

**МОДЕЛИРОВАНИЕ
НЕРАВНОВЕСНЫХ,
АДАПТИВНЫХ И
УПРАВЛЯЕМЫХ
СИСТЕМ – 2023**

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-2023**

МАТЕРИАЛЫ
ДВАДЦАТЬ ШЕСТОГО ВСЕРОССИЙСКОГО СЕМИНАРА
6 октября 2023 года

Красноярск 2023

УДК 001.126 (571.51) (043)

М 74

Моделирование неравновесных, адаптивных и управляемых систем: Материалы XXVI Всероссийского семинара, / Под ред. М.Г. Садовского; отв. за вып. М.Ю. Сенашова; – Красноярск: Институт вычислительного моделирования Сибирского отделения Российской академии наук, 2023. –131 с.

В сборнике представлены материалы XXVI Всероссийского семинара «Моделирование неравновесных, адаптивных и управляемых систем» (МНАУС–2023), проходившего в городе Красноярске 6 октября 2023 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 № 075-02-2023-912).

Редакционная коллегия:

Садовский Михаил Георгиевич – ответственный редактор

Сенашова Мария Юрьевна – ответственный за выпуск

© ИВМ СО РАН, 2023

© Коллектив авторов, 2023

ISBN 978-5-6047078-4-5



9 785604 707845

ОЦЕНКА СТАТИСТИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ДИНАМИКИ ИНФОРМАЦИОННЫХ ПОТОКОВ

С.С. Анцыферов, К.Н. Фазилова, М.К. Ханова

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

fazilova@mirea.ru

Введение

Информационные потоки (ИП) играют огромную роль в научных исследованиях и разработках, так как они являются основой для формирования как информационной базы, так и базы знаний по тому или иному научно-тематическому направлению. Каждому направлению соответствует свой ИП, который позволяет судить как о текущем состоянии научной разработки, так и прогнозировать ее дальнейшее развитие. Динамика развития научного направления находит свое отражение в динамике ИП, прежде всего в таких его показателях как рост числа информационных единиц (ИЕ), например публикаций, и интенсивность их использования. Так, с учетом этапов развития научного направления, можно отметить, что на этапе его зарождения отмечается небольшое число публикаций с высокой степенью рассеяния информации; на этапе формирования происходит резкое увеличение числа публикаций, достигающее максимального значения на эволюционном этапе и уменьшение числа публикаций и их использования на этапе деградации. Вместе с тем, следует отметить, что данные показатели должны быть достаточно строго «привязаны» к смысловому (семантическому) содержанию информационных единиц, что, в свою очередь, должно обеспечить высокую достоверность контроля и прогнозирования.

В связи с этим представляется актуальной задача создания системы оценки статистических показателей для контроля динамики ИП и объективного оценивания и прогнозирования того или иного научного направления. Решение

данной задачи возможно путем использования ранее полученных результатов [1-3].

Математическая модель динамики информационного потока

Для отслеживания и прогнозирования динамики ИП необходима следующая статистическая информация:

D_N - общее число ИЕ с высокой степенью вероятности соответствующее тематике данного научного направления;

d_o - число выделенных ИЕ на начало наблюдения;

Δd - приращение выделенного числа ИЕ в системе за время наблюдения Δt ;

Δb - приращение числа использований ИЕ за время Δt .

Указанная информация дает возможность определить основные показатели динамики ИП:

$$\Delta I(t) = \frac{\Delta d}{d_o \Delta t} - \text{интенсивность роста числа ИЕ};$$

$$\Delta J(t) = \frac{\Delta b}{d_o \Delta t} - \text{интенсивность использования ИЕ.}$$

Знание этих показателей позволяет воспользоваться нелинейным дифференцированным уравнением, устанавливающим связь между: $\Delta I(t)$, $\Delta J(t)$ и энтропией $H(t)$

$$\dot{H} = \frac{dH}{dt} = \Delta I(t)H(t) - \Delta J(t)H^2(t), \quad (1)$$

$$\text{где } H(t) = \sum \frac{d_k(t)}{D_N} \ln \sum \frac{d_k(t)}{D_N}, k = \overline{1, N}, \quad (2)$$

$d_k(t)$ - число выделяемых ИЕ в процессе наблюдений,

N - число источников, содержащих ИЕ по данному направлению.

Уравнение (1) будем использовать в качестве математической модели динамики ИП. Она может служить основой для структурного построения системы и алгоритма ее функционирования.

Система оценки статистических показателей и алгоритм ее

функционирования

Структура системы должна обеспечивать выполнение таких операций как извлечение знаний из входных данных, семантическая и статистическая обработка входных данных, диалоговое общение (рис. 1).

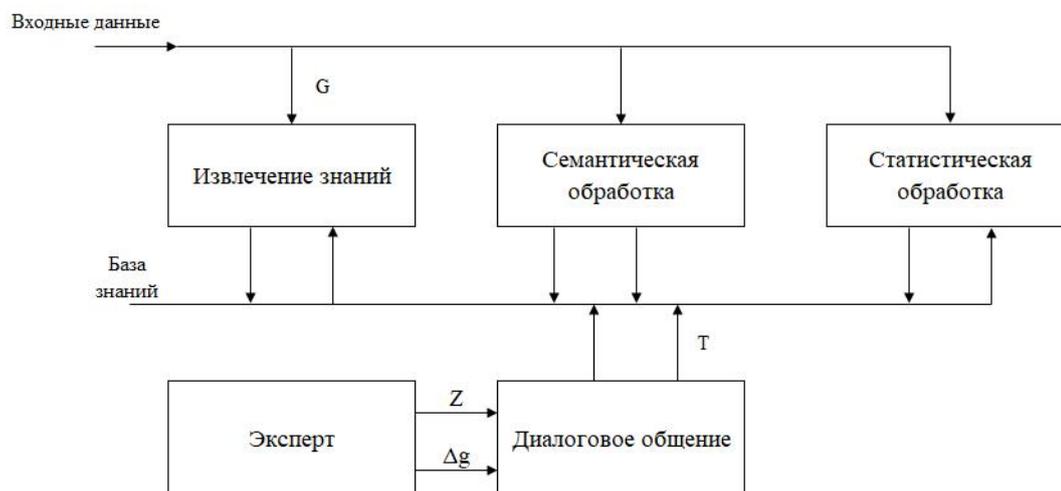


Рис. 1. Структурное построение системы оценки

База знаний (БЗ), позволяющая решать задачи контроля, должна содержать форматированное в рамках метода и языка представления знаний описание среды, которую должна контролировать система. Знания о среде формируются подсистемой «Извлечение знаний» путем объединения интегрированной входной информации G , и корректирующей информации Δg от эксперта. Подсистема «Диалоговое общение» обрабатывает неформализованное задание Z в интерактивном режиме и использует для своей работы соответствующую БЗ, содержащую правила анализа и синтеза естественно-языковой или графической информации в проблемной области, а также интерпретатор, служащий для преобразования неформализованного задания Z в формализованное T в рамках внутреннего языка системы. Подсистема «Семантическая обработка» обеспечивает выполнение таких операций (рис. 2), как адаптивное группирование входных данных по вторичным признакам (классификационные индексы, термины, причастность к специализированным изданиям и др.), формирование семантических шаблонов для каждой из ранее полученных групп, формирование текущих семантических образов,

установление аналогии между шаблоном и текущим образом. Результатом выполнения этих операций является выделенное число информативных единиц d_{ik} , из общего их числа D_{iN} с высокой степенью вероятности, соответствующее тематике данного (i-го) направления. Подсистема «Статистическая обработка» обеспечивает получение статистической информации по выделенному числу информативных единиц d_{ik} , обеспечивающую эксперту возможность отслеживания и прогнозирования динамики развития научного направления по показателям динамики информационного потока:

* если значение энтропии минимально H_{min} и $\dot{H} > 0 (\Delta J \approx 0)$, то это соответствует этапу зарождения научного направления;

* если происходит рост энтропии и при этом $\dot{H} < 0$ (высокие значения ΔJ), то это соответствует этапу формирования;

* если энтропия максимальна H_{max} и $\dot{H} > 0$, то это соответствует эволюционному этапу;

* если $\dot{H} \leq 0 (\Delta I \approx 0 \text{ и } \Delta J \approx 0)$, то это соответствует этапу деградации.

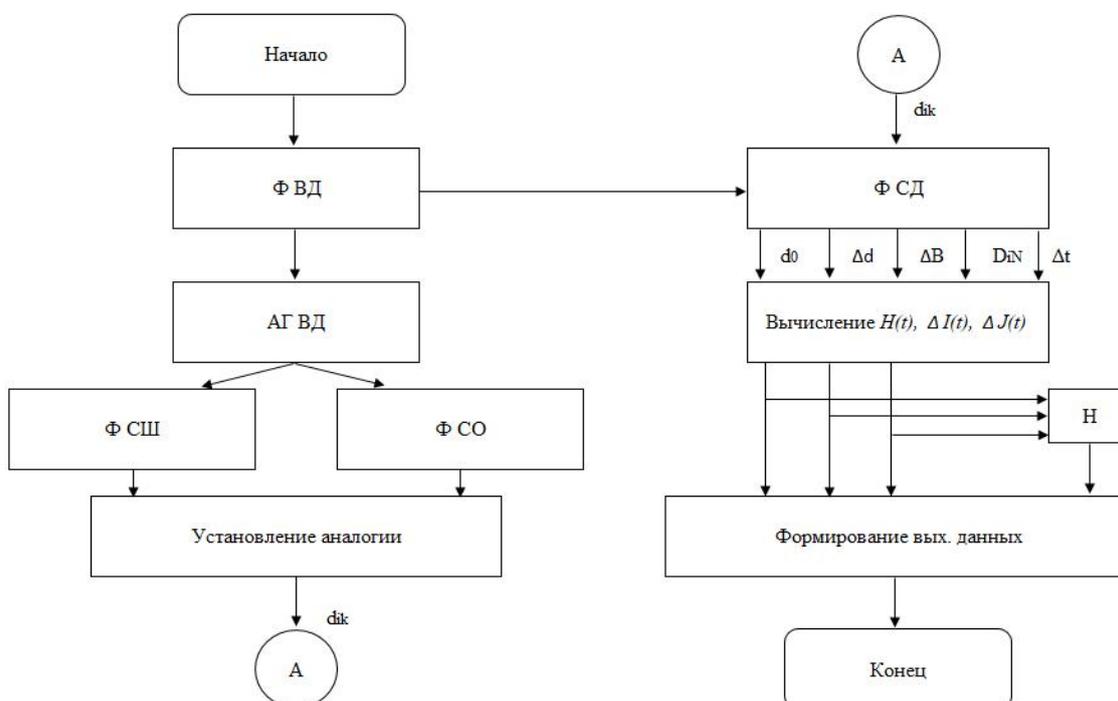


Рис. 1. Алгоритм функционирования системы, где Ф - формирование; ВД - входные данные; АГ- адаптивное группирование; СШ- семантический шаблон; СО - семантический образ; СД- статистические данные

Выводы

Предложенные принципы структурного построения системы могут быть использованы при создании экспертных систем, предназначенных для контроля и прогнозирования развития научных направлений по статистическим показателям информационного потока.

Список литературы

1. Анцыферов С.С., Фазилова К.Н., Ханова М.К. Стандартизация показателей свойств документальных информационных потоков // В сборнике: Национальная научно-техническая конференция с международным участием. Перспективные материалы и технологии (ПМТ-2022). Сборник докладов конференции Института перспективных технологий и индустриального программирования РТУ МИРЭА. Москва. 2022. С. 118-122.
2. Анцыферов С.С., Фазилова К.Н., Ханова М.К. Методика оценки показателей свойств документальных информационных потоков // В сборнике: Управление документацией в цифровой среде. Сборник трудов IV национальной научно-практической конференции. Москва. 2022. С. 11-15.
3. Анцыферов С.С., Фазилова К.Н., Ханова М.К. Контроль и управление научно-технической информацией посредством документального информационного потока // Управление документацией в цифровой среде / Сборник трудов V национальной научно-практической конференции, 1 марта 2023 года, Москва, – Волгоград: ООО «Сфера». 2023. С. 7-11.

К ВЫБОРУ КРАЕВЫХ УСЛОВИЙ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА В ПОЛУПРОВОДНИКОВОМ *n-p*-ПЕРЕХОДЕ

Н.М. Богатов

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

Теория полупроводниковых приборов с *n-p*-переходами, построенная Шокли [1], непрерывно совершенствуется. Популярность получили модели, описывающие два предельных случая: резкий *n-p*-переход, плавный *n-p*-переход с линейным распределением примесей [2, 3]. Для анализа *n-p*-переходов с реальным профилем примесей разработаны численные модели [4, 5].

Ключевым положением теории является изменение потенциала электрического поля в области пространственного заряда (ОПЗ) *n-p*-перехода. Учет изменения концентрации носителей заряда в ОПЗ позволяет более точно рассчитать распределение электрического потенциала и плотности заряда [6]. В случае сильно несимметричных, а также сверхмелких *n-p*-переходов используются численные расчеты [7, 8].

Правильное описание *n-p*-перехода необходимо для решения прикладных задач и определения параметров области объемного заряда реальных полупроводниковых структур. В работах [6, 9] с помощью численного моделирования показано, что в резком или мелком диффузионном, несимметричном *n-p*-переходе присутствуют 3 области: 1 – эмиттер, содержащий плотность положительного заряда меньшую, чем концентрация ионизированных доноров; 2 – область, обогащенная электронами, в которой концентрация электронов превышает концентрацию ионизированных примесей; 3 – область, обедненная электронами и дырками, содержащая плотность отрицательного заряда, созданного ионизированными акцепторами.

Цель работы – рассчитать плотность заряда в диффузионном несимметричном *n-p*-переходе, используя численное решение уравнения Пуассона с краевым условием, учитывающим общую электронейтральность структуры.

Общепринятая условная схема планарного n - p -перехода показана на рис.1: эмиттер расположен при $-w_n \leq x < -d_n$, область, обедненная носителями заряда, (ООНЗ) расположена при $-d_n \leq x \leq d_p$, база, в которой выполняется условие локальной нейтральности, расположена при $d_p \leq x \leq w_p$. Концентрация ионизованных примесей при $-w_n \leq x \leq w_p$ задается формулой (1):

$$N(x) = N_D(x) - N_A, \quad (1)$$

где концентрация ионизованных доноров в модели диффузии из неограниченного источника

$$N_D(x) = N_{D0} \operatorname{erfc}\left(\frac{(x + w_n)}{x_0}\right),$$

концентрация ионизованных акцепторов

$$N_A = \text{const}.$$

При $x = 0$ выполняется условие $N(0) = 0$ – металлургическая граница n - p -перехода. В расчетах использованы следующие значения: $N_{D0} = 10^{26} \text{ м}^{-3}$, $N_A = 10^{21} \text{ м}^{-3}$. Глубина залегания n - p -перехода $w_n = 0,45 \cdot 10^{-6} \text{ м}$ достаточно велика, чтобы уменьшить эффект образования области, обогащенной электронами, в ОПЗ.

Концентрации электронов $n(x)$, дырок $p(x)$ определяются по формулам [2]:

$$n(x) = N_c e^{\frac{F - E_g + q\varphi(x)}{kT}}, \quad p(x) = N_v e^{\frac{-F - q\varphi(x)}{kT}}, \quad (2)$$

где N_c – эффективная плотность электронных состояний в окрестности дна зоны проводимости, F – электрохимический потенциал (уровень Ферми), отсчитанный от вершины валентной зоны в точке $x = w_p$, q – элементарный заряд, $\varphi(x)$ – потенциал внутреннего электрического поля, k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, N_v – эффективная плотность электронных состояний в окрестности вершины валентной зоны, E_g – ширина запрещенной зоны.

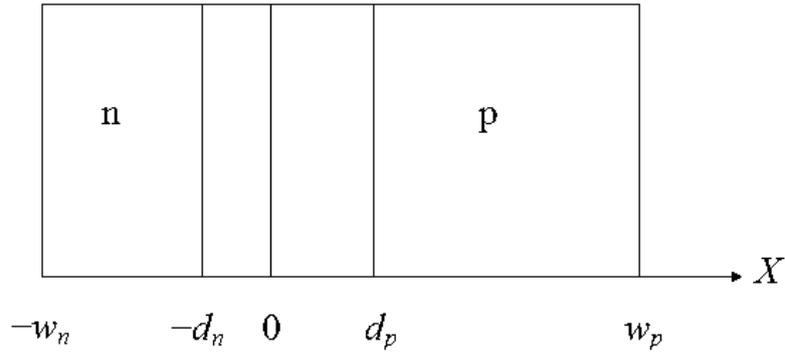


Рис.1. Схема n - p -перехода.

Потенциал внутреннего электрического поля является решением уравнения Пуассона [2]:

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) = -\frac{q}{\varepsilon \varepsilon_0} (p(x) - n(x) + N(x)), \quad (3)$$

где ε – диэлектрическая проницаемость вещества, ε_0 – диэлектрическая постоянная.

Дополнительным условием для уравнения (3) является условие общей электронейтральности [2]:

$$\int_{-w_n}^{w_p} (p(x) - n(x) + N(x)) dx = 0. \quad (4)$$

В общем случае концентрация заряженных частиц $\rho(x) = p(x) - n(x) + N(x)$ распределена по всей длине полупроводника $-w_n \leq x \leq w_p$, так что параметры d_n , d_p не входят в уравнения явно.

Часто используемым предположением является отсутствие плотности заряда на внешних поверхностях

$$\rho(-w_n) = 0, \quad \rho(w_p) = 0. \quad (5)$$

Условия (5) и формулы (2) используются для определения значений $\varphi(-w_n)$ и $\varphi(w_p)$, являющихся краевыми условиями для решения уравнения (3). Из условия (4) следует, что

$$\left. \frac{d}{dx} \varphi(x) \right|_{x=-w_n} = \left. \frac{d}{dx} \varphi(x) \right|_{x=w_p} = 0. \quad (6)$$

Сравнивая n - p -переход с моделью плоскопараллельного конденсатора, отметим, что напряженность электрического поля $E(x) = -\frac{d}{dx}\varphi(x)$ равна нулю вне конденсатора, тогда условие (6) следует записать в виде

$$\left. \frac{d}{dx} \varphi(x) \right|_{x=-w_n-o} = \left. \frac{d}{dx} \varphi(x) \right|_{x=w_p+o} = 0, \quad (7)$$

где o – произвольное смещение. Используем этот факт для построения численного решения уравнения Пуассона в n - p -переходе.

Выбор начала отсчета потенциала произволен, поэтому считаем, что $\varphi(w_p) = 0$. Размер базы $w_p \gg \max(w_n, d_p)$, база локально нейтральна, поэтому $\rho(w_p) = 0$. Отсюда, используя формулы (2), находим значение F .

Из (7) следует, что $\varphi(x) = \varphi_0$ при $x \leq -w_n$. Константа φ_0 явно не задается, а определяется в итерационном процессе при достижении условия (4). Уравнение Пуассона в разностной форме (8) решалось методом последовательных приближений.

$$\frac{\varphi^j(x-h) - 2\varphi^j(x) + \varphi^{j-1}(x+h)}{h^2} = -\frac{q}{\varepsilon\varepsilon_0} \left(N_v e^{\frac{-F-q\varphi^j(x)}{kT}} - N_c e^{\frac{F-E_g+q\varphi^j(x)}{kT}} + N(x) \right). \quad (8)$$

Краевые условия $\varphi^j(-w_n-h) = \varphi^j(-w_n)$, $\varphi^j(w_p) = 0$. В формуле (8) h – шаг дискретизации, j – номер итерации. Начальное приближение $\varphi^0(x)$ является решением уравнения локальной нейтральности

$$N_v e^{\frac{-F-q\varphi^0(x)}{kT}} - N_c e^{\frac{F-E_g+q\varphi^0(x)}{kT}} + N(x) = 0.$$

Значения $\varphi^j(x)$ находим, решая алгебраические уравнения (8) во всех точках отрезка дискретизации от $x = -w_n$ до $x = w_p - h$, используя $\varphi^{j-1}(x)$. Итерационный процесс прекращается при достижении условия (4).

Расчитанное распределение электрического потенциала $\varphi(x)$ показано на рис.2.

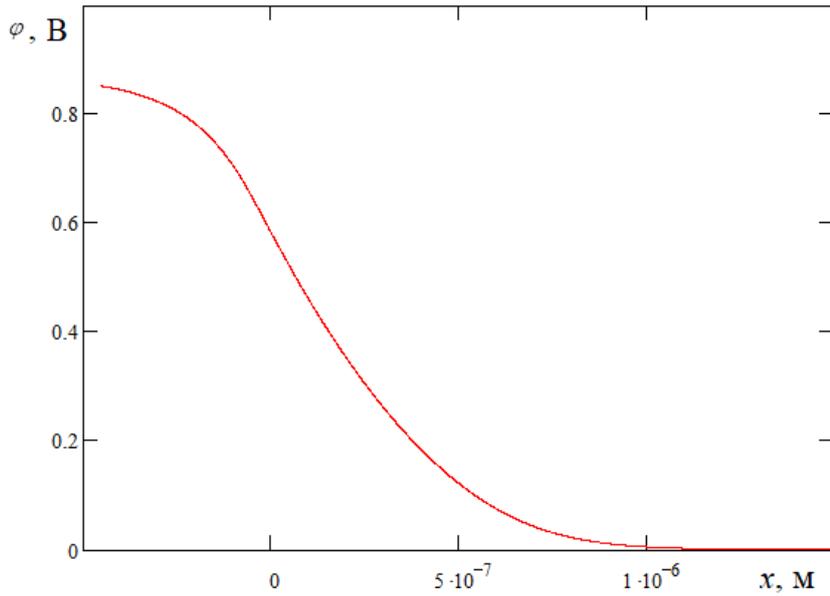


Рис.2. Рассчитанная зависимость $\varphi(x)$.

Полученные значения $\varphi(x)$ использованы для расчета концентраций электронов $n(x)$, дырок $p(x)$ (рис.3) и заряженных частиц $\rho(x)$ (рис.4).

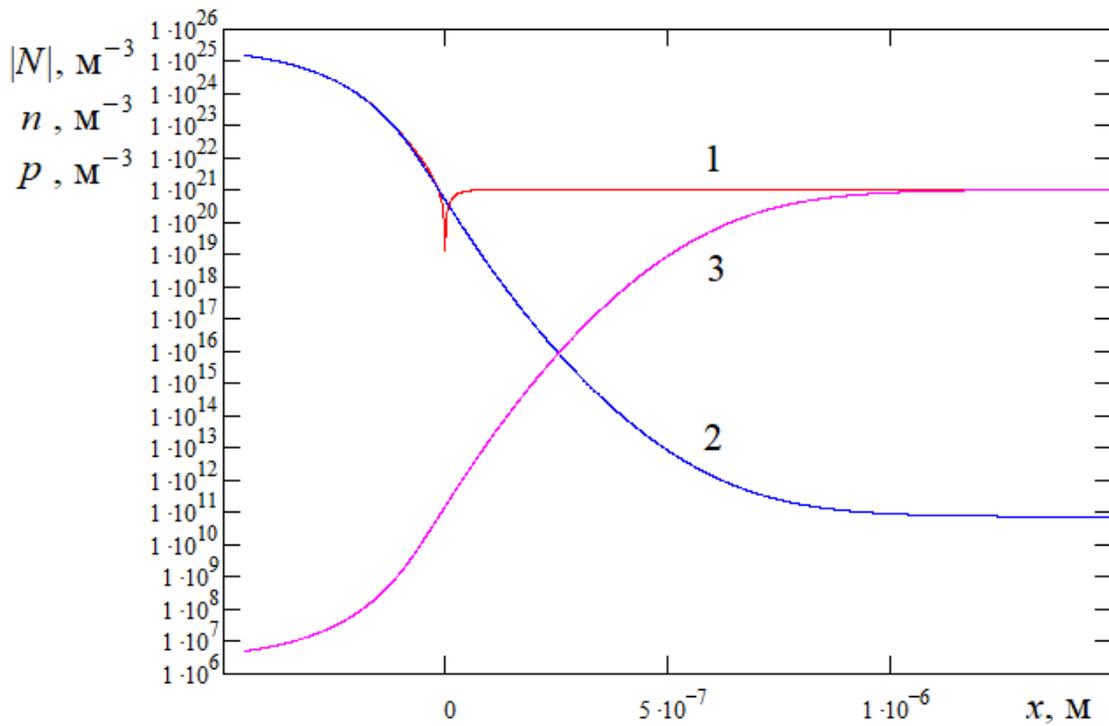


Рис.3. Концентрации 1 – ионизованных примесей (по модулю) $|N(x)|$, 2 – электронов $n(x)$, 3 – дырок $p(x)$.

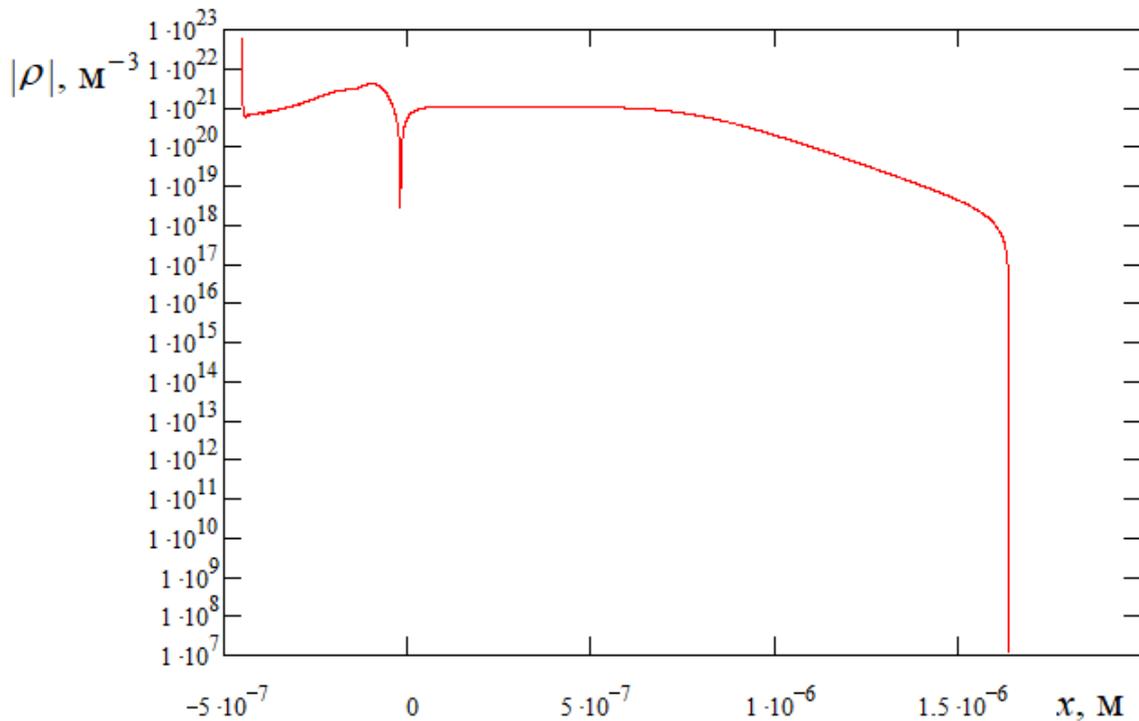


Рис.4. Модуль концентрации заряженных частиц $|\rho(x)|$.

Сравнение зависимостей на рис.3 показывает, что ООЗ расположена при $0 < x < 0,75 \cdot 10^{-6}$ м, где $n(x), p(x) \ll |N(x)|$. Часть ОПЗ, содержащая положительную плотность заряда, начинается на поверхности $x = -w_n$ и простирается вплоть до металлургической границы $x = 0$ (рис.4).

Существенной особенностью полученных зависимостей является наличие плотности заряда на поверхности $x = -w_n$. Этот эффект не связан с поверхностными состояниями, лежащими в зоне запрещенных энергий, отсутствующими в данной модели. Причиной является изменение концентрации ионизованных доноров в эмиттере.

Список литературы

1. Shockley W. The theory of n - p junctions in semiconductors and n - p junction transistors / W. Shockley // Bell Syst. Tech. J. — 1949. — V.28. — N 7. P. 435 – 439.

2. Зи С. Физика полупроводниковых приборов. Кн. 1 / С. Зи. — М.: Мир, 1984. — 456 с.
3. Pulfrey D.L. Understanding Modern Transistors and Diodes / D.L. Pulfrey. — Cambridge University Press, 2010. — 335 p.
4. Redfield D. Revised model of asymmetric n - p junctions / D. Redfield // Applied Physics Letters. — 1979. — V.35. — July 15. P. 182 – 184.
5. Pfitzner A. Numerical solution of the one - dimensional phenomenological transport equation set in semiconductors / A. Pfitzner // Electron Technology. — 1977. — V.10. — N 4. P. 3 – 21.
6. Богатов Н.М. Моделирование распределения заряда в несимметричном n - p -переходе / Н.М. Богатов // Моделирование неравновесных систем: Материалы XIX Всероссийского семинара, 7 – 9 октября 2016 г. Красноярск. Красноярск: Институт вычислительного моделирования СО РАН. — 2016. С. 10 – 14.
7. Богатов Н.М. Анализ влияния легирующих примесей на эффективность солнечных элементов из монокристаллического кремния / Н.М. Богатов // Электронная техника. Сер. 6. Материалы. — 1991. — В. 6(260). С. 48 – 53.
8. Богатов Н.М. Анализ влияния рекомбинации в области пространственного заряда на вольт-амперную характеристику кремниевых солнечных элементов / Н.М. Богатов // Гелиотехника. — 1990. — № 6. С. 49 – 53.
9. Bogatov N.M. Modelling of asymmetric n - p junction enriched with charge carriers in equilibrium state / N.M. Bogatov, L.R. Grigoryan, A.I. Kovalenko, I.I. Nesterenko, Y.A. Polovodov // IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series. — 2019. — V. 1278. — I. 012006. P. 1 – 7.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ БИНАРНОГО СПЛАВА AG-AU¹

С.Л. Гафнер¹, А.А. Череповская, М.Н. Наразин, И.С. Бекешева

Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова,

¹*sgafner@rambler.ru*

1. Введение

Известно, что из-за уникальных физико-химических свойств наночастицы из металла могут применяться во многих областях науки и техники, в частности, такой областью является нанооптика. Благодаря явлению поверхностного плазмонного резонанса некоторые металлические нанокластеры могут быть использованы, как антенны для передачи энергии электромагнитных волн [1,2] или в качестве SERS (поверхностное комбинационное рассеяние света) структур. Частота и интенсивность плазмонного резонанса сильно зависят от формы, размера, внутреннего строения наночастиц, что в свою очередь определяется способом синтеза наноматериалов. Если рассматривать подготовку SERS подложек, одним из возможных вариантов формирования массива наночастиц на них является физический метод термического испарения в вакууме [1,2]. Он значительно дешевле и менее трудоемок по сравнению с литографическим методом, более точен и воспроизводим, чем химический.

Экспериментальные и теоретические данные показывают, что добавление в нанокластер другого металла (в некоторых случаях достаточно даже одного примесного атома) приводит к изменению его свойств, в том числе и строения, например, могут появляться неправильная морфология (треугольные, шестиугольные и др. пластины) или янус-подобные частицы, а также множество некристаллических структур. Однако существует сравнительно мало информации о том, какими именно строением и формой будут обладать

¹Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №23-12-20003, <https://rscf.ru/project/23-12-20003/> при паритетной финансовой поддержке Правительства Республики Хакасия

биметаллические наночастицы при заданных условиях.

В настоящее время удалось добиться устойчивого синтеза нанокластеров с контролируемыми размерами и формой для таких металлов, как Au и Ag, и именно они вызывают большой научный интерес в нанооптике, демонстрируя LSPR полосу в видимой области спектра. Использование нанокластеров из чистого металла сопровождается рядом недостатков, которые возможно устранить, при помощи так называемых бинарных наночастиц. Например, бинарные наночастицы сплава золота и серебра представляют большой практический интерес в связи с возможностью регулирования спектрального положения и амплитуды LSPR при помощи изменения состава, размера, формы, структуры и диэлектрического окружения наночастиц. Регулирование целевого химического состава наносплава открывает дополнительные возможности для управления оптоэлектронными свойствами, а также способствует улучшению практически важных характеристик. Поскольку система Ag-Au представляет собой ряд непрерывных твердых растворов, появляется возможность плавного изменения положения LSPR максимума в диапазоне длин волн, соответствующих чистому Ag и чистому Au путем выбора процентного соотношения компонентов [2].

Таким образом, в работе нами будет проведено молекулярно-динамическое исследование процессов структурообразования наночастиц бинарного сплава Ag-Au в зависимости от их целевого состава, размера и скорости охлаждения.

2. Компьютерная модель

В ходе исследования очень важным представляется выбор методики изучения объекта. Безусловно, реальный эксперимент выступает тем инструментом, с помощью которого проверяются наши гипотезы и предположения, однако, в случае анализа термического воздействия на нанокластеры не все так однозначно. Экспериментально установлено, что в

конечном итоге нам будет доступно лишь изображение конечной стадии термической эволюции внутренней структуры наночастицы. Именно поэтому, на наш взгляд, наиболее подходящей методикой для исследования является компьютерное моделирование, которое позволяет проводить изучение, изменяя внутренние и внешние параметры системы (размер, форма, начальное строение, температура и т.д.) в достаточно широком диапазоне.

В качестве основы моделирования был выбран метод молекулярной динамики (МД), который является достаточно адекватным с точки зрения определения структур металлических наночастиц с интересующим нас размером.

Важной частью моделирования реальных систем для получения соизмеримых результатов является выбор потенциала межатомного взаимодействия. В представленной работе компьютерное моделирование Ag-Au наночастиц проводилось с использованием модифицированного потенциала сильной связи TB-SMA [3], хорошо зарекомендовавшего себя при исследовании внутреннего строения нанокластеров различных химических элементов. Метод основан на том, что большая группа свойств переходных металлов может быть полностью определена из плотности состояний внешних d – электронов. Второй момент плотности состояния есть μ_2 , и экспериментально установлено, что энергия когезии металлов пропорциональна ширине плотности состояний, которая в приближении вторых моментов есть просто $\sqrt{\mu_2}$. Если принимаются во внимание только $dd\sigma$ - $dd\pi$ - и $dd\delta$ - орбитали, то, согласно данной модели, зонная энергия атома i может быть записана как

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

которая зависит только от расстояния между атомами i и j , т.е. r_{ij} , и формально является тем же самым, что и функция погружения в методе погруженного атома. Кроме того, модель имеет слагаемое, отвечающее за отталкивающее взаимодействие, в виде суммы борн-майеровских парных ионных потенциалов:

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

где α и β – различные типы атомов. Таким образом, полная энергия системы имеет вид

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

Значения величин $\xi_{\alpha\beta}$, $p_{\alpha\beta}$, $A_{\alpha\beta}$, $q_{\alpha\beta} \text{ и } r_{\alpha\beta}^{\alpha\beta}$, а также радиус обрезания потенциала r_c , определяют параметры элементов системы и взяты непосредственно из работы [3]. Величины $\xi_{\alpha\beta}$, $p_{\alpha\beta}$, $A_{\alpha\beta}$ и $q_{\alpha\beta}$ находятся подгонкой к экспериментальным значениям энергии когезии, параметру решетки, объемному модулю B и упругим постоянным C_{44} и C' .

Потенциалы, разработанные в [3], успешно зарекомендовали себя при моделировании систем в кристаллическом состоянии и прошли подробную проверку по многим показателям. Например, расхождение рассчитанных в [3] характеристик и экспериментальных данных ряда параметров точечных дефектов, термических свойств металлов и фононных спектров составляет не более 3-5%.

Температура системы определялась посредством средней кинетической энергии атомов, рассчитанной при помощи скоростного алгоритма Верле [4] с шагом по времени 1.0 фс. В качестве начальных объектов были использованы сферические кластеры, получаемые при вырезании из идеальной кристаллической решетки Ag, в которых часть атомов серебра была случайным образом заменена атомами золота в интересующем нас целевом процентном соотношении.

Кроме того, важной частью моделирования является взаимодействие системы с тепловым резервуаром. Для метода молекулярной динамики естественным является микроканонический NVE ансамбль, для которого постоянной величиной является энергия. Для подобных целей был предложен и развит целый ряд специальных методик, и, в частности, термостат Андерсена, который использовался нами при вычислениях.

Данный термостат применяется для моделирования процесса плавного изменения температуры с заданной скоростью. Для решения такой задачи атомы Ag-Au наночастицы испытывают случайные столкновения с некими виртуальными объектами, имитирующими атомы холодного инертного газа. Эффект столкновений проявляется в том, что скорость Ag-Au нанокластера

понижается случайным образом по сравнению с распределением Максвелла-Больцмана при предыдущей температуре. В нашем случае скорость охлаждения атомов рассматриваемого металла контролируется частотой их столкновений с атомами теплового резервуара.

Моделирование проводилось с использованием компьютерной программы MDNTP, разработанной Dr. Ralf Meyer, University Duisburg Germany. Далее при помощи визуализаторов OVITO и xmakemol определяется реальный внешний вид и структура изучаемых наночастиц.

3. Анализ полученных результатов компьютерного моделирования

Для компьютерной имитации процессов, происходящих при подготовке SERS подложек указанным выше способом, нами были созданы три первичных массива Ag-Au нанокластеров с идеальным ГЦК строением диаметром 2.0, 4.0 и 6.0 нм и различным содержанием компонент от $Ag_{90}Au_{10}$ до $Ag_{50}Au_{50}$. Затем происходил их нагрев до температур около $T = 1500$ К, с целью разрушения дальнего порядка и исключения наличия остаточных зародышей кристаллической фазы. После процесса формирования массив Ag-Au наночастиц с первичной аморфной структурой подвергался процедуре плавного охлаждения с регулируемым темпом отвода тепловой энергии до температуры 300 К.

Анализ полученных в ходе моделирования результатов показал, что даже при незначительном добавлении в Ag наночастицы (AgНЧ) примеси золота, результат может достаточно сильно отличаться от случая химически чистого металла [5]. При низком темпе отвода тепловой энергии, соответствующем времени охлаждения $\tau = 2.0-2.5$ нс, все AgНЧ ($D = 2.0-10.0$ нм) обладали явно выраженной кристаллической структурой (Ih, Dh, ГЦК/ГПУ). При уменьшении времени охлаждения до 0.5 нс наблюдалось существенное снижение процента возникновения кристаллических модификаций. Так при диаметре AgНЧ $D = 2.0$ нм аморфным строением обладало примерно 30% наночастиц, при $D = 4.0$ нм уже порядка 40%, а НЧ с $D = 6.0$ нм вероятность появления аморфных структур достигает 80-90%. Однако даже при такой высокой скорости отвода тепловой

энергии лишь при диаметре кластера $D = 10.0$ нм все исследуемые кластеры стабильно обладали разупорядоченным строением. А вот в случае бинарных частиц Ag-Au диаметрами 2.0, 4.0 и 6.0 нм соответственно видно, что добавление атомов золота в AgНЧ при времени охлаждения из расплава $\tau = 2.5$ нс повлияло только на самые малые Ag-Au НЧ диаметром $D = 2.0$ нм, где с ростом процентного содержания атомов золота наблюдался аналогичный рост вероятности появления аморфной фазы, доходящий до своего максимального значения в 60-70%. При $D = 4.0$ и 6.0 нм аналогично AgНЧ аморфная фаза при этой скорости отвода тепловой энергии не фиксировалась, несмотря на то, целевой состав менялся до своего максимального значения $Ag_{50}Au_{50}$.

При времени охлаждения $\tau = 0.5$ нс влияние добавки второго химического элемента оказалось уже более существенным. Так для бинарной наночастицы аморфная фаза наблюдалась у Ag-Au в 50-100% модельных опытов, плавно увеличивая вероятность своего появления с возрастанием процентного содержания атомов золота. Т.е. при такой высокой скорости отвода тепловой энергии добавление в AgНЧ атомов золота привело к практически линейному увеличению вероятности появления аморфного строения.

Таким образом можно прийти к выводу, что внедрение атомов золота в AgНЧ оказывает явное дестабилизирующее воздействие на создание упорядоченного внутреннего строения в бинарной наночастице Ag-Au [6, 7]. Т.е., для того, чтобы Ag-Au НЧ на SERS подложке были в упорядоченном кристаллографическом состоянии при любом целевом содержании компонент необходимо использовать наночастицы с диаметром $D > 2-3$ нм и добиваться медленного охлаждения системы.

Перейдем теперь к вопросу определения конкретного вида кристаллического строения бинарных Ag-Au НЧ, получаемых нами при МД моделировании. Полученные результаты свидетельствуют о том, что наиболее вероятной кристаллической структурой для диаметра $D = 2.0$ нм является Ih конфигурация, в некоторых случаях с ней конкурирует Dh модификация, а ГЦК/ГПУ морфология встречается ощутимо реже (рис. 1).

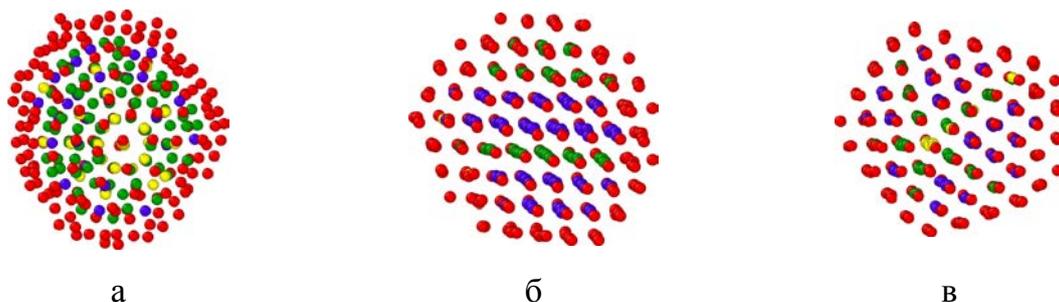


Рис. 1. Примеры кристаллических структур нанокластеров $\text{Ag}_{90}\text{Au}_{10}$ диаметром 2.0 нм, полученные в ходе охлаждения из расплава: а) – Ih; б) – ГЦК/ГПУ; в) – Dh.

Если рассматривать нанокластеры Ag-Au диаметром $D = 4.0$ нм, то для них характерно наличие Ih фазы именно при максимальном времени кристаллизации $\tau = 2.5$ нс или для частиц с малым содержанием золота (целевой состав $\text{Ag}_{90}\text{Au}_{10}$). При других условиях икосаэдрическое строение в ходе МД экспериментов не фиксировалось. Таким образом, можно сделать вывод, что рассмотренный диаметр бинарного кластера Ag-Au, по всей видимости, лежит в той области размеров, в которой, при условии плавной кристаллизации с высокой скоростью, икосаэдрическая структура перестает быть наиболее стабильной и сменяется Dh или ГЦК строением. Если же рассматривать поведение Ag-Au наночастиц с увеличением скорости охлаждения, то здесь фиксировался существенный рост нахождения их в аморфном состоянии, так же как и у AuНЧ [8]. При $\tau = 0.5$ нс процент фиксации данной политипной модификации составлял 60-100%, увеличиваясь с ростом процентного содержания атомов золота, что еще раз доказывает дестабилизирующее его действие при формировании упорядоченного строения бинарных наночастиц Ag-Au.

Перейдем далее к рассмотрению результатов МД моделирования, полученных для ансамбля бинарных частиц Ag-Au диаметром $D = 6.0$ нм. Видно, что при таком размере аморфная фаза не фиксируется только при максимальном времени охлаждения $\tau = 2.5$ нс, при большем темпе отвода тепла ($\tau = 0.5$ и 1.5 нс) она наблюдается в 100% случаев, начиная с состава $\text{Ag}_{70}\text{Au}_{30}$. Для данного массива также с ростом процента атомов золота в Ag-Au НЧ имеется и

аналогичный рост вероятности разупорядоченного строения. То есть хорошо заметна тенденция к тому, что увеличение среднего размера НЧ в массиве и/или увеличение процентного содержания атомов золота в бинарной наночастице Ag-Au приводит к увеличению вероятности формирования в НЧ аморфного строения, причем такой рост часто имеет практически линейный характер. Что касается вопроса появления кристаллических структур, то в случае их наличия ожидаемо подавляющую часть составила ГЦК модификация, характерная для объемного материала.

4. Заключение

Таким образом, результаты проведенного моделирования свидетельствуют о том, что внедрение атомов золота в нанокластер серебра оказывает дестабилизирующее воздействие на процессы внутреннего упорядочения структуры. Также с ростом процентного содержания атомов золота в бинарной наночастице Ag-Au наблюдается увеличение вероятности формирования аморфного строения, причем такой рост часто имеет практически линейный характер; в малых нанокластерах Ag-Au диаметром менее $D < 2-3$ нм при любом целевом составе очень трудно добиться образования строго кристаллического строения. Средний размер массива наночастиц Ag-Au в 4.0 нм является наиболее подходящим для образования плотноупакованных структур при относительно небольшом темпе отвода термической энергии; с ростом среднего размера вероятность формирования пятичастичной симметрии в бинарных частицах Ag-Au ощутимо падает.

Список литературы

1. D.G. Gromov, S.V. Dubkov, A.I. Savitskiy, Yu.P. Shaman, A.A. Polokhin, I.A. Belogorokhov, A.Yu. Trifonov Optimization of nanostructures based on Au, Ag, Au-Ag nanoparticles formed by thermal evaporation in vacuum for SERS applications.// Applied Surface Science 489 (2019) 701–707.
2. Д.Г. Громов, И.В. Мельников, А.И. Савицкий, А.Ю. Трифонов, Е.Н. Редичев, В.А. Астапенко Оптическая спектроскопия массивов биметаллических

наночастиц Ag-Au, полученных методом вакуум-термического испарения. // Письма в ЖТФ, 2017, том 43, вып. 5.- С.3-9.

3. Rapallo, A., Rossi, G., Ferrando, R., Fortunelli, A., Curley, B. C., Lloyd, L. D., Johnston, R. L. (2005). Global optimization of bimetallic cluster structures. I. Size-mismatched Ag-Cu, Ag-Ni, and Au-Cu systems. *The Journal of Chemical Physics*, 122(19), 194308. doi:10.1063/1.1898223

4. Verlet L. Computer «Experiments» on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules // *Phys Rev.* 1967. 159. №1. P. 98. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.159.98>

5. Д.А. Башкова, Ю.Я. Гафнер, С.Л. Гафнер, Л.В. Редель Применение наночастиц серебра в качестве ячеек фазо-изменяемой памяти. // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2018. - Т.15. - №.3. – С. 313-319.

6. Yuri Gafner, Svetlana Gafner, Larisa Redel, Ivan Zamulin Dual structural transition in small nanoparticles of Cu-Au alloy. // *Journal of Nanoparticle Research*. – 2018. – 20. - № 2. – 51.

7. Ю.Я. Гафнер, С.Л. Гафнер, Ж.В. Головенько Анализ распределения по размеру бинарных наночастиц Cu-Au при синтезе из газовой среды. // *Письма о материалах*. – 2020. - 10(1). – С.33-37. DOI: 10.22226/2410-3535-2020-1-33-37

8. Гафнер Ю.Я., Головенько Ж.В., Гафнер С.Л. Формирование структуры нанокластеров золота при процессах кристаллизации. // *ЖЭТФ*. – 2013. – Т. 143. – В.2 – С.288-305.

**ВОЗМОЖНОСТИ АНАЛИЗА ИНФОРМАЦИИ О ГЕНЕТИЧЕСКИХ
ОСОБЕННОСТЯХ ПАЦИЕНТОВ ПРИ ПРОВЕДЕНИИ
АМБУЛАТОРНОГО ЭТАПА РЕАБИЛИТАЦИИ У БОЛЬНЫХ
ИНФАРКТОМ МИОКАРДА**

С.Е.Головенкин¹, С.Е.Русал², Е.Ю.Можейко¹, И.В.Савицкий¹, Д.В.Ружилов¹

¹ФГБОУ ВО «Красноярский Государственный Медицинский Университет им.
проф. В.Ф.Войно-Ясенецкого» МЗ РФ,

²КГБУЗ «Краевая Клиническая Больница»

Ежегодно от сердечно-сосудистых заболеваний (ССЗ) в мире погибают более 17 млн человек [1]. В России, как и в других странах, эта патология на протяжении нескольких десятилетий остается основной причиной смертности населения (50,1 %) [2–4]. Это заставляет искать новые подходы к диагностике, лечению, профилактике и реабилитации пациентов с сердечно-сосудистыми заболеваниями.

Активная работа системы кардиореабилитации (КР) и вторичной профилактики пациентов с острым инфарктом миокарда (ИМ) – важнейший компонент в решении общей задачи по снижению смертности от кардиоваскулярных причин [5, 6]. КР позволяет стабилизировать заболевание, предотвратить развитие осложнений и последующих госпитализаций, снизить смертность и инвалидизацию пациентов, улучшить качество жизни больных [7–10].

Особенно важным является физический компонент реабилитации на третьем – амбулаторно-поликлиническом этапе. Именно на этом этапе важно к адекватной медикаментозной и психологической помощи добавить дозированную ходьбу, лечебную физкультуру, тренировки на велоэргометре или тредмиле. В настоящее время в зависимости от возраста, сопутствующей патологии, тяжести перенесенного инфаркта миокарда разработаны схемы увеличения физических нагрузок для каждого пациента. Что позволяет учесть особенности каждого пациента и подобрать ему адекватный уровень физической нагрузки. В тоже время, было замечено, что при одинаковой тяжести инфаркта миокарда, одинаковой сопутствующей патологии реабилитационные мероприятия дают иногда разную эффективность. Что обоснованно позволило

предположить влияние генетических особенностей пациентов на эффект реабилитационных мероприятий.

Учитывая эту информацию, для оценки влияния генетических особенностей пациента на восстановление сократительной способности миокарда при проведении реабилитационных мероприятий у больных, перенесших острый инфаркт миокарда, нами отобран однонуклеотидный полиморфизм: rs5186 гена *AGTR1*.

Примененные нами компьютерные нейронные сети помогли выявить значимость выявленных полиморфизмов в восстановлении сократительной способности миокарда при проведении реабилитационных мероприятий у больных, перенесших острый инфаркт миокарда.

В исследовании мы анализировали информацию 278 пациентов обоего пола в возрасте от 41 до 65 лет, перенесших острый инфаркт миокарда, прошедших полный курс реабилитационных мероприятий, подписавших информированное согласие. Согласно поставленным задачам исследования нами проведено молекулярно-генетическое тестирование образцов ДНК, выделенных из венозной крови пациентов. (анализировался полиморфизм rs5186 гена *AGTR1*).

В остром периоде инфаркта миокарда все пациенты получали лечение в Региональном сосудистом центре/первичных сосудистых отделениях с использованием чрескожных коронарных вмешательств. Амбулаторно-поликлинический этап реабилитации все пациенты проходили в «Профессорской клинике» Красноярского Государственного медицинского университета и ООО «Центр Современной Кардиологии» (г.Красноярск).

Всем обследуемым проведены клиничко-инструментальные исследования (ЭКГ, эхокардиография, холтеровское ЭКГ-мониторирование, тест с физической нагрузкой, тест с шестиминутной ходьбой), лабораторные исследования. Всем пациентам произведен забор крови на молекулярно-генетическое исследование.

Выделение геномной ДНК из периферической крови проводили методом фенолхлороформной экстракции с модификациями [11].

Прогнозирование выполнялось при помощи системы Matlab 2016, модуль Neural Network Toolbox [12]. В ходе исследования выполнялся подбор архитектуры нейронной сети, наилучшим образом предсказывающей исходы,

описанные в базе данных.

Во всех экспериментах для прогнозирования использовались искусственные нейронные сети прямого распространения (функция *feedforwardnet*) [12]. Нейросеть, создаваемая при помощи этой функции, содержит набор из нескольких слоев. Первый (входной) слой связывает сеть с вектором входных данных. Далее располагаются несколько скрытых слоев нейронов, причем каждый последующий слой соединен с предыдущим. Последний (выходной) слой производит расчет одного либо нескольких выходных сигналов сети. Выполнялось обучение нейронной сети с учителем с использованием функции обучения *traingdx*, выполняющей обучение по методу обратного распространения ошибки с оптимизацией функции ошибки методом градиентного спуска.

Восстановление сократительной способности миокарда – важнейшая задача проведения все трех этапов реабилитации после перенесенного острого инфаркта миокарда. Оценку восстановления насосной функции сердца мы оценивали после проведения третьего (амбулаторно-поликлинического) этапа. Третий этап проводится амбулаторно в режиме дневного стационара, начинается через 4-6 недель после перенесенного инфаркта миокарда и продолжается в течение 14-16 дней.

Нами было проведено молекулярно-генетическое тестирование образцов ДНК, выделенных из венозной крови пациентов.

При анализе полиморфизма rs5186 гена *AGTR1* распределение частот генотипов было следующим: гомозиготный генотип AA - 51,08%, гетерозиготный генотип AG – 39,57%, гомозиготный генотип GG – 9,35%. Данная информация отражена в Таблице 1.

Таблица 1

Распределение частот генотипов полиморфизма rs5186 гена *AGTR1*

Генотип	Число пациентов	Все пациенты	Мужчины	Женщины
AA	142	51,08%	50,89%	51,85%
AC	110	39,57%	40,18%	37,04%

СС	26	9,35%	8,93%	11,11%
Всего:	278	100,00%	100,00%	100,00%

У мужчин гомозиготный генотип АА составил 50,89%, гетерозиготный генотип АС – 40,18%, гомозиготный генотип СС – 8,93%. У женщин гомозиготный генотип АА составил 51,85%, гетерозиготный генотип АС – 37,04%, гомозиготный генотип СС – 11,11%. Данная информация отражена в Таблице 1.

Восстановление сократительной способности нами оценивалось по пяти показателям: толерантности к физической нагрузке при проведении велоэргометрии, уровню нагрузки при проведении велотренировок, увеличении фракции выброса при проведении ЭхоКГ после проведения кардиореабилитации, приросту показателей теста с шестиминутной ходьбой после прохождения реабилитации, снижении количества баллов по модифицированной шкале Борга после курса реабилитационных мероприятий (шкала оценивает уровень одышки пациента при физической нагрузке). Средние значения этих показателей отражены в Таблице 2.

Таблица 2

Средние значения показателей восстановления сократительной способности миокарда пациентов генотипов АА, АС, СС полиморфизма rs5186 гена *AGTR1*

Показатель	АА (1)	АС (2)	СС (3)	Значимость различий
Толерантность к ФН, ВЭМ, (Вт)	89.15±10.78	87.38±10.07	86.23±10.18	p ₁₋₂ >0,05, p ₁₋₃ >0,05, p ₂₋₃ >0,05
Тренирующая нагрузка при проведении велотренировок(Вт)	70.42±8.16	69.04±7.85	68.38±6.51	p ₁₋₂ >0,05, p ₁₋₃ >0,05, p ₂₋₃ >0,05
Прирост ФВ, ЭхоКС (%)	2.89±1.91	2.52±1.89	2.48±1.81	p ₁₋₂ >0,05, p ₁₋₃ >0,05, p ₂₋₃ >0,05

Прирост ТШХ (м)	49.30±13.93	46.35±12.98	45.46±10.21	p ₁₋₂ >0,05, p ₁₋₃ >0,05, p ₂₋₃ >0,05
Снижение кол-ва баллов, шкала Борга	0.77±0.42	0.71±0.46	0.54±0.51	p ₁₋₂ >0,05, p ₁₋₃ <0,05, p ₂₋₃ <0,05

Как видно из данных Таблицы 2 по четырем показателям статистически значимых различий пациенты с генотипами AA, AC и CC не имеют (это показатели: толерантность к физической нагрузке при проведении велоэргометрии, уровень нагрузки при проведении велотренировок, увеличение фракции выброса при проведении ЭхоКГ после проведения кардиореабилитации, прирост показателей теста с шестиминутной ходьбой после прохождения реабилитации). Лишь по одному показателю: снижение баллов по шкале Борга, генотип CC статистически значимо отличается от генотипов AA и AC. Между генотипами AA и AC статистически значимых различий не выявлено. Учитывая отсутствие статистической значимости по четырем из пяти показателей, есть основания высказаться об отсутствии влияния выбранных генотипов данного полиморфизма на сократимость миокарда у данной категории больных.

Таким образом, не выявлено ассоциации наличия генотипов CC, CG, GG полиморфизма rs5186 гена *AGTR1* с ухудшением восстановления сократительной способности миокарда у пациентов после курса реабилитационных мероприятий.

Мы провели анализ влияния аллелей A и C полиморфизма rs5186 гена *AGTR1* на восстановление сократительной способности миокарда. Информация по данному вопросу содержится в Таблице 3.

Таблица 3

Показатели восстановления сократительной способности миокарда у пациентов с аллелями A и G полиморфизма rs5186 гена *AGTR1*

Показатель	аллель A(1)	аллель C(2)	Значимость различий
------------	-------------	-------------	---------------------

Толерантность к ФН, ВЭМ, (Вт)	88.66±10.59	86.37±10.15	p ₁₋₂ <0,05
Тренирующая нагрузка при проведении велотренировок(Вт)	70.04±8.08	68.19±7.51	p ₁₋₂ <0,05
Прирост ФВ, ЭхоКС (%)	2.78±1.91	2.38±1.87	p ₁₋₂ <0,05
Прирост ТШХ (м)	48.47±13.7	44.78±12.31	p ₁₋₂ <0,05
Снижение кол-ва баллов, шкала Борга	0.76±0.43	0.65±0.48	p ₁₋₂ <0,05

Как видно из Таблицы 3 пациенты имеющие аллель А имеют статистически значимые различия в сравнении с пациентами, имеющие аллель С по показателям: толерантность к физической нагрузке при проведении велоэргометрии, уровень нагрузки при проведении велотренировок, увеличение фракции выброса при проведении ЭхоКГ после проведения кардиореабилитации, прирост показателей теста с шестиминутной ходьбой после прохождения реабилитации, снижение количества баллов по модифицированной шкале Борга после курса реабилитационных мероприятий. Таким образом, есть основания полагать, что имеется ассоциация наличия аллеля С полиморфизма rs5186 гена *AGTR1* с ухудшением восстановления сократительной способности миокарда у пациентов, проходящих курс кардиореабилитации после перенесенного острого инфаркта миокарда.

Таким образом: не выявлено ассоциации наличия генотипов АА, АС, СС полиморфизма rs5186 гена *AGTR1* с ухудшением восстановления сократительной способности миокарда у пациентов после курса реабилитационных мероприятий. Выявлена ассоциация наличия аллеля С полиморфизма rs5186 гена *AGTR1* с ухудшением восстановления сократительной способности миокарда у пациентов, прошедших курс кардиореабилитации после перенесенного острого инфаркта миокарда.

Применение компьютерных нейронных сетей позволило выяснить, что добавление информации о наличии полиморфизма rs5186 гена *AGTR1* позволяет повысить точность восстановления сократительной способности миокарда при проведении реабилитационных мероприятий у больных, перенесших острый инфаркт миокарда с 81,1% до 89,3%.

Внедрение полученных в данном исследовании результатов позволит на

основании генетических особенностей пациента индивидуально подойти к выбору физической нагрузки при проведении велотренировок в рамках проведения реабилитации пациентов после перенесенного острого инфаркта миокарда. Это позволит улучшить восстановление сократительной способности миокарда и уменьшить вероятность развития хронической сердечной недостаточности в дальнейшем. Что в свою очередь улучшит качество жизни пациента и уменьшит финансовые затраты здравоохранения и социальных служб на оказание помощи пациентам с данной патологией.

Внедрение персонального подхода к пациенту с учетом его генетических особенностей позволит оптимизировать процесс восстановления сократительной способности миокарда во время реабилитационных мероприятий и уменьшит в дальнейшем вероятность неблагоприятного течения заболевания.

Список литературы

1. Naghavi M, Wang H, Lozano R, et al. Global, regional, and national age-sex specific all-cause and cause-specific mortality for 240 causes of death, 1990-2013: a systematic analysis for the Global Burden of Disease Study 2013. *Lancet* 2015; 385: 117–71.
2. Бойцов С.А., Погосова Н.В., Бубнова М.Г., Драпкина О.М., Гаврилова Н.Е., Еганян Р.А., Калинина А.М., Карамнова Н.С., Кобалава Ж.Д., Концевая А.В., Кухарчук В.В., Лукьянов М.М., Масленникова Г.Я., Марцевич С.Ю., Метельская В.А., Мешков А.Н., Оганов Р.Г., Попович М.В., Соколова О.Ю., Сухарева О.Ю. и др. Кардиоваскулярная профилактика 2017. Российские национальные рекомендации // Российский кардиологический журнал. 2018. Т. 23. № 6. С. 7-122. [Boitsov S.A. et al. Cardiovascular Prevention 2017. National guidelines. Russian Journal of Cardiology. 2018;(6):7-122. (In Russ.)]
3. Аронов Д.М., Бубнова М.Г., Барбараш О.Л., Долецкий А.А., Красницкий В.Б., Лебедева Е.В., Лямина Н.П., Репин А.Н., Свет А.В., Чумакова Г.А. Острый инфаркт миокарда с подъемом сегмента ST электрокардиограммы: реабилитация и вторичная профилактика. Российские клинические рекомендации // CardioСоматика. 2014. № S1. С. 5-41. [Aronov D. M. et al. Acute myocardial infarction with ST segment elevation electrocardiograms: rehabilitation and secondary prevention. Russian clinical guidelines. CardioSomatика. 2014. № S1. С. 5-41. (In

Russ.)]

4. Демографический ежегодник России. 2015: Стат. сб. Росстат. – М., 2015. 263с.

5. Аронов Д.М. История развития кардиореабилитации в России // Кардиология, 2018, 58 (S11), С.14-21. [Aronov D. M. History of cardiac rehabilitation in Russia. Cardiology, 2018, 58 (S11), С.14-21. (In Russ.)]

6. Аронов Д.М., Бубнова М.Г. Проблемы внедрения новой системы кардиореабилитации в России // Российский кардиологический журнал 2013, 4 (102): 14-22. [Aronov D. M., Bubnova M. G. Challenges of the implementation of a new cardiac rehabilitation system in Russia. Russ J Cardiol 2013, 4 (102): 14-22. (In Russ.)]

7. O`Gara P.T., Kushner F.G., Ascheim D.D. et al. ACCF/AHA Guidelines for the Management of ST-Elevation Myocardial Infarction. A report of the American College of Cardiology Foundation/American Heart Association. Task Force on Practice Guidelines. J Am Coll Cardiol 2011; 61 (4): e78-e140.

8. Steg G., James S.K., Atar D. et al. ESC Guidelines for the Management of acute Myocardial Infarction in patients presenting with ST-segment elevation. Task Force on management of elevation acute Myocardial Infarction of the European Society of Cardiology (ESC). Eur Heart J 2012; 33: 2569-2619.

9. Leine G.N., Bates E., Blankenship J.C. et al. ACC/AHA/SCAI 2011 Guideline for Percutaneous coronary intervention: a report of the American College of Cardiology Foundation/American Heart Association. Task Force on Practice Guidelines and the Society for Cardiovascular Angiography and Interventions. J Am Coll Cardiol 2011; 58 (24): e44-e122.

10. Wijns W., Kolh P., Danchin N. et al. Guidelines on myocardial revascularization. ESC/EACTS Guidelines. Eur Heart J 2010; 31: 2501-2555.

11. Sambrook J., Fritsch E.F., Maniatis T. Molecular cloning [Internet]. Vol. 2. New York: Cold spring harbor laboratory press; 1989 [cited 2016 Apr 13]. Available from: <http://nhjy.hzau.edu.cn/kech/jycz/jczs/ml-introduction/> Content.pdf

12. Dorrer M.G., Golovenkin S.E., Nikulina S.Yu., Orlova Yu.V., Pelipeckaya E.Yu., Vereshagina T.D. Selection of neural network architecture and data augmentation procedures for predicting the course of cardiovascular diseases // Journal of Physics:

Conference Series. - 2021. - Vol.2094, №032037. - P.1-9.

ОЦЕНКА ПРИМЕНИМОСТИ ИСКУССТВЕННОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ДЛЯ ИНТЕРПОЛЯЦИИ ПЛОТНОСТИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ СЛУЧАЙНОЙ ВЕЛИЧИНЫ

М.Г. Доррер¹

¹ Сибирский государственный университет науки и технологий им. М.Ф.
Решетнева, Россия, г. Красноярск, пр. Мира, д.82, mdorrer@mail.ru

Аннотация

В работе описано решение задачи создания нейросетевого интерполятора функции плотности распределения вероятности случайной величины, заданной набором отчетов случайной величины и исключающей стадию идентификации закона распределения. Необходимость в задаче вызывается ограничениями, вносимыми в точность расчета функции плотности распределения вероятности случайной величины как таблично-гистограммным методом, так и путем идентификации закона распределения. Задача решалась на языке Python с использованием нейросетевой библиотеки TensorFlow путем создания нейросетевого интерполятора на базе класса Sequential с полносвязными слоями Dense, обученного на данных численного дифференцирования функции распределения случайной величины. Точность прогноза оценивалась с помощью меры расстояния Кульбака-Лейблера для различных соотношений объема экспериментальных данных и количества интервалов интерполяции на синтетических тестовых данных, сгенерированных для 5 законов распределения – Рэля, Вэйбулла, гамма, экспоненциального и нормального (гауссовского). Предложенное решение показало значительно более высокую точность расчета значений плотности распределения случайной величины по сравнению с гистограммным методом. Разработанный подход будет внедрен в моделирующую часть цифрового двойника бизнес-процесса, основанного на математическом аппарате стохастических GERT-сетей.

Ключевые слова: плотность распределения вероятности, интерполяция, гистограммы, нейронные сети

Введение

В настоящее время в связи задачи управления организационными системами постоянно усложняются [1]. Отдельные части организационных систем становятся все более интеллектуальными, число и сложность выполняемых ими функций постоянно увеличиваются. Разные части организационной системы функционируют параллельно и в процессе решения задач постоянно обмениваются между собой информацией. Ведется обмен не только данными, но и во все большей мере звуковой и видеоинформацией, часто в реальном времени. Примерами таких систем являются системы управления бизнес-процессами организации, обеспечивающие взаимодействие пользователей как внутри организации, так и с внешними акторами, включающие в себя интеллектуальные системы – боты, ассистенты, системы роботизации бизнес-процесса и т.д.

Предлагаемый в данной работе результат был получен в ходе решения задач по созданию цифрового двойника бизнес-процесса на базе системы управления бизнес-процессами [2]. В качестве математического аппарата для моделей аддитивных параметров бизнес-процесса (время выполнения, стоимость, ресурсоемкость) в цифровом двойнике используется модель стохастических GERT-сетей. Для использования этого математического аппарата необходимо было получить решение задачи нахождения непрерывных плотностей распределения данных параметров при прохождении стохастических GERT-сетей с использованием топологического уравнения для оценки вероятностно-временных и вероятностно-ресурсных характеристик организационных систем.

При этом разнородность организационно-технической системы требовала сопряжения нескольких моделей бизнес-процессов, как на одном уровне, так и иерархически. При этом должно было обеспечиваться информационное единство среды, на которой строятся сложные иерархические модели, моделируемые в цифровом двойнике. На ранних этапах реализации это обеспечивалось путем представления распределений времени выполнения отдельных операций

(эквивалентных операций, GERT-сетей) их характеристическими функциями в табличном представлении. Такой подход применяется, когда исходная или промежуточная информация получена в виде плотности или функции распределения. Однако применение табличного представления накладывает довольно существенное ограничение на алгоритмы расчета, привязывая их к единой, фиксированной для всей модели интерполяционной сетке.

В данной работе будет рассмотрено решение задачи представления характеристических функций аддитивных параметров операций модели бизнес-процесса в виде искусственной нейронной сети, включая сравнительный анализ данного подхода с базовым, таблично-гистограмным методом расчета функции плотности распределения.

Связанные работы

Работы по моделированию бизнес-процессов с помощью математических моделей в настоящее время разрабатываются достаточно активно, в публикациях описано несколько частных решений данной задачи. Так, в работе [3] предложен подход к формальному описанию бизнес-процессов с использованием ряда математических ограничений (которые определяют границы осуществимости бизнес-процесса) и набора целевых функций (которые состоят из различных целей для проектирования бизнес-процесса). Аналогичный подход представлен в работе [4], авторы которой описывают математическую модель, содержащую основные компоненты общего бизнес-процесса. В работе [5] предлагается использовать формальные математические обозначения как способ введения бизнес-правил и проверки логической согласованности схематических моделей. В работе [6] предложено теоретико-множественное формальное описание бизнес-процессов, которое, например, ставить задачи на разработку алгоритмов верификации бизнес-процесса [7]. Авторы работы [8] предлагают использовать для анализа бизнес-процессов их описание в форме тензоров специального вида и определенных над ними операций. Первоначально этот подход был разработан для решения более общей задачи анализа процессов в сложных сетевых системах [9].

Для решения ряда частных задач по анализу бизнес-процессов используются стохастические GERT-сети (Graphical Evaluation and Review Technique) [10], [11], [12], [13]. GERT-сеть позволяет моделировать поток работ в виде ориентированного графа, ребрами которого являются задачи бизнес-процесса [14], [15].

Данная работа является продолжением цикла публикаций, посвященных реализации цифрового двойника бизнес-процесса – ЦДБП (Business Process Digital Twin, BPDT) [16], [17], [18], [2].

Актуальность темы обусловлена проблемами в точности прогноза вероятностных характеристик бизнес-процессов, выявленных в построении функции плотности распределения случайной величины, заданной отчетами случайного процесса, таблично-гистограммном методом [19] и путем идентификации законов распределения [20].

Постановка задачи и экспериментальные материалы

Оценка методов расчета плотности распределения случайной величины выполняется с использованием данных, сгенерированных для 5 распределений, для которых известны аналитические выражения плотности распределения. Работа базируется на методах, предложенных в статье [21] с расширением набора моделируемых законов распределения, а также содержит полностью оригинальный блок создания программного объекта – интерполятора функции плотности распределения случайной величины на базе многослойной полносвязной нейронной сети. Используемый набор законов распределения включает закон Релея, гамма-распределение, распределение Вейбулла, экспоненциальное распределение и нормальное (гауссово) распределение.

Исходные данные в виде массивов измерений случайной величины для 5 вышеперечисленных законов распределения генерируются с помощью кода Python, показанного на рис. 1.

Генерируем плотности распределения в соответствии с 5 законами

```
pdf_function = {
    'rrand': partial(rel_pdf, 1),
    'grand': partial(gam_pdf, 0.5, 0.5),
    'wrand': partial(weib_pdf, 1, 5),
    'exprand': partial(exp_pdf, 1.5),
    'gaussrand': partial(gauss_pdf, 1.0, 1.0)
}
```

Рис. 1. Генерация исходных данных для набора законов распределения.

Пример функции **gauss_pdf**, генерирующей синтетические данные отсчетов случайной величины для нормального распределения приведен на рис. 2.

```
def gauss_pdf(mu: float, sigma: float, X: list) -> pandas.DataFrame:
    """
    Вычисляет кривую гауссовской плотности распределения вероятности
    по известной формуле
    :param n: количество отсчетов
    :param mu: матожидание
    :param sigma: дисперсия
    :param X: координаты по оси абсцисс
    :return: pandas.DataFrame
    """
    pdf_y = [] # Координаты по оси ординат
    for x in X:
        pdf_y.append((1 / np.sqrt(2 * np.pi * sigma)) * np.exp(-(x - mu)**2 / (2 *
sigma)))
    return pd.DataFrame({'x': X, 'y': pdf_y})
```

Рис. 2. Функция генерации исходных данных для нормального закона распределения.

Далее выполним сравнение точности расчета функции плотности распределения случайной величины для вышеперечисленных 5 законов между аналитическими значениями и значениями, полученными следующими методами:

- путем интерполяции таблично-гистограммным методом;
- путем интерполяции полносвязной нейронной сетью, обученной на табличных значениях функции плотности распределения случайной величины, рассчитанной как первая производная от функции распределения, которая, в свою очередь, представляет собой вероятность обнаружить значение случайной величины меньше либо равное заданному [22].

Методы решения задачи

Сравнение точности исследуемых методов производилось с помощью меры расстояния Кульбака-Лейблера от априорной функции плотности распределения P до получаемой оценки Q , рассчитываемой как $KL = \mathbb{E} \left[P \cdot \ln \left(\frac{P}{Q} \right) \right]$.

Далее производится расчет обучающей выборки для нейросетевого интерполятора функции плотности распределения случайной величины. При этом используется следующий алгоритм [22] (N – количество доступных отсчетов случайной величины):

1. Сортировка значений отсчетов случайной величины X по возрастанию, получение упорядоченного набора значений \tilde{X} ;
2. Сопоставление с каждым значением в \tilde{X} его порядкового номера i , начиная с нуля, тогда с точностью до множителя $i(\tilde{X}_i)$ представляет собой оценку функции распределения случайной величины;
3. Построение равномерной шкалы из $k + 2$ значений на интервале от X_{\min} до X_{\max} где k – желаемое число узлов сетки в которых

рассчитывается функция плотности распределения ($k < N$);

4. Интерполяция значений номеров переменных из шкалы упорядоченного массива значений переменной в равномерную шкалу, полученную в п.;
5. Численное дифференцирование интерполированной функции по соседним точкам (для чего сетка и состоит из $k + 2$ значений) с делением каждого значения на N – в результате получается искомая оценка плотности вероятности.

В результате выполнения данного алгоритма формируется переменная **d** – таблица значений плотности распределения случайной величины. В реализованном в рамках настоящего исследования примере она имеет вид DataFrame из библиотеки Pandas, содержащего два столбца вещественных чисел – «x» – значения случайной величины и «y» – значения плотности распределения для данного значения случайной величины.

Далее на основе полученного датафрейма **d** производится формирование и обучение модели нейронной сети, позволяющей получить значение функции плотности распределения не только в узлах сетки, содержащейся в обучающей выборке, но и на всей области определения. Код Python для решения задачи приведен на рис. 3.

```
d = {'x': pdf_x, 'y': pdf_y}
x = np.array(d['x'])
y = np.array(d['y'])
print(x.shape)
Regressor = Sequential()
Regressor.add(Dense(32, input_dim=1, activation='tanh'))
Regressor.add(Dense(16, activation='tanh'))
Regressor.add(Dense(1, activation='sigmoid'))
# Определив функцию ошибки (loss function) и метод оптимизации
(optimizer) для обучения модели.
```

```
Regressor.compile(loss='mse', optimizer='adam', metrics=['accuracy'])
# Обучим модель на данных плотности распределения, используя метод
fit() в Keras.
Regressor.fit(x, y, epochs=100, verbose = 0)
# Передаем результаты для оценки
d = pd.DataFrame(d)
d['y'] = Regressor.predict(x)
```

Рис. 3. Код создания и обучения нейронной сети – интерполятора.

Полученный объект **Regressor** передается в качестве выхода функции формирования объекта-интерполятора и может быть далее использован как встроенный объект, позволяющий получить значение функции плотности распределения случайной величины для любой точки области определения данной функции.

Результаты

Для сравнительной оценки точности полученного метода с базовым, таблично-гистограммным, выполнялось построение меры отклонения Кульбака-Лейблера при разных соотношениях k/N (k – размерность сетки интерполяции, N – количество отсчетов в синтетических данных, в данной работе принято равным 10 000) для каждого из 5 законов распределения. Результат сравнения показан на рис. 4. Законы распределения показаны в легенде к рис. 4: «**rrrand**» – Релея, «**grand**» – Гамма, «**wrand**» – Вейбулла, «**exprand**» – экспоненциальное, «**gaussrand**» – нормальное (гауссово).

Как видно, в обоих случаях графики показывают монотонно возрастающие зависимости метрики отклонения в от соотношения k/N , однако, нейросетевой интерполятор, обученный на данных численного дифференцирования функции распределения случайной величины, показывает на порядок меньшие значения метрики отклонения Кульбака-Лейблера между кривой оценки плотности распределения и теоретической кривой, чем базовый

(гистограммный) метод, основанный на построении гистограммы.

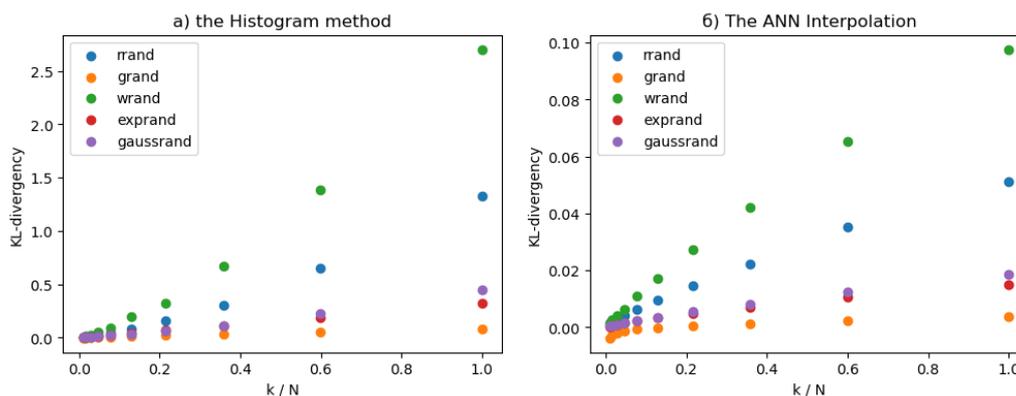


Рис. 4. Сравнительная точность интерполяции для таблично-гистограммного метода и для полученной нейросетевой интерполяции

Вывод

Предложенный подход к нейросетевой интерполяции функции плотности распределения случайной величины по заданному набору наблюдений отличается более высокой точностью, по сравнению с базовым таблично-гистограммным методом. Преимущество предложенного подхода особенно велико при больших значениях k/N , что позволяет говорить о преимуществах предложенного метода в ситуации малого объема экспериментальных данных, что особенно ценно для задачи анализа и прогнозирования бизнес-процессов, где частота выполнения операций редко превышает сотни, максимум – тысячи раз за период функционирования системы.

Таким образом, поставленная задача – построение нейросетевой интерполяции плотности распределения случайной величины – была успешно решена. Успех обеспечило совместно применение таких методов и алгоритмов, как:

- Подготовка обучающих данных для нейросетевого интерполятора путем расчет значений функции плотности распределения случайной величины как первой производной от функции распределения;
- Реализация интерполятора в виде многослойной нейронной сети (**Sequential**), позволяющей встраивать данную функцию в любой код, требующий получения значений функции плотности

распределения случайной величины в заданных точках области распределения.

Дальнейшее развитие данной работы будет встраивание разработанной модели интерполятора в моделирующую часть цифрового двойника бизнес-процессов и проверка его прогностической способности на реальных протоколах выполнения бизнес-процессов.

Список литературы

1. Ahmad T., Van Looy A. Business Process Management and Digital Innovations: A Systematic Literature Review // Sustainability. 2020. Vol. 12, № 17. P. 6827.
2. Dorrer M. Implementation of the digital twin of educational business processes on the ELMA BPMS platform. 2022. P. 040088.
3. Hofacker I., Vetschera R. Algorithmical approaches to business process design // Comput. Oper. Res. 2001. Vol. 28, № 13. P. 1253–1275.
4. Powell S.G., Schwaninger M., Trimble C. Measurement and control of business processes // Syst. Dyn. Rev. 2001. Vol. 17, № 1. P. 63–91.
5. Valiris G., Glykas M. Business analysis metrics for business process redesign // Bus. Process Manag. J. 2004. Vol. 10, № 4. P. 445–480.
6. Калянов Г.Н. Теория и практика реорганизации бизнес-процессов. Москва: СИНТЕГ, 2000. 203 p.
7. Доррер М.Г., Курохтин В.В. Оптимизация расчёта инвариантов сети Петри в рамках задачи формирования сценариев интеграционного тестирования // Моделирование и анализ информационных систем. 2012. Vol. 19, № 4. P. 128–143.
8. Петров М.И., Треногий И.Г., Беловатый Е.А. Использование тензорной методологии анализа систем для описания бизнес-процессов предприятия. Средства автоматизации // . 2008. №3 (20). URL: (дата обращения: 19.07.2022). // Сибирский аэрокосмический журнал. 2008. Vol. 3. P. 157–161.
9. Kron G. Tensor analysis of networks. 1939.
10. Barjis J., Dietz J.L.G. Business Process Modeling and Analysis Using Gert Networks // Enterprise Information Systems. Dordrecht: Springer Netherlands,

2000. P. 71–80.
11. Zyryanov, A.A., Dorrer M.G. The algorithm of business process model translation into the GERT-network model // Bull. KrasGAU. 2012. № 12. P. 13–18.
 12. Ambika S. et al. Application of Gert Analysis in Management // Int. J. Latest Eng. Manag. Res. 2018. Vol. 03, № 02. P. 01–04.
 13. Dorrer M., Dorrer A., Zyryanov A. Numerical Modeling of Business Processes Using the Apparatus of GERT Networks. 2021. P. 47–55.
 14. Phillips D.T., Garcia-Diaz A. Fundamentals of network analysis // Networks. Englewood Cliffs, NJ: Prentice Hall, 1981. 474 p.
 15. Pritsker A.A.V. GERT: Graphical Evaluation and Review Technique. Santa Monica, CA: RAND Corporation, 1966. 150 p.
 16. Доррер М.Г. РЕАЛИЗАЦИЯ ЦИФРОВОГО ДВОЙНИКА БИЗНЕС-ПРОЦЕССОВ НА БАЗЕ СИСТЕМЫ ELMA // ИТНОУ информационные технологии в науке, образовании и управлении. 2021. Vol. 1 (17).
 17. Dorrer M.G. The digital twin of the business process model // J. Phys. Conf. Ser. 2020. Vol. 1679. P. 032096.
 18. Dorrer M.G. The prototype of the organizational maturity model's digital twin of an educational institution // J. Phys. Conf. Ser. 2020. Vol. 1691. P. 012121.
 19. Шибанов А.П. Обобщенные GERT-сети для моделирования протоколов, алгоритмов и программ телекоммуникационных систем. Рязанская государственная радиотехническая академия, 2003. 307 p.
 20. Зырянов А.А. Методика вероятностного прогнозирования состояния организационно-технологических систем при помощи формализмов GERT-сетей. Сиб. аэрокосм. акад. им. акад. М.Ф. Решетнева, 2013. 146 p.
 21. Милащенко Е.А. Получаем кривую плотности распределения вероятности случайного процесса [Electronic resource] // Хабр. 2021. URL: <https://habr.com/ru/articles/585232/>.
 22. Прядченко В. Получаем кривую плотности распределения вероятности... быстрее и точнее [Electronic resource] // Хабр. 2021. URL: <https://habr.com/ru/articles/587372/>.

ВЫБОР ОПТИМАЛЬНОЙ ОКОННОЙ ФУНКЦИИ В ЗАДАЧЕ НАХОЖДЕНИЯ ОГИБАЮЩЕЙ РЕЧЕВОГО СИГНАЛА

Н.П.Кузенков

Сибирский федеральный университет,
Институт космических и информационных технологий, каф. прикладной
математики и анализа данных, *knp@vivaldi.net*

Огибающая сигнала является одним из важнейших понятий в анализе сигналов и находит широкое применение. Прежде всего, огибающая упоминается в контексте амплитудной модуляции сигналов, классическое представление которой имеет вид:

$$x(t) = A(t) \cos(\omega t), \quad (1)$$

где $A(t)$ определяет вид огибающей сигнала, а ω — частота несущего колебания. В случаях, когда $A(t)$ принимает отрицательные значения, выделение огибающей из сигнала (1) приводит к возникновению искажений. Для борьбы с этим явлением используется добавление постоянной составляющей к сигналу $A(t)$ с величиной, не меньшей модуля минимального значения $A(t)$. Сформированный таким образом сигнал $x(t)$ используется затем для передачи информационного сообщения $A(t)$.

Обобщая процесс амплитудной модуляции, легко прийти к его представлению в следующем виде

$$x(t) = (1 + x_i(t)) x_c(t), \quad (2)$$

где $x_i(t)$ — информационный сигнал, $\min(x_i(t)) \geq -1$, $x_c(t)$ — несущий сигнал. Очевидно, что $x_c(t)$ должен соответствовать требованиям стационарности, поскольку в противном случае проявление нестационарности будут вносить искажения в информационный сигнал $x_i(t)$ в процессе демодуляции.

Классическим математическим инструментом демодуляции амплитудно модулированного сигнала является использование свойств преобразование Гильберта, имеющего следующий вид:

$$x'(t) = H(x(t)) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x(\tau)}{t-\tau} d\tau, \quad (3)$$

где $x'(t)$ — новая функция, называемая функцией сопряжённой (по Гильберту) исходной функции $x(t)$ (известная также, как квадратурное дополнение).

Для гармонических функций преобразование Гильберта приводит к следующему результату:

$$\begin{aligned} x(t) = \cos \omega t, & \quad H(x(t)) = \sin \omega t \\ x(t) = \sin \omega t, & \quad H(x(t)) = -\cos \omega t \end{aligned} \quad (4)$$

С использованием исходного сигнала и его квадратурного дополнения строится аналитический сигнал следующего вида:

$$x_a(t) = x(t) + i x'(t). \quad (5)$$

Имея аналитический сигнал, нетрудно из него восстановить огибающую, или модулирующую функцию:

$$A(t) = \sqrt{x^2(t) + x'^2(t)}. \quad (6)$$

Однако, использование преобразования Гильберта с целью получения огибающей сигнала эффективно лишь в том случае, когда в качестве несущего сигнала используются гармонические колебания, иначе полученная таким образом огибающая значительно искажается (Рис. 1).

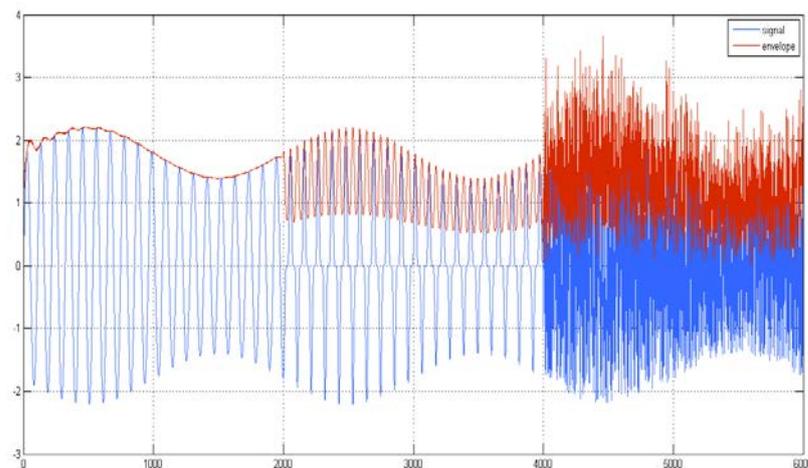


Рис. 1. Огибающая, полученная в результате преобразования Гильберта.

На данном рисунке показан результат нахождения огибающей сигнала с использованием преобразования Гильберта. Несущий сигнал состоит из трёх участков: первый — гармоническое колебание, второй — это же гармоническое

колебание, возведённое в седьмую степень и содержащее, таким образом, большое количество гармоник, третий — равномерно распределённый шум в интервале $(-1,1)$. Модулирующая функция представлена также гармоническим колебанием и не меняет своего вида на протяжении всего сигнала. Смена режима несущего сигнала происходит по достижении одного периода колебаний модулирующей функции.

Как видно из рисунка, применение преобразования Гильберта для выделения огибающей весьма эффективно в случае использования гармонических колебаний в качестве несущего сигнала. В случае наличия гармоник в несущем сигнале, огибающая искажается, однако весьма вероятно, что последующее применение цифровых фильтров способно значительно повысить качество её восстановления. Использование же данного подхода к модулированному шуму фактически привело лишь к случайному увеличению амплитуды колебаний с одновременным вычислением модуля сигнала. Таким образом, использование преобразование Гильберта к определению огибающей в случае наличия шумовых компонент в несущем сигнале не имеет большого смысла.

В случае анализа речевых сигналов, к инструментам анализа предъявляются высокие требования по причине сложного устройства этих сигналов. Речевой сигнал представляет собой чередование звуковых сегментов, длительность которых распределена по определённому закону, различной формы и с различным спектром. Внутри одного такого сегмента может наблюдаться неоднократный переход от периодических колебаний к шумовым сигналам и обратно с изменением спектрального состава периодических колебаний.

При этом важным инструментом анализа речевых сигналов является его огибающая, как мера близкая к энергетическим характеристикам. Она может быть использована как один из первых этапов обработки речевого для его последующего анализа, так и как самостоятельная характеристика. Круг решаемых задач с использованием огибающей речевых сигналов весьма широк и включает в себя кодирование речи, определение эмоционального состояние

диктора, диагностика неврологических нарушений и пр. [1-3].

Очевидно, что в силу сложного устройства речевого сигнала, - полного отсутствия гармонических колебаний в чистом виде и значительного присутствия шумовых компонент, использование преобразования Гильберта для нахождения огибающей не является оптимальным решением. В данном случае для её нахождения целесообразно воспользоваться тем фактом, что огибающая сигнала является функцией от времени, множество значений которой находятся вблизи локальных экстремумов несущего сигнала и, в ряде случаев, совпадают с ними.

Данную идею можно реализовать с использованием оконных функций. С этой целью в речевом сигнале x_S выделяется сегмент с малой продолжительностью τ , все его значения заменяются абсолютными значениями, после чего он умножается на оконную функцию w . В качестве значения огибающей функции принимается максимальное значение результата умножения, положение значения огибающей во времени принимается равным положению центра сегмента. В результате такого преобразования получается осциллирующая функция, близкая к огибающей сигнала и в точности с ней совпадающая в точках, соответствующих экстремумам несущего сигнала (Рис. 2).

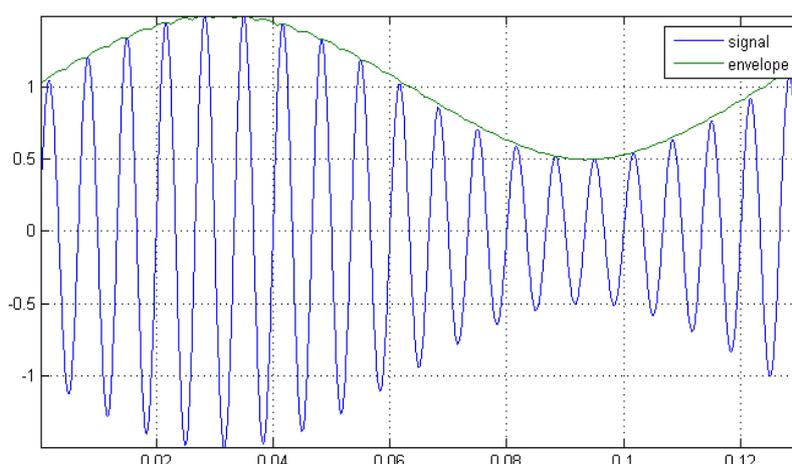


Рис. 2. Огибающая, построенная по максимальным значениям в скользящем окне.

Данный подход требует уточнения вида оконной функции w и её ширины

для максимально точного восстановления огибающей сигнала. При малой ширине оконной функции w , восстановленная огибающая стремится повторить модуль несущего сигнала, при слишком большой ширине восстановленная огибающая запаздывает вблизи малых значений истинной огибающей и стремится к увеличению значений в окрестностях локальных минимумов истинной огибающей. Кроме того, вид осцилляций восстановленной огибающей определяется видом оконной функции w , что при её правильном выборе также приведёт к снижению погрешности восстановления огибающей.

С целью выбора оптимальной оконной функции и определения её оптимальной ширины проводился ряд вычислительных экспериментов, для которых генерировались два ряда амплитудно-модулированных сигнала. Первый сигнал в качестве несущей использовал гармоническое колебание с частотой 150Гц и имел частоту дискретизации 16кГц, второй в качестве несущий использовал равномерно распределённый шум в интервале $(-1,1)$. Оба несущих сигнала модулировались одним гармоническим сигналом с частотой 8Гц и одинаковой глубиной модуляции. При выполнении детектирования использовался следующий набор из десяти оконных функций: Блэкмана, Блэкмана-Харриса, Бохмана, Флэттоп, Хэмминга, Хеннинга, прямоугольное, Тейлора, треугольное и Уэлча.

Для каждого из перечисленных окон выполнялось детектирование огибающей при изменении ширины скользящего окна L в диапазоне от 1,3125мкс до 200мкс, что в свою очередь, составляет от 0,2 до 30 периодов колебаний T несущего сигнала и от 0,0105 до 1,6 периода колебаний информационного сигнала.

Погрешность восстановления огибающей сигнала вычислялась как среднее квадратическое отклонение разницы между восстановленной и истинной огибающими.

По мере увеличения ширины окна, наблюдалась характерное для всех оконных функций поведение погрешности восстановления огибающей: обычно весьма выраженный быстрый спад, за которым следовал плавный подъём.

Однако, положение минимумов и характер подъёма могли существенно различаться в зависимости от выбранного типа окна (Рис. 3).

Как видно из рисунка, существует оптимальная ширина окна, соответствующая минимуму ошибки восстановления огибающей. В зависимости от типа оконной функции это значение может весьма существенно различаться. Кроме того, в зависимости от оконной функции значительно различается ширина окрестностей вокруг минимума ошибки, в которых не происходит её значительного увеличения. Изменение режима колебаний несущего сигнала — гармоническое колебание или случайный шум не привело к какому-либо существенному изменению в поведении графиков ошибок.

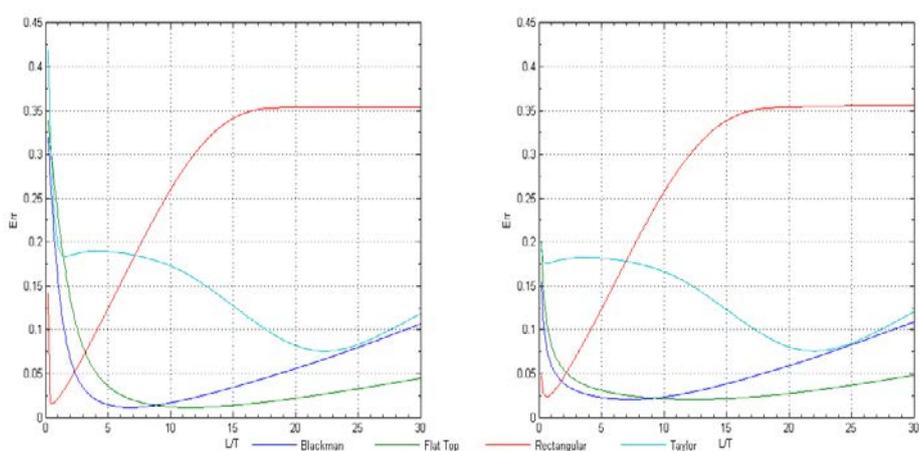


Рис. 3. Ошибка восстановления огибающей в зависимости от ширины окна.

Слева — модуляция гармонического сигнала, справа — равномерно распределённого шума.

Поскольку в речевом сигнале могут наблюдаться колебания в весьма широком диапазоне частот, при выборе оконной функции необходимо также учитывать ширину окрестностей вокруг минимума ошибки восстановления огибающей и выбирать оконную функцию, соответствующую не только минимуму ошибок, но также имеющую широкую окрестность вблизи минимума.

Для всех оконных функций данная ширина окрестностей была оценена; границы данных окрестностей определялись исходя из условия увеличения погрешности относительно минимума на 10%. Результаты вычислений представлены в таблице 1.

Таблица 1. Характеристики функций ошибок для оконных функций.

Оконная функция	Гармоническое колебание				Случайный шум			
	Минимум		Левая граница	Правая граница	Минимум		Левая граница	Правая граница
	Значение	Ширина на окне			Значение	Ширина на окне		
Блэкмана	0,0112	6,75	5,7	8,1	0,0207	7,25	5,1	9,65
Блэкмана-Харриса	0,0113	8,05	6,75	9,6	0,0206	8,6	6,05	11,45
Бохмана	0,0113	7,25	6,1	8,65	0,0207	7,75	5,45	10,3
Флэттоп	0,0112	11,55	9,7	13,8	0,0207	12,4	8,7	16,5
Хэмминга	0,0112	5,1	4,3	6,1	0,0207	5,45	3,85	7,25
Хеннинга	0,0112	5,3	4,45	6,35	0,0207	5,7	4	7,6
Прямоугольное	0,0156	0,45	0,45	0,7	0,0238	0,65	0,45	1,0
Тейлора	0,0755	22,3	19,85	25	0,0756	22,05	19,5	24,75
Треугольное	0,0157	11,7	10	13,1	0,0237	11,25	8,25	13,3
Уэлча	0,0112	3,4	2,9	4,1	0,0207	3,65	2,6	4,9

В данной таблице столбец «Значение» содержит минимальные значения функции ошибок, «Ширина окна» — ширина скользящего окна, соответствующая данному минимальному значению, «Левая граница» и «Правая граница» — соответствующие границы, на которых происходит увеличение функций ошибок на 10%.

Сводные результаты вычислительных экспериментов представлены в виде трёхмерной диаграммы на Рис. 4. На данном рисунке «Minima» — минимальные значения функций ошибок, «Minimum width» — ширина окрестностей минимумов, «Window width» — ширина оконных функций, соответствующих

минимумам.

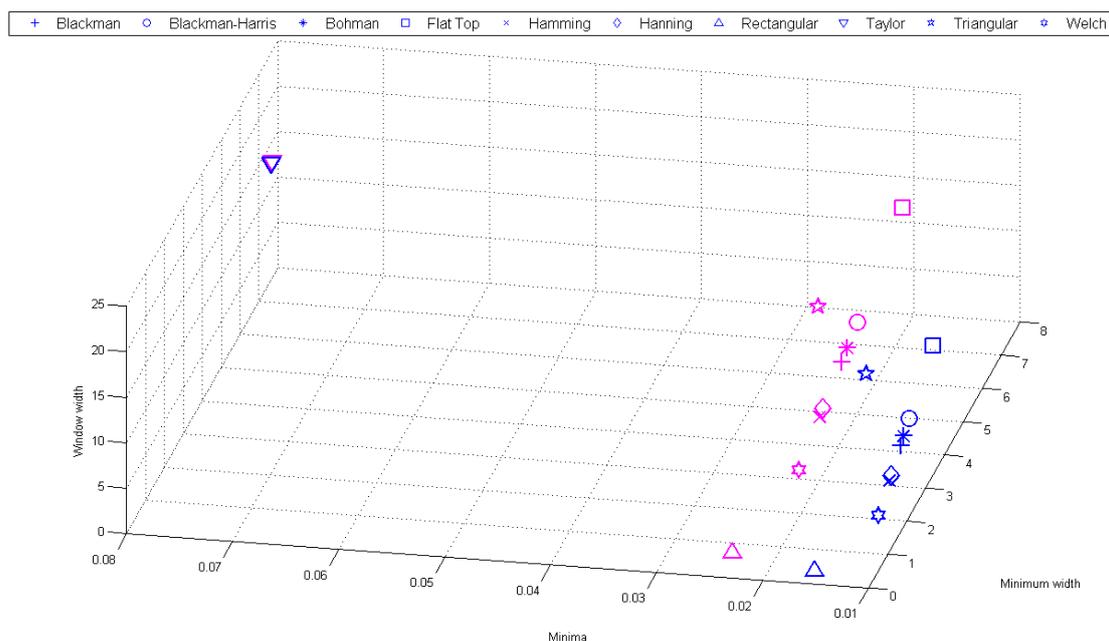


Рис. 4. Характеристики функций ошибок оконных функций.

Как видно, из рисунка 4 и таблицы 1, при использовании в качестве критерия выбора не только минимально возможной ошибки, но и широкую окрестность её минимума, стоит отдавать предпочтения при восстановлении огибающей речевого сигнала описанным выше способом таким оконным функциям, как флэттоп, Блэкмана-Харриса, Бохмана и Блэкмана.

Список литературы

1. A. Cucu. Overlapped Speech Detection and Competing Speaker Counting - Humans Versus Deep Learning / Andrei, Valentin & Cucu, Horia & Burileanu, Corneliu — IEEE Journal of Selected Topics in Signal Processing. 13. 850-862. 10.1109/JSTSP.2019.2910759.
2. Алешин Т.С. Распознавание эмоций по речевому сигналу с помощью функций модуляционной теории звуковых сигналов // Т.С. Алешину — Евразийский Союз Ученых. 2016. №4-2 (25).
3. Кузенков Н. П. Статистическое описание речи человека при органических нарушениях центрального отдела речевого аппарата / Н.П. Кузенков, В.М. Логинов, Е.Ю. Можейко, С.В. Прокопенко // Нелинейный мир. – 2012. – № 4. – т. 10. – С. 247-255.

КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЕ АСИМПТОТИКИ ДЛЯ НЕЛОКАЛЬНОГО НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С НЕЭМИРТОВОЙ ЧАСТЬЮ²

А.Е.Кулагин^{1,2}, А.В.Шаповалов^{3,4}

¹Томский политехнический университет, *ae8@tpu.ru*

²Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН

³Томский государственный университет, *shpv@mail.tsu.ru*

⁴Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники

Различные модификации и обобщения нелинейного уравнения Шредингера (НУШ) нашли широкое применение в физике для описания нелинейных эффектов, включая нелинейную оптику [1], теорию бозе-эйнштейновского конденсата [2,3], динамику квантовых вихрей [4,5].

Добавление неэрмитовой части в НУШ позволяет описывать открытые квантовые системы, включая диссипацию в таких системах или их возбуждение. При описании ряда эффектов открытость системы является не просто малой поправкой, а неотъемлемой частью модели. Например, образование вихревой решетки в бозе-эйнштейновском конденсате обязательно сопровождается диссипацией энергии. Другим примером принципиально открытой системы является атомный лазер. Поэтому для описания существенно нелинейных открытых систем требуется математический метод построения таких решений, не использующего приближения слабой неэрмитовости и нелинейности. Так как точные решения таких сложных уравнений, как правило, построить не удастся, на помощь приходят приближенные методы, в частности квазиклассическое приближение. В данной работе предлагается метод построения квазиклассически сосредоточенных решений на основе идей метода Маслова [6]. Мы используем нелокальную форму нелинейности, позволяющую описывать, в том числе, дальнедействующие взаимодействия (например, диполь-дипольное взаимодействие [7]).

Нелокальное НУШ с неэрмитовой частью в общем виде может быть записано как

² Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-71-01047, <https://rscf.ru/project/23-71-01047/>

$$\begin{aligned}
& \left\{ -i\hbar\partial_t + H(\hat{z}, t)[\Psi] - i\hbar\Lambda\tilde{H}(\hat{z}, t)[\Psi] \right\} \Psi(\bar{x}, t) = 0, \\
& H(\hat{z}, t)[\Psi] = V(\hat{z}, t) + \kappa \int_{\mathbb{R}^n} d\bar{y} \Psi^*(\bar{y}, t) W(\hat{z}, \hat{w}, t) \Psi(\bar{y}, t), \\
& \tilde{H}(\hat{z}, t)[\Psi] = \tilde{V}(\hat{z}, t) + \kappa \int_{\mathbb{R}^n} d\bar{y} \Psi^*(\bar{y}, t) \tilde{W}(\hat{z}, \hat{w}, t) \Psi(\bar{y}, t).
\end{aligned} \tag{1}$$

Здесь $t \in \mathbb{R}^1$, $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$, Λ и κ – действительные параметры неэрмитовости и нелинейности соответственно, \hbar выступает в роли формального малого параметра асимптотического разложения. Псевдодифференциальные операторы $V(\hat{z}, t)$, $\tilde{V}(\hat{z}, t)$, $W(\hat{z}, \hat{w}, t)$ и $\tilde{W}(\hat{z}, \hat{w}, t)$ зависят от некоммутирующих операторов $\hat{z} = (\hat{p}, \hat{x})$, $\hat{w} = (\hat{p}_y, \hat{y})$, $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \bar{x}}$, $\hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \bar{y}}$, $\bar{y} \in \mathbb{R}^n$. Уравнение (1) также известно как нелокальное комплексное уравнение Гинзбурга–Ландау [8] или уравнение Гросса–Питаевского с диссипацией [9]. Отметим, что (1) является обобщением уравнений, для которых был построен формализм квазиклассического приближения в работах [10,11].

Мы ищем квазиклассически сосредоточенные решения. Это решения принадлежат классу $\Gamma_h^t(Z(t), \sigma(t)) \subset L_2$, который задается следующим формальным определением. Функция $\Psi(\bar{x}, t) \in \Gamma_h^t(Z(t), \sigma(t))$, если для любого псевдодифференциального оператора $\hat{A} = A(\hat{z}, t, \hbar)$ с вейлевским символом $A(z, t, \hbar)$ справедливо

$$\begin{aligned}
\lim_{\hbar \rightarrow 0} \langle \hat{A} \rangle_\Psi &= \lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle}{\sigma_\Psi(t)} = A(Z(t), t, 0), \\
\lim_{\hbar \rightarrow 0} \sigma_\Psi(t) &= \sigma(t),
\end{aligned} \tag{2}$$

где $\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$ – скалярное произведение в L_2 -пространстве, $\sigma_\Psi(t) = \|\Psi\|^2$ – L_2 -норма решения, которая не сохраняется за счет наличия неэрмитовой части в (1). Данный класс функций представляет собой функции, квазиклассически локализованные в окрестности траектории $z = Z(t) = (\vec{P}(t), \vec{X}(t))$ с весом $\sigma(t)$.

Используя свойства псевдодифференциальных операторов [12] и теорему Эренфеста, можно показать, что функции, определяющие класс $\Gamma_h^t(Z(t), \sigma(t))$ и, соответственно, траекторию локализации, удовлетворяют системе уравнений

$$\begin{cases} \dot{Z}(t) = JV_z(Z(t), t) + \kappa\sigma(t)JW_z(z, w, t)|_{z=w=Z(t)}, \\ \dot{\sigma}(t) = -2\Lambda\sigma(t)(\tilde{V}(Z(t), t) + \kappa\sigma(t)\tilde{W}(Z(t), Z(t), t)), \end{cases} \quad J = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{I}_{n \times n} \\ \mathbf{I}_{n \times n} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Систему (3) мы называем системой Гамильтона–Эренфеста с диссипацией первого порядка. Она выполняет роль классических уравнений в нашем формализме квазиклассики.

Класс (2) является довольно широким, но его определение неконструктивно. Асимптотические решения уравнения (1) в явном виде удается построить в более узком классе функций, заданных следующим квазиклассическим анзацем:

$$P'_h(Z(t), S(t), \sigma(t)) = \left\{ \Phi : \Phi(\bar{x}, t, \hbar) = \sqrt{\frac{\sigma(t)}{\hbar^{n/2}}} \cdot \varphi\left(\frac{\Delta\bar{x}}{\sqrt{\hbar}}, t, \hbar\right) \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(S(t) + \langle \bar{P}(t), \Delta\bar{x} \rangle\right)\right] \right\}, \quad (4)$$

где $\Delta\bar{x} = \bar{x} - \bar{X}(t)$, $\langle \cdot, \cdot \rangle$ обозначает евклидово скалярное произведение, а функция $\varphi(\bar{\varepsilon}, t, \hbar)$ принадлежит пространству Шварца по переменным $\bar{\varepsilon}$ и регулярно зависит от t и \hbar . Отметим, что мы рассматриваем решения с $\sigma(t) = O(1)$, т.е. случай, когда вклады линейной и нелинейной частей уравнения (1) соизмеримы. Класс (4) имеет ряд асимптотических оценок, в частности, в нем имеет оценку оператор $\Delta\hat{z} = \hat{z} - Z(t)$ вида

$$\{\Delta\hat{z}\}^\alpha = \hat{O}(\hbar^{|\alpha|/2}), \quad (5)$$

где $\alpha \in \mathbb{Z}_+^{2n}$ – мультииндекс [12], а под операторной оценкой $\hat{A} = \hat{O}(\hbar^s)$ понимается, что $\frac{1}{\|\Phi\|} \|\hat{A}\Phi\| = O(\hbar^s)$, $\Phi \in P'_h$.

В классе (4) решение уравнения (1) можно представить в виде асимптотического ряда вида

$$\Psi(\bar{x}, t, \hbar) = \Psi^{(0)}(\bar{x}, t, \hbar) + \sqrt{\hbar}\Psi^{(1)}(\bar{x}, t, \hbar) + \hbar\Psi^{(2)}(\bar{x}, t, \hbar) + \dots, \quad (6)$$

где $\Psi^{(k)}(\bar{x}, t, \hbar) \in P'_h(Z(t), S(t), \sigma(t)) \quad \forall k \in \mathbb{Z}_+$. Члены асимптотического разложения (6) определяются уравнениями вида

$$\begin{aligned} \hat{L}^{(2)}(g_\Psi^{(M)}(t, \hbar))\Psi^{(0)}(\bar{x}, t, \hbar) &= 0, \\ \hat{L}^{(2)}(g_\Psi^{(M)}(t, \hbar))\Psi^{(1)}(\bar{x}, t, \hbar) &= -\hbar^{-1/2}\hat{L}^{(3)}(g_\Psi^{(M)}(t, \hbar))\Psi^{(0)}(\bar{x}, t, \hbar), \\ &\dots \\ \hat{L}^{(2)}(g_\Psi^{(M)}(t, \hbar))\Psi^{(M-2)}(\bar{x}, t, \hbar) &= -\hbar^{-1/2}\hat{L}^{(3)}(g_\Psi^{(M)}(t, \hbar))\Psi^{(M-1)}(\bar{x}, t, \hbar) - \\ &- \dots - \hbar^{-(M-2)/2}\hat{L}^{(M)}(g_\Psi^{(M)}(t, \hbar))\Psi^{(0)}(\bar{x}, t, \hbar). \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь операторы $\hat{L}^{(k)}$ получаются из уравнения (1) асимптотическим разложением по операторам $\Delta\hat{z}$, а также разложением ядра нелинейности по $\Delta\hat{w} = \hat{w} - Z(t)$ с заменой соответствующих интегралов на моменты $g_{\Psi}^{(M)}(t, \hbar)$ функции Ψ до M -го порядка включительно. В силу оценок (5) система уравнений на $g_{\Psi}^{(M)}(t, \hbar)$ является замкнутой с точностью $O(\hbar^{(M+1)/2})$. Оператор $\hat{L}^{(2)}$ имеет вид

$$\hat{L}^{(2)} = -i\hbar\partial_t + H(t, \hbar) + \langle H_z(t), \Delta\hat{z} \rangle + \frac{1}{2} \langle \Delta\hat{z}, H_{zz}(t) \Delta\hat{z} \rangle, \quad (8)$$

где коэффициенты включают в себя моменты до второго порядка включительно.

Теперь опишем конструктивный метод построения асимптотический решений уравнения (1). Пусть $g^{(M)}(t, \hbar, C)$ – частное решение системы ОДУ на моменты, где отброшены слагаемые с оценкой $O(\hbar^{(M+1)/2})$ (как мы уже отмечали, такая система является замкнутой), полученное из общего решения путем выбора констант интегрирования C . Константы интегрирования для этой системы можно задать равными значению моментов в некоторый момент времени, определяемому значением волновой функции в этот момент времени, т.е. $C = C[\phi]$. Для определенности этот момент времени можно положить $t = 0$. Справедливо следующее утверждение:

Пусть $\Psi(\bar{x}, t, \hbar) \in P_{\hbar}^t(Z(t), S(t), \sigma(t))$ – решение задачи Коши для уравнения (1) с начальным условием

$$\Psi(\bar{x}, t, \hbar)|_{t=0} = \phi(\bar{x}, \hbar), \quad (9)$$

а $\Phi(\bar{x}, t, \hbar, C[\phi])$ – решение задачи Коши

$$\begin{aligned} \hat{L}^{(2)}(g^{(M)}(t, \hbar, C[\phi]))\Phi(\bar{x}, t, \hbar, C[\phi]) &= 0, \\ \Phi(\bar{x}, t, \hbar, C[\phi])|_{t=0} &= \phi(\bar{x}, \hbar). \end{aligned} \quad (10)$$

Тогда $\sup_{t \in [0, T]} \|\Phi(\bar{x}, t, \hbar, C[\phi]) - \Psi(\bar{x}, t, \hbar)\| = O(\sqrt{\hbar})$.

Уравнение (10) мы называем ассоциированным линейным уравнением Шредингера с диссипацией. Из приведенного утверждения следует, что его решение определяет главный член асимптотики $\Psi^{(0)}(\bar{x}, t, \hbar)$ решения задачи Коши (1), (9). Из (7) видно, что высшие поправки также являются решениями ассоциированных линейных уравнений Шредингера с диссипацией, но уже неоднородных. Зная функцию Грина уравнения (10), которая для квадратичного

уравнения Шредингера известна (см., например, [13]), мы можем построить и главный член асимптотики, и высшие приближения, используя формулу Дюамеля.

В качестве примера применения предложенного формализма рассмотрено уравнение

$$\left\{ -i\hbar\partial_t + (c_1 - i\hbar\Lambda)\hat{p}^2 + (c_2 - i\hbar\Lambda)\kappa \int_{\mathbb{R}} \exp\left(-\frac{(x-y)^2}{\gamma^2}\right) |\Psi(\bar{y}, t)|^2 d\bar{y} + i\hbar\Lambda\varepsilon \right\} \Psi(\bar{x}, t) = 0, \quad (11)$$

которое представляет собой нелокальное обобщение модели атомного лазера, предложенной в [9]. Данное уравнение является редукцией системы двух уравнений: уравнения Гросса–Питаевского, описывающего поле бозе-эйнштейновского конденсата, и реакционно-диффузионного уравнения, описывающего плотность неконденсированных атомов. В рамках квазиклассического приближения все вспомогательные уравнения для построения главного члена асимптотики решения уравнения (11) в явном виде интегрируются точно.

Таким образом, предложенный метод позволяет свести задачу построения локализованных асимптотических решений уравнения (1) с любой точностью по квазиклассическому параметру малости к решению вспомогательной системы ОДУ, описывающих моменты неизвестной функции. Такие локализованные состояния возникают в ряде физических моделей, описываемых НУШ с неэрмитовой частью, таких как модель атомного лазера, мастер уравнение Хауса и некоторые другие.

Список литературы

1. Lederer F. Discrete solitons in optics / F. Lederer, G. Stegeman, D. Christodoulides, G. Assanto, M. Segev, Y. Silberberg // *Physics Reports – Review Section of Physics Letters*. – 2008. – Vol. 463. – P. 1–126.
2. Dalfovo F. Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases / F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, S. Stringari // *Reviews of Modern Physics*. – 1999. – Vol. 71. – issue 3, P. 463–512.
3. Legett A. Bose-Einstein condensation in the alkali gases: Some fundamental concepts / A. Legett // *Reviews of Modern Physics*. – 2001. – Vol. 73. – P. 307–356.
4. Saffman P. G. *Vortex Dynamics* / P. G. Saffman – Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2001.

5. Fetter A. L. Vortices in a trapped dilute Bose-Einstein condensate / A. L. Fetter, A. A. Svidzinsky // *Journal of Physics Condensed Matter*. – 2001. – Vol. 13. – issue 12, P. 135–194.
6. Maslov V. The Complex WKB Method for Nonlinear Equations. I. Linear Theory / V. Maslov. – Birkhauser Verlag, Basel, 1994.
7. Cuevas J. Solitons in quasionedimensional Bose-Einstein condensates with competing dipolar and local interactions / J. Cuevas, B. A. Malomed, P. G. Kevrekidis, D. J. Frantzeskakis // *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*. – 2009. – Vol. 79. – issue 5.
8. Aranson I. S. The world of the complex Ginzburg-Landau equation / I. S. Aranson, L. Kramer // *Rev. Mod. Phys.* – 2002. – Vol. 74. – P. 99–143.
9. Arecchi F. Dissipative dynamics of an open Bose Einstein condensate / F. Arecchi, J. Bragard, L. Castellano // *Optics Communications*. – 2000. – Vol. 179. – issue 1, P. 149–156.
10. Shapovalov A. V. The Gross–Pitaevskii equation with a nonlocal interaction in a semiclassical approximation on a curve / A.V. Shapovalov, A.E. Kulagin, A.Yu. Trifonov // *Symmetry*. – 2020. – Vol. 12. – issue 2, article 201.
11. Shapovalov A. V. An application of the Maslov complex germ method to the one-dimensional nonlocal Fisher–KPP equation / A.V. Shapovalov, A.Yu. Trifonov // *International Journal of Geometric Method in Modern Physics*. – 2018. – Vol. 15. – No. 06, article 1850102.
12. Karasev M. V. Weyl and ordered calculus of noncommuting operators / M. V. Karasev // *Mathematical Notes of the Academy of Sciences of the USSR*. – 1979. – Vol. 26. – No. 6, P. 945–958.
13. Bagrov V. G. Semiclassical trajectory-coherent approximation in quantum mechanics I. High-order corrections to multidimensional time-dependent equations of Schrodinger type / V. G. Bagrov, V. V. Belov, A. Y. Trifonov // *Annals of Physics*. – 1996. – Vol. 246. – issue 2, P. 231–290.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕФЛЕКСИВНЫХ ПРОЦЕССОВ В КОЛЛЕКТИВАХ СПЕЦИАЛИСТОВ, РЕШАЮЩИХ ПРОБЛЕМЫ ЗА КРУГЛЫМ СТОЛОМ³

С.В. Листопад

Калининградский филиал Федерального исследовательского центра «Информатика и управление» Российской академии наук, *ser-list-post@yandex.ru*

Сложность решения проблем в производственных, экономических и социальных системах обусловлена следующими их особенностями: слабая формализация, комплексное строение, сетевой характер условий и целей, существенная непрозрачность (неопределенность), субъективность и динамичность. Эти свойства обуславливают необходимость привлечения к решению проблем коллективов специалистов, обеспечивающих комплексное, всестороннее их рассмотрение, самоорганизацию и адаптацию к изменениям проблемной ситуации. Существенную роль в организации работы коллектива специалистов как самоорганизующейся среды, в которой субъекты (специалисты и их группы) гармонично сосуществуют и развиваются для достижения общей цели, играют рефлексивные процессы и механизмы имитации рассуждений. Они выступают как особое средство координации и синхронизации деятельности отдельных членов: если один из членов коллектива, обладающий рефлексивными способностями, не может установить связь с лидером или другим членом коллектива, он производит рассуждения «за другого», вырабатывает решение, имитирует его трансляцию самому себе и в соответствии с этим решением строит свои дальнейшие рассуждения [1].

Рефлексия – это одновременно и уникальное свойство, присущее лишь человеку, и состояние осознания чего-либо, и процесс репрезентации психике своего собственного содержания, т.е. выступает как процесс, свойство и состояние одновременно, но не сводится ни к одному из них [2]. Выделяется три вида рефлексии по "временному" принципу: ситуативная, ретроспективная и перспективная. Ситуативная рефлексия обеспечивает непосредственный самоконтроль субъекта в текущей ситуации, ее осмысление и анализ, а также его способность выбору своих действий, релевантных ситуации и собственному

³ Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-21-00218, <https://rscf.ru/project/23-21-00218/>

состоянию. Ретроспективная рефлексия заключается в способности анализа совершенных действий и произошедших событий. Перспективная рефлексия предполагает анализ предстоящей деятельности, планирование, прогнозирование вероятных исходов и т.п. Кроме того, различается степень глубины понимания психики и поведения себя и других людей, описываемая «рангом рефлексии».

Понятие ранга рефлексии было введено В.А. Лефевром как количество последовательных вложений в сознание некоторого персонажа других персонажей [3]. Понятие ранга рефлексии [4] проиллюстрировано рис. 1, на котором представлены взаимоотношения между субъектом деятельности, например, менеджером логистического комплекса, объектом его деятельности – логистическим комплексом и другими субъектами – его коллегами, подчиненными или руководителями. Стрелки представляют отдельные акты размышления, рефлексии, ранг которой указан в окружности. Объект деятельности пассивен и не способен к рефлексии. Рис. 1а демонстрирует отношения, существующие с точки зрения субъекта нулевого ранга рефлексии: оценка своей деятельности относительно объекта (самооценка результатов); оценка самого себя (самооценка себя как личности); оценка других субъектов (как личностей). Другие субъекты рассматриваются как объекты, не способные к рефлексии.

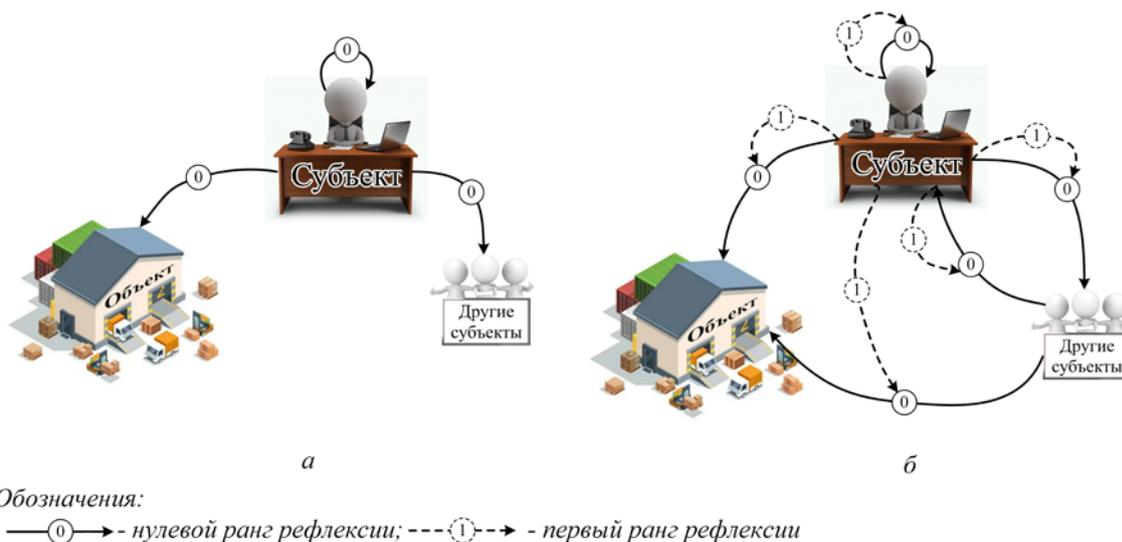


Рис. 1. Ранги рефлексии субъекта:

а) субъект нулевого ранга рефлексии; б) субъект первого ранга рефлексии;

На рис. 1б показан субъект, обладающий рефлексией первого ранга. Он предполагает, что другие субъекты – не пассивные объекты, а субъекты с рефлексией нулевого ранга, которые оценивают его самого как личность, а также результаты его деятельности относительно объекта, что показано на рис. 1б соответствующими новыми стрелками с меткой «0». Полагая, что другие субъекты обладают нулевым рангом рефлексии, субъект соответствующим образом выстраивает собственную деятельность и размышления, моделируя субъектов в своем сознании. Следует отметить, что субъект не умеет «читать мысли» других субъектов, и такие модели – лишь предположения субъекта. У субъекта первого ранга рефлексии возникают размышления об оценке другими субъектами результатов его деятельности и об оценке его самого другими субъектами. Кроме того, субъект исследует собственные процессы мышления о самооценке результатов деятельности в отношении объекта, собственной самооценке и оценке других субъектов (как личностей). Аналогичным образом могут быть определены субъекты второго и более высоких рангов рефлексии. Считается, что при прочих равных условиях сторона с большим рангом рефлексии [5] имеет преимущество перед конкурентами, но, как отмечает Д.А. Поспелов, не всегда более высокий ранг рефлексии дает безусловный выигрыш, важно уметь правильно идентифицировать ранг рефлексии соперника [6]. При этом в [4] показана нецелесообразность рассмотрения ранга рефлексии выше второго.

Существенный недостаток коллективного решения проблем – длительность получения решения, что часто несовместимо с высокой динамичностью проблемной ситуации. В этой связи, актуальна разработка интеллектуальных систем, моделирующих работу таких коллективов, в частности, рефлексивно-активных систем искусственных гетерогенных интеллектуальных агентов (РАСИГИА), агенты которых взаимно моделируют рефлексивные позиции друг друга, динамически вырабатывают тактики и стратегии своего поведения, релевантные моделям своих контрагентов, обеспечивая самоорганизацию системы.

В работе описывается типовая модель РАСИГИА (точнее ее часть, непосредственно связанная с моделированием рефлексивных процессов в коллективе специалистов), реализующая основные аспекты коллективного поведения интеллектуальных агентов, которая должна быть доработана при реализации РАСИГИА для решения конкретной проблемы с учетом ее особенностей. В основу этой модели положена модель гибридной интеллектуальной многоагентной системы [7], которая, в свою очередь, базируется на определении многоагентной системы из [8].

При построении модели РАСИГИА будем разделять макро- и микроуровневые модели системы и ее частей. Макроуровневая модель описывает систему как элемент надсистемы (системы более высокого уровня иерархии), т.е. в виде «черного ящика», обладающего определенными свойствами, доступными для наблюдения другим элементам надсистемы. В формальной записи будем помечать ее чертой над символом, обозначающим систему или ее часть. Микроуровневая модель детализирует состав и структуру описываемой системы, а также правила формирования элементов макроуровневой модели. Для обозначения данной модели используется черта под символом соответствующей системы или ее части.

Макроуровневые модели РАСИГИА $\overline{rasahia}$ и ее агента \overline{ag} совпадают, так как РАСИГИА сама является агентом в системе более высокого уровня (внешней среде), а также может включать агентов, которые являются РАСИГИА более низкого уровня, образуя иерархическую и, в определенном смысле, фрактальную структуру. Формально макроуровневые модели РАСИГИА и ее агента записываются следующим выражением:

$$\overline{rasahia} = \overline{ag} = \langle id, LANG^s, PRB, CP \rangle, \quad (1)$$

где id – идентификатор РАСИГИА в целом или ее агента; $LANG^s$ – множество языков передачи сообщений, поддерживаемых РАСИГИА при взаимодействии с агентами внешней среды или агентом РАСИГИА при взаимодействии с другими агентами системы; PRB – множество концептуальных моделей проблем (подпроблем, элементарных задач), которые способны решить РАСИГИА или ее

агент; CP – управляющие параметры архитектуры РАСИГИА, возникшей в результате самоорганизации, или агента, которые позволяют оказывать влияние на их поведение.

Микроуровневая модель РАСИГИА из (1) представляется следующим кортежем

$$\underline{rasahia} = \langle \overline{AG^r}, \underline{env}, INT^r, TEF^r, VBM^r \rangle, \quad (2)$$

где $\overline{AG^r}$ – множество (3) агентов РАСИГИА, представленных своими макроуровневыми моделями (1); \underline{env} – микроуровневая модель внешней среды РАСИГИА (4); INT^r – множество элементов структурирования взаимодействий агентов, описываемые выражением (5); TEF^r – множество концептуальных моделей групповых процессов в РАСИГИА, описываемое выражением (6); VBM^r – отображение, формирующее макроуровневую модель системы на основе микроуровневой, не рассматриваемое в рамках типовой модели и подлежащее разработке для каждой РАСИГИА, решающей конкретную проблему или класс проблем.

Множество макроуровневых моделей агентов РАСИГИА $\overline{AG^r}$ из (2) описывается выражением:

$$\overline{AG^r} = \{ \overline{ag_{dm}^r}, \overline{ag_{fc}^r}, \overline{ag_{med}^r}, \overline{ag_{pc}^r}, \overline{ag_{acm}^r} \} \cup \overline{AG^{rint}} \cup \overline{AG^{rsp}} \cup \overline{AG^{rtr}} \cup \overline{AG^{rit}}, \quad (3)$$

где $\overline{ag_{dm}^r}$ – агент, принимающий решения, моделирующий работу руководителя коллектива специалистов по распределению задач между подчиненными, интеграции полученных решений, выработке коллективного решения; $\overline{ag_{fc}^r}$ – агент-фасилитатор, отвечающий за организацию эффективной совместной работы других агентов и достижение РАСИГИА синергетического эффекта, когда коллективное решение превосходит по качеству возможные решения, которые могли бы предложить те же агенты, работая порознь; $\overline{ag_{med}^r}$ – агент-посредник, выполняющий служебную функцию по поиску агентов, реализующих требуемый функционал; $\overline{ag_{pc}^r}$ – агент контроля протокола, отслеживающий соблюдение протоколов, выработанных агентами в ходе совместной работы;

$\overline{ag_{acm}^r}$ – агент управления составом РАСИГИА, отвечающий за поддержание состава агентов РАСИГИА, релевантного ситуации решения проблемы, путем привлечения агентов из пула и исключения неэффективных агентов; $\overline{AG^{rint}} = \{\overline{ag_1^{rint}}, \dots, \overline{ag_{nrint}^{rint}}\}$ – подмножество интерфейсных агентов, отвечающих за взаимодействие с пользователем и другими элементами внешней среды РАСИГИА; $\overline{AG^{rsp}} = \{\overline{ag_1^{rsp}}, \dots, \overline{ag_{nrsp}^{rsp}}\}$ – подмножество агентов-специалистов, имитирующих рассуждения специалистов в реальном коллективе по решению поставленной проблемы, обеспечивающих, таким образом, разнообразие моделей проблемы, достаточное для ее решения, учет ее полителичности и реализацию концепции субъектно-ориентированной организации знаний, где $nrsp$ – число агентов-специалистов; $\overline{AG^{rtr}} = \{\overline{ag_1^{rtr}}, \dots, \overline{ag_{nrtr}^{rtr}}\}$ – подмножество агентов-переводчиков, позволяющих взаимодействовать агентам, которые не могут общаться напрямую из-за несовместимости поддерживаемых ими языков передачи сообщений, где $nrtr$ – число агентов-переводчиков.

Внешняя среда РАСИГИА также формализуется через понятие многоагентной системы, микроуровневая модель которой представляется выражением

$$\underline{env} = \langle \overline{AG^e}, INT^e \rangle, \quad (4)$$

где $\overline{AG^e} = \{\overline{ag_{co}^e}, \overline{ag_{pl}^e}, \overline{ag_{usr}^e}\} \cup \overline{AG^{esh}}$ – множество агентов внешней среды РАСИГИА, представленных своими макроуровневыми моделями (1), содержащее агента $\overline{ag_{co}^e}$, имитирующего поведение объекта управления, который, в общем случае, также может быть многоагентной системой уровня РАСИГИА, агента $\overline{ag_{pl}^e}$, представляющего собой пул (хранилище), в котором содержится программный код вновь созданных или исключенных из состава системы агентов-специалистов, не принимающих участие в решении проблем, пока агенту управления составом РАСИГИА $\overline{ag_{acm}^r}$ не потребуется включить их в состав подмножества агентов-специалистов $\overline{AG^{rsp}}$, агента $\overline{ag_{usr}^e}$, представляющего пользователя системы, а также множество $\overline{AG^{esh}}$ агентов,

моделирующих стейкхолдеров с их целями и оценивающих результаты работы РАСИГИА; INT^e – множество элементов структурирования взаимодействий агентов внешней среды, описываемые выражением (5).

Множества элементов структурирования взаимодействий агентов INT^r из (2) и INT^e из (4) описываются выражением

$$INT = \{LANG, ont^{bsc}, PROT^{bsc}, PRC\}, \quad (5)$$

где $LANG$ – множество языков, используемых агентами для передачи сообщений; ont^{bsc} – базовая, общая для всех агентов системы соответствующего уровня (в общем случае разная для РАСИГИА и ее внешней среды) онтология, обеспечивающая понимание агентами смысла передаваемых сообщений по управлению составом системы, согласованию собственных моделей предметной области, целей и формированию протокола взаимодействия при решении проблемы; $PROT^{bsc}$ – множество базовых протоколов, обеспечивающих взаимодействие агентов на основе коммуникативных актов; PRC – множество элементов (пустое для внешней среды) для конструирования протоколов решения проблем агентами-специалистами и агентом, принимающим решения.

Множество концептуальных моделей групповых процессов РАСИГИА TEF^r из (2) формально может быть представлено следующим выражением:

$$TEF^r = \{ontng, glng, protng, socm, refc\}, \quad (6)$$

где $ontng, glng, protng$ – модели согласования агентами между собой своих моделей предметной области [9], целей [10] и протоколов [11] для достижения их непротиворечивости при включении в состав системы новых агентов из пула агентов-специалистов $\overline{ag_{pl}^e}$ (3); $socm$ – модель самоорганизации РАСИГИА путем управления составом агентов-специалистов $\overline{AG^{rsp}}$ (3); $refc$ – модель (7) рефлексивного управления, осуществляемого агентами-специалистами $\overline{AG^{rsp}}$ (3) и агентом, принимающим решения $\overline{ag_{dm}^r}$ (3).

Модель рефлексивного управления из формулы (6) представляется выражением

$$refc = \langle rmdl, rctr, RCTRM \rangle, \quad (7)$$

где $rmdl$ – метод моделирования рефлексивными агентами других агентов на основе предлагаемых ими вариантов решения проблемы; $rctr$ – метод выработки рефлексивными агентами тактики и стратегии поведения при переговорах с другими агентами в соответствии с моделями последних; $RCTRM$ – методы рефлексивного управления агентами в соответствии с их моделями.

Микроуровневая модель агента представляется выражением

$$\underline{ag} = \langle id, gl^{ag}, LANG^{ag}, ont^{ag}, prot^{ag}, ACT^{ag}, AGM^{ag}, BBM^{ag} \rangle, \quad (8)$$

где id – идентификатор агента; gl^{ag} – цель агента; $LANG^{ag} \subseteq LANG$ – множество языков, сообщения на которых могут быть записаны или прочитаны агентом; ont^{ag} – онтология (модель предметной области) агента; $prot^{ag}$ – модель протокола решения проблемы, разработанная агентом; ACT^{ag} – множество действий, реализуемых агентом; AGM^{ag} – множество (9) – (11) моделей других агентов, построенных агентом; BBM^{ag} – отображение, формирующее макроуровневую модель агента на основе элементов микроуровневой модели.

Множество AGM^{ag} моделей других агентов из (8), построенных агентом, зависит его ранга рефлексии. В РАСИГИА агентами с нулевым рангом рефлексии, т.е. не обладающие рефлексией, являются все агенты кроме агента, принимающего решения и части агентов специалистов. У таких агентов множество $AGM^{ag} = AGM_{r_0}^{ag}$ пустое

$$AGM_{r_0}^{ag} = \emptyset. \quad (9)$$

Агенты первого ранга рефлексии выполняют построение усеченной микроуровневой модели агента с помощью своей модели предметной области и формируют множество $AGM^{ag} = AGM_{r_1}^{ag}$ следующего вида:

$$AGM_{r_1}^{ag} = \{ agm_{id} \mid agm_{id} = \langle id, gl, LANG, ont, prot, ACT, AGM_{r_0}^{ag} \rangle \}. \quad (10)$$

В случае агента второго ранга рефлексии предполагается, что другие агенты обладают рангом рефлексии не выше первого. В результате его множество $AGM^{ag} = AGM_{r_1}^{ag}$ представляется выражением

$$AGM_{r_2}^{ag} = \{ agm_{id} \mid agm_{id} = \langle id, gl, LANG, ont, prot, ACT, AGM_{r_0}^{ag} \rangle \vee \vee agm_{id} = \langle id, gl, LANG, ont, prot, ACT, AGM_{r_1}^{ag} \rangle \}. \quad (11)$$

Следует отметить, что в данном случае агент второго ранга рефлексии стремится идентифицировать ранг рефлексии других агентов, а не слепо предполагает, что все остальные агенты системы имеют первый ранг рефлексии. Это позволяет выбирать релевантный метод рефлексивного управления для каждого агента, если в системе присутствуют агенты всех трех рангов рефлексии.

В настоящей работе разработана типовая модель РАСИГИА, реализующая основные аспекты коллективного поведения интеллектуальных агентов. Данная модель реализует принципы субъектно-ориентированной организации знаний («паутины концепций»), полителичности и необходимого разнообразия благодаря наличию агентов-специалистов, моделирующих рассуждения на основе моделей предметной области и целей реальных специалистов. Представленная типовая модель РАСИГИА строится по иерархическому принципу: агенты в ее составе представляют собой РАСИГИА более низкого уровня. Агенты системы, согласно данной модели, – активные субъекты, способные к рассуждениям, коммуникации и рефлексии, как умения моделировать рассуждения других агентов системы и себя самого. Рефлексивное моделирование агентами друг друга обеспечивает выработку согласованного представления об объекте управления, цели коллективной работы и нормах взаимодействия, а также выстраивание эффективного взаимодействия между агентами, т.е. эволюционную стадию самоорганизации РАСИГИА.

Список литературы

1. Лефевр В.А. Рефлексия / В.А. Лефевр. — М.: «Когито-Центр», 2003. — 496 с.
2. Карпов А.В. Рефлексивность как психическое свойство и методика ее диагностики / А.В. Карпов // Психологический журнал. — 2003. — Т. 24. — № 5. — С. 45 – 57.
3. Лефевр В.А. Исходные идеи логики рефлексивных игр / В.А. Лефевр // Материалы конференции «Проблемы исследования систем и структур». — М.: Издание АН СССР, 1965. — С. 73 – 79.
4. Новиков Д.А. Рефлексия и управление: математические модели / Д.А.

- Новиков, А.Г. Чхартишвили. — М.: Издательство физико-математической литературы, 2012. — 412 с.
5. Новосельцев В.И. Конфликтология: Учебное пособие / В.И. Новосельцев, В.М. Мельников. — Воронеж: Российская академия правосудия (Центральный филиал), 2004. — 290 с.
 6. Поспелов Д.А. Фантазия или наука: на пути к искусственному интеллекту / Д.А. Поспелов. — М., Наука, 1982. — С. 92 – 100.
 7. Колесников А.В. Гибридные интеллектуальные системы с самоорганизацией: координация, согласованность, спор / А.В. Колесников, И.А. Кириков, С.В. Листопад. — М.: ИПИ РАН, 2014. — 189 с.
 8. Demazeau Y. Populations and organizations in open multi-agent systems / Y. Demazeau, A.C. Rocha Costa // In Proceedings of the 1st National Symposium on Parallel and Distributed AI (PDAI '96). — Hyderabad, India: 1996. — pp. 1 – 13.
 9. Kirikov I.A. Agents' ontologies negotiation in cohesive hybrid intelligent multi-agent systems / I.A. Kirikov, S.V. Listopad, A.S. Luchko // Journal of Physics: Conference Series. — 2021. — pp. 032033.
 10. Кириков И.А. Согласование целей агентов сплоченных гибридных интеллектуальных многоагентных систем / И.А. Кириков, С.В. Листопад // Информатика и ее применения. — 2021. — Т. 15. — Вып. 2. — С. 66–71.
 11. Kirikov I.A. Cohesive Interaction Protocol Development in Hybrid Intelligent Multi-agent Systems / I.A. Kirikov, S.V. Listopad // 3rd International Conference on Control Systems, Mathematical Modeling, Automation and Energy Efficiency SUMMA-2021, November, 10-12 2021. — Lipetsk: IEEE, 2021. — pp. 553-558.

СИСТЕМА ВИЗУАЛИЗАЦИИ СНИМКОВ ОПЕРАЦИОННОЙ РАНЫ С ПОМОЩЬЮ МОДИФИЦИРОВАННОГО ВИДЕОЭНДОСКОПА И ПРИМЕНЕНИЯ ЛАЗЕРА

А.В. Медиевский¹, А.Г. Зотин², К.В. Симонов³,

Т.В. Черепанова⁴, И.В. Хомколов⁵

¹Красноярский государственный медицинский университет имени профессора
В.Ф. Войно-Ясенецкого, *amedievsky@yandex.ru*

²Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика
М.Ф. Решетнева, *zotin@sibsau.ru*

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

⁴ЧУЗ «КБ «РЖД – Медицина» г. Красноярск, *grakova@list.ru*

⁵Сибирский федеральный университет, *khomkolov99@gmail.com*

Введение. Исследование посвящено разработке инновационной технологии (системы), включающей модификацию видеэндоскопа и способ освещения операционного поля лазером. Цель исследования: разработать систему, которая позволяет визуализировать источник кровотечения во время хирургических операций и осуществить гемостаз в операционной ране. Задачи исследования: изучить глубину визуализации биологических тканей с помощью камеры ближнего инфракрасного спектра; разработать экспериментальный образец видеэндоскопа с камерами NIR, RGB и механизмом перенаправления световых лучей; в эксперименте оценить глубину визуализации биологических структур при помощи модифицированного видеэндоскопа и лазера.

В рамках экспериментов выполнен анализ качества визуализации биологических структур в зависимости от глубины их расположения в хирургической ране. В результате созданы система и методика, позволяющие улучшить качество визуализации сосудов в условиях кровотечения.

В настоящее время разрабатываемая технология (система) выполнена в виде эндоскопа, способного улавливать излучение как в видимом, так и в ближнем инфракрасном диапазоне, а также менять активные камеры между собой в автоматизированном режиме. Разработано алгоритмическое и

программное обеспечение, которое нацелено на улучшение шумовых, яркостных и цветовых характеристик исходного изображения, получаемого с эндоскопа. Наиболее важной особенностью модифицированного эндоскопа является возможность визуализации источника кровотечения в глубине операционной раны, что достигается при помощи использования системы, состоящей из камеры ближнего инфракрасного диапазона, лазера и соответствующего программного обеспечения.

Предварительный этап экспериментальных исследований. Для изучения глубины визуализации биологических структур при помощи камеры ближнего инфракрасного спектра, работоспособности системы и методики NIR визуализации, проводилось исследование в условиях хирургического стационара. Практическая часть выполнена на базе хирургического отделения больницы ЧУЗ «КБ «РЖД - Медицина» г. Красноярск (пациент с диагнозом ущемленная бедренная грыжа). С целью соблюдения стерильных условий и получения качественной видеозаписи во время операции, камера переоборудована в соответствии с предъявляемыми стандартными требованиями [1].

Для камеры ближнего инфракрасного диапазона сконструирована рукоятка длиной 580 мм, на которой имелись зажимы для смартфона *iPhone 6s*. Удалось расположить матрицы NIR камеры и *iPhone 6s* на расстоянии 6 мм, что позволило провести съёмку с одного ракурса и получить снимки в ближнем инфракрасном и видимом спектре одной и той же области. Использовалась аналоговая NIR камера из детектора *DORS 1000*. Изображение из аналогового формата конвертировалось в цифровой, что позволяло записывать на ПК процесс хирургической операции (NIR камера воспринималась ПК как Web-камера). В процессе хирургического вмешательства для осуществления доступа к грыжевому мешку выполнялся гемостаз. Во время перевязки сосуда, лигатура соскользнула с дистального его конца, что вызвало незначительное кровотечение в операционную рану. Данный момент зафиксирован двумя камерами и представлен на рисунке 1. На рисунке 1 б видны структуры, которые располагаются глубже тех, которые продемонстрированы на рисунке 1 а.

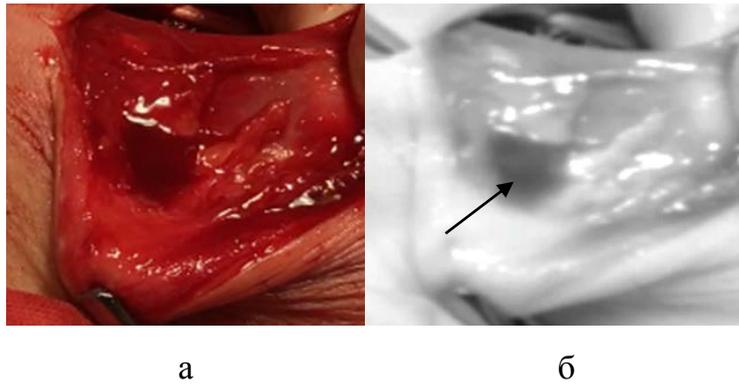


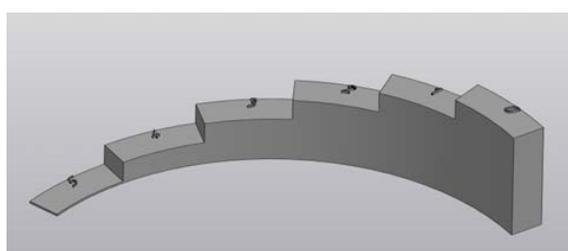
Рис. 1. Операционное поле в момент незначительного кровотечения: (а) видимый спектр (съемка камерой *iPhone 6s*); (б) NIR (съемка камерой NIR)

Участок сосуда располагается в центре снимка (рис. 1 а) и виден только в инфракрасном режиме (рис. 1. б). На снимке со смартфона видна лишь жидкая среда. Для применения данной технологии на операциях во время массивного кровотечения необходимы доработки камеры, нацеленной на улучшение способности визуализировать ткани, находящиеся на большей глубине.

Экспериментальные исследования первого этапа. Для улучшения системы визуализации искомых структур операционного поля подобрана иная камера ближнего инфракрасного диапазона, а также заменен источник освещения на более мощный (с длиной волны – 850 нм). Одним из основных критериев для выбора NIR камеры являлся показатель светочувствительности. Установлено эмпирическим путем, что глубина визуализации биологических структур имеет прямую зависимость от способности камеры работать в условиях плохой освещенности. То есть, если камера регистрирует в темноте больше деталей, то она сможет запечатлеть анатомические структуры, которые находятся более глубоко в крови, поэтому выбрана IP-камера с опцией ночной съёмки. Наиболее оптимальной по соотношению размер/качество являлась камера IP-камера с матрицей Sony CMOS IMX335F. Используемый вариант камеры работает на базе процессора XM550AI [2]. За счёт высокой светочувствительности ($SNR_{1s} = 0.56$ люкс) имелась возможность регистрировать инфракрасные лучи достаточно низкой интенсивности, что обуславливало большую глубину расположения видимых анатомических

структур.

Для разработки методики визуализации биологических тканей в момент кровотока изготовлена модель операционного поля. Для этого использовался гистологический препарат головного мозга человека, помещенный в прозрачный стеклянный флакон с венозной кровью. Дополнительно предложена «линейка», особенностью которой является возможность определения глубины каждого участка препарата мозга. Линейка выполнена в виде лестницы, в которой каждая ступенька отвечает за свою глубину, при этом одна ступенька соответствует изменению глубины ровно на 1 мм. Линейка имеет 6 ступеней в связи с небольшими размерами исследуемого биопрепарата (рис. 2). Первый уровень находится на поверхности и характеризуется отметкой 0 мм, а шестой – имеет отметку 5 мм (рис. 2 а). В соответствии с яркостью пикселей линейки можно определить глубину одного из участков среза головного мозга (рис. 2 б). Если случайный пиксель, взятый из нижней части препарата мозга, соответствует по яркости пикселю, расположенному на шаге, равном 3 мм, то можно сделать вывод, что этот участок мозга находится на глубине 3 мм.



а



б

Рис. 2. (а) модель линейки, общий вид; (б) препарат головного мозга с линейкой в видимом спектре до заполнения флакона кровью

На рисунке 3 показаны различия в структурах, заснятых в видимом и ближнем инфракрасном спектрах [3]. Все изображения для исследования получены с помощью IP-камеры с 5-мегапксельной матрицей Sony CMOS 335E. Эта матрица способна захватывать как видимый, так и инфракрасный диапазоны.

Поэтому для достоверности результатов оба изображения сделаны на одну и ту же матрицу. Изменение режимов съемки осуществлялось с помощью оптического фильтра, отсекающего лучи с длиной волны более 700 нм.



Рис. 3. Препарат головного мозга с линейкой после смоделированного кровотечения: (а) снимок в видимом диапазоне; (б) снимок в ближнем ИК спектре

Выполнено сравнение объекта на рисунке 3 б и силуэт биопрепарата без крови (рис. 2 б). В данном случае контуры совпали, это означает, что на рисунке 3 б, после смоделированного развития кровотечения, визуализируется препарат головного мозга, а не артефакт. Визуализация в ближнем ИК-диапазоне позволяет регистрировать биологические структуры, которые находятся в крови, без изменения морфологии и с сохранением размерности. На рисунке 3 а представлен снимок в видимом диапазоне, на нем виден участок линейки, который находится на поверхности венозной крови, что соответствует 0 мм. Отметим, что части биопрепарата и линейки, которые находятся глубже данного уровня, невозможно увидеть. Но при удалении ИК-фильтра с объектива камеры ситуация значительно меняется. Благодаря регистрации лучей ближнего инфракрасного диапазона появляется возможность заснять структуры, которые находятся на следующих уровнях: 0 мм, -1 мм, -2 мм, -3 мм. Но по мере углубления уменьшается контрастность исследуемых структур, что обуславливается поглощением фотонов NIR диапазона частицами крови.

Для оценки эффективности применяемых методов контрастирования

рассчитаны коэффициенты контрастности для отдельных локаций на различных глубинах. На каждом видимом уровне линейки случайным образом выбирали по 10 пикселей: 0 мм, -1 мм, -2 мм, -3 мм и определяли их относительную яркость [4]. Далее определялась относительная яркость фона, представленного только кровью, по сравнению с которой определялась контрастность изображений. Расположение выбранных пикселей было одинаковым для всей серии снимков. Среднеарифметические значения коэффициентов контрастности для каждой глубины приведены в таблице. Коэффициенты контрастности определены с использованием алгоритмов, установленных в Web Content Accessibility Guidelines, где наименьшее значение равно 1, а наибольшее – 21 [5].

Таблица

Коэффициенты контрастности исследуемых элементов
в зависимости от глубины их залегания

Вид съёмки	Глубина			
	0 mm	-1 mm	- 2 mm	- 3 mm
Снимок в ближнем ИК спектре	2,042	1,209	1,071	1,035
Снимок в видимом диапазоне	1,21	-	-	-

Второй этап экспериментальных исследований. В рамках этого этапа выполнены работы по усовершенствованию системы визуализации, проведена адаптация камеры для использования её в малоинвазивных операциях. Для этого смоделирован корпус для камеры, который позволял присоединяться к наглазнику эндоскопа. Адаптер камеры сделан с учетом стандартных размеров наглазника [6], поэтому можно использовать любой эндоскоп, а также отпадает необходимость приобретать иную эндоскопическую оптику.

Корпус камеры состоит из трех элементов: два элемента, которые формируют видеоголовку и третий – фиксатор наглазника эндоскопической оптики. Размеры видеоголовки определялись размерами модуля камеры: 38×38

мм. Сборка оставшихся элементов видеоэндоскопической системы осуществлялась стандартным образом, как предусматривается существующими медицинскими нормативами. Все разрабатываемые элементы имеют стандартные выходы, что позволяет легко комбинировать модифицированный видеоэндоскоп с имеющимся в операционных оборудовании.

Для переключения режима работы видеоэндоскопа с обычного на инфракрасный в видеоголовку установлен механический IR-CUT фильтр. Он состоит из стеклянного фильтра диаметром 9,5 мм, электрического привода, работающего от напряжения 3,5 В – 5 В, и корпуса. Привод представлен электрическим мотором, имеющим два выхода, которые соединены с платой видеокамеры. Механический IR-CUT фильтр устанавливается между объективом и матрицей камеры. При проведении стандартных этапов операции, без массивного кровотечения, съёмка полости операционной раны осуществляется в цветном режиме. Для этого в ПО выбирается данный режим и ИК-фильтр, который отсекает лучи в диапазоне более 740 нм, смещается в центр и на матрицу попадают только те лучи, у которых длина волны менее 700 нм. При развитии массивного кровотечения ассистент включает инфракрасный режим съёмки, и фильтр смещается в боковую сторону, матрица начинает регистрировать лучи ближнего инфракрасного диапазона. Для конечного варианта модели видеоэндоскопа будет возможность осуществить переключение режимов работы камеры не только посредством предустановленного ПО, но и с помощью переключателя на корпусе видеоголовки.

Для улучшения качества визуализации глубокорасположенных тканей разработан новый способ освещения полости операционной раны. Светодиодный источник с большим углом рассеивания, который равномерно освещает все структуры, заменен на инфракрасный лазерный модуль, точно освещающий необходимую область. Лазерный модуль подобран с той же длиной волны, что и светодиоды, при которой форменные элементы крови имеют оптимальный коэффициент поглощения лучей [7]. Предлагаемый подход позволяет лучам ближнего инфракрасного диапазона точно достичь

анатомических структур. Тем самым NIR лучи отразятся от наименьшего количества элементов крови, что положительно повлияет на уровень засветки. По этой причине камера будет регистрировать преимущественно лучи, которые достигли искомой анатомической структуры. Несмотря на минимальный угол рассеивания источника освещения, камера регистрирует лучи с большей площади биологических тканей, чем площадь лазерного пучка, за счет диффузного рассеивания лучей внутри тканей. Для подсветки другой области операционного поля производилось смещение светового пучка.

На рисунке 4 представлена модель интраоперационного кровотока и продемонстрировано действие системы для освещения полости операционной раны (рис. 4 а). На рисунке 4 б световой пучок направлен на верхний слой биопрепарата, в связи с этим освещаются в большей степени верхние 5 мм. На рисунке 4 в лазерный модуль смещен ниже и поэтому лучше освещается основание биопрепарата.

В итоге, удалось визуализировать ткани, находящиеся на глубине 6 мм, что в 2 раза лучше предыдущего результата, полученного на начальной стадии экспериментальных исследований.

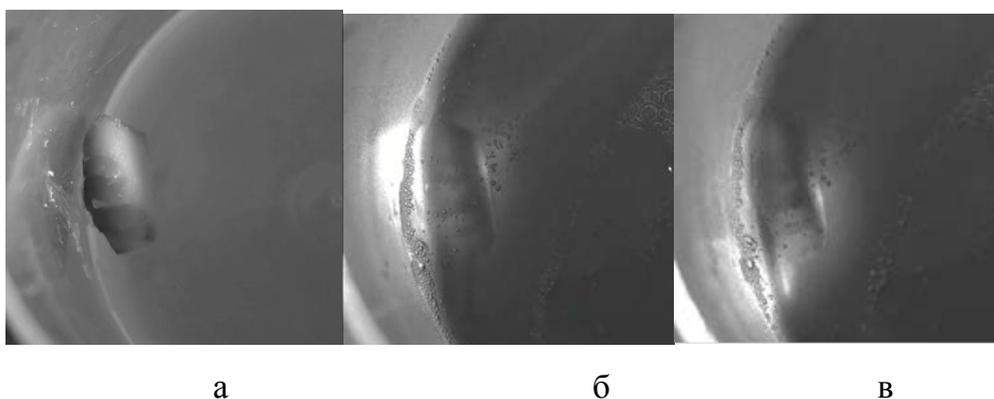


Рис. 4. Препарат головного мозга: (а) эталонный снимок препарата; освещенные при помощи инфракрасного лазерного модуля 850 нм: (б) снимок верхних слоёв; (в) снимок нижних слоёв

Тестирование усовершенствованной видеоэндоскопической системы.

Тестирование усовершенствованной видеоэндоскопической системы осуществлялось на ранее подготовленном препарате, представленном на рисунке

4 а. Итоговый эксперимент имеет ряд отличий: во флакон добавили большее количество крови, а также эндоскопическую оптику погрузили внутрь флакона. Производилась съёмка дна смоделированной операционной раны. В этом эксперименте визуализировались биопрепарат и дно флакона, при этом уровень крови достигает 3 см. В контексте эндоскопической съёмки уровень крови не учитывается, так как этот показатель не влияет на качество получаемых изображений. Критерием эффективности видеосистемы служит расстояние от объектива эндоскопической оптики до биологических тканей. Этот показатель определен в эксперименте выше. Исходя из данного эксперимента, можно сделать вывод, что при кровотечении в операционной ране любой интенсивности, активируя съёмку в режиме ближнего инфракрасного диапазона, у хирурга будет возможность эффективно визуализировать источник кровотечения посредством перемещения эндоскопа в сторону кровоточащего сосуда. Это позволит хирургу определить его расположение и произвести коагуляцию поврежденного сосуда.

Заключение. В рамках экспериментальных исследований выполнена разработка системы визуализации, а также проведен анализ способности ближнего инфракрасного диапазона в большей степени отражаться от тканей головного мозга и кровеносных сосудов, чем от элементов крови. Это обстоятельство позволяет хирургу сохранить видимость интересующих тканей в условиях массивного кровотечения в операционной ране, а также провести качественный гемостаз.

Для визуализации биотканей в ближнем инфракрасном диапазоне сконструирован эндоскоп с механическим IR-CUT фильтром, который, в зависимости от ситуации пропускает, либо отражает лучи в ближнем ИК спектре. Благодаря этому осуществляется быстрая смена режимов работы без участия медицинского персонала.

С целью улучшения качества визуализации более глубокорасположенных тканей предложен иной способ освещения полости операционной раны. Светодиодный источник с большим углом рассеивания, который равномерно

освещал все структуры, заменен на инфракрасный лазерный модуль, точно освещающий необходимую область. В результате модификации видеоэндоскопа и способа освещения лазером операционной раны стало возможным регистрировать анатомические структуры, которые находились, в данном случае, на глубине 6 мм от уровня крови, что в 2 раза лучше предыдущих измерений. Улучшение качества результатов визуализации подтверждалась посредством сравнения полученных контуров биопрепарата с контурами препарата до добавления крови.

Список литературы

1. СанПиН 3.3686-21. Санитарно-эпидемиологические правила и нормативы. Санитарно-эпидемиологические требования по профилактике инфекционных болезней: издание официальное: утверждены постановлением Главного государственного санитарного врача Российской Федерации 28.01.2021. — 960 с.
2. Sony IMX335LQN / IMX335LLN Sensor Module. FSM-IMX335 Datasheet. Version v1.0f. 2019. — 7 с.
3. Calabro K.W. Modeling Biological Tissues in LightTools. — 2020.
4. Medievsky A. Intraoperative visualization of anatomical structures in massive bleeding using infrared images / A.Medievsky, A.Zotin, K.Simonov, T.Cherepanova, A.Kruglyakov // The International Archives of the Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Sciences. XLVIII-2/W3-2023. — 2023. — P. 173 – 178.
5. Hristov H. A model for designing accessible color and contrast for users with visual deficiency and color blindness / H.Hristov, T.Glushkova, S.Cheresharov, M.Stoeva // IEEE 11th International Conference on Intelligent Systems (IS), 2022. — P. 1 – 7. Warsaw, Poland.
6. ГОСТ 23496-89. Эндоскопы медицинские. Общие технические требования и методы испытаний: дата введения 1991-01-01. — 1991 — 26 с.
7. Miyoshi Y. Endoscopic image-guided laser treatment system based on fiber bundle laser steering / Y.Miyoshi, T.Nishimura, Y.Shimojo, et al. // Sci. Rep. — 2023. — V. 13. — 2921.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОВОДИМОСТИ ГАЗОВОГО НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ДЕТЕКТОРА НА ОСНОВЕ SnO₂⁴

Д.А. Рыжкова¹, Ю.Я. Гафнер

Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова,

¹*bashkova.daria@yandex.ru*

1. Введение

Газовые сенсоры применяются в химической и нефтехимической промышленности, в полупроводниковом производстве, сельском хозяйстве и машиностроении – практически везде, где требуется контроль и анализ газового состава атмосферы. Обычно газовые сенсоры преобразуют посредством химических и физических эффектов процессы взаимодействия с газом-реагентом в выходной электрический сигнал при обнаружении воспламеняющихся и взрывчатых веществ, токсичных или вредных газов [1]. В последнее время большинство газовых датчиков представляют собой планарные датчики сопротивления, в которых чувствительные поверхностные материалы в основном являются полупроводниками на основе оксидов металлов [2].

Благодаря большому количеству свободных электронов в зоне проводимости и кислородным вакансиям на их поверхности, такой сенсорный материал обладает сильными адсорбционными характеристиками и высокой реакционной способностью, сильно изменяя число носителей электрического заряда под действием определяемого газа. Именно благодаря такому эффекту измерения концентрации опасных газов можно проводить на основе электрических параметров [3]. Кроме этого материалы на основе оксидов металлов имеют низкую стоимость производства и простые методы получения [4], что и стало основой их использования в различных газоанализаторах.

Однако разнообразие токсичных веществ, различные условия их определения, технологические аспекты изготовления сенсорного материала и

⁴ Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-29-20018, <https://rscf.ru/project/22-29-20018/> при паритетной финансовой поддержке Правительства Республики Хакасии.

связанные с этим ограничения по эксплуатации делают проблему разработки газового датчика сложной задачей, требующей учета многих факторов. При этом подбор материала играет одну из ключевых ролей при разработке системы детекции.

Датчики газа в основном включают полупроводниковые датчики газа, электрохимические датчики газа и контактные датчики дымовых газов, среди которых наиболее перспективными являются полупроводниковые датчики газа. С применением ряда оксидных полупроводников, включая NiO, ZnO, SnO₂ и CdO, исследования оксидов металлов для обнаружения газа стали наиболее популярными. Окислительный полупроводник относится к полупроводнику, проводимость которого увеличивается в окислительной атмосфере, относясь к полупроводнику p-типа. Восстановительный полупроводник относится к полупроводнику, проводимость которого увеличивается в восстановительной атмосфере, относясь к полупроводнику n-типа.

С помощью измерения электрического сопротивления можно получить достаточно много информации об исследуемом материале. В простейшем случае сопротивление материала является мерой концентрации носителей электрического заряда и для его определения достаточно воспользоваться элементарным омметром. В других случаях используется принцип изменяемого сопротивления, т.е. взаимодействие сенсора с окружением приводит к изменению электрического сопротивления реагирующего слоя, которое затем и измеряется.

2. Компьютерный анализ различных механизмов проводимости

При моделировании сенсорных свойств в качестве рабочего слоя был использован диоксид олова SnO₂. SnO₂ из-за наличия кислородных вакансий в кристаллической решетке является полупроводником с проводимостью n-типа и шириной запрещенной зоны в 3,5 эВ [5]. Проводимость соединения между наночастицами напрямую зависит от толщины поверхностного слоя λ и именно на этом эффекте основан принцип действия газо-чувствительного сенсора.

Степень изменения проводимости из-за взаимодействия с реагирующим газом в значительной мере определяется размерами наночастиц, что и было впервые показано Ямазое в [6]. Далее будут представлены основные возможные механизмы проводимости и проведен их компьютерный анализ по отношению к некоторым экспериментальным параметрам.

Прежде всего, изучим влияние размера частиц на чувствительность сенсора, исходя из наличия одного контакта между ними, который может быть либо в виде закрытого канала (контакт Шоттки), либо в виде открытого канала. Эти каналы, в зависимости от размера частиц и концентрации определяемого газа, могут быть полностью обеднены свободными носителями заряда, переводя частицы из проводящего состояния в изолированное. С уменьшением размера используемых частиц можно ожидать повышение восприимчивости сенсора.

Термоионная эмиссия. Перемещение заряда через барьер Шоттки (переход без прямого соединения наночастиц) происходит, в основном, при помощи термоионной эмиссии [7]. Кроме этого, преодоление данного барьера возможно на основе квантово-механического туннелирования, которое наступает в случае сильно дотированного материала [8] и в предлагаемой работе не учитывается.

Приближение Шоттки дает связь между степенью покрытия поверхности абсорбированным кислородом и высотой образующегося энергетического барьера. В случае термоионной эмиссии плотность тока находится по следующему выражению [7, 8]:

$$\begin{aligned}
 j &= q \cdot n_b \sqrt{\frac{k_B \cdot T}{2\pi m_n}} \exp\left(-\frac{q \cdot V_B}{k_B \cdot T}\right) \cdot \left[\exp\left(\frac{q \cdot V_a}{k_B \cdot T}\right) - 1\right] = \\
 &= q^2 \cdot n_b \sqrt{\frac{1}{2\pi m_n k_B T}} \exp\left(-\frac{q \cdot V_B}{k_B \cdot T}\right) \cdot V_a .
 \end{aligned} \tag{1}$$

При выводе формулы (1) было учтено, что $q \cdot V_a \ll k_B \cdot T$. Через n_b обозначена концентрация свободных электронов в объемном материале, через m_n – масса электрона, а V_a обозначает внешнее напряжение на переходе между двумя наночастицами, которое приближенно можно рассчитать как

произведение напряжения электрического поля E на расстояние L между центрами частиц.

Для таких контактов справедлив закон Ома $j = \sigma \cdot E$, где σ является проводимостью. Ток, протекающий через контакт, рассчитывают как

$$I_{GB} = A_{GB} \cdot \sigma \cdot \frac{V_a}{L},$$

где $A_{GB} = \pi \cdot D_N^2 / 4$ представляет величину площади контакта. Исходя из этого, в работе [7] было получено окончательное выражение для электрического сопротивления барьера Шоттки

$$R_{GB} = \frac{L}{A_{GB} \cdot \sigma} = \frac{\sqrt{2\pi m_n k_B T}}{A_{GB} \cdot q^2 \cdot n_b} \exp\left(\frac{q \cdot V_B}{k_B \cdot T}\right). \quad (2)$$

Сопротивление контакта Шоттки зависит, прежде всего, от площади соприкосновения частиц и высоты потенциального барьера. Проведенный далее компьютерный анализ показал, что сопротивление контакта Шоттки увеличивается с уменьшением площади контакта, однако при расчете чувствительности сенсора $S = R_{gas} / R_0$ не было замечено ни каких изменений с уменьшением размера моделируемых частиц и, следовательно, уменьшением площади контакта.

Проводящие контакты. Если диаметры частиц D_p больше удвоенной толщины обедненной зоны и хорошо соединены между собой, что в случае наночастиц малого размера является нормальным, то между частицами возникает проводящий контакт и внутренние области частиц с постоянной электронной плотностью n_b образуют проводящий канал. Сечение канала непосредственно в месте контакта можно аппроксимировать кругом с диаметром $D_b = D_N - 2 \cdot \lambda$. Вокруг данной области наблюдается обедненная зона с внешним диаметром D_N и внутренним D_b .

Ванг [7] и Ямазое [8] рассчитали проводимость контакта при предположении, что величина площади контакта остается постоянной. С учетом этого протекающий через контакт ток вычисляется по формуле

$$I_N = \pi \left(\frac{D_N}{2} - \lambda \right)^2 q \mu_b n_b E_N + \pi \left[\left(\frac{D_N}{2} \right)^2 - \left(\frac{D_N}{2} - \lambda \right)^2 \right] q \mu_d n_d E_N, \quad (3)$$

где q обозначает элементарный заряд, μ – подвижность электронов, n – соответствующую их плотность и E_N – напряжение электрического поля в месте соединения частиц ($E_N \approx V_n \cdot L$).

Сопротивление контакта определяется тогда по следующему соотношению

$$R_N = \frac{V_N}{I_N} = \frac{L}{q \pi \left[n_b \mu_b \left(\frac{D_N}{2} - \lambda \right)^2 + n_d \mu_d \left(\left(\frac{D_N}{2} \right)^2 - \left(\frac{D_N}{2} - \lambda \right)^2 \right) \right]}. \quad (4)$$

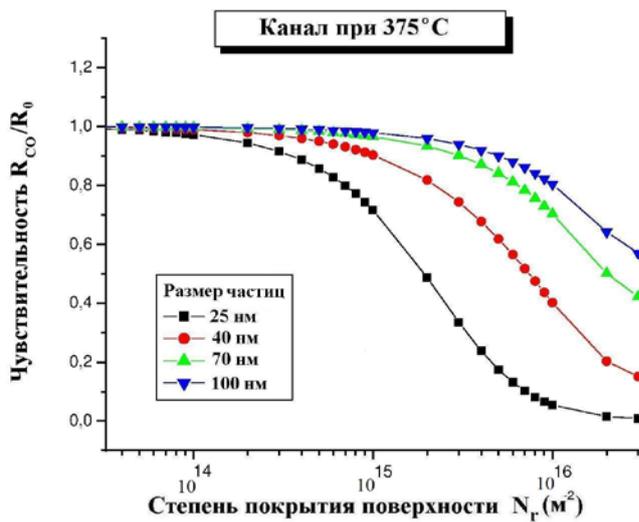


Рис. 1. Изменение чувствительности S типичного открытого канала между частицами в зависимости от степени абсорбции газовых молекул N_r при $\alpha = 0,8$.

На основе приведенных формул можно описать контакты только с открытым каналом. В случае открытого канала его сечение линейно зависит от размера частицы $d_N = \alpha \cdot d_G$, и решающую роль в газомодулированной чувствительности сенсора будет играть ширина канала. Для расчетов были использованы следующие значения: $N_D = n_b =$

$$3,5 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3}, \mu = 75 \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}, N_o^0 = 3,5 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-2} [7].$$

Из полученных результатов ($\alpha = 0,8$) можно видеть, что для частиц с размером менее 40 нм или сечением канала менее 30 нм, сопротивление канала сильно увеличивается с соответствующим улучшением чувствительности сенсора (рис. 1). Проведенные далее исследования при $\alpha = 0,5$ показывают повышенную чувствительность рабочего слоя (рис. 2). Сопротивление понижается при сечении канала в 56 нм и концентрации газа реагента $N_r = 8 \cdot 10^{15} \text{ м}^{-2}$ примерно до 0,8. Аналогичное понижение сопротивления при $\alpha = 0,5$

может быть достигнуто уже при степени покрытия поверхности сенсора $N_r = 7 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$, если ширина канала понижается до 20 нм.

Контакт Шоттки из-за экспоненциальной связи между проводимостью и толщиной поверхностного слоя (формула 2) показывает очень сильное изменение проводимости в зависимости от степени покрытия поверхности N_r химически абсорбируемым определяемым газом. С учетом формулы (2) сенсорная чувствительность, определяемая как $S = R(0)/R(N_r)$, оказывается принципиально независимой от размера используемых наночастиц. Однако в случае открытого канала размерные эффекты уже имеют место. Так при среднем размере частиц $D_p = 50 \text{ нм}$ чувствительность достигает значения равного четырем, в то время как при $D_p = 30 \text{ нм}$ практически на порядок превышает данное значение ($S = 36$).

Поликристаллические слои состоят из большого числа частиц самой разной величины. Использование различных экспериментальных методик позволяет влиять на виды контакта между частицами с различным диаметром

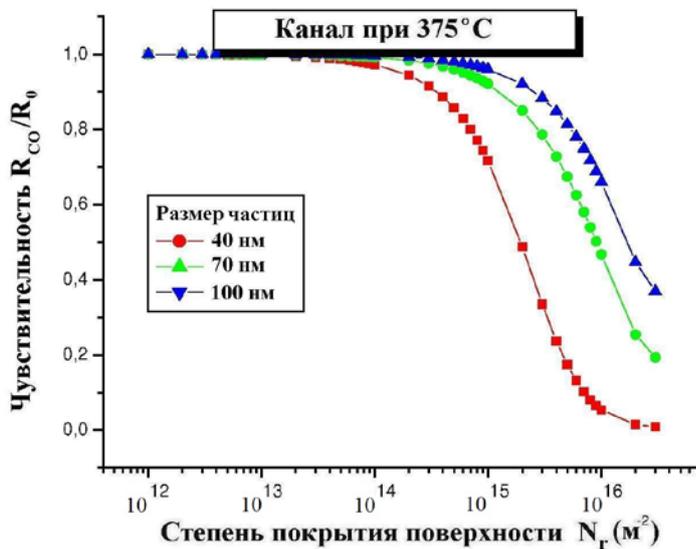


Рис. 2. Изменение чувствительности S типичного открытого канала между частицами в зависимости от степени абсорбции газовых молекул N_r при $\alpha = 0,5$.

рабочего слоя сенсора при уменьшении используемых частиц или площади контакта между ними.

контакта. На основе проведенного моделирования с использованием модели контакта только между двумя частицами уже можно сделать вывод, что понижение площади контакта между частицами SnO_2 менее 30 нм может существенно улучшить восприимчивость сенсора к опасным газам. Таким образом, проведенные расчеты подтверждают предположение об улучшении чувствительности

На основе сокращения площади контакта, заметного изменения сопротивления можно достичь при меньшей концентрации определяемого газа. При размере частиц в 40 нм обеднение данной частицы свободными носителями заряда существенно повышает сопротивление рабочего слоя. Частицы такого размера можно рассматривать как своего рода канал (открытый или закрытый) между частицами большего размера. Показанное при расчетах улучшение чувствительности позволяет сделать некоторые прогнозы по построению более качественных сенсоров. Для этого необходимо использовать при создании рабочего слоя значительную фракцию частиц с размерами от 20 до 40 нм. Сформированные на этой основе каналы будут иметь очень малые размеры и могут легко перейти из изолированного состояния в проводящее даже при небольшой концентрации газа реагента, существенно улучшая показатели такого сенсорного устройства.

3. Заключение

В данной работе была исследована проводимость метало-оксидной SnO_2 пленки обусловленная взаимодействием определяемого газа (CO) с поверхностью данного слоя. Для этого на основе моделей химических реакций между газом реагентом и поверхностью полупроводниковой пленки была предложена модель для вычисления проводимости между двумя соединенными в результате технологического процесса частицами. Области с высокой плотностью свободных носителей заряда между частицами образуют каналы, которые в зависимости от концентрации определяемого газа могут находиться в проводящем или изолированном состоянии. Было показано, что уменьшение сечения такого канала должно приводить к повышению чувствительности сенсора. Полученные результаты находятся в согласии с экспериментальными работами, где было показано, что чувствительность сенсора на основе SnO_2 повышается с ростом доли частиц с размерами между 20 и 40 нм по отношению к сенсору построенному на основе 50 нм частиц. Другой возможностью

улучшения чувствительности сенсора может быть увеличение степени пористости нанокристаллической пленки.

Список литературы

1. Zhou, Q., Zeng, W., Chen, W. G., Xu, L. N., Kumar, R., and Umar, A. (2019). High sensitive and low-concentration sulfur dioxide (SO₂) gas sensor application of heterostructure NiO-ZnO nanodisks. *Sens. Actuat. B Chem.* 298, 126870–126876. doi: 10.1016/j.snb.2019.126870
2. Jeong, H. I., Park, S., Yang, H. I., and Choi, W. (2019). Electrical properties of MoSe₂ metal-oxide-semiconductor capacitors. *Mater. Lett.* 253, 209–212. doi: 10.1016/j.matlet.2019.06.072
3. Rabee, A. S. H., Hameed, M. F. O., Heikal, A. M., and Obayya, S. S. A. (2019). Highly sensitive photonic crystal fiber gas sensor. *Optik* 188, 78–86. doi: 10.1016/j.ijleo.2019.05.044
4. Wang, Y. R., Ma, S. H., Wang, L. F., and Jiao, Z. Y. (2019). A novel highly selective and sensitive NH₃ gas sensor based on monolayer Hf₂CO₂. *Appl. Surf. Sci.* 492, 116–124. doi: 10.1016/j.apsusc.2019.06.212
5. Robertson, J. Electronic structures of SnO₂, GeO₂, PdO₂, TeO₂ and MgF₂. / J. Robertson // *J. Phys. C.* – 1979. – 12. – P. 4767.
6. Xu, C. Grain size effects on gas sensitivity of porous SnO₂-based elements. / C. Xu, J. Tamaki, N. Miura, N. Yamazoe // *Sensors and Actuators.* – 1991. – B3. – P. 147-155.
7. Wang, X. Transition between neck-controlled and grain-boundary-controlled sensitivity of metal-oxide gas sensors. / X. Wang, S.S. Yee, W.P Carey // *Sensors and Actuators.* – 1995. – B24-25. – P. 454-457.
8. Sze, S.M. *Physics of semiconductor devices.* / S.M. Sze - New York: Wiley, 1981. – 382 p.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПЕРКОЛЯЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ГАЗОВЫХ СЕНСОРОВ⁵

Д.А. Рыжкова¹, Ю.Я. Гафнер, И.С. Бекешева

Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова,

¹*bashkova.daria@yandex.ru*

1. Введение

Современная индустрия с каждым годом наращивает количество технологических процессов с использованием химических веществ повышенной опасности. Газовые сенсоры способны обнаруживать наличие токсичных или взрывоопасных веществ, что позволяет избежать потенциальных нежелательных последствий для работающих в зоне риска людей [1]. В последние десятилетия в качестве активных элементов для газовых сенсоров стали использовать различные наноматериалы. Так как основой механизма чувствительности являются химические реакции между активной поверхностью сенсора и газовыми молекулами, то наиболее востребованными являются материалы с большим соотношением поверхности к объему и с большой степенью пористости [2-6], то есть наноразмерные.

Наноразмерные структуры, которые часто исследуются в качестве сенсорного материала на основе оксидов металлов, включают в себя нанопроволоки, нановолокна, наноленты, наностержни, нанотрубки, нитевидные нанокристаллы, наноиглы и иерархические дендриты. Кроме исследования морфологии и размеров наноструктур большое внимание уделяется вопросу повышения селективности полупроводниковых наноматериалов к определяемому газу на фоне других газов.

Для повышения селективности в настоящее время можно выделить два параллельно развивающихся подхода. Первый заключается в создании гетеропереходов в композитных наноматериалах. Контакт двух и более

⁵ Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-29-20018, <https://rscf.ru/project/22-29-20018/> при паритетной финансовой поддержке Правительства Республики Хакасии.

полупроводников приводит к образованию энергических ям для носителей проводимости, что ведет к целому ряду эффектов при контакте с атмосферой: изменение потенциалов на границе раздела фаз; разделение носителей заряда; уменьшение энергии активации реакций, протекающих на поверхности. Вторым подходом заключается в создании гибридных материалов путем смешивания полимерных материалов с оксидами металлов [1].

С одной стороны, неорганические материалы обладают термической и химической стабильностью, с другой стороны, современные технологии органического синтеза позволяют создавать разнообразные мономеры с различными функциональными группами, открывая возможность молекулярного моделирования для создания специфических центров связывания с определяемыми молекулами газа.

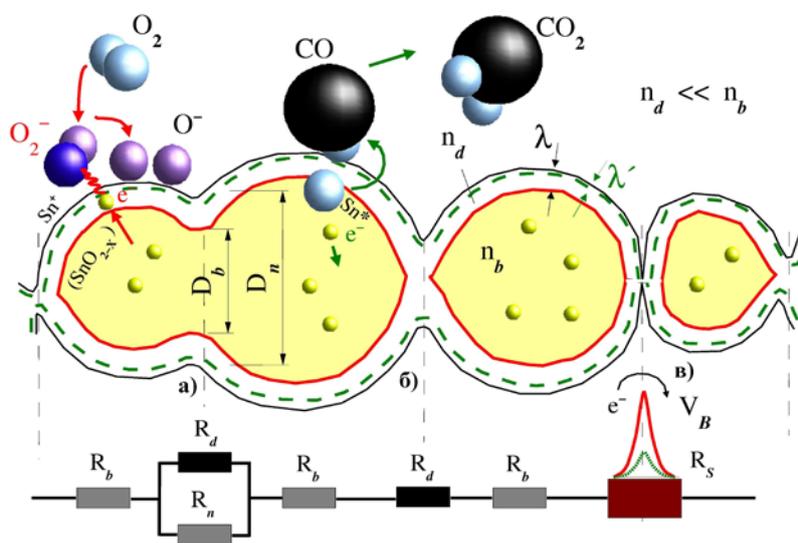
2. Перколяционный подход

Систематические изучения связи между размером частиц и их проводимостью при взаимодействии с реагирующим газом были проведены Ямаэ [7], которым для случая n - проводящих нанокристаллических материалов было показано, что их проводимость в зависимости от концентрации газа сильно увеличивается с уменьшением размера частиц. На основе проведенных далее исследований был сделан вывод о том, что в наноматериале должно наблюдаться большое число проводящих и соединенных между собой каналов. Такой вывод сразу приводит к перколяционной задаче [8,9] и при таком подходе необходимо учитывать реальное строение структуры, а именно: вид соединения наночастиц, их размер и степень пористости [10,11].

Некоторое число теоретических работ было посвящено перколяционному подходу для описания смешанных систем из n - и p - проводников [12-14]. Однако во всех проведенных ранее исследованиях считалось, что рассматриваемая система находится выше порога протекания. Количественные расчеты газ-индуцированной проводимости при компьютерном моделировании также были ограничены рассмотрением одного единственного контакта между частицами, который и должен был описывать поведение всего материала в целом [13]. При

таким рассмотрением изначально предполагалось, что каждая частица и, следовательно, каждый контакт являются проводящими. Такой подход все же нельзя считать физически корректным, так как реальные системы обладают набором самых разных контактов с различной степенью соединения и различным сечением. При расчете проводимости сети из контактов между частицами необходимо проводить усреднение по проводимости контактов разного вида, что и ведет к перколяционным эффектам.

Будут ли они наблюдаться или нет, сильно зависит от электронной плотности и размера частиц. Если рассматривать частицы с размерами в области от 20 до 70



нм, связанные в плотную трехмерную структуру, то в этом случае перколяционные эффекты большой роли не играют, так как все частицы будут проводящими и с большим числом ближайших соседей.

Кроме этого часто при построении сенсоров используют пальчиковые

электроды, которые по своей конструкции имеют большую ширину (несколько мм) и

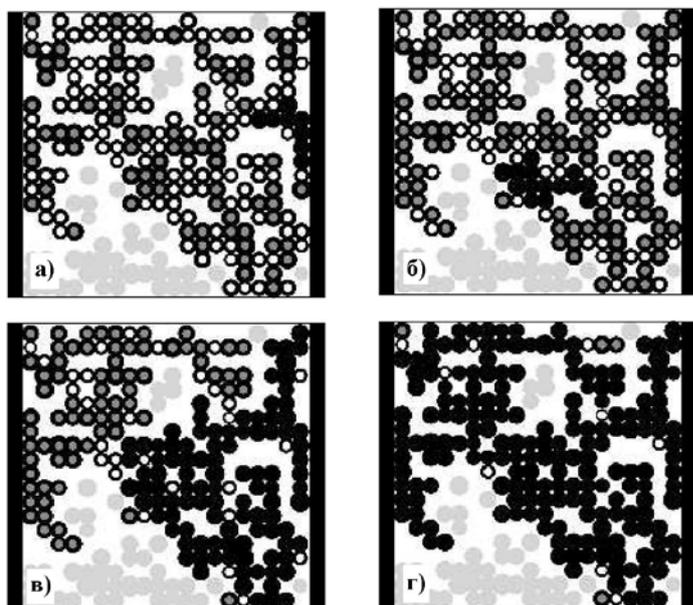
Рис. 1. Возможный вид соединения наночастиц:
а) открытый канал; б) закрытый канал; в) двойной контакт Шоттки.

одновременно очень малое расстояние между собой [15]. Использование таких электродов сильно понижает порог протекания. Он может быть настолько мал, что система, несмотря на малые размеры частиц, приводящие к большому их количеству в изолированном состоянии, будет находиться выше порога перколяции и перколяционный переход становится в принципе невозможен.

3. Проводимость нанопленки SnO_2

Поликристаллические слои состоят из большого числа частиц самой разной величины. Использование различных экспериментальных методик позволяет влиять на виды контакта между частицами с различным диаметром контакта. На основе проведенного моделирования с использованием модели контакта только между двумя частицами можно сделать вывод, что понижение площади контакта между частицами SnO_2 менее 30 нм может существенно улучшить восприимчивость сенсора к опасным газам. Таким образом, расчеты подтверждают предположение об улучшении чувствительности рабочего слоя сенсора при уменьшении используемых частиц или площади контакта между ними.

На основе сокращения площади контакта, заметного изменения сопротивления можно достичь при меньшей концентрации определяемого газа. При размере частиц в 40 нм обеднение данной частицы свободными носителями заряда существенно повышает сопротивление рабочего слоя. Частицы такого



размера можно рассматривать как своего рода канал (открытый или закрытый) между частицами большего размера. Показанное при расчетах улучшение чувствительности позволяет сделать некоторые прогнозы по построению более качественных сенсоров. Для этого необходимо использовать

при создании рабочего слоя значительную фракцию частиц с размерами от 20 до

Рис. 2. Система из металлооксидных наночастиц. Черным цветом обозначены соединенные между собой частицы, формирующие общий проводящий кластер; темно-серым – проводящие частицы, относящиеся к изолированному кластеру.

40 нм. Сформированные на этой основе каналы будут иметь очень малые размеры и могут легко перейти из

изолированного состояния в проводящее даже при небольшой концентрации газа реагента, существенно улучшая показатели такого сенсорного устройства.

Если величина сечения частицы лежит в области удвоенной дебаевской длины, то при определенных обстоятельствах открытый канал может уже и не образоваться (рис. 1). В этом случае сопротивление определяется сопротивлением обедненного слоя расположенного перпендикулярно к оси соединяющей центры обеих частиц. Если размеры частиц менее удвоенной дебаевской длины, то, строго говоря, эффект смещения энергетических зон уже не наблюдается и плотность электронов во всем объеме наночастицы становится равномерной со значением n_d . Химическая абсорбция газа реагента приводит лишь к равномерному увеличению этой плотности.

На поверхности частицы электроны проводимости захватываются молекулами кислорода, что приводит к их ионизации и локализации на поверхности ($O_2 + e^- \rightarrow O_{2(ad)}^-$). Захваченные электроны более не способны участвовать в транспортных процессах и в отдельных случаях вся частица оказывается в таком, обедненном носителями зарядов состоянии, что обозначает ее изолированное состояние [16]. По этой причине сопротивление всей рассматриваемой системы в значительной мере определяется тем, сколько еще проводящих контактов в ней существует. Вероятность встретить частицу в проводящем состоянии сильно зависит от объема частицы и площади поверхности, непосредственно соприкасающейся с окружающей атмосферой. Согласно теории перколяции в сети из участков с различным значением сопротивления должно существовать некое критическое число проводящих контактов для образования хотя бы единственного, проводящего пути в этой системе. При этом порог протекания будет сильно зависеть от вида кристаллической решетки, ее размерности и координационного числа.

Рис. 2 наглядно показывает перколяционный эффект на двухмерной решетке из соединенных металлооксидных частиц. Основой для проводящей сети является наличие геометрического кластера из соединений между частицами соединяющего оба электрода. В чистой, воздушной атмосфере существует так много частиц в изолированном состоянии, так что соединяющий

противоположные стороны системы проводящий кластер попросту отсутствует. С увеличением степени абсорбции газа реагента, к примеру CO, электроны из поверхностного слоя высвобождаются и возвращаются в глубь частицы, что может привести к спонтанному переходу частицы из изолированного в проводящее состояние. На основе таких переходов возможен рост общего, проводящего кластера системы (обозначен черным цветом).

При достижении критического значения степени абсорбции реагирующего газа, образуется соединяющий обе противоположные стороны системы кластер из проводящих наночастиц. С еще большим увеличением степени абсорбции величина проводящего кластера начинает стремительно увеличиваться. Из-за такого возрастания величины проводящего кластера дополнительно к изменению проводимости отдельных контактов между наночастицами наблюдается значительное изменение проводимости уже всей системы.

4. Заключение

Для создания безопасных производственных процессов и бытовых условий часто необходимо контролировать концентрацию некоторых газов и летучих соединений. Таким образом, имеется большая потребность в системах способных четко определять наличие токсичных, взрывоопасных и других нежелательных газов. В последние годы рынок таких систем значительно вырос, что еще раз подтверждает их индустриальную значимость. Для детектирования газов созданы сенсоры самых разных видов: резисторные, оптические, термические, калориметрические, диэлектрические и т.д. Одним из наиболее широко распространенных типов сенсора является резисторный сенсор на основе металлооксидных соединений. Такие сенсоры отличаются высокой чувствительностью, прочностью, малыми размерами и массой и достаточно просты в производстве.

Проведенные ранее исследования показали, что морфология рабочего слоя оказывает значительное воздействие на характеристики сенсора. Уменьшение среднего размера используемых частиц и плотности размещения должны приводить к повышенной чувствительности сенсора из-за увеличения

соотношения поверхности к объему. Такой сенсор при концентрации газа ниже пороговой принципиально не может обладать проводимостью и может быть рассмотрен как обычный изолятор. Выше пороговой концентрации на основе перколяционных эффектов проводимость повышается в более значительной степени, чем при отсутствии таких эффектов. Таким образом, сенсор выше порога протекания оказывается более чувствительным, чем сенсор, построенный без перколяционных свойств. Порог протекания, соответствующий критической концентрации определяемого газа, можно контролировать с помощью среднего размера используемых частиц и с помощью степени пористости пленки. Оба данных параметра поддаются изменению и в случае прямых экспериментов.

Предложенные идеи могут быть использованы при проектировании сенсорных устройств нового поколения. Кроме использования идеи порога протекания для отдельных сенсоров имеется также возможность соединения многих сенсорных элементов, возможно даже на одной сенсорной заготовке, параллельно в единую мультисенсорную систему. При этом отдельные элементы должны иметь свой порог перколяции. В качестве сенсорного сигнала будет служить сопротивление отдельных элементов находящихся в проводящем состоянии, которое определяется концентрацией газа реагента.

Список литературы

1. Чаплыгин, Ю.А. Нанотехнологии в электронике. / Ю.А. Чаплыгин - Москва: Техносфера, 2015.- 476 с.
2. Gruendler, P. Chemische Sensoren. / P. Gruendler - Berlin: Springer, 2004. - 295 p.
3. Baldini, F. Optical Chemical Sensors. / F. Baldini - Dordrecht: Springer, 2006.- 535 p.
4. Yong, Y. Ag₇Au₆ Cluster as a Potential Gas Sensor for CO, HCN, and NO Detection./ Y. Yong, C. Li, X. Li, T. Li, H. Cui, and Sh. Lv // J. Phys. Chem. C. – 2015. - V.119. - P.7534-7540.
5. Qin, Y. Hierarchically Porous CuO Hollow Spheres Fabricated via a One-Pot Template-Free Method for High-Performance Gas Sensors. / Y. Qin, F. Zhang, Y. Chen, Y. Zhou, J. Li, A. Zhu, Y. Luo, Y. Tian, and J. Yang // J. Phys. Chem. C. – 2012. - V.116. - P.11994-12000.

6. Dittrich, Th. Thermal activation of the electronic transport in porous titanium dioxides. / Th. Dittrich, J. Weidmann, V.Yu. Timoshenko, A.A. Petrov, F. Koch, M.G. Lisachenko, E. Lebedev // *Material Science and Engineering B*. – 2000. – 69-70. – P. 489-493.
7. Xu, C. Grain size effects on gas sensitivity of porous SnO₂-based elements. / C. Xu, J. Tamaki, N. Miura, N. Yamazoe // *Sensors and Actuators*. – 1991. – B3. – P. 147-155.
8. Kohl, D. Multisensor system for partial pressure ratios of gas species. / D. Kohl, J. Kelleter // *Sensors and Actuators*. – 1996. – B33. – P. 134-136.
9. Göpel, W. Ultimate limits in the miniaturization of chemical sensors. / W. Göpel // *Sensors and Actuators*. – 1996. – A56. – P. 83-102.
10. Schierbaum, K.D. Conductance, work function and catalytic activity of SnO₂ - based gas sensors. / K.D. Schierbaum, U. Weimar and W. Göpel // *Sensors and Actuators*. – 1991. – B3. – P. 205-212.
11. Göpel, W. SnO₂ sensors: current status and future prospects. / W. Göpel, K.D. Schierbaum // *Sensors and Actuators*. – 1995. – B26. – P. 1-12.
12. Savage, N. Composite p-n semiconducting titanium oxides as gas sensors. / N. Savage, B. Chwieroth, A. Ginwalla, B.R. Patton, Sh.A. Akbar, P.K. Dutta // *Sensors and Actuators*. – 2001. – B79. – P. 17-27.
13. Kosemba, I. The properties of strongly pressed tin oxide-based gas sensors. / I. Kosemba, S. Szafran, J. Rynkowski, T. Pajczak // *Sensors and Actuators*. – 2001. – B79. – P. 28-32.
14. Yoon, D.H. CO gas sensing properties of ZnO-CuO composite. / D.H. Yoon, J.H. Yu, G.M. Choi // *Sensors and Actuators*. – 1998. – B46. – P. 15-23.
15. Fleischer, M. Selectivity in high-temperature operated semiconductor gas-sensors. / M. Fleischer, H. Meixner // *Sensors and Actuators*. – 1998. – B52. – P. 179-187.
16. Williams, D.E. Microstructure effects on the response of gas-sensitive resistors based on semiconducting oxides. / D.E. Williams, K.F.E. Pratt // *Sensors and Actuators*. – 2000. – B70. – P. 214-221.

ЯЧЕЙКИ ФАЗОИНВЕРСНОЙ ПАМЯТИ НА ОСНОВЕ БИНАРНЫХ НАНОЧАСТИЦ Ag-Au⁶

Д.А. Рыжкова¹, А.А. Череповская, М.Н. Наразин

Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова,

¹*bashkova.daria@yandex.ru*

1. Введение

Память с изменением фазового состояния носителя (phase change memory – PCM), достаточно хорошо поддающаяся масштабированию в нанометровом диапазоне, является одним из кандидатов на роль универсальной энергонезависимой памяти [1]. Элементарная PCM ячейка представляет собой небольшой объем активного материала, помещенный между двумя электродами: верхним контактом и резистивным нагревателем. В основе технологии лежит обратимый фазовый переход, который сопровождается значительным изменением электрических и оптических свойств материала [2]. В аморфном состоянии материал характеризуется высоким сопротивлением и низким оптическим коэффициентом отражения, а кристаллическая фаза, наоборот – низким электрическим сопротивлением и высоким оптическим коэффициентом отражения.

Работа PCM устройств реализуется путем подачи импульса тока различной длительности и амплитуды (за счет эффекта джоулевого нагрева). Операция SET связана с переводом материала в поликристаллическое состояние (логическая «1»). Для этого к активному слою ячейки прикладывается импульс тока, нагревающий его выше температуры кристаллизации, но меньше температуры плавления. Затем реализуется относительно плавный отвод тепла в окружающие холодные слои. Операция RESET заключается в переводе PCM материала в аморфное состояние (логический «0»), для чего используется интенсивный короткий импульс тока, позволяющий нагреть активный слой выше температуры

⁶ Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-29-10011, <https://rscf.ru/project/23-29-10011/> при паритетной финансовой поддержке Правительства Республики Хакасия.

плавления. А для фиксации разупорядоченной структуры производится интенсивное охлаждение. Следует сказать, что аморфная фаза представляет собой термодинамически нестабильное стекло, однако время его кристаллизации при комнатной температуре очень велико. Считывание информации происходит путем измерения сопротивления ячейки [3].

В настоящее время в качестве активного слоя устройств фазоинверсной памяти используется несколько групп материалов: соединения на основе германия, сурьмы и теллура; соединения типа Sb-Te, в том числе легированные; а также In_2Sb_3 и $\text{Sb}_x\text{Se}_{1-x}$. Однако при эксплуатации данных материалов возникает ряд трудностей, связанных, например, с самопроизвольным переключением из аморфного состояния в кристаллическое. Минимизировать подобные негативные явления можно несколькими способами. Первый связан с разработкой новой архитектуры устройств. Вторая – с поиском оптимальной композиции фазоинверсного материала, подбором примесей. Третья – с использованием гетероструктур и т.д.

Таким образом, актуальной остается проблема поиска альтернативных материалов для РСМ устройств. Причем, не всякий материал, обладающий ярко выраженным различием в свойствах кристаллической и аморфной фаз может быть использован в устройствах хранения данных. Критическим в этом случае являются скорость фазового перехода и его стабильность.

Из широкого ряда химических соединений, которые теоретически можно использовать в РСМ устройствах, выделяют металлические наночастицы. Это обусловлено относительно низкой стоимостью их синтеза и высокой вероятностью получения требуемого размерного распределения. Анализ применимости таких частиц связан с необходимостью понимания механизмов переключения между стабильными структурными состояниями, кинетики кристаллизации, что напрямую сопряжено с изучением фундаментальных термических свойств кристаллической и аморфной фаз. Кроме того, помимо химически чистых металлов, можно использовать различные сплавы. Поиск оптимальной конфигурации таких составов является отдельной задачей, так как

даже незначительной добавление примеси может оказывать существенное влияние на процессы структурообразования наночастиц.

2. Компьютерная модель

Исследование нанометровых объектов экспериментальными методами не всегда является целесообразным, как ввиду высокой стоимости, так и из-за проблем, связанных с минимизацией воздействия на образец. Выходом в такой ситуации является применение методов компьютерного моделирования.

В данной работе использовался метод молекулярной динамики, в основе которого лежит расчет классических (ньютоновских) траекторий движения объекта в фазовом пространстве координат и импульсов его атомов. Данный метод позволяет достаточно хорошо отследить динамику наночастиц при воздействии внешних факторов (давление, температура и т.д.), определить структурные и термодинамические свойства нанокластеров.

Силы межатомного взаимодействия вычислялись на основе модифицированного потенциала сильной связи TB-SMA [4], который основан на предположении, что большая группа свойств переходных металлов может быть полностью определена из плотности состояний внешних d-электронов. Температура системы определялась посредством средней кинетической энергии атомов, которая рассчитывалась при помощи скоростного алгоритма Верле с шагом по времени $h = 1$ фс.

В качестве начальных объектов были использованы сферические ГЦК кластеры, получаемые при вырезании из идеальной кристаллической решетки Ag, в которых часть атомов серебра была случайным образом заменена атомами золота в интересующем нас процентном соотношении (от 10% до 50%). Диаметр наночастиц варьировался в диапазоне от 2 до 8 нм. Моделирование нагрева происходило в рамках термостата Нозе. Процесс нагрева каждого кластера начинался с релаксации исходной кристаллической фазы при начальной температуре, далее подвод термической энергии происходил до полного разрушения дальнего порядка в наночастице.

На следующем этапе моделирования для определения минимального размера нанокластера, имеющего четкое различие в аморфной и кристаллической структуре при разных темпах отвода тепловой энергии, с использованием термостата Андерсена моделировалось плавное охлаждение нанокластеров Ag-Au разного химического состава из жидкой фазы до комнатной температуры с некоторыми фиксированными скоростями, которые соответствовали темпам отвода тепловой энергии $\Delta T/\Delta t = 30 \cdot 10^{11}$, $12 \cdot 10^{11}$ и $5 \cdot 10^{11}$ К/с.

Моделирование проводилось при помощи компьютерной программы MDNTP, разработанной Dr. Ralf Meyer, University Duisburg Germany. Структурные переходы и внутреннее строение наночастиц определялись при помощи визуализатора OVITO [5] и функции радиального распределения.

3. Результаты и обсуждения

Одним из ключевых компонентов работоспособности устройств фазоинверсной памяти является наличие стабильного структурного перехода между аморфной и кристаллическими фазами в зависимости от условий охлаждения системы. В данной работе рассматривались три темпа отвода тепловой энергии ($\Delta T/\Delta t = 30 \cdot 10^{11}$, $12 \cdot 10^{11}$ и $5 \cdot 10^{11}$ К/с), которые соответствовали времени охлаждения 0,5; 1,5; 2,5 нс. Результаты моделирования представлены на рисунке 1. Вероятность реализации структуры означает, что данным строением обладают М отдельных кластеров из N наночастиц рассматриваемого ансамбля.

Анализируя результаты моделирования можно увидеть сильное влияние кинетических факторов на процесс структурообразования. При увеличении интенсивности охлаждения с $\Delta T/\Delta t = 5 \cdot 10^{11}$ К/с до $30 \cdot 10^{11}$ К/с заметно снижается вероятность реализации кристаллической фазы. На этот процесс также оказывает влияние химическая композиция наночастицы.

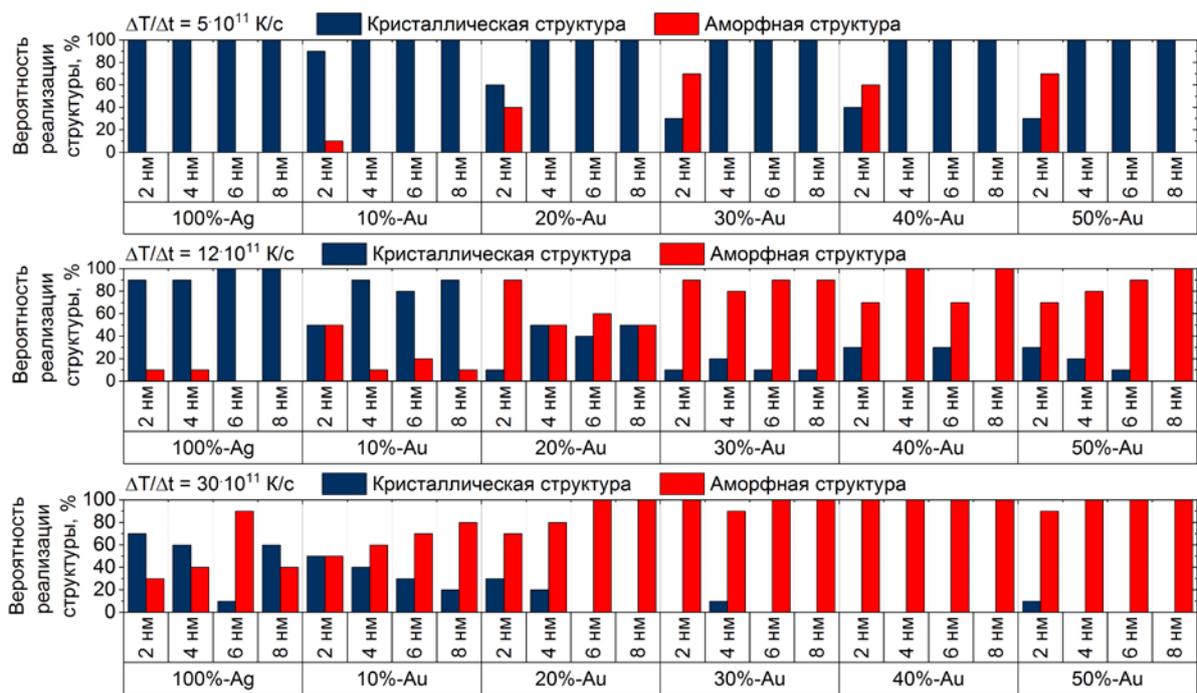


Рис. 1. Вероятность реализации аморфных и кристаллических структур нанокластеров Ag-Au в зависимости от темпа теплоотвода и размера наночастицы.

Данные предыдущего моделирования для чистых нанокластеров Ag [6] говорили о затруднённом формировании аморфной фазы: даже при $\Delta T/\Delta t = 30 \cdot 10^{11}$ K/c максимум реализации данной морфологии (90%) достигался при диаметре частицы 6,0 нм, а затем снижался. Добавление в состав золота позволяло стабилизировать данный процесс. Причем, при $\Delta T/\Delta t = 5 \cdot 10^{11}$ K/c увеличение концентрации примеси оказывало влияние только на малые нанокластеры Ag-Au диаметром 2,0 нм. Доля аморфной фазы увеличивалась с 10% до 70% для составов $Ag_{90}Au_{10}$ и $Ag_{50}Au_{50}$ соответственно. При увеличении скорости теплоотвода зависимость распространялась уже на весь размерный диапазон. Так для состава $Ag_{90}Au_{10}$ вероятность реализации аморфной фазы плавно увеличивается от 50% до 80%, а начиная с композиции $Ag_{70}Au_{30}$ находится в пределах 90–100%. Для промежуточного значения $\Delta T/\Delta t = 12 \cdot 10^{11}$ K/c данная зависимость имела несколько неоднородную форму, что было сопряжено со сложностью идентификации конечной структуры, т.к. кристаллические модификации в этом случае часто имели крупные включения

аморфной фазы.

Таким образом можно увидеть, что стабильного переключения между аморфной и кристаллической модификациями удастся достичь при диаметре нанокластеров 4,0 нм и 6,0 нм при содержании золота в составе $\geq 40\%$ и $\geq 20\%$ соответственно, что значительно ниже, чем для наночастиц серебра (10 нм).

4. Заключение

PCM устройства памяти обладают рядом привлекательных свойств: быстротой реализации цикла чтение/запись, энергонезависимостью, хорошей масштабируемостью в нанометровом диапазоне, устойчивостью к радиационному воздействию и т.д. Это способствует расширению возможных практических приложений устройств фазоинверсной памяти. Однако до сих пор открытыми остаются ряд вопросов, связанных с механизмом кристаллизации, электрического транспорта, релаксационных эффектов и т.д. Хотя механизм кристаллизации в PCM устройствах был успешно объяснён в рамках моделей роста кристаллов, но точная роль зародышеобразования не изучалась так широко. В вычислительных приложениях, где для постепенной кристаллизации аморфной области используются маломощные импульсы, распределение температуры PCM может способствовать зарождению ядра в центре аморфной фазы.

Следует сказать, что именно аморфная фаза играет ключевую роль в PCM технологии. Однако, в отличие от кристаллической конфигурации, информацию об аморфной структуре в атомном масштабе гораздо труднее идентифицировать из-за сложности расположения атомов. В этом случае целесообразно использовать, помимо экспериментальных методов, теоретические, такие как компьютерное моделирование.

В данной работе исследовался характер структурообразования наночастиц Ag-Au при вариации темпов охлаждения из жидкой фазы. Было показано, что добавление золота в состав наночастицы позволяет решить проблему воспроизведения аморфного строения, характерную для чистых серебряных

нанокластеров. Благодаря этому, удастся сдвинуть размерную границу стабильного переключения между аморфной и кристаллической фазами с 10 нм (для Ag наночастиц) до 4 нм и 6 нм для Ag-Au нанокластеров (при содержании золота в составе $\geq 40\%$ и $\geq 20\%$ соответственно)

Список литературы

1. Jones, R. O. Rationalizing the dominance of Ge/Sb/Te alloys / R. O. Jones // *Physical Review B*. – 2020. – V. 101. – Art.№ 024103.
2. Le Gallo, M. An overview of phase-change memory device physics / M. Le Gallo, A. Sebastian // *Journal of Physics D: Applied Physics*. – 2020. – V. 53. – № 21. – Art.№ 213002.
3. Navarro, G. Phase-change memory: performance, roles and challenges / G. Navarro, G. Bourgeois, J. Kluge, A. L. Serra, A. Verdy, et al. // 2018 IEEE International Memory Workshop (IMW). – 2018.
4. Cleri F. Tight binding potentials for transition metals and alloys / F. Cleri, V. Rosato // *Physical Review B*. – 1993. – Vol. 48. – P. 22–33.
5. 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. – № 1. – Art. № 015012. – 7 p.
6. Гафнер, Ю. Я. Оценка применимости малых наночастиц серебра в качестве ячеек РСМ памяти / Ю. Я. Гафнер, Д. А. Башкова, С. Л. Гафнер, Л. В. Редель // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2018. – № 10. – С. 219–225.

НЕОДНОРОДНАЯ ТУРБУЛЕНТНОСТЬ В РАМКАХ ПОДХОДА ЛАНДАУ

В.Н.Удодов

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

1. Введение

Проблема турбулентности – одна из фундаментальных проблем современного естествознания [1-19] (подробную библиографию см. в [14-16]). Одни из первых работ были выполнены А.М. Обуховым [10], А.Н. Колмогоровым [11], Л.Д. Ландау [12]. Первые две работы являются статистическими, посвящены развитой турбулентности (при больших или очень больших числах Рейнольдса) и получили дальнейшее развитие [13-16]. Работа Л.Д. Ландау [12, 17, 18] по сути дела является термодинамической, посвящена зарождению турбулентности при малых числах Рейнольдса. Идеи Ландау в области зарождения турбулентности пока дальнейшего развития не получили.

В работе Л.Д. Ландау «К проблеме турбулентности» (1944 г.) рассмотрен переход от ламинарного движения к турбулентному для однородной среды [12, 17, 18]. В [19] развиты идеи Ландау для однородной турбулентности. В данной работе в рамках общей теории фазовых переходов (ФП) Ландау [20-26] рассмотрена неоднородная турбулентность.

2. Теория турбулентности Л.Д. Ландау

Напомним теорию Л.Д. Ландау турбулентности [12, 17, 18]. Существует критическое число Рейнольдса [18]

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

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

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

ламинарное движение устойчиво, в обратном случае ламинарное движение не устойчиво и появляются периодические движения с комплексными частотами [18]

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

где γ_1 – мнимая часть частоты, причем она отрицательна при малых числах Рейнольдса. При $R = R_C$ появляется одна частота, мнимая часть которой обращается в нуль [12, 17, 18]. При $R > R_C$ у этой частоты $\gamma_1 > 0$. Возмущение скорости (отклонение от ламинарного движения), соответствующее этой частоте, имеет вид [18]:

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

где f – некоторая комплексная функция координат, а комплексная амплитуда возмущения скорости для малых времен равна [18]

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

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

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

Это начало разложения в ряд по x [12, 17-19]. В простейшем случае разложение имеет вид [18]

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

где α – постоянная Ландау. Сначала считаем $\alpha > 0$. Можно показать, что в этом случае в пределе бесконечного времени x стремится к [18]

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

Величина γ_1 зависит от R , в простейшем приближении имеем [18]

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

Подставив это в (8), найдем модуль максимальной амплитуды возмущения скорости [18]

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

В случае $\alpha < 0$ разложение (7) принимает вид [18]

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

где α_1 – положительная константа. В стационарном случае

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

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

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

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

Величина γ_1 дается формулой (9). Нижняя ветвь корня соответствует неустойчивому движению [18]. В этом случае есть два критических числа Рейнольдса: одно прежнее R_C и второе R'_C , которое получится, если подкоренное выражение приравнять к нулю

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

Если $R < R'_C$, то устойчиво только ламинарное движение; если $R > R_C$, то устойчиво только решение (13) (верхняя ветвь корня), причем с конечной амплитудой; если $R_C > R > R'_C$, то устойчивы два решения – нулевое (ламинарное) и турбулентное (13) со знаком + перед корнем, причем ламинарное решение метастабильно [18]. Подчеркнем, что рассмотренная теория применима лишь к начальной стадии развития турбулентности.

3. Аналогия

В общей теории ФП Ландау есть параметр порядка (ПП) η [19, 20], который равен нулю в одной фазе (неупорядоченная фаза (НФ)) и отличен от нуля в упорядоченной фазе (УФ). В теории турбулентности Ландау комплексная амплитуда возмущения скорости (5) равна нулю для НФ и не равна нулю при турбулентном движении (УФ). Более того, в теории сверхпроводимости

Гинзбурга-Ландау роль ПП играет комплексная эффективная волновая функция сверхпроводящих электронов [19, 21, 25]. Следовательно, в теории турбулентности Ландау ПП – это амплитуда возмущения скорости

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

квадрат модуля которой обозначен в данной работе за x (см. (6), (13)). Управляющим параметром является число Рейнольдса. Поскольку амплитуда возмущения скорости среды комплексная функция, то ПП для ФП от ламинарного движения к турбулентному является двухкомпонентным [19], так же как в теории сверхпроводимости Гинзбурга-Ландау и в теории сверхтекучести [25].

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

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

Здесь β – критический индекс ПП [20], который в теории турбулентности Ландау равен [19]

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

что совпадает со значением этого индекса в теории Ландау ФП второго рода (2р) [19, 20].

Переход от ламинарного движения к турбулентному при увеличении R при $\alpha > 0$ аналогичен ФП 2р, так как при этом состояние меняется плавно, без скачков.

Случай $\alpha < 0$ соответствует ФП первого рода (ФП 1р). Действительно, при увеличении R от малых значений до R'_C движение среды ламинарно (НФ). В интервале $R_C > R > R'_C$ есть два устойчивых движения: ламинарное и турбулентное, но при медленном увеличении R сначала реализуется ламинарное движение, которое далее скачком перейдет в турбулентное движение (УФ), при

этом ПП испытывает конечный скачок. Наличие метастабильного состояния и конечного скачка состояния при ФП характерно для ФП 1р [20].

Возможен промежуточный случай (не рассмотрен в теории турбулентности Л.Д. Ландау), когда $\alpha \equiv 0$ ($\gamma_1 \neq 0$) (см. (11)) [19]

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

В стационарном случае производная по времени равна нулю

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

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

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

один из этих корней не имеет физического смысла. Другой корень

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

или

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

В этом случае критический индекс ПП равен [19]

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

Наконец, возможен еще один случай, соответствующий критической точке обычной теории ФП Ландау (критическая точка ФП 2р или трикритическая точка для равновесных ФП) [19, 20]. В этой точке

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

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

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

Для простоты пусть в (13)

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

Тогда (13) примет вид

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

Подставим сюда (9) и (25)

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

При $\tau = (R - R_C) \rightarrow 0$

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

Следовательно, критический индекс ПП при приближении к трикритической точке переходов (ламинарное движение) \rightarrow (турбулентное движение) равен [19]

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

Это согласуется с теорией равновесных ФП Ландау [19, 20]. Этот ФП также является непрерывным – с нулевым скачком ПП.

Возможен теоретически более экзотический случай, когда вместо (9) будет [19]

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

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

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

Выражение под корнем преобразуем с точностью до членов второго порядка малости

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

(31) примет вид [19]

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

Нижний знак не имеет физического смысла, следовательно

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

Отсюда найдем [19]

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

и в этом экзотическом случае трикритической точки для ФП ламинарность→турбулентность критический индекс ПП равен [19]

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

ФП является и в этом случае непрерывным.

Теория Ландау-Халатникова для слабо неравновесных состояний основана на формуле [26] (t – время)

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

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

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

тогда

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

или

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

Производная от ПП по времени равна

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

Отсюда (интегрируя) найдем термодинамический потенциал [19]

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

С точностью до обозначений потенциал совпадает с обычным разложением в теории ФП Ландау [20]. Для НФ параметр порядка в равновесии равен нулю, считая

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

найдем из (41) (см. [26])

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

Отсюда время релаксации ПП равно (см. (9)) [19]

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

При приближении к точке непрерывного ФП $R \rightarrow R_C$ и время релаксации стремится к бесконечности (критическое замедление) [26]. При этом вводят кинетический индекс y для температурных ФП [26]

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

Для рассматриваемого случая формула для времени релаксации примет вид [19]

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

Сравнивая с (45), найдем для перехода от ламинарного движения к турбулентному [19]

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

что совпадает с обычным значением в теории ФП Ландау-Халатникова [11]. Однако в случае экзотической трикритической точки (см. (30)) значение кинетического индекса изменится [19]

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

Проведенная аналогия является относительной [19]: движение жидкости или газа с трением (вязкостью) – существенно неравновесный процесс, тогда как обычная теория ФП Ландау описывает равновесные процессы [20].

4. Неоднородная турбулентность

Для неоднородной турбулентности при учете внешнего поля h разложение плотности термодинамического потенциала имеет вид (аналогично [20] ПП зависит от координат)

$$\Omega = -\frac{\gamma_1}{\gamma_2} \eta^2 + \frac{\alpha}{8\gamma_2} \eta^4 + \frac{\alpha_1}{12\gamma_2} \eta^6 + g(\nabla \eta)^2 - \eta h, \quad g > 0 . \quad (50)$$

В традиционном варианте теории ФП Ландау верна формула (9). В нулевом поле плотность потенциала равна

$$\Omega = \Omega_0 + g(\nabla \eta)^2 . \quad (51)$$

Полный потенциал найдется как интеграл по объему [20]

$$\Omega_{II} = \int [\Omega_0 + g(\nabla \eta)^2] dV . \quad (52)$$

Далее переходим к Фурье компонентам (\vec{k} – волновой вектор) [20]

$$\eta = \sum_{\vec{k}} \eta_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} . \quad (53)$$

Подставляя это в (52) и интегрируя по объему, найдем (оставляя только квадратичные по ПП слагаемые ввиду малости последнего) (см. [20])

$$\Omega_{II} = V \sum_{\vec{k}} (gk^2 - \frac{\gamma_1}{\gamma_2}) |\eta_{\vec{k}}|^2 . \quad (54)$$

Отсюда найдем дисперсию Фурье компоненты ПП [20] для НФ

$$\langle |\eta_{\vec{k}}|^2 \rangle = \frac{T}{2V(gk^2 - \frac{\gamma_1}{\gamma_2})} . \quad (55)$$

Здесь T – абсолютная температура в энергетических единицах, V – объем системы, k – волновое число

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} . \quad (56)$$

В «критической» точке при критическом числе Рейнольдса γ_1 равна нулю (см. (9)) и получим для дисперсии флуктуаций ПП

$$\langle |\eta_{\vec{k}}|^2 \rangle = \frac{T\lambda^2}{8Vg\pi^2} . \quad (57)$$

Итак, при переходе ламинарность-турбулентность аномально возрастают длинноволновые флуктуации ПП, аналогично обычным ФП 2р [20].

Для однородной системы $\lambda=\infty$ и $k=0$, тогда (55) даст

$$\langle |\eta_0|^2 \rangle = \frac{T}{2V(-\frac{\gamma_1}{\gamma_2})} \propto \frac{1}{R - R_C} . \quad (58)$$

При приближении к точке ФП $R \rightarrow R_C$ и флуктуации ПП расходятся, однако теория ФП Ландау верна только для малых флуктуаций [20]. Отсюда следует, что рассмотренная теория не верна близко к точке ФП от ламинарного движения к турбулентному. Далее этот вопрос мы разберем подробнее.

Теперь рассмотрим релаксацию ПП при учете неоднородности и внешнего поля. Равновесное (независящее от времени) значение ПП определяется минимизацией потенциала (52) [26]

$$\frac{\partial \Omega_{II}}{\partial \eta} = 0 . \quad (59)$$

Равновесный параметр порядка обозначим $\langle \eta \rangle$, тогда неравновесный параметр порядка равен

$$\eta(t) \equiv \eta = \langle \eta \rangle + \delta \eta . \quad (60)$$

Для неупорядоченной фазы (НФ) равновесный ПП в теории ФП Ландау равен нулю, тогда

$$\eta = \delta \eta . \quad (61)$$

Для неравновесного состояния (59) не верно и имеем уравнение релаксации (37). Для слабо неравновесного состояния линеаризованное уравнение релаксации для НФ (ламинарное движение) имеет вид [26] (h – напряженность внешнего поля)

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = -\frac{\eta}{\tau_0} + 2\gamma_2 g \nabla^2 \eta + \gamma_2 h . \quad (62)$$

Здесь ∇^2 – оператор Лапласа. Переходя к Фурье-компонентам для неоднородной системы, получим для НФ близко к точке перехода [26]

$$\frac{\partial \eta_{\vec{k}}}{\partial t} = -\frac{\eta_{\vec{k}}}{\tau_0} - 2\gamma_2 g k^2 \eta_{\vec{k}} + \gamma_2 h = -\frac{\eta_{\vec{k}}}{\tau_{\vec{k}}} + \gamma_2 h . \quad (62')$$

Считая внешнее поле периодическим [26]

$$h \propto \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)) \quad (63)$$

и полагая [26]

$$\eta_{\vec{k}} = \chi(\omega, \vec{k}) h , \quad (64)$$

можно найти обобщенную восприимчивость $\chi(\omega, \vec{k})$. Берем производную по времени от (64)

$$\frac{\partial \eta_{\vec{k}}}{\partial t} = \chi(\omega, \vec{k}) h(-i\omega) = -i\eta_{\vec{k}} \omega . \quad (65)$$

Подставим это в (62') и делим на напряженность внешнего поля

$$-i\omega \chi(\omega, \vec{k}) = -\frac{\chi}{\tau_{\vec{k}}} + \gamma_2 . \quad (66)$$

Отсюда найдем обобщенную восприимчивость [26]

$$\chi(\omega, \vec{k}) = \frac{\gamma_2}{\frac{1}{\tau_{\vec{k}}} - i\omega} . \quad (67)$$

Эта величина обращается в бесконечность при некоторой частоте внешнего поля ω [26]

$$\omega = -i\tau_{\vec{k}}^{-1} . \quad (68)$$

Смысл внешнего поля для перехода от ламинарного движения к турбулентному нуждается в дополнительном анализе. Это должно быть поле, сопряженное ПП (15), которым является амплитуда возмущения скорости отклонения от ламинарного движения.

При нулевой частоте (однородная система) (67) переписывается

$$\chi(0, 0) \equiv \chi = \gamma_2 \tau_0 = \frac{-\gamma_2}{\gamma_1} = \frac{-\gamma_2}{a(R - R_C)} \propto \frac{1}{(R - R_C)^\gamma} . \quad (69)$$

Это обычная статическая восприимчивость, γ – критический индекс восприимчивости [20]. Таким образом, для перехода от ламинарного движения к турбулентному индекс восприимчивости (в рамках теории ФП Ландау)

$$\gamma = 1 . \quad (70)$$

Это обычное значение для равновесной теории ФП Ландау [20], однако для экзотической трикритической точки [19] (см. (30)) индекс восприимчивости изменится

$$\gamma = 3 . \quad (71)$$

Обратное время релаксации из (66) – (68) найдется из (62') [26]

$$\frac{1}{\tau_{\vec{k}}} = \frac{1}{\tau_0} + 2\gamma_2 g k^2 . \quad (72)$$

Тау нулевое (время релаксации ПП для однородной системы) τ_0 определяется из (45). В точке ФП число Рейнольдса $R = R_C$ и

$$\tau_0 = \infty . \quad (73)$$

(72) примет вид

$$\frac{1}{\tau_{\vec{k}}} = 2\gamma_2 g k^2 . \quad (74)$$

Или (см. [26])

$$\tau_{\bar{k}} \propto k^{-2} \propto k^{-z} . \quad (75)$$

Отсюда динамический индекс z для перехода от ламинарного движения к турбулентному равен

$$z = 2 . \quad (76)$$

Это обычное значение этого индекса в теории Ландау-Халатникова [26], чего, впрочем, и следовало ожидать.

5. Условия применимости теории

Теперь рассмотрим условия применимости теории ФП Ландау к явлению перехода от ламинарного (НФ) движения к турбулентному (УФ). Теория ФП Ландау применима при малых флуктуациях ПП [20]. Для однородной системы при отсутствии внешнего поля равновесное значение ПП для УФ найдется из условия равновесия (см. (42))

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \eta} = 0 . \quad (77)$$

Пренебрегая шестой степенью ПП близко к точке ФП, откуда найдем для УФ

$$\eta^2 = \frac{4\gamma_1}{\alpha} = \frac{4a}{\alpha} \tau = \frac{4a}{\alpha} (R - R_C) \propto \tau^{2\beta} . \quad (78)$$

Средний квадрат флуктуаций ПП (58) должен быть гораздо меньше этой величины (аналогично [20])

$$\langle |n_0|^2 \rangle = \frac{T\gamma_2}{2V|\gamma_1|} \ll \frac{4|\gamma_1|}{\alpha} . \quad (79)$$

Усредним флуктуации ПП по корреляционному объему в трехмерном пространстве [20]

$$\frac{T\gamma_2}{\xi^3|\gamma_1|} \ll \frac{4|\gamma_1|}{\alpha} , \quad (80)$$

где ξ – корреляционная длина, для которой в теории равновесных температурных ФП Ландау верна формула [20]

$$\xi = \left(\frac{g}{a(T - T_C)} \right)^{1/2} . \quad (81)$$

Для нашего неравновесного случая выражение приобретает вид

$$\xi = \left(\frac{g\gamma_2}{|\gamma_1|} \right)^{1/2} = \left(\frac{g\gamma_2}{a|R - R_C|} \right)^{1/2} = \left(\frac{g\gamma_2}{a\tau} \right)^{1/2} . \quad (82)$$

Подставляя (82) в (80), найдем

$$a\tau = a|R - R_C| \gg \frac{T^2 \alpha^2}{4^2 g^3 \gamma_2} . \quad (83)$$

Это неравенство неизбежно нарушится при приближении к точке турбулентного перехода $R \rightarrow R_C$, то есть рассмотренная обобщенная теория Ландау перехода к турбулентности в самой точке ФП и её окрестности не верна, по крайней мере, для трехмерного пространства.

С другой стороны коэффициенты разложения (50) (такие как γ_1 , γ_2 , a , g) фактически раскладывались в ряд по $\tau = |R - R_C|$ и оставлены первые неисчезающие слагаемые (аналогично [20]). Разберем это на примере γ_1

$$\gamma_1 = \gamma_0 + a\tau + b_1\tau^2 + b\tau^3 + \dots . \quad (84)$$

Анализ показывает, что (γ_1 должен менять знак в точке ФП)

$$\gamma_0 = b_1 = 0 . \quad (85)$$

Для выполнения

$$\gamma_1 \cong a\tau \quad (86)$$

должно соблюдаться неравенство

$$\tau^2 \ll \frac{a}{b} , \quad (87)$$

то есть, τ должна быть достаточно мала, во всяком случае, логично считать, что (аналогично [20], заметим, что параметры a и b неизвестны, а критическое число Рейнольдса измерено экспериментально)

$$|\tau| \ll R_C . \quad (88)$$

Объединяя это с (83), найдем

$$R_C \gg \frac{\alpha^2 T^2}{4^2 a g^3 \gamma_2} . \quad (89)$$

Если (83) и (89) не выполняются, то рассмотренная теория не имеет отношения к турбулентности. К сожалению, параметры в формуле (89) (кроме критического числа Рейнольдса R_C и абсолютной температуры T в энергетических единицах)

для перехода к турбулентности не оценены. Остается надеяться, что последнее условие выполняется во многих случаях для достаточно низких температур. Для доказательства этого нужна оценка параметров (89), что возможно в рамках численного моделирования турбулентности с привлечением экспериментальных данных. Заметим, что критическое число Рейнольдса порядка сотни, иногда существенно больше [18].

Область, соответствующая обратному неравенству в формуле (83), называется флуктуационной [20], в ней необходимо использовать флуктуационную скейлинговую теорию ФП [20]. Это может быть предметом дальнейших исследований турбулентности в рамках подхода Л.Д. Ландау.

6. Заключение

Развита феноменологическая теория начальной стадии развития турбулентности Л.Д. Ландау на случай неоднородной среды как теория фазовых переходов (ФП). Определён параметр порядка для этого случая. Предложено неравновесное разложение термодинамического потенциала по параметру порядка (ПП) для перехода от ламинарного движения к турбулентному. В рамках подхода Ландау рассмотрена неоднородная турбулентность, когда ПП (связанный с полем скоростей жидкости или газа) зависит от координат. Поставлен впервые (и решен в рамках обобщенной теории ФП Ландау) вопрос о критических индексах при переходе от ламинарного движения к турбулентному.

Причем речь идет и о статических (термодинамических, таких как индекс ПП, индекс восприимчивости и др.) и о динамических (таких как кинетические индексы y и z) критических индексах. Отметим, что термин «статические индексы» является здесь условным, так как движение среды с вязкостью это существенно неравновесный процесс. Необходимо экспериментальное определение критических индексов для начальной стадии турбулентности, видимо, это возможно также сделать методами компьютерного моделирования. Вопрос о том, каким образом это можно сделать, нуждается в дополнительных исследованиях.

Необходимо выяснить смысл внешнего поля (сопряженного ПП) для

перехода от ламинарного движения к турбулентному.

Таким образом, проведена аналогия между теорией равновесных ФП Ландау [20] и обобщенной теорией турбулентности Л.Д. Ландау [19]. Эта аналогия не является полной, так как переход от ламинарного движения к турбулентному является существенно неравновесным процессом, тогда как обычная теория ФП Ландау относится к термодинамически равновесным состояниям [4 19, 20]. Предложено три новых варианта зарождения турбулентности в рамках общего подхода Ландау.

Установлена также аналогия с теорией Ландау-Халатникова [11 26] для слабо неравновесных состояний. Для перехода в турбулентное состояние впервые найдены кинетические индексы y и z и некоторые термодинамические индексы (индексы параметра порядка и восприимчивости).

Поставлен вопрос о применимости развитой теории к явлению перехода от ламинарного движения к турбулентному, аналогично условиям применимости общей теории ФП Ландау [20]. Для полного ответа на этот вопрос необходима оценка параметров разложения термодинамического потенциала в ряд по ПП и других параметров теории. Это, в принципе, можно сделать на основе микроскопической теории турбулентности с привлечением экспериментальных данных, а также методами компьютерного моделирования.

Остается открытым вопрос о сопоставлении полученных результатов с экспериментальными данными или с данными численных экспериментов, а также с другими теориями турбулентности. Было бы интересно также учесть флуктуационные поправки в духе скейлинговой теории фазовых переходов [20].

Список литературы

1. Филатов С.В. Формирование и затухание вихревого движения на поверхности жидкости / С.В.Филатов, А.А.Левченко, Л.П.Межов-Деглин // Письма в ЖЭТФ. — 2020. — Т.111, вып.10. С.653–667.
2. Kochurin E. Numerical simulation of collinear capillary-wave turbulence / E.Kochurin, G.Ricard, N.Zubarev, E.Falcon // Письма в ЖЭТФ. — 2020. — Т.112, вып.12. С.799–800.

3. Зудин И.Ю. Особенности турбулентности, возбуждаемой импульсной высокочастотной накачкой в замагниченной плазме / И.Ю.Зудин, М.Е.Гущин, А.В.Стриковский, С.В.Коробков, И.А.Петрова, А.Н.Катков, В.В.Кочедыков // Письма в ЖЭТФ. — 2022. — Т.116, вып.1. С.46–53.
4. Кочурин Е.А. Прямое численное моделирование акустической турбулентности: спектр Захарова–Сагдеева / Е.А.Кочурин, Е.А.Кузнецов // Письма в ЖЭТФ. — 2022. — Т.116, вып.12. С.830–835.
5. Зиняков Т.А. Спектры двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β -плоскости / Т.А.Зиняков, А.С.Петросян // Письма в ЖЭТФ. — 2020. — Т.111, вып.2. С.65–74.
6. Пятницкий Л.Н. К вопросу о природе турбулентности / Л.Н.Пятницкий // ЖЭТФ. — 1998. — Т.113, вып. 1. С.191–203.
7. Гордиенко С.Н. Структура турбулентных течений несжимаемой жидкости и параметризация турбулентности / С.Н.Гордиенко, С.С.Моисеев // ЖЭТФ. — 1999. — Т.116, вып. 5 (11). С.1630–1647.
8. Воротилин В.П. О механизме турбулентных течений со сдвигом / В.П.Воротилин // ЖЭТФ. — 2019. — Т.156, вып. 1 (7). С.176–188.
9. Воротилин В.П. Гидродинамика турбулентного слоя смешения / В.П.Воротилин // ЖЭТФ. — 2022. — Т.162, вып. 6 (12). С.985–990.
10. Обухов А.М. О распределении энергии в спектре турбулентного потока / А.М.Обухов // Изв. АН СССР. Серия: География и геофизика. — 1941. — Т. 5, №4-5. С.453.
11. Колмогоров А.Н. Локальная структура турбулентности в несжимаемой вязкой жидкости при очень больших числах Рейнольдса / А.Н.Колмогоров // ДАН СССР. — 1941. — Т. 30, № 4. С.299-303.
12. Ландау Л.Д. К проблеме турбулентности / Л.Д.Ландау // ДАН СССР. — 1944. — Т. 44. С.339 – 344.
13. Колмогоров А.Н. Рассеяние энергии при локально изотропной турбулентности / А.Н.Колмогоров // ДАН СССР. — 1941. — Т. 32, № 1. С.19-21.

14. Rytov S.M. Principles of Statistical Radiophysics Vol. 2 Elements of Random Fields / S.M.Rytov, Yu.A.Kravtsov, V.I.Tatarskii. — Berlin: Springer-Verlag, 1989.
15. Зыбин К.П. Модель вытягивающихся вихрей и обоснование статистических свойств турбулентности / К.П.Зыбин, В.А.Сирота // УФН. — 2015. — Т. 185. — С.593–612.
16. Лукин В.П. Внешний масштаб турбулентности и его влияние на флуктуации оптических волн / В.П.Лукин // УФН. — 2021. — Т. 191. — №3. — С. 292–317.
17. Ландау Л.Д. Собрание трудов / Л.Д. Ландау. — М. Наука, 1969. — Т.1 (статья 50). — 512 с.
18. Ландау Л.Д. Теоретическая физика. Т.6. Гидродинамика. 4-е изд. / Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. — М., Наука, 1988. — 733 с.
19. Удодов В.Н. Новые аспекты теории турбулентности Л.Д. Ландау / В.Н.Удодов // Южно-Сибирский научный вестник. — 2023. — №.1 (47). С.10 – 15. DOI 10.25699/SSSB.2023.47.1.008.
20. 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.
21. Гинзбург В.Л. К теории сверхпроводимости / В.Л.Гинзбург, Л.Д.Ландау // ЖЭТФ. — 1950. — Т.20. С.1064.
22. Ландау Л.Д. К теории аномалий теплоемкости / Л.Д.Ландау // Phys. Zs. Sowjet. — 1935. — Т.8. С.113.
23. Ландау Л.Д. К теории фазовых переходов. I / Л.Д.Ландау // Phys. Zs. Sowjet. — 1937. — Т.11. С.26. ЖЭТФ. — 1937. — Т.7. С.19.
24. Ландау Л.Д. К теории фазовых переходов. II / Л.Д.Ландау // Phys. Zs. Sowjet. — 1937. — Т.11. С.545. ЖЭТФ. — 1937. — Т.7. С.627.
25. Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т.9. Статистическая физика. Часть 2. Теория конденсированного состояния / Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский. — М.: Физматлит, 2004. — 496 с.
26. Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т.10. Физическая кинетика. — Изд. 2 / Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский. — М.: Физматлит, 2007. — 536 с.

АВТОМОДЕЛЬНЫЙ РЕЖИМ ВОЗБУЖДЕНИЯ ЛИНИИ РОСТА ОДИНОЧНОГО ДЕНДРИТА

Шабловский О.Н., Кроль Д.Г.

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

Введение. Теоретические и экспериментальные задачи высокоскоростной кристаллизации чистых веществ обусловлены разработкой перспективных технологий получения материалов в неравновесных тепловых условиях. Современные экспериментальные установки позволяют переохлаждать расплавы до 300 К, [1]. В этих условиях были получены высокие (20 – 70 м/с) скорости роста кристалла. Дендритный режим роста наблюдается при глубоких переохлаждениях ΔT расплава: например, для никеля при $\Delta T > 57$ К, для меди при $\Delta T > 90$ К. Состояние исследований этой фундаментальной проблемы изложено в [1 – 7].

Цель работы: изучить автомоделный режим роста одиночного дендрита в переохлажденном расплаве чистого вещества.

Автомоделная линия роста. Рассмотрим двухмерную плоскую фазовую границу кристаллизации (ФГК) $x - F(y, t) = 0$. Уравнение роста дендрита имеет вид [8]:

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

где координата x направлена вдоль оси симметрии дендрита в сторону твердой фазы; y - поперечная декартова координата. 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; ; $\varphi = \alpha/\mu$; $\alpha = L/(UT_c)$; $K = (\partial^2 F / \partial^2 y) / G^3$ - средняя

кривизна ФГК; $B = T_c - T_j(y=0)$ - переохлаждение на вершине дендрита; δ - параметр неоднородности переохлаждения ФГК по отношению к угловой координате θ ; θ - угол между нормалью линии роста и осью x , т.е. $\partial F / \partial y = \tan \theta$; угол заострения линии роста равен $\theta_1 = (\pi/2) - \theta$. Расплав находится в однородном отрелаксировавшем состоянии. ФГК перемещается справа налево со скоростью $N < 0$. Другие подробности изложены в наших предшествующих публикациях [8-12].

Далее рассматриваем автомодельный случай

$$F(y,t) = A_1 t + A_2(\zeta), \quad \zeta = y - mt, \quad A_1, m = \text{const}, \quad A_1 < 0, \quad \delta \in (0,1]. \quad (2)$$

При $\delta = 1$ уравнение роста (1) можно записать в виде

$$\frac{dA}{d\zeta} = (\alpha B + \varphi A_1 - m\varphi A)(1 + A^2), \quad \frac{dA_2(\zeta)}{d\zeta} = A(\zeta). \quad (3)$$

Выражение (2) означает, что плоская фазовая граница $x = A_1 t$ перемещается влево с постоянной скоростью $A_1 < 0$ и испытывает конечное автомодельное возмущение $A_2(\zeta)$. Волна $\zeta = 0, y = mt$ распространяется по однородному нулевому фону: $A(\zeta=0) = 0$. На основе (3) проанализированы два волновых режима возмущения, при которых кривизна положительная, $K > 0$: 1) волна $y = mt, t \geq 0$ идет вверх, на периферию, удаляясь от оси симметрии дендрита, $m > 0, 0 \leq A < (\mu_1 B_1)/m, \mu_1 B_1 = \mu B + A_1 > 0$; 2) волна $y = mt + y_0, y_0 > 0$ идет вниз, с периферии к вершине, $m < 0, A \geq 0$. Процесс длится конечное время t_1 , в течение которого волна достигает оси симметрии $mt + y_0 = 0$.

Обсудим знак производной $dN/dA = (\partial N/\partial t)/(\partial A/\partial t)$, которая характеризует корреляцию между знаком $\partial N/\partial t$ (ускоренное либо замедленное движение) и знаком $\partial A/\partial t$ [$dA > 0, d\theta_1 < 0$ – заострение либо $dA < 0, d\theta_1 > 0$ – затупление линии роста. Из (3) следует, что знак dN/dA противоположен знаку выражения $(m + A_1 A)$. Знак dK/dA противоположен знаку выражения $(m + A\mu_1 B_1)$.

Пусть $m > 0$. Режим $dN/dA < 0$, при котором торможение [$N < 0, dN > 0$] сопровождается затуплением [$d\theta_1 > 0$] либо ускоренное движение [$N < 0, dN < 0$] сопровождается заострением [$d\theta_1 < 0$], существует при $m^2 < (-A_1)\mu_1 B_1$,

$0 < A < [m/(-A_1)]$. Режим $(dN/dA) > 0$, при котором наблюдается корреляция «торможение – заострение» $[N < 0, dN > 0, d\theta_1 < 0]$ либо корреляция «ускорение – затупление» $[N < 0, dN < 0, d\theta_1 > 0]$, существует тоже при $m^2 < (-A_1)\mu_1 B_1$, но здесь другой интервал значений A : $[m/(-A_1)] < A < (\mu_1 B_1/m)$.

Вывод: при $m > 0$, $m^2 < (-A_1)\mu_1 B_1$ существует пороговое значение $A = m/(-A_1)$. Слева от порога имеем корреляции «торможение / ускорение – затупление / заострение». Справа от порога: «торможение / ускорение – заострение / затупление»; эти два режима эволюции линии роста наблюдались в экспериментах [13] при изучении кристаллизации льда в переохлажденной воде. При всех $m > 0$ поведение кривизны определяется неравенством $(dK/dA) < 0$.

Пусть $m < 0$. Единственно возможный режим $(dN/dA) > 0$ существует при $0 \leq A < (A_1/m)$, т.е. угол заострения θ_1 не является слишком малым, и реализуются экспериментально наблюдавшиеся корреляции «ускорение – затупление», «торможение – заострение».

Бегущая волна возбуждения линии роста. Автомодельная линия роста (2), согласно (1), определяется следующими выражениями для скорости и кривизны:

$$N = \frac{A_1 - mA}{(1 + A^2)^{1/2}}, \quad K = \frac{\varphi}{(1 + A^2)^{1/2}} \left[A_1 - mA + \mu B (1 + A^2)^{(1-\delta)/2} \right]; \quad \delta > 0, \quad A \geq 0.$$

Оценка параметров задачи основана на неравенствах $N < 0$, $K > 0$, определяющих регулярный режим роста: $mA - A_1 > 0$; $\mu_1 B_1 > mA$, $0 < \delta < 1$.

При $m > 0$, когда волна $\zeta = 0$ бежит вверх, условие $N < 0$ выполнено, а условие $K > 0$ дает ограничение на угол заострения: $0 < A < (\mu_1 B_1/m)$. Напомним, что здесь $A = \operatorname{tg}\theta = \operatorname{ctg}\theta_1$. При $m < 0$, когда волна $\zeta = 0$ бежит вниз, условие $K > 0$ выполнено, а неравенство $N < 0$ означает, что $0 < A < (A_1/m)$. Именно для таких углов заострения существует автомодельный режим возбуждения линии роста. Для $\delta \in (0,1)$ анализ знака dN/dA дает такие же оценки параметров, как при $\delta = 1$ для $m > 0$ и $m < 0$.

Числовые расчеты при $\delta \in (0,1)$ проведены для никеля при следующих

значениях теплофизических параметров $T_c = 1728 \text{ К}$, $T_* = 1562 \text{ К}$,
 $L = 2,14 \cdot 10^9 \text{ Дж/м}^3$, $c = 5,62 \cdot 10^6 \text{ Дж/(м}^3 \cdot \text{К)}$, $\lambda = 69 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$, $U = 1,81 \text{ Дж/м}^2$,
 $\gamma = 1,3804 \cdot 10^{-7} \text{ с}$, $\mu = 9,53 \text{ м/(К} \cdot \text{с)}$, $N_b = 5,3 \text{ м/с}$, $\Delta T = 166 \text{ К}$, $B = 1 \text{ К}$. Все расчеты
 выполнены в безразмерных величинах. Соответствие между безразмерными и
 размерными параметрами выглядит так: $A_1 \rightarrow (A_1 t_b / y_b) = (-N_b t_b / y_b)$; безразмерная
 скорость m волны определена в долях основной скорости ($-A_1$). Индексом b
 отмечены масштабы величин, применяемые при обезразмеривании: $t_b = 10^{-7} \text{ с}$,
 $y_b = 10^{-6} \text{ м}$.

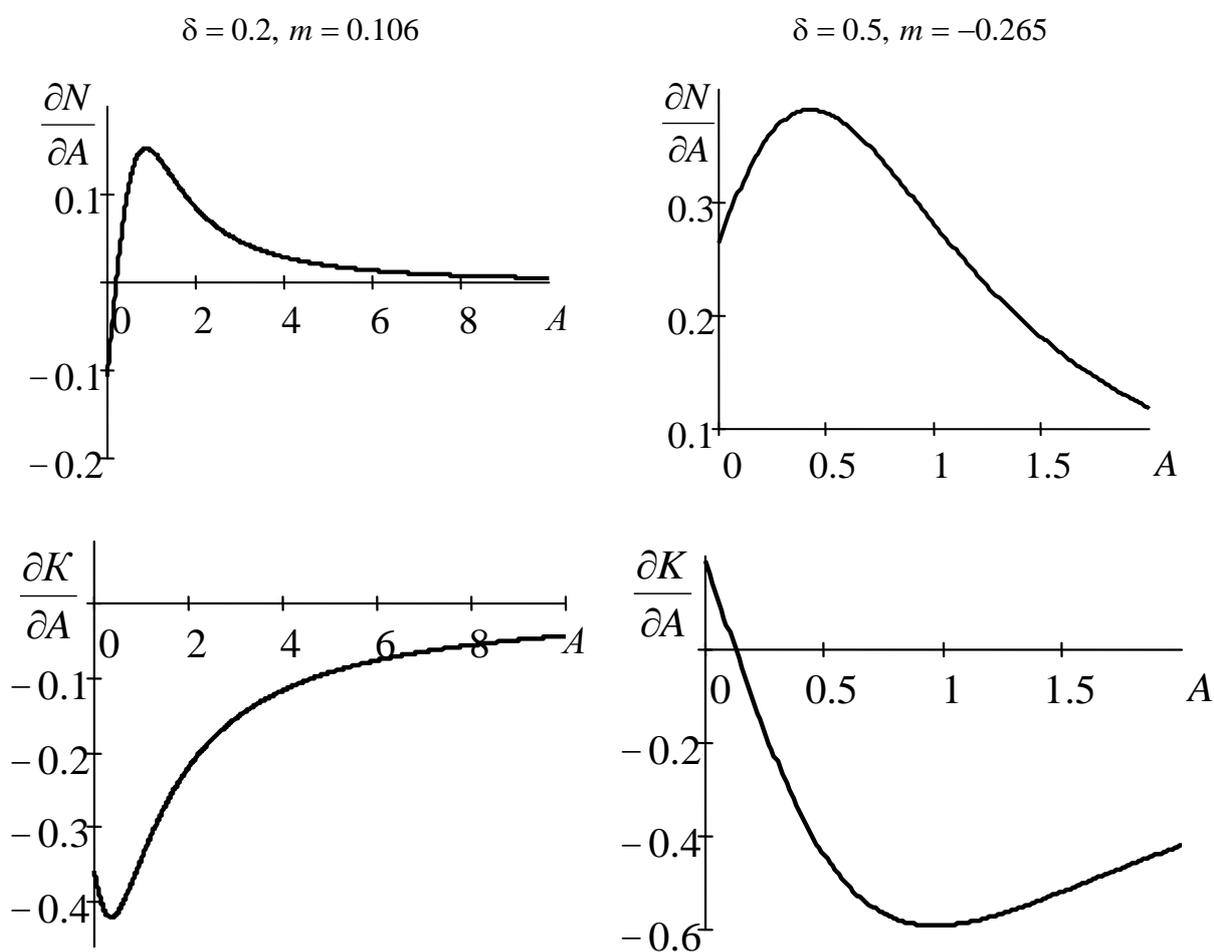


Рис. 1. Автомоделная линия роста: влияние угла заострения на скорость и кривизну фазовой границы. Входные параметры: $N_b = 5.3 \text{ м/с}$, $\mu = 9,53 \text{ м/(К} \cdot \text{с)}$

Результаты расчетов представлены на рисунках 1-3. На рисунку 1 даны типичные примеры поведения линии роста. Для волны бегущей вверх отчетливо

прослеживается корреляция $m \leftrightarrow (-N)$, а именно: чем больше $m > 0$, тем больше модуль скорости $(-N)$ фазовой границы; производная $\partial N / \partial A$ - знакопеременная. Если же волна возмущения бежит вниз, $m < 0$, то $\partial N(A, m) / \partial A$ не меняет свой знак, а производная $\partial K(A, m) / \partial A$ - знакопеременная. Закономерности поведения скорости $N(A, m)$ и кривизны $K(A, m)$ как функций угла заострения и скорости волны возмущения, даны на рисунках 2 и 3: представленные здесь изолинии позволяют получить не только качественную, но и количественную информацию о влиянии A и m на свойства линии роста дендрита.

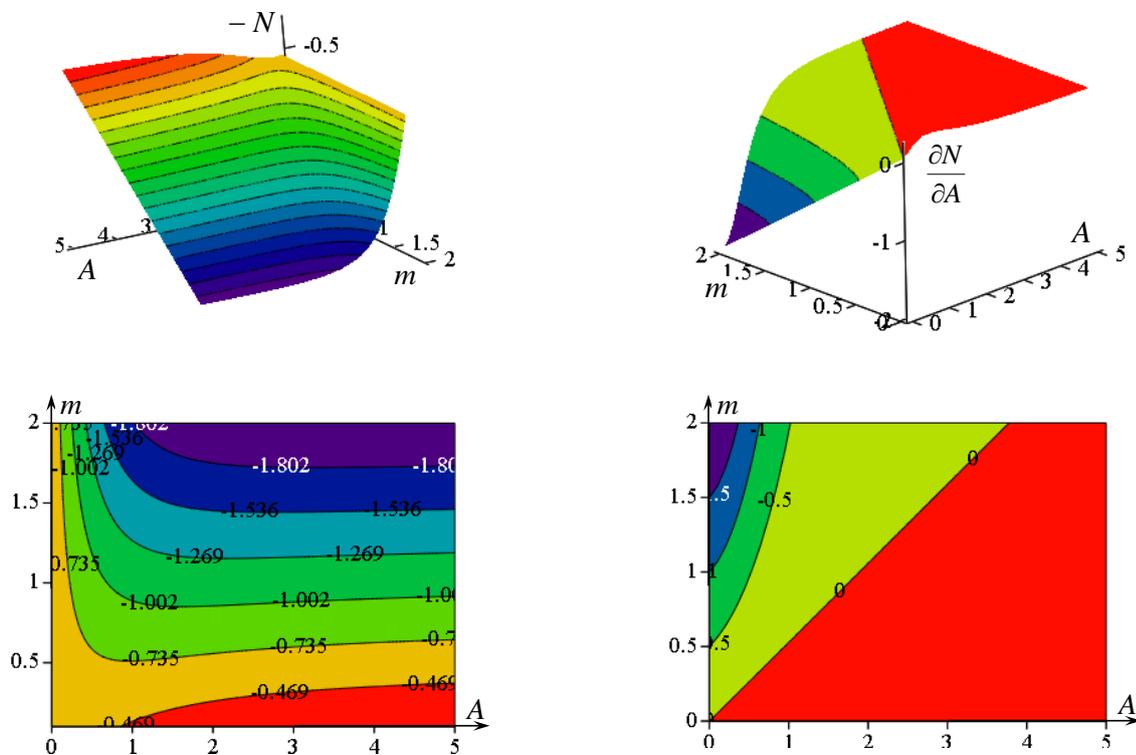


Рис. 2. Автомодельная линия роста: свойства скорости фазовой границы, $\delta = 0.5$.

Нижняя часть рисунка: слева - изолинии $N(A, m) = \text{const}$, справа – изолинии $[\partial N(A, m) / \partial A] = \text{const}$.

Отметим еще, что была получена (график не приводится) зависимость скорости волны $m = m_*(A)$ вдоль линии нулевой кривизны $K(A, m) = 0$: при малых положительных значениях A эта функция резко убывает и при $A > 2$ меняется слабо.

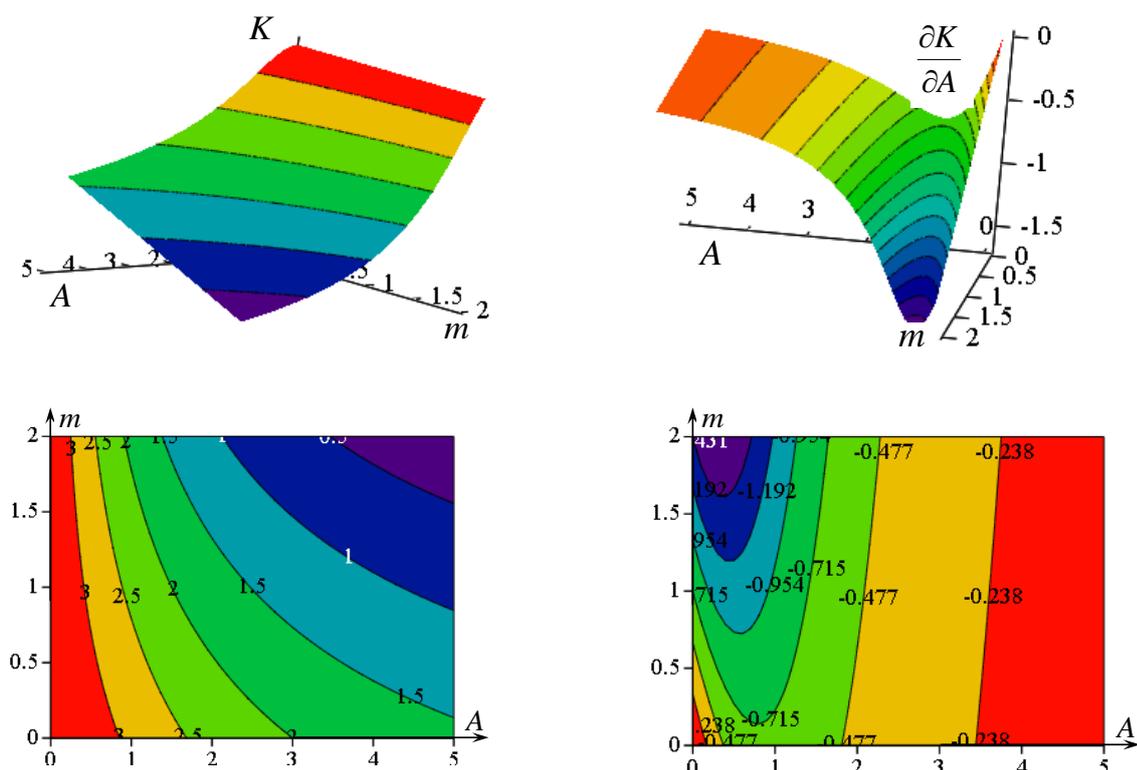


Рис. 3. Автомодельная линия роста: свойства кривизны фазовой границы, $\delta = 0.5$.

Нижняя часть рисунка: слева изолинии $K(A, m) = \text{const}$, справа – изолинии

$$[\partial K(A, m) / \partial A] = \text{const}.$$

Заключение. Дано аналитическое описание автомодельного режима эволюции линии роста, когда волна возбуждения идет вверх, на периферию дендрита либо вниз – с периферии к вершине. Получены оценки параметров задачи, при которых наблюдаются режимы роста «торможение – заострение» и «ускорение – затупление». В ходе численных расчетов для переохлажденного расплава чистого никеля определены важные качественные и количественные закономерности влияния скорости бегущей волны возбуждения на кривизну и скорость фазовой границы кристаллизации.

Список литературы

1. Herlach, D. M. Metastable Solids from Undercooled Melts / D. M. Herlach, P. Galenko, D. Holland-Moritz. – Oxford: Pergamon, 2007. – 448 p.

2. Dragnevski, K. Experimental evidence for dendrite tip splitting in deeply undercooled, ultrahigh purity Cu / K. Dragnevski, R. F. Cochrane, A.M. Mullis // *Physical review letters*. – 2002. – Vol. 89. – № 21. – P. 215502-1 – 215502-4.
3. Bassler, B. T. The solidification velocity of pure nickel / B. T. Bassler, W. H. Hofmeister, R. J. Bayuzik // *Materials Science and Engineering*. – 2003. – A. 342. – P. 80–92.
4. Mullis, A. M. A study of kinetically limited dendritic growth at high undercooling using phase-field techniques / A. M. Mullis // *Acta Materialia*. – 2003. – Vol. 51, № 7. – P. 1959–1969.
5. Gliksman, M. E. Capillary-mediated interface perturbations: Deterministic pattern formation / M. E. Gliksman // *Journal of Crystal Growth*. – 2016. – Vol. 450. – P. 119–139.
6. Strickland, J. On Directional Dendritic Growth and Primary Spacing – A Review / J. Strickland, B. Nanchev // *Crystals*. – 2020. – 10(7). – P. 627.
7. Kurz, W. Progress in modeling solidification microstructures in metals and alloys. Part II: dendrites from 2001 to 2018 / W. Kurz, M. Rappaz, R. Trivedi // *Int. Mater. Rev.* – 2020. – P. 1-47.
8. Шабловский, О.Н. Морфологические свойства линии роста двумерного дендрита в переохлажденном расплаве / О.Н. Шабловский // *Прикладная физика*. – 2012. – №4. – С. 40–46.
9. Шабловский, О.Н. Кинетика роста вершины дендрита в глубоко переохлажденном расплаве. Часть 1. Уравнение фазовой границы кристаллизации / О.Н. Шабловский // *Успехи прикладной физики*. – 2013. –Т. 1. – №6. – С. 680-685.
10. Шабловский, О.Н. Кинетика роста вершины дендрита в глубоко переохлажденном расплаве. Часть II. Аналитическая структура возмущений линии роста / О.Н. Шабловский // *Успехи прикладной физики*. – 2014. –Т. 2. – №1. – С. 12-17.

11. 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.
12. Шабловский, О.Н. Динамика неустойчивости волновых возмущений и боковое ветвление дендрита в переохлажденном расплаве / О.Н. Шабловский, Д.Г. Кроль // Успехи прикладной физики. – 2022. – №2. – С. 189-202.
13. Шибков, А.А. Связь нестационарного роста вершины дендрита с образованием боковых ветвей / А.А. Шибков, А.А. Леонов, А.А. Казаков, С.С. Столбенников // Материаловедение. – 2005. – № 7. – С. 2-9.

СПИСОК ДОКЛАДОВ

С.С. Анцыферов, К.Н. Фазилова, М.К. Ханова ОЦЕНКА СТАТИСТИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ДИНАМИКИ ИНФОРМАЦИОННЫХ ПОТОКОВ	3
Н.М. Богатов К ВЫБОРУ КРАЕВЫХ УСЛОВИЙ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА В ПОЛУПРОВОДНИКОВОМ N-P-ПЕРЕХОДЕ	8
С.Л. Гафнер, А.А. Череповская, М.Н. Наразин, И.С. Бекешева МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ БИНАРНОГО СПЛАВА AG-AU	15
С.Е. Головенкин, С.Е. Русал, Е.Ю. Можейко, И.В. Савицкий, Д.В. Ружилов ВОЗМОЖНОСТИ АНАЛИЗА ИНФОРМАЦИИ О ГЕНЕТИЧЕСКИХ ОСОБЕННОСТЯХ ПАЦИЕНТОВ ПРИ ПРОВЕДЕНИИ АМБУЛАТОРНОГО ЭТАПА РЕАБИЛИТАЦИИ У БОЛЬНЫХ ИНФАРКТМ МИОКАРДА	24
М.Г. Доррер ОЦЕНКА ПРИМЕНИМОСТИ ИСКУССТВЕННОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ДЛЯ ИНТЕРПОЛЯЦИИ ПЛОТНОСТИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ СЛУЧАЙНОЙ ВЕЛИЧИНЫ	32
Н.П. Кузенков ВЫБОР ОПТИМАЛЬНОЙ ОКОННОЙ ФУНКЦИИ В ЗАДАЧЕ НАХОЖДЕНИЯ ОГИБАЮЩЕЙ РЕЧЕВОГО СИГНАЛА	43
А.Е. Кулагин, А.В. Шаповалов	

КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЕ АСИМПТОТИКИ ДЛЯ НЕЛОКАЛЬНОГО НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С НЕЭМИРТОВОЙ ЧАСТЬЮ	51
С.В. Листопад МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕФЛЕКСИВНЫХ ПРОЦЕССОВ В КОЛЛЕКТИВАХ СПЕЦИАЛИСТОВ, РЕШАЮЩИХ ПРОБЛЕМЫ ЗА КРУГЛЫМ СТОЛОМ	57
А.В. Медиевский, А.Г. Зотин, К.В. Симонов, Т.В. Черепанова, И.В. Хомколов СИСТЕМА ВИЗУАЛИЗАЦИИ СНИМКОВ ОПЕРАЦИОННОЙ РАНЫ С ПОМОЩЬЮ МОДИФИЦИРОВАННОГО ВИДЕОЭНДОСКОПА И ПРИМЕНЕНИЯ ЛАЗЕРА	67
Д.А. Рыжкова, Ю.Я. Гафнер МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОВОДИМОСТИ ГАЗОВОГО НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ДЕТЕКТОРА НА ОСНОВЕ SnO ₂	77
Д.А. Рыжкова, Ю.Я. Гафнер, И.С. Бекешева ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПЕРКОЛЯЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ГАЗОВЫХ СЕНСОРОВ	85
Д.А. Рыжкова, А.А. Череповская, М.Н. Наразин ЯЧЕЙКИ ФАЗОИНВЕРСНОЙ ПАМЯТИ НА ОСНОВЕ БИНАРНЫХ НАНОЧАСТИЦ Ag-Au	93
В.Н. Удодов НЕОДНОРОДНАЯ ТУРБУЛЕНТНОСТЬ В РАМКАХ ПОДХОДА ЛАНДАУ	100

Шабловский О.Н., Кроль Д.Г.

АВТОМОДЕЛЬНЫЙ РЕЖИМ ВОЗБУЖДЕНИЯ ЛИНИИ РОСТА
ОДИНОЧНОГО ДЕНДРИТА

117

АЛФАВИТНЫЙ СПИСОК УЧАСТНИКОВ СЕМИНАРА

Участник	Адрес	Стр.
Анцыферов Сергей Сергеевич	119454, ЦФО, г. Москва, пр-т Вернадского, д. 78, МИРЭА – Российский технологический университет, Физико-технологический институт, каф. метрологии и стандартизации E-mail: c_standard@fel.mirea.ru	3
Бекешева Ирина Сергеевна	655017, г. Абакан, ул. Ленина, д. 92 Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова E-mail: irisskay@mail.ru	15, 85
Богатов Николай Маркович	350040, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149 ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет» E-mail: bogatov@phys.kubsu.ru	8
Гафнер Светлана Леонидовна	655017, г. Абакан, ул. Ленина, д. 92 Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова E-mail: sgafner@rambler.ru	15
Гафнер Юрий Яковлевич	655017, г. Абакан, ул. Ленина, д. 92 Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова E-mail: ygafner@khsu.ru	77, 85

Головенкин Сергей Евгеньевич	660022, Красноярск, ул. Партизана Железняка, 1, Красноярский государственный медицинский университет. Имени профессора В.Ф.Войно- Ясенецкого E-mail: gse2008@mail.ru	24
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	32
Зотин Александр Геннадьевич	660037, г. Красноярск, пр-т имени газеты Красноярский рабочий, 31а, Сибирский госуниверситет науки и технологий им. ак. М.Ф. Решетнева E-mail: zotin.sibsau@gmail.com	67
Кроль Дмитрий Григорьевич	Республика Беларусь, 246746, г. Гомель, пр-т Октября, 48, Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого E-mail: dk_zaoch@gstu.by	117
Кузенков Николай Петрович	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский федеральный университет E-mail: knp@vivaldi.net	43
Кулагин Антон Евгеньевич	634050, г. Томск, пр. Ленина, 30, Томский политехнический университет E-mail: aek8@tpu.ru	51
Листопад Сергей Викторович	Калининград, ул. Гостиная, д.5, Калининградский филиал ФИЦ «Информатика и управление» РАН E-mail: ser-list-post@yandex.ru	57

Медиевский Алексей Владимирович	660022, г. Красноярск, ул. Партизана Железняка, 1, Красноярский государственный медицинский университет имени профессора В.Ф. Войно-Ясенецкого E-mail amedievsky@yandex.ru	67
Можейко Елена Юрьевна	660022, Красноярск, ул. Партизана Железняка, 1, ФГБОУ ВО «Красноярский Государственный Медицинский Университет им. проф. В.Ф.Войно-Ясенецкого» МЗ РФ, E-mail: el_mozhejko@mail.ru	24
Наразин Максим Николаевич	655017, г. Абакан, ул. Ленина, д. 92 Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова E-mail: warpnb@bk.ru	15, 93
Ружиллов Дмитрий Вячеславович	660022, Красноярск, ул. Партизана Железняка, 1, ФГБОУ ВО «Красноярский Государственный Медицинский Университет им. проф. В.Ф.Войно-Ясенецкого» МЗ РФ, E-mail: dmitrii_ruzhilov@mail.ru	24
Русал Светлана Евгеньевна	660022, г. Красноярск, ул. Партизана Железняка, 3а, КГБУЗ «Краевая Клиническая Больница» E-mail: rusal_se@mail.ru	24
Рыжкова Дарья Антоновна	655017, г. Абакан, ул. Ленина, д. 92 Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова E-mail: bashkova.daria@yandex.ru	77, 85, 93

Савицкий Иван Владимирович	660022, Красноярск, ул. Партизана Железняка, 1, ФГБОУ ВО «Красноярский Государственный Медицинский Университет им. проф. В.Ф.Войно-Ясенецкого» МЗ РФ, E-mail: idontknown@mail.ru	24
Симонов Константин Васильевич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН, т. 89135954902 E-mail: simonovkv@icm.krasn.ru	67
Удодов Владимир Николаевич	655017, Абакан, пр. Ленина, д. 92/1, каб. 513, Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова (ХГУ), E-mail: udodov@khsu.ru	100
Фазилова Ксения Наильевна	119454, ЦФО, г. Москва, пр-т Вернадского, д. 78, МИРЭА – Российский технологический университет, Физико-технологический институт E-mail: fazilova@mirea.ru	3
Ханова Мариям Керимовна	119454, ЦФО, г. Москва, пр-т Вернадского, д. 78, МИРЭА – Российский технологический университет, Физико-технологический институт, каф. метрологии и стандартизации E-mail: c_standard@fel.mirea.ru	3
Хомколов Дмитрий Владимирович	660041, г. Красноярск, проспект Свободный, 79, Сибирский федеральный университет, ИКИТ, каф. ПМиАД E-mail: khomkolov99@gmail.com	67

Черепанова Татьяна Валентиновна	660058, г. Красноярск, ул. Ломоносова, 47, ЧУЗ «КБ «РЖД – Медицина» г. Красноярск E-mail: grakova@list.ru	67
Череповская Арина Александровна	655017, г. Абакан, ул. Ленина, д. 92 Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова E-mail: arina.cherepovskaya@mail.ru	15, 93
Шабловский Олег Никифорович	Республика Беларусь, 246746, г. Гомель, пр-т Октября, 48, Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого E-mail: shablovsky-on@yandex.ru	117
Шаповалов Александр Васильевич	634050, г. Томск, пр. Ленина, 30, Томский политехнический университет E-mail: shpv@mail.tsu.ru	51

Научное издание

**Моделирование неравновесных адаптивных и управляемых систем–
2023**

Материалы XXVI Всероссийского семинара 6 октября 2023 г.

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

Подписано в печать «6» сентября 2023 г. Формат 60 × 90/8. (А4)
Бумага офсетная. Печать плоская.
Усл. печ. л. 13,56. Уч.-изд. л. 11,81.
Тираж 500 экз. Заказ 14

Институт вычислительного моделирования СО РАН
660036, Красноярск, Академгородок, 50, стр. 44
Тел/факс (391) 2907476
<http://icm.krasn.ru>

Отпечатано в типографии ИВМ СО РАН
660036, Красноярск, Академгородок