расчет других критических индексов и проверка соотношений скейлинга для задачи связей в конечных системах.

Список литературы

1. Шкловский Б.И. Теория протекания и проводимость неоднородных сред / Б.И.Шкловский, А.Л.Эфрос // УФН. — 1975. — Т.117. — № 3. С.401 – 435.
2. Тарасевич Ю.Ю. Математическое и компьютерное моделирование. Вводный курс: учеб.пособие для вузов / Ю.Ю.Тарасевич. — Изд. 3-е, испр. — М.: Едиториал УРСС, 2003. — 144 с.
3. Эфрос А.Л. Физика и геометрия беспорядка / А.Л.Эфрос. — М.: Наука, 1982. — 176 с.
4. Волкова Т.В. Зависимость порога протекания от длины цепочки и от радиуса протекания для модели одномерной перколяции / Т.В.Волкова, М.А.Буреева // Физика и химия высокоэнергетических систем: Сборник материалов IV Всероссийской конференции молодых учёных (22-25 апреля 2008 г., г. Томск). — Томск: ТМЛ-Пресс, 2008. — С.182 — 184.
5. Тарасевич Ю.Ю. Перколяция: теория, приложения. Учеб.пособие./ Ю.Ю.Тарасевич. — М.: Книжный дом"ЛИБРОКОМ", 2012. — 112 с.
6. Волкова Т.В. Модели решения одномерных задач связей на перколяционных решетках и нанолентах / Т.В.Волкова, В.Н.Удодов // Всероссийский молодежный конкурс научно-исследовательских работ студентов и аспирантов в области физических наук. Сборник трудов. Ред. В.Н.Зимин, В.Н.Наумов, А.Н.Морозов. — М.: МГТУ им. Н.Э.Баумана, 2012. — С. 91 – 95.
7. Yakunina T.V. Distribution law of the percolation threshold in one-dimensional bond problems / T.V.Yakunina and V.N.Udodov // J. Phys.: Conf. Ser. — 2020. — **1679** 032073.

СПИСОК ДОКЛАДОВ

А. Е. Алёхина, А.Г. Овчинников, М. Г. Доррер СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ АРХИТЕКТУР СВЕРТОЧНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ РЕАЛИЗАЦИИ КОМПЬЮТЕРНОГО ЗРЕНИЯ УМНОГО ХОЛОДИЛЬНИКА	3
С.С. Анцыферов, К.Н. Фазилова АЛГОРИТМЫ КОНТРОЛЯ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ НЕРАВНОВЕСНЫХ СИСТЕМ ОБРАБОТКИ ИНФОРМАЦИИ	12
А.А. Ачитаев, Н.С. Савельева, Н.С. Наумкин, А.Г. Русина ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ ИСКАЖЕНИЯ ФОРМ СТАТОРА И РОТОРА НА ПАРАМЕТРЫ РАБОТЫ ГИДРОГЕНЕРАТОРА	18
Н.М. Богатов, В.С. Володин, Л.Р. Григорьян, А.В. Кленевский, М.С. Коваленко МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ НАПРЯЖЕНИЯ В N-P ПЕРЕХОДЕ В ИМПУЛЬСНОМ РЕЖИМЕ	27
Р.Н. Голых, В.Н. Хмелёв, И.А. Маняхин, Д.А. Ильченко, В.Д. Минаков, В.А. Шакура, Г.А. Боброва ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЁТ РАЗРЫВА МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ СВЯЗЕЙ ПОД ДЕЙСТВИЕМ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ КАВИТАЦИИ	33
Л.Р. Григорьян, К.С. Ичетовкина МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЛЬТРАЦИИ ЭЛЕКТРОКАРДИОГРАММ В СРЕДЕ MATLAB	38
М. Г. Доррер, А.В. Фомин, Д.А. Логинов, А.Г. Овчинников ПРИМЕНЕНИЕ РЕКУРРЕНТНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ЭФФЕКТА ОТ ПРИМЕНЕНИЯ СТИМУЛИРУЮЩИХ АКЦИЙ В ТОРГОВЫХ СЕТЯХ	44
Р.А. Козлитин, В.Н. Удодов ИССЛЕДОВАНИЕ РАЗРЫВА СИНТЕТИЧЕСКОЙ ЛЕНТЫ В РАМКАХ ТЕОРИИ ПРОТЕКАНИЯ	53
Л.А. Компаниец, О.С. Володько ОПРЕДЕЛЕНИЕ КАРТИНЫ ТЕЧЕНИЯ ПО ДАННЫМ ЛОКАЛЬНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ СКОРОСТИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА ГЛАВНЫХ КРИВЫХ	59
Д.А. Рыжкова, С.Л. Гафнер, Ю.Я. Гафнер СТРУКТУРНЫЕ МОДИФИКАЦИИ НАНОКЛАСТЕРОВ Ag ₇₅ РАЗЛИЧНОЙ НАЧАЛЬНОЙ КОНФИГУРАЦИИ	66

М.Ю. Сенашова СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ ГЕНОВ ФОТОСИНТЕТИЧЕСКИХ СИСТЕМ I И II ХЛОРОПЛАСТОВ И ЦИАНОБАКТЕРИЙ	71
В.М. Сомсиков, А. М. Абылай, Д. Б. Куватова ФИЗИКА ЭВОЛЮЦИИ И ЕДИНСТВО ФИЗИКИ	79
В.Н. Удодов СФЕРИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И КВАНТОВЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ	96
Д.П. Федченко, В.В. Новиков, И.В. Тимофеев. ГРАНИЧНЫЕ ЗАДАЧИ НА КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТАХ	105
О. Н. Шабловский, Д. Г. Кроль ВОЗМУЩЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ЛИНИИ РОСТА ДЕНДРИТА ПРИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ИЗ ПЕРЕОХЛАЖДЕННОГО РАСПЛАВА	110
Т.В. Якунина, В.Н. Удодов КРИТИЧЕСКИЙ ИНДЕКС КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ДЛИНЫ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ РАДИУСА ПЕРКОЛЯЦИИ ДЛЯ ОДНОМЕРНЫХ ЦЕПОЧЕК В ЗАДАЧАХ СВЯЗЕЙ	116

АЛФАВИТНЫЙ СПИСОК УЧАСТНИКОВ СЕМИНАРА

Участник	Адрес	Стр.
Абылай Айым Мустахиқызы	050040, г.Алматы, пр. аль-Фараби, 71, Казахский национальный университет имени Аль-Фараби E-mail: vmsoms@rambler.ru	79
Алехина Анна Евгеньевна	660000, Красноярск, просп. имени газеты Красноярский Рабочий, 31, Сибирский государственный университет науки и технологий им. М.Ф. Решетнева E-mail: a.tolmacheva@solutionfactory.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	12
Ачитаев Андрей Александрович	655619, Республика Хакасия, г. Саяногорск, рп. Черемушки, д. 46, Саяно-Шушенский филиал Сибирского федерального университета E-mail: aachitaev@shf-sfu.ru	18
Боброва Галина Алексеевна	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: bobrovagalja@mail.ru	33
Богатов Николай Маркович	350040, г. Краснодар, ФГБОУ ВПО «Кубанский государственный университет», т. 8(861)2199501*266 E-mail: bogatov@phys.kubsu.ru	27
Володин Владимир Сергеевич	350040, г. Краснодар, ФГБОУ ВПО «Кубанский государственный университет», т. 8(861)2199501*266 E-mail: volodinvs1995@mail.ru	27
Володько Ольга Станиславовна	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: ovs@icm.krasn.ru	59
Гафнер Светлана Леонидовна	655017, г. Абакан, г.Абакан, ул.Ленина, д. 92 Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова E-mail: sgafner@rambler.ru	66
Гафнер Юрий Яковлевич	655017, г. Абакан, г.Абакан, ул.Ленина, д. 92 Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова E-mail: ygafner@khsu.ru	66

Голых Роман Николаевич	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: romangl90@gmail.com	33
Григорьян Леонтий Рустемович	350040, Краснодар, ул. Ставропольская 149, Кубанский государственный университет E-mail: leonmezon@mail.ru	27, 38
Доррер Михаил Георгиевич	660000, Красноярск, просп. имени газеты Красноярский Рабочий, 31, Сибирский государственный университет науки и технологий им. М.Ф. Решетнева E-mail: dorrer_mg@sibsau.ru	3, 44
Ильченко Дмитрий Александрович	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: ilchenko.dmitrij.01@mail.ru	33
Ичетовкина Ксения Сергеевна	350040, Краснодар, ул. Ставропольская 149, Кубанский государственный университет E-mail: kbrusgod@mail.ru	38
Кленевский Александр Викторович	350040, Краснодар, ул. Ставропольская 149, Кубанский государственный университет E-mail: physinf@phys.kubsu.ru	27
Коваленко Максим Сергеевич	350040, Краснодар, ул. Ставропольская 149, Кубанский государственный университет E-mail: m.s.kovalenko@ya.ru	27
Козлитн Роман Анатольевич	655017, Абакан, пр. Ленина, д. 92/1, Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова (ХГУ), E-mail: roman@khsu.ru	53
Компаниец Лидия Алексеевна	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: kla@icm.krasn.ru	59
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	110
Куватова Дана Бердиярқызы	050020, Казахстан, Алма-Ата, Обсерватория, д. 23, Астрофизический институт им. Фесенкова E-mail: dana_centauri@bk.ru	79
Логинов Дмитрий Александрович	660135, город Красноярск, улица Батурина, дом 5, ООО «МаксБонус» E-mail: d.loginov@mail.ru	44
Маняхин Иван Александрович	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: manyaxin.ivan@bk.ru	33

Минаков Вячеслав Дмитриевич	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: slava2926@mail.ru	33
Наумкин Николай Сергеевич	655619, Республика Хакасия, г. Саяногорск, рп. Черемушки, д. 46, Саяно-Шушенский филиал Сибирского федерального университета E-mail: NaumkinNS@rushydro.ru	18
Новиков Владимир Владимирович	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский федеральный университет E-mail: work_vladimir_novikov@mail.ru	105
Овчинников Александр Геннадьевич	660012, город Красноярск, Судостроительная улица, дом 163, ООО «Фабрика решений» E-mail: alexkrs7@mail.ru	3, 44
Русина Анастасия Георгиевна	655619, Республика Хакасия, г. Саяногорск, рп. Черемушки, д. 46, Саяно-Шушенский филиал Сибирского федерального университета E-mail: rusina@corp.nstu.ru	18
Рыжкова Дарья Антоновна	655017, г. Абакан, г. Абакан, ул. Ленина, д. 92 Хакассский государственный университет им. Н. Ф. Катанова E-mail: bashkova.daria@yandex.ru	66
Савельева Наталья Сергеевна	655619, Республика Хакасия, г. Саяногорск, рп. Черемушки, д. 46, Саяно-Шушенский филиал Сибирского федерального университета E-mail: rusina@corp.nstu.ru	18
Сенашова Мария Юрьевна	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН, д. 50, стр. 44 E-mail: msen@icm.krasn.ru	71
Сомсиков Вячеслав Михайлович	050040, г. Алматы, пр. аль-Фараби, 71, Казахский национальный университет имени Аль-Фараби E-mail: vmsoms@rambler.ru	79
Тимофеев Иван Владимирович	660036, Красноярск, Академгородок, д. 50, стр. 38, Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН E-mail: Tiv@iph.krasn.ru	105
Удодов Владимир Николаевич	655017, Абакан, пр. Ленина, д. 92/1, каб. 513, Хакассский государственный университет им. Н.Ф. Катанова (ХГУ), E-mail: udodov@khsu.ru	53, 96, 116

Фазилова Ксения Наильевна	119454, ЦФО, г. Москва, пр-т Вернадского, д. 78, МИРЭА – Российский технологический университет, Физико-технологический институт E-mail: fazilova@mirea.ru	12
Федченко Дмитрий Петровис	660036, Красноярск, ул. Академгородок, 50, с. 38, Институт Физики им. Л.В. Киренского СО РАН E-mail: fdp@iph.krasn.ru	105
Фомин Анатолий Владимирович	660135, город Красноярск, улица Батурина, дом 5, ООО «МаксБонус» E-mail: a.v.fomin@live.com	44
Хмелёв Владимир Николаевич	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: vnh@u-sonic.ru	33
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	110
Шакура Владислав Анатольевич	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: shakura.va@u-sonic.ru	33
Якунина Татьяна Валерьевна	655619, Респ. Хакасия, Черемушки, д. 46, Саяно-Шушенский филиал СФУ E-mail: Tatav19@mail.ru	116

Научное издание

**Моделирование неравновесных адаптивных и управляемых систем–
2021**

Материалы XXIV Всероссийского семинара 1 – 3 октября 2021 г.

Редактор М.Г. Садовский
Компьютерная верстка: М.Ю. Сенашова

Подписано в печать «6» сентября 2021 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>