

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное научное учреждение
«ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«КРАСНОЯРСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК»
(КНЦ СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН)

УДК 519.63:519.64

Рег. № НИОКТР 124012900550-1

Рег. № ИКРБС

УТВЕРЖДАЮ

Директор ФИЦ КНЦ СО РАН

чл.-корр. РАН

_____ А. А. Шпедт
« » января 2025 г.

ОТЧЕТ

О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛОЖНЫХ
ФИЗИЧЕСКИХ И ПРОИЗВОДСТВЕННЫХ ПРОЦЕССОВ И СИСТЕМ
(промежуточный)

Направление фундаментальных исследований
1.2.1. Компьютерные, информационные науки и биоинформатика
(№ FWES-2024-0013)

Руководитель НИР
директор ИВМ СО РАН
член-корреспондент РАН

_____ В. В. Шайдуров

Красноярск 2025

СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

Руководитель темы
директор ИВМ СО РАН
член-корреспондент РАН

(подпись, дата)

В.В. Шайдуров
(Разделы 1, 3)

Исполнители:

зам. директора ИВМ СО РАН по
научной работе, канд. техн. наук

(подпись, дата)

С.В. Исаев
(Раздел 3)

зам. директора ИВМ СО РАН по
научной работе, канд. физ.-мат. наук

(подпись, дата)

Д.А. Нестеров
(Раздел 1)

уч. секр., канд. физ.-мат. наук

(подпись, дата)

А.В. Вяткин
(Раздел 1)

зав. отд., канд. физ.-мат. наук

(подпись, дата)

В.С. Герасимов
(Раздел 2)

зав. отд., канд. техн. наук

(подпись, дата)

Т.Г. Пенькова
(Раздел 3)

гл. науч. сотр., д-р физ.-мат. наук

(подпись, дата)

Н.В. Еркаев
(Раздел 2)

гл. науч. сотр., д-р техн. наук

(подпись, дата)

Л.Ф. Ноженкова
(Раздел 3)

вед. науч. сотр., д-р физ.-мат. наук

(подпись, дата)

В.В. Денисенко
(Раздел 2)

вед. науч. сотр., д-р физ.-мат. наук

(подпись, дата)

И.В. Краснов
(Раздел 2)

вед. науч. сотр., д-р физ.-мат. наук

(подпись, дата)

И.И. Рыжков
(Раздел 2)

ст. науч. сотр., канд. физ.-мат. наук

(подпись, дата)

Е.Н. Васильев
(Раздел 1)

ст. науч. сотр., канд. физ.-мат. наук

(подпись, дата)

В.А. Деревянко
(Раздел 1)

ст. науч. сотр., канд. хим. наук

(подпись, дата)

Е.В. Елсуфьев
(Раздел)

ст. науч. сотр., канд. физ.-мат. наук

(подпись, дата)

А.Е. Ершов
(Раздел 2)

ст. науч. сотр., д-р техн. наук

(подпись, дата)

О.С. Исаева
(Раздел 3)

ст. науч. сотр., канд. техн. наук		А.В. Коробко (Раздел 3)
	(подпись, дата)	
науч. сотр., канд. физ.-мат. наук		Л.В. Гилева (Раздел 1)
	(подпись, дата)	
науч. сотр., канд. физ.-мат. наук		И.Л. Исаев (Раздел 2)
	(подпись, дата)	
науч. сотр.		Д.Д. Кононов (Раздел 3)
	(подпись, дата)	
науч. сотр., канд. техн. наук		Р.В. Морозов (Раздел 3)
	(подпись, дата)	
науч. сотр., канд. техн. наук		А.И. Ноженков (Раздел 3)
	(подпись, дата)	
науч. сотр., канд. физ.-мат. наук		В.С. Петракова (Раздел 3)
	(подпись, дата)	
мл. науч. сотр., канд. физ.-мат. наук		В.В. Деревянко (Раздел 1)
	(подпись, дата)	
мл. науч. сотр.		Н.П. Фадеева (Раздел 2)
	(подпись, дата)	
мл. науч. сотр.		М.В. Якубович (Раздел 1)
	(подпись, дата)	
прогр. 1-ой кат.		А.М. Алдошкина (Раздел 3)
	(подпись, дата)	
прогр. 1-ой кат.		Н.В. Кулясов (Раздел 3)
	(подпись, дата)	
прогр. 1-ой кат.		И.А. Ларионова (Раздел 3)
	(подпись, дата)	
прогр. 1-ой кат.		А.В. Малышев (Раздел 3)
	(подпись, дата)	
прогр. 1-ой кат.		А.С. Михалев (Раздел)
	(подпись, дата)	
ст. инж.		Д.П. Емельянов (Раздел 1)
	(подпись, дата)	
ст. инж.		А.А. Пустынский (Раздел 1)
	(подпись, дата)	
ст. инж.		А.Н. Романов (Раздел)
	(подпись, дата)	

СТ. ИНЖ.	_____	А.А. Сиротинин (Раздел 3)
	(подпись, дата)	
СТ. ИНЖ.	_____	И.В. Тимошина (Раздел 1)
	(подпись, дата)	
ИНЖ.	_____	И.Р. Адаев (Раздел 1)
	(подпись, дата)	
ИНЖ.	_____	Р.А. Голубев (Раздел 1)
	(подпись, дата)	
ИНЖ.	_____	К.Д. Горбунова (Раздел 1)
	(подпись, дата)	
ИНЖ.	_____	В.М. Гусейнов (Раздел 1)
	(подпись, дата)	
ИНЖ.	_____	М.С. Максимов (Раздел)
	(подпись, дата)	
ИНЖ.	_____	И.А. Харченко (Раздел 2)
	(подпись, дата)	
ИНЖ.	_____	К.С. Шефтель (Раздел 3)
	(подпись, дата)	
ИНЖ.	_____	Г.В. Шадрина (Раздел 2)
	(подпись, дата)	
нормоконтроль	_____	А.А. Кадочников
	(подпись, дата)	

РЕФЕРАТ

Отчёт 62 с., 21 рис., 3 табл., 2 прил.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, ФИЗИЧЕСКИЕ МИКРО- И НАНО-ПРОЦЕССЫ, БОРТОВЫЕ СИСТЕМЫ ТЕРМОСТАБИЛИЗАЦИИ, ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ ПОЛЯ, ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ

В соответствии с планами работ на 2024 год исследования проводились по трем разделам.

В разделе «Математическое моделирование процессов и устройств в условиях ближнего космоса» представлена трехмерная численная двухжидкостная магнитогидродинамическая (МГД) модель накопления магнитной энергии при взаимодействии потока плазмы с препятствием. Эта модель применялась для решения задачи обтекания Венеры солнечным ветром. Согласно данным космических аппаратов перед планетой возникает слой усиленного магнитного поля, называемый магнитным барьером. В результате моделирования выявлены два фактора, объясняющие наблюдаемую асимметрию в направлении электрического поля.

Представлена математическая модель электрического поля в низкоширотной ионосфере в периоды высокой геомагнитной активности. Эта квазистационарная модель единого проводника ионосфера – атмосфера разработана для расчета электрических полей, создаваемых в околоземном пространстве токами, приходящими в ионосферу из магнитосферы. Для описания реалистичного магнитосферного электрического генератора использованы данные спутников группировки AMPERE о глобальном распределении продольных токов.

В течение года разработаны математические модели тепло- и массопереноса в капиллярных структурах, создаваемых по аддитивной технологии. В частности, представлена математическая модель тепло- и массопереноса в бортовых конструкциях спутников со встроенными гипертеплопроводящими (ГТП) структурами.

В разделе «Математическое моделирование физических микро- и нано-процессов» представлен вычислительный метод сортировки данных для спектров пропускания набора фотонных структур из диэлектрических материалов с периодической решеткой для построения дерева решений. Сформулирована новая разновидность метода, называемого расширенным деревом решений, который обеспечивает более высокую точность прогноза модели одновременно с хорошей объяснимостью.

Сформулирована математическая модель описания интерференционные проявлений эффекта LID (light-induced drift) в бихроматических оптических полях. На ее основании предсказана возможность генерации глубоких оптических супер-решёток для пленения и вращения резонансных примесных атомов, погруженных в холодный буферный газ.

В 2024 году в рамках сотрудничества с коллегами из Европейского центра передовых технологий водоподготовки (Wetsus) разработана модель нанофльтрации растворов, содержащих ионы солей и заряженные / незаряженные микрозагрязнители (вещества, используемые в фармацевтических препаратах). Расчетные данные сравнивались с данными экспериментов, которые проводились в Центре Wetsus с коммерческими нанофльтрационными мембранами и показали хорошее соответствие.

В разделе «Технологии создания информационно-аналитических систем территориального и промышленного управления» представлены разработанные инструменты поддержки формирования управленческих решений на основе интегрального оценивания социально-экономического состояния территорий. Разработана модель формирования управляющих рекомендаций на основе интегрального оценивания социально-экономического состояния территорий путем выявления и исследования проблем и причин. Модель построена на основе иерархии оценок показателей, позволяя выделять «проблемы» и «причины» текущего состояния.

Представлены также инструменты информационной поддержки формирования решений в задачах управления природно-техногенной безопасностью территорий. Предложена архитектура платформы, объединяющей разные аналитические методы и сервисы формирования управляющих решений. Разработана структура информационных ресурсов, логически увязывающая каталоги опасных событий, паспорта безопасности территорий, реестр аварийно-спасательных формирований и управленческие решения.

В качестве инструмента оперативного контроля технологии производства алюминия на основе обработки данных о перемещении анодного массива в электролизерах разработан алгоритм оценки жидкого незавершенного производства на основе анализа временных рядов таких данных. Апробация алгоритма оценки незавершенного производства выполнена для электролизеров опытного участка РА-550 АО «Саяногорск».

Созданы наборы данных сетевой активности информационно-телекоммуникационных систем для идентификации киберугроз методами машинного обучения. Исследование проблем накопления первичных данных и построения наборов данных (датасетов) для идентификации кибератак методами машинного обучения выполнялось на примере корпоративной сети

Федерального исследовательского центра «Красноярский научный центр СО РАН» и развёрнутой в ней сети Интернета вещей.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	9
1. Математическое моделирование процессов и устройств в условиях ближнего космоса.....	11
1.1. Трехмерная численная двухжидкостная МГД-модель накопления магнитной энергии при взаимодействии потока плазмы с препятствием.....	11
1.2. Математическая модель электрического поля в низкоширотной ионосфере в периоды высокой геомагнитной активности.....	15
1.3. Разработка математических моделей тепло- и массопереноса в капиллярных структурах, создаваемых по аддитивной технологии	18
2. Математическое моделирование физических микро- и нано-процессов	25
2.1. Вычислительный метод сортировки данных для спектров пропускания набора фотонных структур из диэлектрических материалов с периодической решеткой для построения дерева решений.....	25
2.2. Математическая модель описания интерференционные проявлений эффекта LID (light-induced drift) в бихроматических оптических полях	33
2.3. Математические модели процессов переноса ионов и заряженных микрозагрязнителей в мембранных материалах.....	34
3. Технологии создания информационно-аналитических систем территориального и промышленного управления.....	41
3.1. Инструменты поддержки формирования управленческих решений на основе интегрального оценивания социально-экономического состояния территорий.....	41
3.2. Инструменты информационной поддержки формирования решений в задачах управления природно-техногенной безопасностью территорий.....	44
3.3. Инструменты оперативного контроля технологии производства алюминия на основе обработки данных перемещения анодного массива в электролизерах	45
3.4. Создание наборов данных сетевой активности информационно-телекоммуникационных систем для идентификации киберугроз методами машинного обучения	46
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	54
ПРИЛОЖЕНИЕ А Научные статьи к отчету за 2024 год.....	58
ПРИЛОЖЕНИЕ Б Свидетельства о регистрации программ для ЭВМ за 2024 год.....	62

ВВЕДЕНИЕ

В разделе «Математическое моделирование процессов и устройств в условиях ближнего космоса» представлена трехмерная численная двухжидкостная магнитогидродинамическая (МГД) модель накопления магнитной энергии при взаимодействии потока плазмы с препятствием. Эта модель применялась для решения задачи обтекания Венеры солнечным ветром. Согласно данным космических аппаратов перед планетой возникает слой усиленного магнитного поля, называемый магнитным барьером. В результате моделирования выявлены два фактора, объясняющие наблюдаемую асимметрию в направлении электрического поля.

Представлена математическая модель электрического поля в низкоширотной ионосфере в периоды высокой геомагнитной активности. Эта квазистационарная модель единого проводника ионосфера – атмосфера разработана для расчета электрических полей, создаваемых в околоземном пространстве токами, приходящими в ионосферу из магнитосферы. Для описания реалистичного магнитосферного электрического генератора использованы данные спутников группировки AMPERE о глобальном распределении продольных токов.

В течение года разработаны математические модели тепло- и массопереноса в капиллярных структурах, создаваемых по аддитивной технологии. В частности, представлена математическая модель тепло- и массопереноса в бортовых конструкциях спутников со встроенными гипертеплопроводящими (ГТП) структурами.

В разделе «Математическое моделирование физических микро- и нано-процессов» представлен вычислительный метод сортировки данных для спектров пропускания набора фотонных структур из диэлектрических материалов с периодической решеткой для построения дерева решений. Сформулирована новая разновидность метода, называемого расширенным деревом решений, который обеспечивает более высокую точность прогноза модели одновременно с хорошей объяснимостью.

Сформулирована математическая модель описания интерференционные проявлений эффекта LID (light-induced drift) в бихроматических оптических полях. На ее основании предсказана возможность генерации глубоких оптических супер-решёток для пленения и вращения резонансных примесных атомов, погруженных в холодный буферный газ.

В 2024 году в рамках сотрудничества с коллегами из Европейского центра передовых технологий водоподготовки (Wetsus) разработана модель нанофильтрации растворов, содержащих ионы солей и заряженные / незаряженные микрозагрязнители (вещества,

используемые в фармацевтических препаратах). Расчетные данные сравнивались с данными экспериментов, которые проводились в Центре Wetsus с коммерческими нанофильтрационными мембранами и показали хорошее соответствие.

В разделе «Технологии создания информационно-аналитических систем территориального и промышленного управления» представлены разработанные инструменты поддержки формирования управленческих решений на основе интегрального оценивания социально-экономического состояния территорий. Разработана модель формирования управляющих рекомендаций на основе интегрального оценивания социально-экономического состояния территорий путем выявления и исследования проблем и причин. Модель построена на основе иерархии оценок показателей, позволяя выделять «проблемы» и «причины» текущего состояния.

Представлены также инструменты информационной поддержки формирования решений в задачах управления природно-техногенной безопасностью территорий. Предложена архитектура платформы, объединяющей разные аналитические методы и сервисы формирования управляющих решений. Разработана структура информационных ресурсов, логически увязывающая каталоги опасных событий, паспорта безопасности территорий, реестр аварийно-спасательных формирований и управленческие решения.

В качестве инструмента оперативного контроля технологии производства алюминия на основе обработки данных о перемещении анодного массива в электролизерах разработан алгоритм оценки жидкого незавершенного производства на основе анализа временных рядов таких данных. Апробация алгоритма оценки незавершенного производства выполнена для электролизеров опытного участка РА-550 АО «Саяногорск».

Созданы наборы данных сетевой активности информационно-телекоммуникационных систем для идентификации киберугроз методами машинного обучения. Исследование проблем накопления первичных данных и построения наборов данных (датасетов) для идентификации кибератак методами машинного обучения выполнялось на примере корпоративной сети Федерального исследовательского центра «Красноярский научный центр СО РАН» и развёрнутой в ней сети Интернета вещей.

1. Математическое моделирование процессов и устройств в условиях ближнего космоса

1.1. Трехмерная численная двухжидкостная МГД-модель накопления магнитной энергии при взаимодействии потока плазмы с препятствием

Картина обтекания солнечным ветром планет существенно зависит от величины и направления межпланетного магнитного поля (ММП). Однако в солнечном ветре плотность магнитной энергии ММП примерно в сто раз меньше плотности кинетической энергии. В этой связи возникает естественный вопрос, каким образом такое слабое магнитное поле оказывает сильное влияние на общую картину обтекания. Для его выяснения необходимо проследить цепь преобразований магнитной энергии при обтекании солнечным ветром препятствия. Поскольку поток солнечного ветра является гиперзвуковым (число Маха порядка 10), то при обтекании планет возникает отошедшая ударная волна большой интенсивности. На фронте этой волны происходит резкий скачок магнитного поля, напряженность которого возрастает примерно в 4 раза. Далее, при растекании плазмы солнечного ветра вокруг препятствия магнитное поле дополнительно усиливается вблизи обтекаемой поверхности и его плотность энергии в точке торможения становится сравнимой с плотностью энергии невозмущенного ветра. Область усиленного внешнего магнитного поля вблизи обтекаемой границы магнитосферы получила название «магнитный барьер», который является неотъемлемой частью взаимодействия солнечного ветра со всеми планетами солнечной системы, а также с кометами. Факт существования магнитного барьера, подтвержденный экспериментально в случае Земли, Венеры, и Марса, имеет фундаментальное значение и проливает свет на проблему влияния ММП на состояние ионосферы и магнитосферы планет. При обтекании магнитных планет (Земли, Юпитера, Сатурна), граница магнитосферы отделяет собственное магнитное поле планеты от значительно усиленного магнитного поля солнечного происхождения. В случае антипараллельности полей может произойти так называемое быстрое пересоединение магнитных полей солнечного и планетарного происхождения, в результате которого топологически меняется пространственная картина магнитных силовых линий. Часть магнитных силовых линий, идущих от поверхности Солнца, проникает внутрь магнитосферы. При этом граница магнитосферы перестает быть непроницаемой для заряженных частиц солнечного ветра, и они свободно могут попасть внутрь магнитосферы вдоль открытых магнитных силовых линий вплоть до ионосферы. Для теоретического описания указанных выше сложных процессов требуются адекватные по физическому

содержанию и пространственному разрешению модели.

Уравнения одножидкостной магнитной газодинамики довольно активно использовались в последнее десятилетие для моделирования взаимодействия солнечного ветра с планетами и позволяли получить крупномасштабную картину обтекания. Однако в последние годы в связи с возросшим объемом экспериментальных данных возникла потребность в моделях, позволяющих более детальное описание физических процессов в области обтекания, особенно в пограничных слоях. В этом отношении более информативной и более адекватной является двухжидкостная МГД модель, в которой рассматриваются два сорта заряженных частиц: протоны и электроны. Поскольку масса электронов много меньше массы протонов, то ею можно пренебречь в уравнении движения электронов, которое принимает вид:

$$\nabla P_e = -e n (\vec{E} + \vec{V}_e \times \vec{B}), \quad (1.1)$$

где P_e – электронное давление, e – заряд электрона, E – электрическое поле, B – магнитное поле, V_e – скорость движения электронов, n – плотность частиц.

Скорость электронов выражается через скорость протонов V и плотность электрического тока j :

$$\vec{V}_e = \vec{V} - \frac{\vec{j}}{en}. \quad (1.2)$$

Используя уравнения Максвелла с учетом равенств (1.2) и (1.3), преобразуем уравнение (1.1) к следующему виду:

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} - \text{rot} \left(\frac{\nabla P_e}{en} \right) - \text{rot} (\vec{V} \times \vec{B}) + \text{rot} \left[\left(\frac{\text{rot}(\vec{B})}{en\mu_0} \right) \times \vec{B} \right] = 0. \quad (1.3)$$

Уравнение (1.3) называется уравнением индукции и является ключевым для нахождения магнитного поля. Это уравнение следует дополнить уравнением сохранения магнитного потока:

$$\text{div}(\vec{B}) = 0. \quad (1.4)$$

Система уравнений (1.3), (1.4) определяет поведение магнитного поля во времени и пространстве при заданных распределениях плотности, скорости протонов и давления, для которых имеем систему уравнений неразрывности, сохранения импульса и энергии:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{V}) + \nabla \cdot \left(\rho \vec{V} \vec{V} - \vec{B} \vec{B} \frac{1}{\mu_0} \right) + \nabla \left(P + \frac{1}{2\mu_0} B^2 \right) = 0, \quad (1.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho V^2}{2} + \frac{B^2}{2\mu_0} + \frac{P}{(\gamma-1)} \right) + \nabla \cdot \left[\vec{V} \left(\frac{\rho V^2}{2} + \frac{\gamma P}{(\gamma-1)} \right) + \frac{1}{\mu_0} \vec{E} \times \vec{B} \right] = 0, \quad (1.6)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0, \quad E = -\frac{\nabla P_e}{en} - \vec{V} \times \vec{B} + \frac{rot(\vec{B})}{en\mu_0} \times \vec{B}. \quad (1.7)$$

Для численного решения системы нестационарных уравнений (1.3) - (1.7) использовалась консервативная конечно-разностная схема с расщеплением типа Годунова, в которой пересчет на следующий временной шаг производился в два этапа. На первом этапе с половинным временным шагом определялись потоки на границах ячеек сетки на основе решения одномерной задачи распада разрыва в линеаризованном варианте. Далее на втором этапе все физические величины пересчитывались на весь временной шаг с использованием консервативных уравнений в конечно-разностной форме и найденных потоков через границы ячеек.

Рассмотренная выше модель применялась для решения задачи обтекания Венеры солнечным ветром [Erkaev N.V. About the magnetic barrier of Venus. Planetary and Space Sciences. – 2024. – Vol. 240. – Art. 105834]. Согласно данным космических аппаратов перед планетой возникает слой усиленного магнитного поля, называемый магнитным барьером. В научном сообществе активно дискутируется вопрос о наблюдаемой сильной асимметрии в распределении магнитного поля, давления и плотности плазмы вдоль обтекаемой границы ионосферы планеты. В результате моделирования выявлены два фактора, вызывающие наблюдаемую асимметрию в направлении электрического поля. Первый фактор связан с последним членом в уравнении индукции (1.3), который появился благодаря учитываемым в модели электронам. Влияние этого члена в основном сосредоточено в пограничном слое вблизи обтекаемой границы ионосферы планеты. Полученное в результате расчета распределение интенсивности магнитного поля представлено на рисунке 1.1, где максимальная плотность магнитной энергии на границе ионосферы близка к плотности кинетической энергии солнечного ветра. Показано, что асимметрия магнитного барьера усиливается при уменьшении плотности плазмы солнечного ветра. Второй фактор связан с ионосферными атомами кислорода, которые проникают в поток, ионизируются и замедляют движение частиц солнечного ветра. В этом случае показано, что асимметрия должна возрасть при усилении ионизирующего излучения от Солнца, увеличении плотности ионосферных частиц и уменьшении плотности потока частиц солнечного ветра.

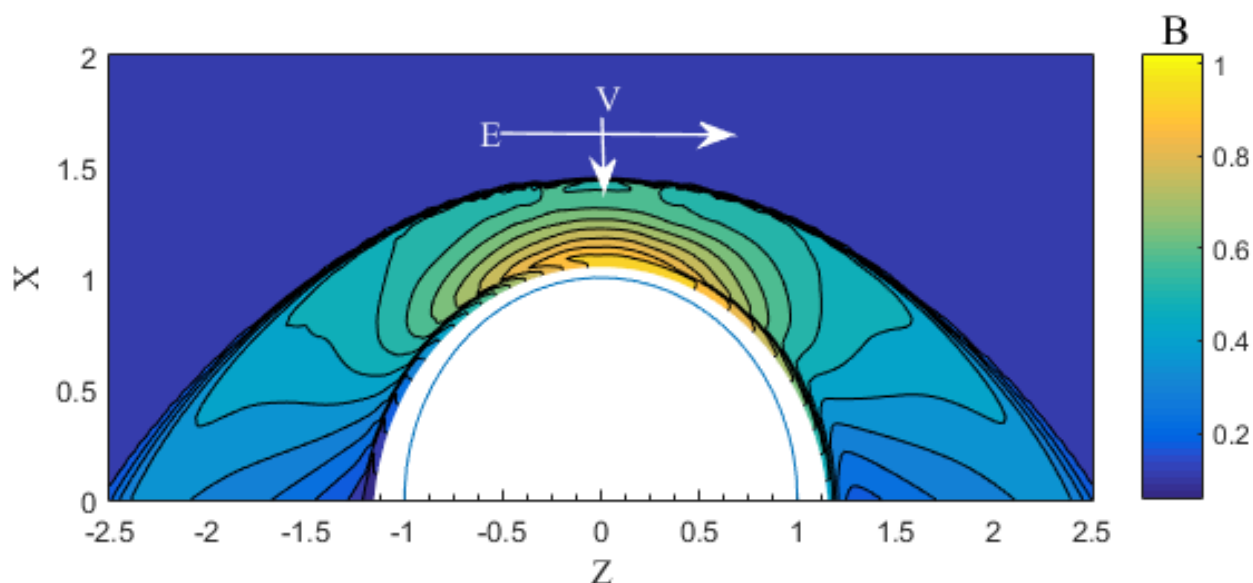


Рисунок 1.1 – Распределение интенсивности магнитного поля (в относительных единицах) в области обтекания солнечным ветром ионосферы Венеры. Голубая полуокружность соответствует поверхности планеты. Ось X направлена на Солнце, V – скорость солнечного ветра, E – электрическое поле в солнечном ветре. Направление магнитного поля перпендикулярно плоскости рисунка

В верхних слоях атмосфер планет при поглощении внешнего ультрафиолетового и рентгеновского излучения от Солнца может возникнуть радиальное истечение атмосферного газа в окружающее космическое пространство. В работе [Еркаев Н.В., Горбунова К.Д. Компактная разностная схема для гидродинамической модели истечения атмосфер планет. Вычислительные технологии. – 2024. – Т. 29, № 1. – С. 5-17] показано, что применение компактной схемы типа Маккормака четвертого порядка на неравномерной сетке позволяет эффективно решать гидродинамическую проблему истечения газа из атмосферы планеты при наличии поглощения внешнего жесткого ультрафиолетового излучения, что важно для моделей эволюции планет. В качестве объектов моделирования рассмотрены две реальные экзопланеты, значительно различающиеся по массе и радиусу орбиты. В отличие от классической схемы, компактная схема показала устойчивый счет при предельном значении числа Куранта, равном 1. Большой порядок аппроксимации и запас устойчивости по числу Куранта дают существенный выигрыш по времени счета, так как позволяют решать задачу истечения атмосферы на более крупной сетке и в более широком диапазоне изменения физических параметров планет при сохранении приемлемой точности.

Для математического описания многокомпонентной атмосферы нужна многожидкостная гидродинамическая модель с учетом возможных химических реакций. В

работе [Kubyshkina D., Fossati L., Erkaev N.V. Precise photoionisation treatment and hydrodynamic effects in atmospheric modelling of warm and hot Neptunes. *Astronomy & Astrophysics*. – 2024. – Vol. 684. – Art. A26. – 26 p.] представлена гидродинамическая модель, дополненная модулями детального расчета химических реакций и переноса излучения. Сравнение результатов моделирования показало, что скорости потери массы атмосферы, которые имеют ключевое значение для исследований эволюции атмосферы, не отличаются существенно между базовой гидродинамической моделью без учета химических реакций и более сложной модификацией модели, включающей блок химических реакций. Однако, профили температуры и ионизации, которые важны для характеристики атмосферы, значительно изменяются с учетом блока химических реакций.

1.2. Математическая модель электрического поля в низкоширотной ионосфере в периоды высокой геомагнитной активности

Из данных наблюдений следует, что в периоды высокой геомагнитной активности, особенно во время геомагнитных бурь, происходят изменения электрического поля в ионосфере и в атмосфере. Мы разработали квазистационарную модель единого проводника ионосфера – атмосфера для расчета электрических полей, создаваемых в околоземном пространстве токами, приходящими в ионосферу из магнитосферы. Поскольку в магнитосфере велика только проводимость в направлении магнитного поля, эти токи текут вдоль магнитных силовых линий и поэтому называются продольными. Для описания реалистичного магнитосферного электрического генератора мы используем данные спутников группировки AMPERE о глобальном распределении продольных токов. Тензор проводимости ионосферной плазмы является гиротропным. Мы используем высотный профиль скалярной проводимости в атмосфере ниже 50 км, который является некоторым усреднением известных эмпирических моделей. Для E- и F-слоев ионосферы тензор гиротропной проводимости плазмы был построен на основе эмпирических моделей IRI-2016, MSIS 1990 E и IGRF. В оставшемся слое 50-90 км мы получаем компоненты тензора электропроводности путем интерполяции. Поскольку в ионосфере проводимость в направлении магнитного поля на несколько порядков превышает поперечную проводимость, для ионосферной части проводника можно использовать двумерную модель. Для учета роли высыпания энергичных электронов и протонов в высоких широтах мы используем модель Веймера, описывающую дополнительные проводимости Педерсена и Холла в зонах полярных сияний. Из-за большого масштаба по времени задача

рассматривается как квазистационарная, и потому решается как последовательность стационарных задач.

При таком подходе получается двумерная задача электропроводности. Она имеет эллиптический тип, решение существует и единственно. Для ее решения мы используем созданный ранее многосеточный вариационно-разностный метод, основанный на предварительной симметризации оператора с построением функционала энергии. В результате численного решения задачи электропроводности получены глобальные распределения электрического потенциала в ионосфере для каждого момента времени в течение рассматриваемого интервала. Распределение ионосферного потенциала, полученное для типичного момента времени показано на рисунке 1.2.

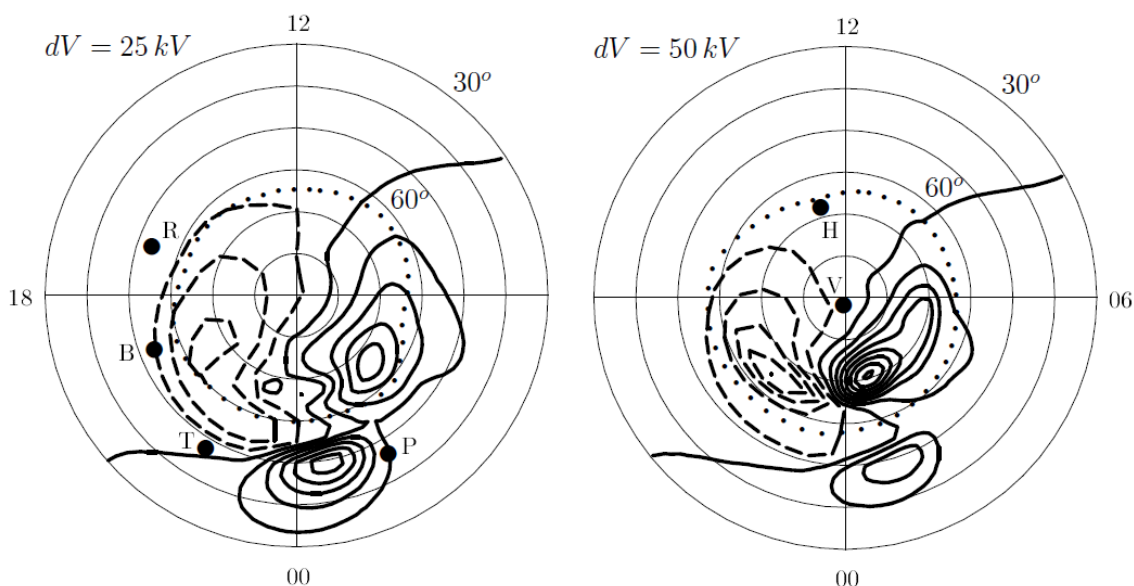


Рисунок 1.2 – Распределение электрического потенциала в ионосфере в 16 часов универсального времени 17 марта в Северном полушарии (левая панель) и в Южном полушарии (если смотреть с Северного полюса, правая панель). Границы полярных шапок показаны пунктирными линиями. Шаг между эквипотенциалами составляет 25 кВ в Северном полушарии и 50 кВ в Южном. Штриховые линии соответствуют отрицательным значениям потенциала. Кругами с буквами показано положение обсерваторий, в которых измерялась напряженность приземного электрического поля в этот момент времени: R – Рэдинг, B – Борок, T – Томск, P – Паратунка, H - Халлей, V – Восток

Изменение электрического потенциала в ионосфере вызывает изменения электрического поля во всей атмосфере, включая ее приповерхностный слой. Эта атмосферная часть задачи электропроводности нами решается в рамках одномерной модели, что возможно в силу больших горизонтальных масштабов явления.

Результаты моделирования сопоставлены с наблюдаемыми возмущениями электрического поля около поверхности Земли во время сильного шторма 17-18 марта 2015 года. Изменения поля, рассчитанные для этой магнитной бури, позволили частично объяснить изменения атмосферного электрического поля, наблюдаемые в некоторых обсерваториях. Использование представленных в интернете данных многих обсерваторий оказалось невозможным, поскольку там была плохая погода, мешающая измерениям. Для лучшего глобального представления необходимы дополнительные данные из других обсерваторий.

Показано, что нецелесообразно сравнивать измеренные возмущения приземного электрического поля с изменением глобальных индексов геомагнитной активности, являющихся функциями только универсального времени, поскольку возмущение поля также существенно зависит от магнитной широты обсерватории и от ее положения относительно направления на Солнце в данный момент времени.

Проведены также исследования влияния выхода радона из-под земли на электрическое поле в ионосфере. За счет повышения эманации радона увеличивается проводимость в приземном слое воздуха, что вызывает изменение электрического поля в нижней части атмосферы и, согласно некоторым гипотезам, в ионосфере. Известны предложения о возможности использовать такие ионосферные возмущения в качестве предвестников землетрясений. Нами ионосферные электрические поля рассчитаны в рамках квазистационарной модели атмосферного проводника, включающего ионосферу. Показано, что даже при экстремальной эманации радона рассчитанные возмущения ионосферного электрического поля получаются на три-четыре порядка меньшими, чем предполагаемые предвестники землетрясений. Это означает необходимость поиска других физических механизмов, обеспечивающих изменение электрического поля в ионосфере вследствие процессов в литосфере. По-видимому, ими могут быть волновые процессы.

Для решения задач о связи атмосферных и ионосферных электрических полей решена вспомогательная задача о роли рельефа. Измерения электрического поля хорошей погоды в горной местности подвержены влиянию рельефа, и поэтому нуждаются в дополнительной калибровке для включения в глобальную картину поля. Для этого необходимо решать трехмерную задачу электропроводности атмосферы в области между поверхностью земли и ионосферой. В качестве примера рассмотрена окрестность Ключевской сопки. С ростом высоты плоскогорий плотность тока хорошей погоды над ними возрастает, а напряженность электрического поля уменьшается. Одномерная модель электропроводности атмосферы для рельефа с крутыми склонами неприменима. Сравнение суточно-сезонных диаграмм,

построенных по данным круиза VII Карнеги и данным Томской обсерватории, показало сходство вариаций напряженности электрического поля хорошей погоды в таких разных местах на Земле. Над морем поле примерно вдвое меньше, чем над низменной сушей в те же моменты времени.

Результаты представлены на двух профильных конференциях.

1.3. Разработка математических моделей тепло и массопереноса в капиллярных структурах, создаваемых по аддитивной технологии

Аддитивные технологии позволяют изготавливать из металла на 3D-принтере изделия сложной формы с внутренними герметичными полостями и капиллярными структурами. Таким способом можно создавать двухфазные теплопередающие устройства, такие как тепловые трубы и гипертеплопроводящие (ГТП) структуры. При этом ГТП-структуры могут встраиваться непосредственно в несущие конструкции, обеспечивая высокую теплопередающую способность. Расчет теплофизических характеристик таких устройств требует использования соответствующих математических моделей.

В течение года разработана математическая модель тепло- и массопереноса в конструкциях со встроенными ГТП-структурами. Расчет характеристик ГТП-структуры выполняется с помощью итерационного процесса в виде двух шагов. На первом шаге решается двумерная стационарная задача теплопроводности. На втором шаге решаются уравнения для движения пара в паровом пространстве и жидкости в фитиле. По распределению давлений на границе раздела фаз определяется капиллярная нагрузка и анализируется выполнение капиллярного ограничения; то есть перепад давления между паровой фазой и жидкостью в фитиле всюду не должен превышать предельное капиллярное давление. Если капиллярная нагрузка ниже предельного значения, то мощность увеличивается, и оба шага повторяются. Таким образом, в ходе итераций можно определить предельное капиллярное ограничение мощности. Распределение температуры и параметры движения пара и жидкости в капиллярной структуре могут быть определены для любого значения мощности, которое не превышает предельное.

В модели считается, что испарение и конденсация теплоносителя происходит на границе областей парового пространства и капиллярной структуры. Паровое пространство заполнено паром, капиллярная структура заполнена жидкой фазой. Считается, что теплоноситель находится на линии насыщения, однозначно связывающей давление и температуру пара. В предположении, что градиент давления пара пропорционален градиенту

давления температуры, процесс переноса тепла за счет испарения, конденсации и движения пара можно заменить эффективной теплопроводностью парового пространства. Это позволяет свести задачу к стационарному уравнению теплопроводности

$$\operatorname{div}(-\lambda(x, y) \cdot \nabla T(x, y)) = 0, \quad (1.8)$$

где $T(x, y)$ – распределение температуры в плоскости задачи, °С; λ – эффективная теплопроводность материала, значение которой зависит от рассматриваемой области, Вт/(м·К).

На границах задаются условия третьего рода в общем случае:

$$\lambda(x, y) \frac{\partial T}{\partial n} + \alpha_f \cdot (T(x, y) - T_f(x, y)) + q(x, y)/W_{hp} = 0,$$

где $q(x, y)$ – плотность потока тепла на единицу длины границы, (Вт/м); $\mathbf{n}$ – перпендикулярный к границе единичный вектор; $T_f(x, y)$ – распределение температуры стока тепла, °С; α_f – коэффициент теплопередачи между стенкой и стоком тепла, Вт/(м²·К); W_{hp} – ширина парового пространства, м.

Величина $q(x, y)$ принимает ненулевое значение только в области подвода тепла. Величины α_f и $T_f(x, y)$ имеют ненулевые значения только в области стока тепла. На остальных границах задается либо отсутствие теплообмена $\frac{\partial T}{\partial n} = 0$ (теплоизоляция), либо конвективный теплообмен с окружающей средой.

Величина теплопроводности λ задается разной в разных областях. В области сплошного металла ВКИ задается теплопроводность материала (алюминия). В области заполненной жидкостью капиллярной структуры задается эффективная теплопроводность капиллярной структуры. В паровом пространстве в качестве теплопроводности берется эффективная величина:

$$\lambda_v(x, y, T) = H_{ev} K_v \frac{\rho_v}{\mu_v} \cdot \frac{\partial P_v}{\partial T_v},$$

где H_{ev} – скрытая теплота парообразования теплоносителя, Дж/кг; K_v – эффективная проницаемость парового пространства, м²; ρ_v и μ_v – плотность и вязкость пара, кг/м³ и кг/(м·с)

соответственно; $\frac{\partial P_v}{\partial T_v}$ – скорость измерения давления насыщенного пара при измерении температуры, Па.

Движение жидкости в капиллярной структуре описывается по закону Дарси. Движение пара в паровом пространстве описывается в предположении несжимаемости пара и ламинарного течения. Учитывая закон сохранения массы, уравнения для движения жидкости и пара записываются в виде:

$$\operatorname{div}(\beta_l \cdot \nabla P_l - \rho_l \mathbf{g}) = 0, \quad \operatorname{div}(\beta_v \cdot \nabla P_v) = 0, \quad (1.9)$$

где $\beta_l = K_l \frac{\rho_l}{\mu_l}$ и $\beta_v = K_v \frac{\rho_v}{\mu_v}$ – коэффициенты проницаемости среды, учитывающие свойства теплоносителя, сек; K_l и K_v – эффективные проницаемости капиллярной структуры и парового пространства для жидкости и пара, соответственно, м²; $\mathbf{g}$ – вектор ускорения свободного падения (учитывается при работе ГТП структуры в условиях силы тяжести); $P_l(x, y)$ и $P_v(x, y)$ – распределение давления в жидкости и паре, Па.

На границе соприкосновения области парового пространства и области капиллярной структуры необходимо учесть испарение и конденсацию теплоносителя, которые определяют приток/отток массы пара и жидкости. Таким образом, граничные условия на линии между капиллярной структурой и паровым пространством имеют следующий вид:

$$\beta_l \frac{\partial P_l}{\partial n} = -q_{ev}/H_{ev}, \quad \beta_v \frac{\partial P_v}{\partial n} = q_{ev}/H_{ev},$$

где $q_{ev}(x, y)$ поток тепла через границу на единицу площади границы, Вт/м²; H_{ev} – скрытая теплота парообразования теплоносителя, Дж/кг.

Дополнительно следует заметить, что уравнение (1.9) позволяет рассчитывать давления жидкости и пара с точностью до константы. Для определения абсолютных значений необходимо задать значение температуры пара в какой-либо точке парового пространства ГТП-структуры и использовать соответствующее значение давления насыщенного пара.

Таким образом, расчетный итерационный процесс представляет собой последовательное решение уравнений (1.8) и (1.9). С помощью уравнения (1.8) определяются распределения температуры и тепловых потоков. Полученные тепловые потоки позволяют задать граничные условия, то есть величину $q_{ev}(x, y)$, для решения уравнения (1.9), и

определить распределения давлений в жидкости и паре $P_l(x, y)$ и $P_v(x, y)$. Далее рассчитывается необходимое условие для работы ГТП-структуры (капиллярное ограничение):

$$\max[\Delta P(x, y)] < P_c(x, y) = \frac{2\sigma}{r_c},$$

где $\Delta P(x, y) = P_v(x, y) - P_l(x, y)$ обозначает перепад давлений между фазами теплоносителя, Па; σ – коэффициент поверхностного натяжения жидкости, Н/м; r_c – эффективный радиус пор капиллярной структуры, м; P_c – капиллярное давление в области испарения, Па.

Если это условие выполняется, то вся капиллярная структура будет смочена теплоносителем, и ГТП-структура будет работать как тепловая труба. Если в какой-либо области $\Delta P > P_c$, то капиллярные силы не будут способны подтягивать жидкость к этой области капиллярной структуры с нужной скоростью, что приведет к осушению в этом месте.

Дополнительно для анализа работы ГТП структуры с точки зрения капиллярных ограничений удобно использовать распределение капиллярной нагрузки, которое задается в виде распределения по границе раздела фаз:

$$\alpha(x, y) = \frac{\Delta P(x, y)}{P_c(x, y)}.$$

Если величина $\alpha(x, y)$ всюду меньше единицы, то капиллярное условие выполняется. Анализ распределения капиллярной нагрузки позволяет оценить запас по капиллярному ограничению (т. е. оценить возможность увеличения мощности).

Для численного решения уравнений (1.8) и (1.9) используется метод конечных элементов. Для этого строится нерегулярная треугольная сетка, согласованная с границами областей. Размер элемента выбирается таким образом, чтобы интеграл потока в области испарения и конденсации был достаточно мал. В качестве конечного элемента используется треугольный элемент Лагранжа. Решение уравнения теплопроводности (1.8) эквивалентно отысканию минимума функционала:

$$\iint_V \frac{1}{2} \left(\lambda(x, y) \left(\left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)^2 \right) \right) dV + \int_S \left(\alpha_f \cdot (T(x, y) - T_f(x, y))^2 + q(x, y)T(x, y) \right) dS,$$

где V – рассматриваемое сечение с границей S . Проведя минимизацию функционала на множестве узловых значений, получим распределение температуры $T(x, y)$.

Аналогично решение уравнений для давлений жидкостной и паровой фазы (1.9) можно найти, минимизируя функционалы:

$$\iint_{V_l} \frac{1}{2} \left(\beta_l \left(\left(\frac{\partial P_l}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial P_l}{\partial y} \right)^2 \right) \right) dV + \int_{S_l} -H_{ev} q_{ev}(x, y) P_l(x, y) dS,$$

$$\iint_{V_v} \frac{1}{2} \left(\beta_v \left(\left(\frac{\partial P_v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial P_v}{\partial y} \right)^2 \right) \right) dV + \int_{S_v} H_{ev} q_{ev}(x, y) P_v(x, y) dS,$$

где V_l и V_v – области капиллярной структуры и парового пространства с границами S_l и S_v соответственно.

Приведем пример расчета плоской пластины со встроенной ГТП-структурой с ацетонитрилом в качестве теплоносителя. Геометрические параметры: длина 10 см, ширина 6 см, общая толщина стенок 2 мм, толщина капиллярной структуры 1,5 мм, толщина парового пространства 1,5 мм. К пластине подводится тепловой поток мощностью 80 Вт, отвод тепла осуществляется с помощью холодильника с температурой $T_f = 22^\circ\text{C}$ и коэффициентом теплообмена $\alpha_f = 16000 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{K})$. Схема передачи тепла в продольном сечении пластины (в плоскости задачи) показана на рисунке 1.3. Получены распределения температуры, давлений и скоростей жидкости и пара.

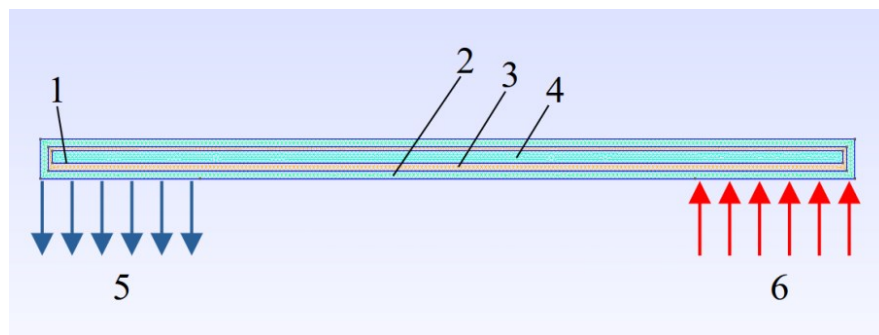


Рисунок 1.3 – Схема передачи тепла по плоской пластине с ГТП структурой;
1 – область испарения и конденсации, 2 – корпус ГТПС, 3 – капиллярная структура,
4 – паровое пространство, 5 – область отвода тепла, 6 – область подвода тепла

Расчеты показывают, что использование ГТП-структуры позволяет получить перепад температуры $5,8\text{ }^{\circ}\text{C}$ при передаче мощности 80 Вт (рисунок 1.4). Перепад температуры по алюминиевой пластине аналогичных размеров будет превышать $100\text{ }^{\circ}\text{C}$, то есть ГТП-структура позволяет на порядок повысить эффективную тепловую проводимость пластины.

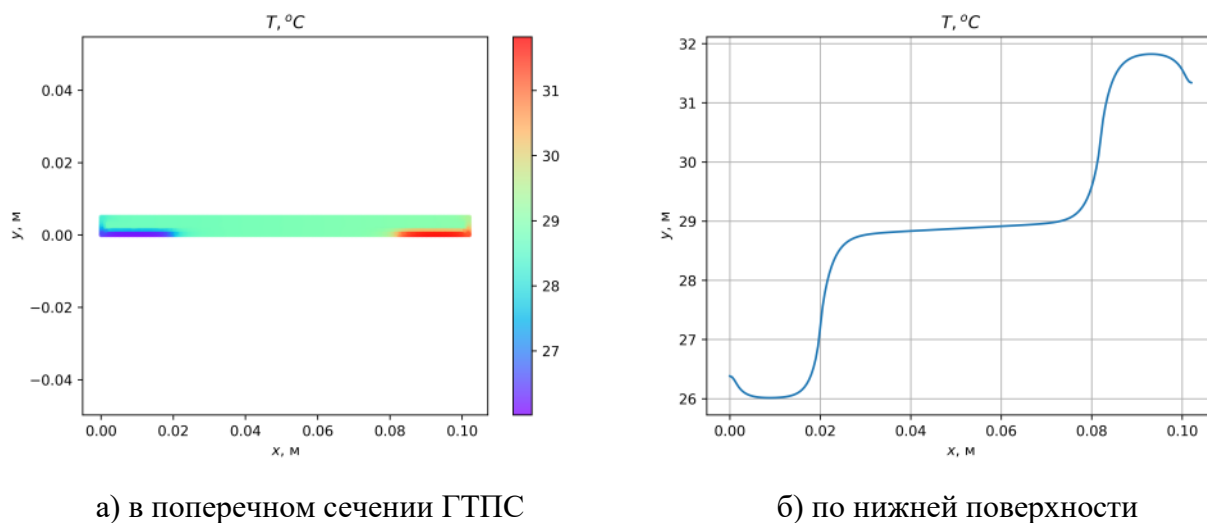
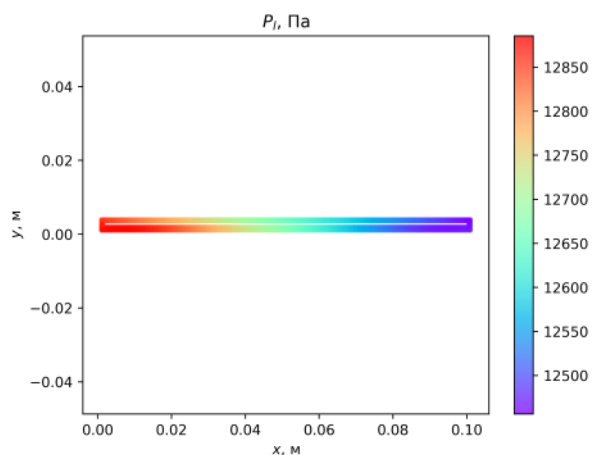


Рисунок 1.4 – Распределение температуры по пластине с ГТП-структурой

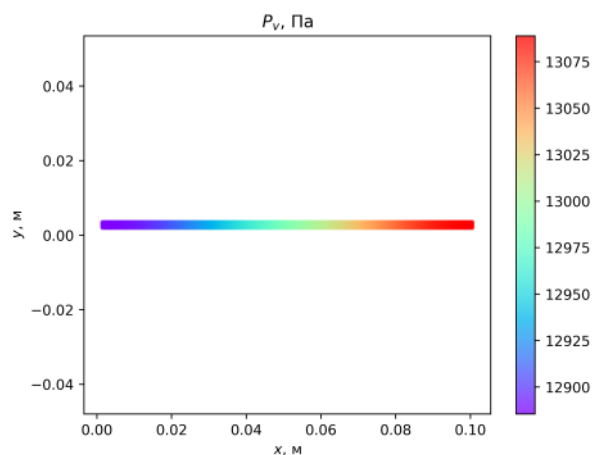
Дополнительно отметим, что основной перепад температуры по ГТП-структуре наблюдается в областях подвода и отвода тепла на заполненном жидкостью слое капилляров. Остальная область ГТП-структуры (адиабатическая часть) имеет перепад доли градуса (рисунок 1.4).

На рисунке 1.5 показаны распределения давлений жидкости в капиллярной структуре и пара в полости. Максимальное давление наблюдается в паровом канале в области испарения. По ходу движения пара к области конденсации давление пара уменьшается. В области конденсации в крайней правой точке давление пара и жидкости одинаковые. По движению жидкости (справа налево на рисунке 1.5) давление далее снижается. Таким образом, максимальный перепад давления между фазами теплоносителя наблюдается в области нагрева.

На рисунке 1.6.а показано распределение капиллярной нагрузки на границе раздела фаз. Можно видеть, что максимальное значение находится в области подвода тепла и составляет 78% , что показывает возможность эффективного переноса тепла от нагревателя мощностью 80 Вт с запасом.



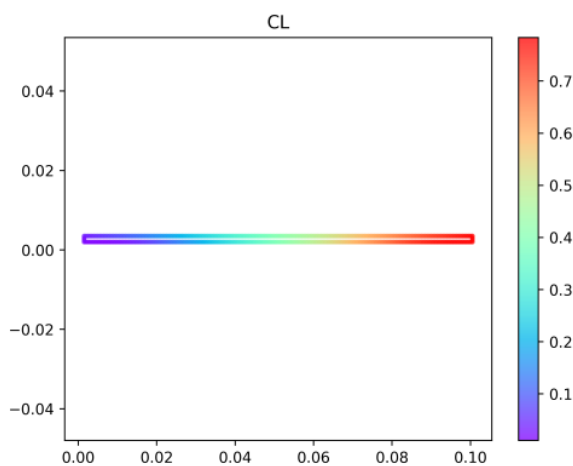
а) капиллярная структура



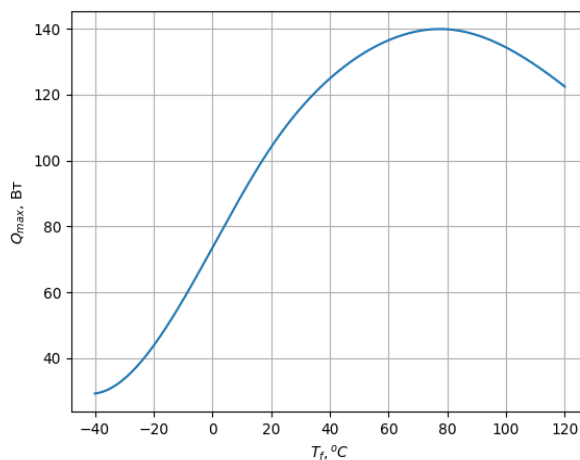
б) паровой канал

Рисунок 1.5 – Распределение давления жидкости и пара в ГТП-структуре

Расчет капиллярной нагрузки позволяет получить предельную допустимую мощность для разных условий работы. На рисунке 1.6.б показана зависимость максимальной мощности от температуры охлаждающей жидкости. Максимальная допустимая мощность достигает значения 140 Вт при температуре около 80 °С.



а)



б)

Рисунок 1.6 – Распределение капиллярной нагрузки при мощности 80 Вт (а) и предельная мощность нагревателя в зависимости от температуры охлаждающей жидкости (б)

2. Математическое моделирование физических микро- и нано-процессов

2.1. Вычислительный метод сортировки данных для спектров пропускания набора фотонных структур из диэлектрических материалов с периодической решеткой для построения дерева решений

В этом направлении ведется работа по созданию улучшенного метода дерева решений – одного из методов машинного обучения с учителем, который может быть использован во всех приложениях, где возможно применение обычного дерева решений, нейросетей, случайного леса и других методов машинного обучения с учителем, при этом как для классификационных, так и регрессионных задач. К примеру, этот метод может быть использован на практике для анализа научных данных, распознавания и классификации текстов, изображений, и т.д. Отличительной особенностью дерева решений относительно других методов машинного обучения с учителем является самая высокая «объяснимость» модели, т.е. возможность их интерпретации с целью раскрытия внутренних механизмов функционирования объекта исследований. Эта особенность полезна в научных исследованиях, и в таких сферах как медицина и автоматическое управление транспортом с людьми, где требуется критическая оценка прогноза и обнаружение вариантов сбоя в процессе работы. Механизмы построения деревьев решений CART [Quinlan J. R. C4. 5: programs for machine learning. – Elsevier, 2014] или [Bujlow T., Riaz T., Pedersen J. M. A method for classification of network traffic based on C5.0 Machine Learning Algorithm. IEEE international conference on computing, networking and communications (ICNC). – 2012. – P. 237-241] хорошо справляются с построением такой объяснимой модели.

В нашей работе методы деревьев решений и построенные на их основе методы случайного леса используются для решения конкретных задач вычислительной физики. Например, в недавней работе [Molokeev M.S. et al. Infrared bound states in the continuum: random forest method. Optics Letters. – 2023. – Vol. 48, Iss. 17. – P. 4460-4463] с использованием классического метода случайного леса мы построили модель, предсказывающую спектральное положение связанного состояния в континууме (ССК) в диэлектрической метаповерхности. Достигнутая в этой работе точность определения длины волны ССК 7 нм может считаться удовлетворительной. Однако, в экспериментальных условиях наблюдение ССК происходит при нарушении симметрии, когда состояние с бесконечной добротностью переходит в так называемое квази-ССК, добротность которого конечна, а ширина линии при угле падения в 1 градус может составлять порядка долей нанометра.

Это свидетельствует о том, что методы на основе обычных деревьев решений имеют недостатки. Самый главный из них – низкая точность прогноза. Кроме того, в них отсутствует гибкость в правилах, что приводит к необходимости формирования большого по размерам дерева, что в свою очередь требует использования большого количества входных данных, которых, как правило, в научных экспериментах собирается немного.

Чтобы устранить описанные выше недостатки разработано несколько подходов. Один из них – методика бустинга Adaboost [Apparatus and methods for machine learning hypotheses, United States Patent 5819247], центральной идеей которой является создание ансамбля самых малых по размеру деревьев, с разными весами, учитываемыми при финальном прогнозе. Существует также метод ансамбля деревьев максимального размера, под названием Случайный Лес [Breiman L. Random forests. Machine learning. – 2001. – Vol. 45. – P. 5-32], в котором у каждого дерева одинаковый вес при голосовании для прогноза. Отсутствие в отдельных деревьях гибкости правил решений, составляющих ансамбли, компенсируется большим количеством генерируемых деревьев решений, повышающих точность.

Существенным недостатком таких методов ансамбля деревьев является практически полное отсутствие возможности объяснения модели из-за большого набора разрозненных правил в каждом дереве.

Помимо описанных выше методов существует дерево решений с нечеткой кластеризацией. Метод нечеткой кластеризации позволяет разбить входные параметры на несколько кластеров, при этом каждая точка входных параметров может принадлежать нескольким кластерам с определенным весом. Дерево решений с нечеткой кластеризацией используют для определения количества групп в каждом из входных параметров x_{ij} и нечетко их кластеризуют. После этого происходит их сортировка и наилучшее деление кластеризованных входных параметров, как это происходит в обычном дереве решений. Процесс повторяется до тех пор, пока размерность пространства кластеризованных входных параметров не уменьшится до нуля. В дереве решений с нечеткой кластеризацией помимо кластеризации данных, в дополнение, предложено построить локальную линейную модель при помощи метода наименьших квадратов (МНК) для каждого конечного узла в окончательно сгенерированном дереве, чтобы аппроксимировать распределение кластеризованных входных параметров. Дерево решений с нечеткой кластеризацией дает на данный момент максимально возможную точность для дерева решений. При этом оно способно решать, как классификационные, так и регрессионные задачи [Chiu H. W., Ouyang C. S., Lee S. J. Improved c-fuzzy decision trees. IEEE International Conference on Fuzzy Systems. – 2006. – P. 1763-1768].

Недостаток данного метода заключается в том, что корень дерева и узлы содержат правила только для кластеризованных входных параметров. Отсутствуют уравнения для входных параметров x_{ij} в корне дерева и его узлах, что приводит к отсутствию объяснимости модели.

В итоге, для дерева решений сложилась полярная ситуация: существует либо хорошо объяснимые модели, но обладающие низкой точностью, либо деревья, обеспечивающие высокую точность, но с полным отсутствием объяснимой модели или отсутствием решения регрессионных задач.

В нашей работе мы формулируем новую разновидность метода дерева решений, которую далее будем называть расширенным деревом решений или по-английски *Extended Decision Tree (EDT)*. За основу расширенного дерева решений взято дерево решений, описанное в монографии [Breiman L. *Classification and regression trees*. – Routledge, 2017], в которой используется набор входных параметров x_{ij} (например, характеристики или признаки объектов, явлений) и выходного параметра y_i (например, свойства объектов, явлений), с последующей сортировкой по j -му входному параметру и делением (x_{ij}, y_i) на две группы $(x_{ij}, y_i)_T$ и $(x_{ij}, y_i)_F$ и повторением процесса для каждой из этих групп. Процесс останавливается либо при достижении заданной максимальной глубины дерева, либо при невозможности дальнейшего деления или сортировки входных параметров. Далее проводится формирование неравенств и связи между узлами дерева решений, что обеспечивает наилучшую объяснимость модели.

В целом описанный алгоритм дерева решений прост, но крайне неэффективен и долог, поскольку в процессе принятия решений алгоритм производит сегрегацию в многомерном пространстве плоскостями, перпендикулярными осям x_j . В итоге модель дает низкую точность прогноза.

Нашей задачей является разработка алгоритма «Расширенное дерево решений» для более качественного отбора и ранжирования входных параметров, обеспечивающего высокую точность прогноза модели одновременно с хорошей объяснимостью. Для достижения поставленной цели при формировании дерева решений, набор входных параметров x_{ij} будет расширен дополнительным входным параметром t_i (или несколькими входными параметрами $t_{i1}, t_{i2}, \dots$) на каждом узле дерева решений.

Алгоритм включает в себя ввод входных параметров x_{ij} и выходных параметров y_i , сортировку по j -м колонкам параметров x_{ij} и делением (x_{ij}, y_i) на две группы $(x_{ij}, y_i)_T$ и $(x_{ij}, y_i)_F$, с последующим повторением процесса для этих групп, формированием неравенств и

связи между узлами. При этом, в отличие от классического дерева решений входные данные x_{ij} на каждом этапе дополняются новыми сгенерированными входными параметрами t_i , которые являются нелинейной комбинацией входных параметров x_{ij} , при $t_i = \sum a_{i,n1,n2...nN} x_{i1}^{n1} x_{i2}^{n2} \dots x_{iN}^{nN}$, где коэффициенты $a_{i,n1,n2...nN}$ определяются методом наименьших квадратов при минимизации функции $\sum (y_i - t_i)^2$; $i = 1, \dots, D$, D – число данных обучения y_i ; $n1, n2, \dots, nN = 0, 1, \dots, n_{max}$ – степени полинома ($n1 + n2 + \dots + nN \leq n_{max}$), при $n_{max} = 1$ и выше. При этом сортировку и деление данных проводим на массиве $([x_{ij}; t_i], y_i)$, который делится на две группы $([x_{ij}; t_i], y_i)_T$ и $([x_{ij}; t_i], y_i)_F$.

На рисунке 2.1 показан пример работы классического дерева решений: а) графическое представление набора входных параметров (x_1, x_2) и выходного параметра y , при $y = 0$ (квадрат), $y = 1$ (круг); б) первый этап работы алгоритма дерева решений с получением первого правила и разделением входных параметров на две группы; наиболее оптимальное деление y на две группы происходит неравенством $x_2 < 2.5$; в) повторение деления деревом решений для оставшихся несегрегированных входных параметров, при этом данные в верхней части описываемые неравенством $x_2 < 2.5$ далее должны быть поделены на две группы при помощи $x_1 < 5.5$; г) конечное дерево, когда алгоритм останавливает свою работу, данные в нижней части описываемые неравенством $x_1 < 5.5$ далее должны быть поделены на две группы при помощи неравенства $x < 7$. При этом полученная линия сегрегации имеет сложную форму.

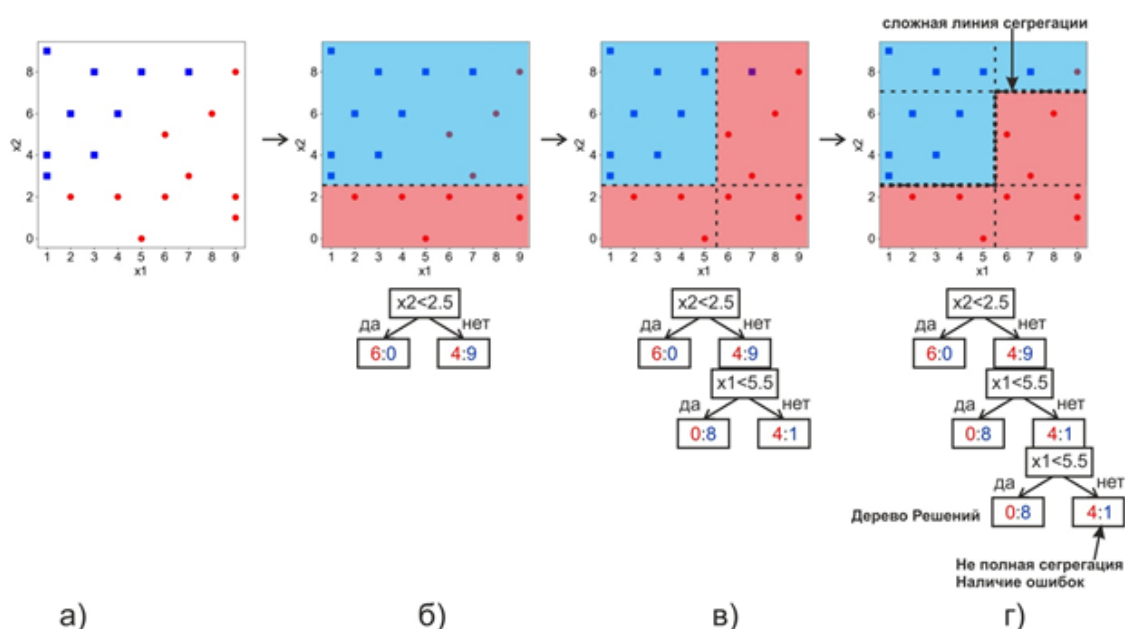


Рисунок 2.1 – Пример работы классического метода дерева решений

На рисунке 2.2 показан пример работы расширенного дерева решений: а) графическое представление набора входных параметров (x_1, x_2) и выходного параметра y , при $y = 0$ (квадрат), $y = 1$ (круг); б) первый и единственный этап работы алгоритма расширенного дерева решений с получением единственного правила и полным разделением входных параметров на две группы, наиболее оптимальное деление y на две группы происходит неравенством $t < 0.45$ или $x_1 < 0.9 \cdot x_2$. Результат работы алгоритма расширенного дерева решений на рисунке 2.2, которое генерирует самое простое правило и наилучшее деление данных, приводит к большой точности прогноза.

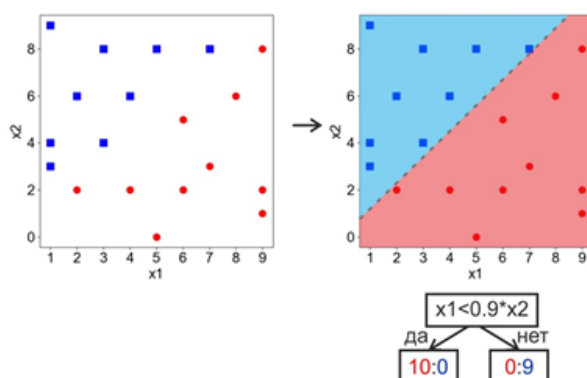


Рисунок 2.2 – Пример работы метода расширенного дерева решений (EDT)

Важной особенностью разработанного метода является ограничение числа используемых коэффициентов $a_{i,k,l,m,n1,n2,...nk}$, например, до двух или трех в t_i . При этом реализована возможность сгенерировать множество новых входных параметров t_i^r , где r – число новых входных параметров от 1 и выше, в которых также будут два или три члена полинома, перебирающие все возможные варианты. В этом случае число новых входных параметров для работы алгоритма заметно увеличивается, и выбирается лишь один t_i^r , приводящий к наилучшей сортировке. Это усложняет расчеты, что можно реализовать за счет использования многоядерных процессоров или даже видеокарт; но при этом правила сегрегации получаются максимально простыми и их удобно использовать для построения объяснительной модели в научных и прикладных целях.

Мы провели сравнение классического дерева решений, расширенного дерева решений и дерева решений с нечеткой кластеризацией, обладающим наибольшей точностью среди деревьев решений, но отсутствием объяснимости. Для этого были использованы сгенерированные входные и выходные параметры из статьи авторов, которые предложили

метод дерева решений с нечеткой кластеризацией [Chiu H. W., Ouyang C. S., Lee S. J. Improved c-fuzzy decision trees. IEEE International Conference on Fuzzy Systems. – 2006. – P. 1763-1768]. Сгенерированные входные и выходные параметры строятся из набора $x_1 = 0, 9^\circ, 18^\circ, \dots, 180^\circ$; $x_2 = 0, 9^\circ, 18^\circ, \dots, 180^\circ$; и вычисления $y = (x_1 * \pi / 180) * \sin(x_2) + (x_2 * \pi / 180) * \cos(x_1)$. Таблица входных параметров (x_1, x_2) и выходного параметра y содержит 441 строку и задачей является построение модели максимальной точности. В методе дерева решений с нечеткой кластеризацией ограничение на количество листьев дерева было установлено равным 17, а в дереве решений и расширенном дереве решений глубина дерева выбрана равным 4, поскольку именно оно позволяет иметь не более 16 листьев. Общее правило – чем больше листьев в дереве, тем точнее модель, поэтому именно число листьев было максимально выровнено во всех моделях. Наборы сгенерированных входных параметров и выходного параметра, подверженные классификации, для построения моделей дерева решений, расширенного дерева решений и дерева решений с нечеткой кластеризацией разбивались на 90% данных для обучения и 10% данных для теста. При этом проводилась 10-кратная кросс-валидация для всех методов, результаты которых представлены в таблице 1.

Таким образом, разработанный метод расширенного дерева решений обеспечивает:

- большую точность по сравнению с классическим деревом решений;
- для достижения аналогичной точности расширенному дереву решений требуется меньше данных по сравнению с классическим деревом решений;
- несмотря на более низкую точность в сравнении с деревом решений с нечеткой кластеризацией, разрабатываемый метод позволяет получать объяснимую модель.

Таблица 1 – Сравнение результатов оценки точности сгенерированных входных и выходного параметров - дерева решений, расширенного дерева решений и дерева решений с нечеткой кластеризацией

Метод машинного обучения	Дерево решений	Дерево решений с нечеткой кластеризацией	Расширенное дерево решений
Ошибка прогноза по данным обучения	0.467(6)	0.145(9)	0.247(3)
Ошибка прогноза по тестовым данным	0.49(5)	0.18(1)	0.26(3)
Точность модели	Плохая	Отличная	Хорошая
Объяснимость модели	Хорошая	Отсутствует	Хорошая

Предложенный метод расширенного дерева решений позволяет улучшить точность прогноза модели, используя меньше данных, по сравнению с обычным деревом решений, при этом оставляет модель максимально объяснимой.

Программная реализация метода расширенного дерева решений.

Осуществлена программная реализация расширенного дерева решений. Программа позволяет построить расширенное дерево решений для произвольного порядка гиперповерхностей разреза, позволяет ограничивать число членов в уравнении гиперповерхности разреза (для улучшения объяснимости).

Диаграмма классов разработанного программного обеспечения (ПО) приведена на рисунке 2.3. Основным базовым классом программной реализации алгоритма является класс `BaseTree`, реализующий механизм расширенного дерева решений. Класс не предполагает непосредственное использование внешним кодом (для этого существует его наследник – класс `Tree`, см. далее).

Прогноз, который даёт дерево, осуществляется путем вызова экземпляров класса `BaseTree` с входящими параметрами, соответствующими входящим параметрам обучения. Кроме того, экземпляр класса может быть превращён в строку. Результирующая строка является описанием дерева на языке C, что позволяет компилировать готовое дерево в исполняемый код.

Атрибут `func` предоставляет дерево в виде Python-функции, не зависящей от времени жизни самого дерева.

Метод `graph` позволяет представить дерево в виде графа в формате пакета `pydot`. Основным классом для непосредственного построения дерева пользовательским кодом является класс `Tree`.

Базовым классом для хранения входных и выходных параметров является абстрактный класс `BaseData`. Он реализует индексирование, взятие длины и превращение в строку.

Класс `InfoData` служит для входящих параметров, не влияющих на принятие решений. Реализует только конструктор.

Абстрактный класс `Data` является базовым для всех параметров, влияющих на принятие решения. Класс `DiscreteData` является реализацией класса `Data` для дискретных параметров. А класс `ContinuumData` является реализацией класса `Data` для непрерывных параметров.

Класс `DiscreteContinuumData` представляет из себя вариацию класса `ContinuumData`, в которой слабо различающиеся данные считаются одинаковыми. Конструктор содержит

дополнительный параметр `precision`, определяющий точность, с которой два числа считаются равными.

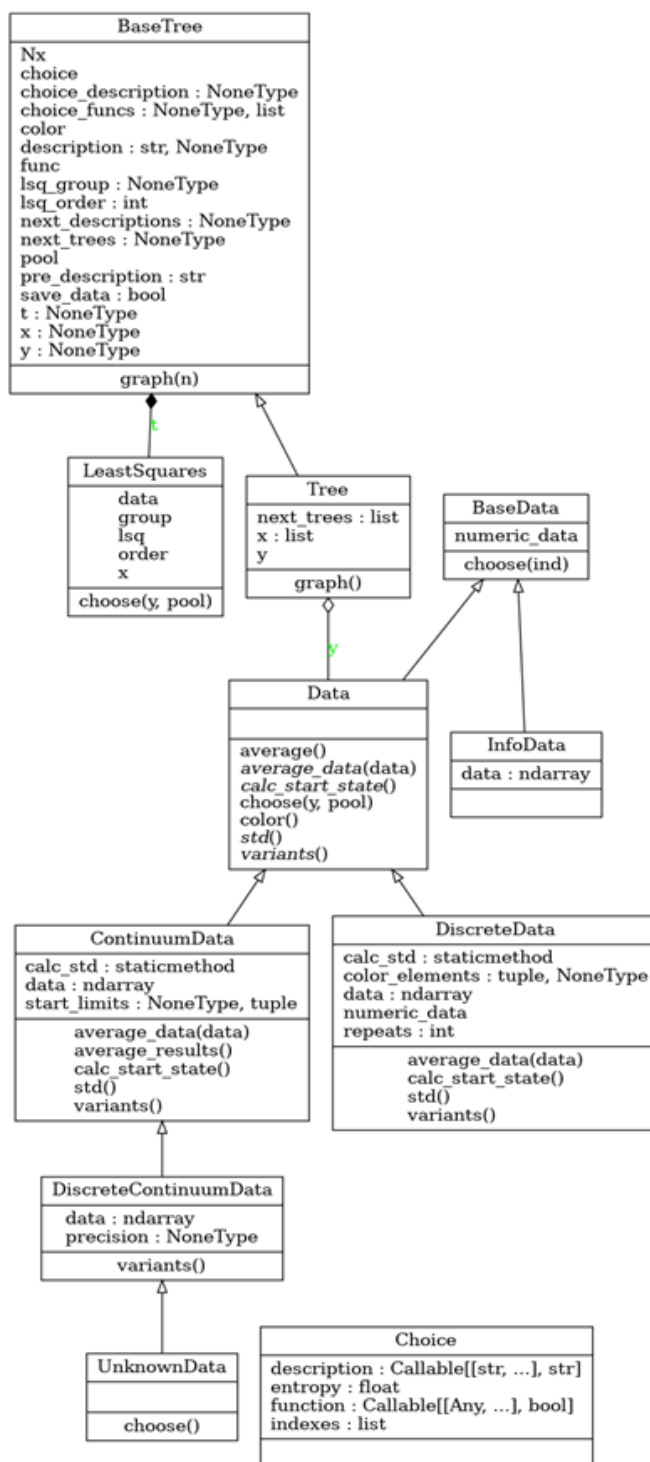


Рисунок 2.3 – Диаграмма классов расширенного дерева решений

Класс `UnknownData` реализует наилучший выбор между `DiscreteContinuumData` и `DiscreteData`. Применяется, когда априорно невозможно указать характер параметра.

Класс LeastSquares реализует метод наименьших квадратов.

Класс Choice представляет собой опции выбора.

В настоящее время ведется подготовка документации для регистрации программного обеспечения.

2.2. Математическая модель описания интерференционных проявлений эффекта LID (light-induced drift) в бихроматических оптических полях

Построена математическая модель, позволяющая описывать интерференционные проявления эффекта LID (light-induced drift) в бихроматических оптических полях. На основании этой модели предсказана возможность генерации глубоких оптических супер-решёток (ОСР) для пленения и вращения резонансных примесных атомов, погруженных в холодный буферный газ. При этом в рассмотренной кинетической модели влияние оптических сил является пренебрежимо малым и предсказываемые явления имеют энтропийную природу (в системе атом + оптическое поле, энтропия излучения существенно увеличивается, но энтропия ансамбля атомов уменьшается, и они переходят в высокоупорядоченное состояние, рисунок 2.4). Таким образом, впервые показано существование схем оптического манипулирования атомами в буферном газе, основанным только на эффекте LID (без участия радиационных сил) аналогичным хорошо известным методам манипулирования действием оптических сил. Подобные проявления эффекта LID ранее не были известны. Конкретные расчёты проводились для случая тяжёлых двухуровневых примесных атомов и 2D-бихроматической стоячей световой волны. Исходные квазиклассические квантовые кинетические уравнения для матрицы плотности в представлении Вигнера с операторами столкновений в дифференциальной форме (посредством применения специальных процедур осреднения по мелкомасштабным пространственным осцилляциям) редуцировались к диффузионно-дрейфовому уравнению для плотности резонансных атомов с эффективными выпрямленными силами, осциллирующими на макроскопических пространственных масштабах и пропорциональных большому параметру (отношению макроскопического периода к длине световой волны) и разности частот столкновений возбуждённых и невозбуждённых атомов с частицами буферного газа. Решения этого уравнения иллюстрирует рисунок 2.4. Результатом воздействия бихроматического света оказывается пленение и сильная локализация атомов в глубоких потенциальных ямах вблизи центров (аттракторов) ОСР, сопровождаемое периодической стратификацией примеси и её распадом её на массив цилиндрических сгустков, вращающихся вокруг аттракторов ОСР. Коэффициент

контрастности (отношение плотности атомов в центре ячейки ОСР и плотности на её периферии) острых пиков на функции распределения плотности может достигать нескольких порядков величины. Предсказываемые интерференционные эффекты могут быть использованы для разработки новых лазерных методов разделения газов, а также для исследования столкновений, так как макроскопические проявления этих эффектов весьма чувствительны к особенностям скоростей столкновительных процессов.

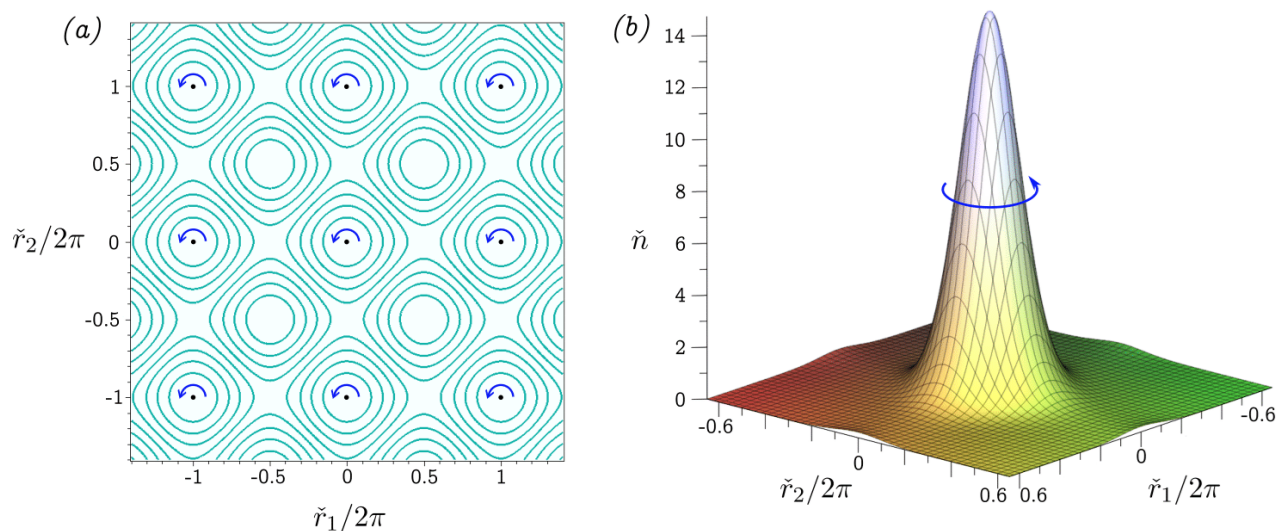


Рисунок 2.4 – Глубокая 2D-потенциально-вихревая оптическая супер-решётка (ОСР), индуцированная эффектом LID (без участия оптических сил) в бихроматической стоячей световой волне: (а) эквипотенциальные линии ОСР потенциала и одновременно векторные линии эффективной вихревой LID-силы; (б) распределение относительной плотности резонансных атомов в отдельной ячейке ОСР. Жирные точки в центре ячеек — аттракторы (точки группировки резонансных атомов), стрелки показывают направление вращения сгустков пленённых частиц, которое можно инвертировать перестройкой параметров интерферирующих световых волн

2.3. Математические модели процессов переноса ионов и заряженных микрозагрязнителей в мембранных материалах

В настоящее время наиболее распространенными технологиями для разделения, очистки и концентрирования растворов являются баромембранные процессы: микрофильтрация, ультрафильтрация, нанофильтрация и обратный осмос. Они характеризуются высокой селективностью, низкими энергозатратами, отсутствием химических реагентов, а также простотой масштабирования и сочетания с другими

процессами. В баромембранных процессах широко используются полимерные мембраны, которые отличаются высокой производительностью и относительно низкой стоимостью.

Наночислтрация водных растворов занимает промежуточное положение между ультрафислтрацией и обратноосмотической очисткой. Размер пор наночислтрационных мембран составляет от 1 до 2 нм, что в 10–50 раз меньше по сравнению с порами в ультрафислтрационных мембранах. Рабочее давление при наночислтрационной очистке также вдвое–втрое выше – в среднем от 3 до 50 бар. Для такой технологии водоподготовки характерны высокая селективность по двух- и поливалентными ионами, но низкая селективность солей по одновалентным ионам. Поэтому для обессоливания и деминерализации используют установки обратного осмоса. Наночислтрационное оборудование подходит только для частичного обессоливания жидкости, а также эффективно удаляет из растворов органические вещества. К последним, в частности, относятся микрзагрязнители, которые включают в себя ингредиенты фармацевтических препаратов, косметических средств, анальгетических средств, а также рекреационных препаратов.

В 2024 году в рамках сотрудничества с коллегами из Европейского центра передовых технологий водоподготовки (Wetsus) была разработана модель наночислтрации растворов, содержащих ионы солей и заряженные / незаряженные микрзагрязнители (вещества, используемые в фармацевтических препаратах). Модель основана на следующих предположениях.

1. Концентрации ионов соли и микрзагрязнителей, а также электрический потенциал изменяются только в направлении Z , перпендикулярном поверхности мембраны.

2. Перенос ионов и микрзагрязнителей происходит за счет конвекции, диффузии и электромиграции и описывается уравнением Нернста-Планка:

$$J_i = K_i C_i J_V - K_i k_{mi} \left(\frac{dC_i}{dz} + \frac{F}{RT} z_i C_i \frac{d\Phi}{dz} \right), \quad i = 1, \dots, n. \quad (2.1)$$

Здесь n – общее число компонентов, J_i – поток компонента i , C_i – молярная концентрация компонента, z_i – зарядовое число, D_i – коэффициент диффузии, J_V – объемный поток (скорость) воды, K_i – коэффициент трения между компонентом и мембраной, k_{mi} – коэффициент массопереноса, Φ – электрический потенциал, T – температура, F – постоянная Фарадея, R – универсальная газовая постоянная, $z = Z/L$, где L – толщина мембраны.

3. Выполняются условия Доннана на границе мембрана/раствор

$$C_i = C_i^\infty \phi_i \exp(-z_i \Delta \Phi). \quad (2.2)$$

Здесь C_i – концентрация компонента внутри мембраны, C_i^∞ – концентрация компонента в растворе, ϕ_i – стерический коэффициент, описывающий соотношения размера пор мембраны и размера компонентов, $\Delta \Phi$ – скачок потенциала на границе.

4. Потоки компонентов определяются формулой

$$J_i = C_i^P J_V, \quad (2.3)$$

где C_i^P – концентрация компонента в выходном потоке (пермеате).

5. Электрический потенциал на границах мембраны и внутри нее определяется только транспортом ионов соли, концентрация которых значительно больше концентрации микрозагрязнителей. Таким образом, концентрации и потоки ионов влияют на транспорт микрозагрязнителей, однако последние не влияют на транспорт ионов. Таким образом, для ионов выполняется условие электронейтральности и отсутствия ионного тока

$$\sum_{i=1}^m z_i C_i + X = 0, \quad \sum_{i=1}^m z_i J_i = 0. \quad (2.4)$$

Здесь $m < n$ – количество рассматриваемых типов ионов, X – объемная плотность заряда мембраны.

6. В уравнениях Нернста-Планка (2.1) для микрозагрязнителей предполагается постоянный градиент потенциала внутри мембраны $d\Phi/dz = \Delta\Phi/L$, где $\Delta\Phi$ – разность потенциалов между границами мембраны (с внутренней стороны).

7. Учитывается концентрационная поляризация, в результате которой возникает повышение концентрации компонентов вблизи мембраны в силу их задержания. Концентрация на поверхности мембраны определяется формулой

$$C_i^m = (C_i^f - C_i^P) \exp\left(\frac{J_V}{k}\right) + C_i^P. \quad (2.5)$$

Здесь C_i^f и C_i^p – концентрации компонента во входном потоке (сырье) и выходном потоке (пермеате) соответственно.

8. Объемный поток растворителя определяется разностью между гидродинамической и осмотической разностью давлений

$$J_V = A(\Delta P - \sigma \Delta \Pi), \quad (2.6)$$

где σ – коэффициент отражения, $\Delta \Pi$ – осмотическая разность давлений, зависящая от разности концентраций компонентов на границах мембрана / раствор.

Предложенная модель сводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений для концентраций компонентов и электрического потенциала с краевыми условиями, которая решалась численно. В модели задается объемный расход (скорость течения) и концентрации компонентов в сырьевом потоке C_i^f . В результате решения необходимо определить концентрацию компонентов в пермеате C_i^p и задержание ионов согласно формуле

$$R_i = 1 - \frac{C_i^p}{C_i^f}. \quad (2.7)$$

Расчетные данные сравнивались с данными экспериментов, которые проводились в Центре Wetsus с коммерческими нанофильтрационными мембранами NF270 (DOW–DuPont). Рассматривались водные растворы соли NaCl с концентрациями 2, 5, 10, 50, 100 мМ и 7 различных видов микрозагрязнителей с концентрациями в диапазоне от 0.08 до 0.13 мМ. В качестве последних выступали компоненты, заряженные положительно (метформин, атенолол), отрицательно (сульфаметоксазол, ибупрофен, аспирин) и нейтрально (атразин, парацетамол). Скорость сырьевого потока устанавливалась равной 60 л/час, трансмембранная разность давлений изменялась в диапазоне от 2 до 10 бар. Для анализа состава пермеата использовался масс-спектрометр LC-MS/MS 6420 (Agilent, США).

Задержание соли. На первом этапе были проведены эксперименты по задержанию соли NaCl в водном растворе для различных концентраций (без микрозагрязнителей). Результаты представлены на рисунке 2.5, где показана зависимость задержания от потока растворителя через мембрану. Для описания экспериментальных данных использовалась модель (2.1) – (2.7), при этом была осуществлена подгонка параметров модели для минимизации суммы квадратов

разностей экспериментальных и расчетных данных по всем рассматриваемым точкам. Полученные значения параметров модели представлены в таблице 2. Толщина селективного слоя в рассматриваемых нанофильтрационных мембранах составляла 100 нм. Как видно из рисунка 2.5, расчетные и экспериментальные данные достаточно хорошо совпадают, за исключением случая, соответствующего концентрации 50 мМ. С уменьшением концентрации соли задержание растет, что связано с увеличением толщины двойного электрического слоя и более сильным влиянием заряда мембраны на снижение концентрации коионов внутри пор за счет электростатического взаимодействия. С ростом величины потока воды через мембрану также наблюдается повышение задержания. Стабилизация задержания при больших значениях поток наиболее выражена при низких концентрациях соли.

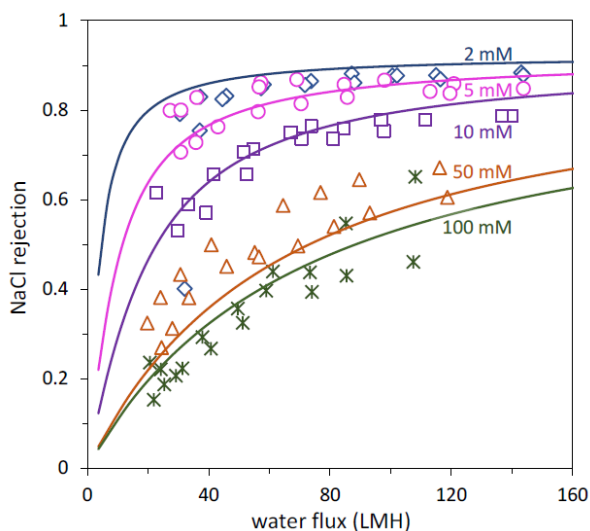


Рисунок 2.5 – Зависимость задержания соли NaCl от потока воды через мембрану (л/м² час) для различных концентраций соли. Точки – экспериментальные данные, линии – расчет на основе модели

Таблица 2 – Значения подгоночных параметров модели задержания соли

K_i , –	0.065
X , мМ	–53
k , л/м ² час	1040
A , л/м ² час бар	1.1

Задержание микрозагрязнителей. В таблице 3 представлены значения подгоночных параметров для описания экспериментальных результатов нанофильтрации микрозагрязнителей. Данными параметрами являются коэффициент массопереноса k_{mi} и коэффициент переноса $P_i = K_i k_{mi} \phi_i$, см. (2.1) и (2.2).

Таблица 3 – Значения подгоночных параметров модели задержания микрозагрязнителей

Компонент	Заряд	Коэффициент массопереноса k_{mi} , л/м ² час	Коэффициент переноса P_i , л/м ² час
Атразин	Нейтральный	190	4.5
Парацетамол	Нейтральный	256	6.7
Метформин	Положительный	259	4.1
Атенолол	Положительный	173	3.4
Сульфаметоксазол	Отрицательный	189	7.1
Ибупрофен	Отрицательный	216	7.3
Аспирин	Отрицательный	238	8.6

Зависимость задержания атразина и парацетамола от потока воды через мембрану при различных концентрациях соли показана на рисунке 2.6. Так как эти компоненты являются нейтральными, то концентрация соли практически не влияет на задержание. В то же время, для задержания метформина, который имеет положительный заряд, наблюдается существенная зависимость задержания от концентрации соли (рисунок 2.7). Как видно, уменьшение концентрации соли приводит к росту задержания. Анализ потоков показывает, что это вызвано усилением электромиграционного потока компонента при больших концентрациях соли.

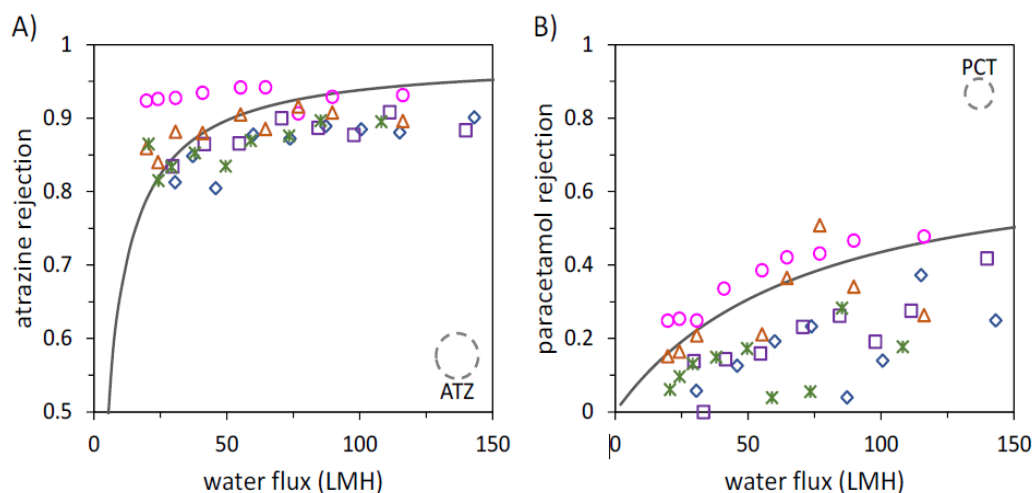


Рисунок 2.6 – Зависимость задержания атразина (А) и парацетамола (В) от потока воды через мембрану (л/м² час) для различных концентраций соли NaCl (цвета соответствуют рисунку 2.5)

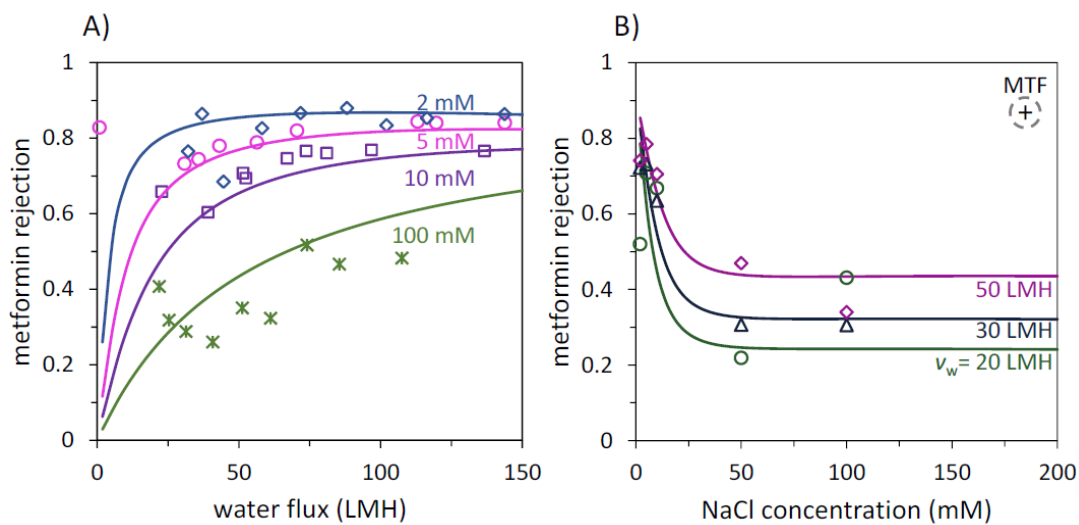


Рисунок 2.7 – Зависимость задержания метформина от потока воды через мембрану (л/м² час) для различных концентраций соли NaCl

Таким образом, проведенное теоретическое и экспериментальное исследование показало, что концентрация соли может оказывать существенное влияние на задержание заряженных микрозагрязнителей в процессе нанофильтрации. Для нейтральных компонентов это влияние значительно меньше.

3. Технологии создания информационно-аналитических систем территориального и промышленного управления

3.1. Инструменты поддержки формирования управленческих решений на основе интегрального оценивания социально-экономического состояния территорий

Разработана модель формирования управляющих рекомендаций на основе интегрального оценивания социально-экономического состояния территорий путем выявления и исследования проблем и причин. Модель строится на основе иерархии оценок показателей, позволяя выделять «проблемы» и «причины» текущего состояния. На рисунке 3.1 представлена обобщенная модель выявления «причин» состояния и формирования управляющих рекомендаций. В ходе моделирования определяется показатель «проблема» P_i , характеризующий текущее состояние, где $i = \overline{1, I}$ – количество возникших «проблем». Для каждого показателя «проблема» определяется совокупность иерархически подчиненных показателей «причина» $S_{lj}(S_{l-1j}(\dots S_{1j}(P_i)))$, которые характеризуют возникшую «проблемную» ситуацию, где $l = \overline{1, L}$ – количество уровней иерархии «причин», $j = \overline{1, J}$ – количество показателей «причина» на уровне иерархии. В модели используются знаковые и беззнаковые типы связей: знаковые соответствуют причинно-следственной связи показателей, которые находятся в состоянии «не норма», беззнаковые обеспечивают перебор «причин» одного уровня или переход от «причин» к рекомендации. Состояние «не норма» определяется исходя из полученных значений оценок показателей. Например, в качестве состояния «не норма» могут рассматриваться значения оценок «Пониженный», «Низкий» или «Критический», либо ухудшение оценки показателя по сравнению с предыдущим отчетным периодом. Если «проблема» P_i в состоянии «не норма», то на каждом уровне иерархии существует показатель «причина» в состоянии «не норма», что обеспечивает движение вниз по иерархии. Частные рекомендации $R_j(S_{Lj}(\dots S_{1j}(P_i)))$ формируются для «причин» $S_{Lj}(S_{L-1j}(\dots S_{1j}(P_i)))$, соответствующих базовым показателям на нижнем уровне иерархии, которые находятся в состоянии «не норма». Для каждого уровня «причин» формируются общие рекомендации $R_l^*(S_{lj}(\dots S_{1j}(P_i)))$. Для уровня «проблем» формируется общая рекомендация R^* . Управляющие рекомендации могут меняться в зависимости от значения оценки.

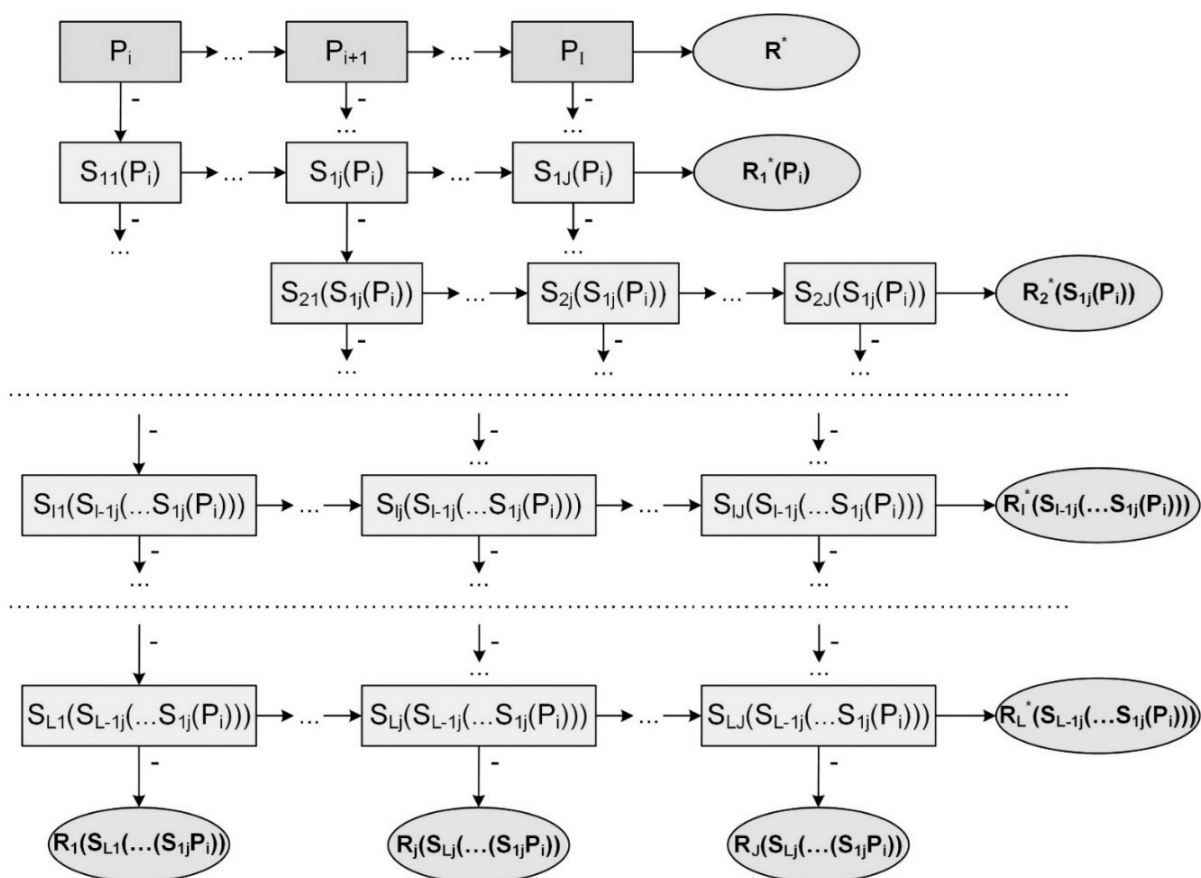


Рисунок 3.1 – Обобщенная модель выявления причин текущего состояния и формирования управляющих рекомендаций

В соответствии с предложенной нормативной моделью качества жизни рассматривается три уровня «причин»: уровень базовых показателей социально-экономического развития, уровень национальных проектов и уровень сфер качества жизни. Частные управляющие рекомендации на уровне базовых показателей формируются исходя из интервалов нормативных значений показателей, определенных в нормативной модели. Общие рекомендации на уровне базовых показателей формируются исходя из задач и результатов, определенных в паспортах региональных проектов. Региональные проекты описывают конкретные меры, направленные на достижение национальных целей в регионе. Общие рекомендации на уровне национальных проектов формируются исходя из паспортов федеральных проектов, входящих в состав соответствующего национального проекта, которые описывают системные меры, направленные на достижения национальных целей. Общие рекомендации на уровне сфер качества жизни формируются в соответствии с целями и целевыми показателями, определенными в паспортах национальных проектов. Таким образом,

модель формирования рекомендаций представляет собой инструмент исследования показателей состояния территорий и дает возможность определять первопричины состояния, а также выделять проблемные и перспективные направления развития территорий.

С целью возможности исследовать влияние различных нормативных моделей на результаты оценивания социально-экономического состояния территорий разработаны веб-инструменты, обеспечивающие управление многоверсионностью нормативных моделей. Реализованы функции редактирования, сохранения и перерасчета нормативных моделей, позволяющие выполнять расчет интегральных оценок на основе нескольких вариантов исходной иерархической структуры показателей и их нормативных значений. Функции перерасчета оценок комплексных показателей с учетом внесенных изменений в нормативной модели реализованы в виде хранимых процедур и выполняются на сервере после обновления пользователем моделей. Взаимодействие с СУБД осуществляется с помощью функций select и update через Rest API. Разработанные инструменты применены в веб-сервисе анализа качества жизни территорий Красноярского края (рисунок 3.2 и рисунок 3.3).

Качество жизни муниципальных образований Красноярского края в разрезе национальных проектов									
Рейтинг качества жизни 2019-2020гг. Детализация оценок по показателям Инструменты настройки модели О системе	Стандарт Настройка коэффициентов Конструктор иерархии показателей								
	Показатель	Единицы измерения	Коэффициент чувствительности	Желаемый тренд	Коэффициенты значимости показателей				
					Городские округа	МО с крупными промышленными объектами	Сельскохозяйственные и лесопромышленные территории	Отдаленные и северные территории	
	Q	Q	Q	(Все)	Q	Q	Q	Q	
	Комфортная среда				0.35	0.3	0.3	0.3	+ -
	Экология				0.4	0.2	0.1	0.2	+ -
	Жилье и городская среда				0.4	0.5	0.5	0.6	+ -
	Безопасные качественные автомобильные дороги				0.2	0.3	0.4	0.2	+ -
	Экономический рост				0.3	0.35	0.3	0.4	+ -
	Малое и среднее предпринимательство				0.2	0.1	0.1	0.3	+ -
	Количество малых и средних организаций, включая микропредприятия, на конец периода	ед.	1.5	+	0.1	0.2	0.2	0.25	-
	Объем инвестиций в основной капитал организаций малого предпринимательства, включая микропредприятия (юридических лиц)	тыс. руб.	1	+	0.35	0.3	0.3	0.25	+ -
	Объем инвестиций в основной капитал средних организаций	тыс. руб.	1	+	0.35	0.3	0.3	0.25	+ -
	Доля среднесписочной численности работников (без внешних совместителей) малых и средних организаций в среднесписочной численности работников (без внешних совместителей) всех организаций	%	1.5	+	0.2	0.2	0.2	0.25	+ -
	Цифровая экономика				0.1	0.05	0.05	0.05	+ -
	Производительность труда и поддержка занятости				0.3	0.4	0.4	0.4	+ -
	Международная кооперация и экспорт				0.1	0.2	0.2	0.15	+ -
	Магистральная инфраструктура				0.3	0.25	0.25	0.1	+ -
	Человеческий капитал				0.35	0.35	0.4	0.3	+ -
	Культура				0.15	0.15	0.15	0.1	+ -
	Демография				0.3	0.3	0.25	0.3	+ -
	Образование				0.2	0.15	0.2	0.2	+ -
	Здравоохранение				0.35	0.4	0.4	0.4	+ -

Рисунок 3.2 – Средства редактирования и сохранения нормативной модели в веб-сервисе анализа качества жизни территорий

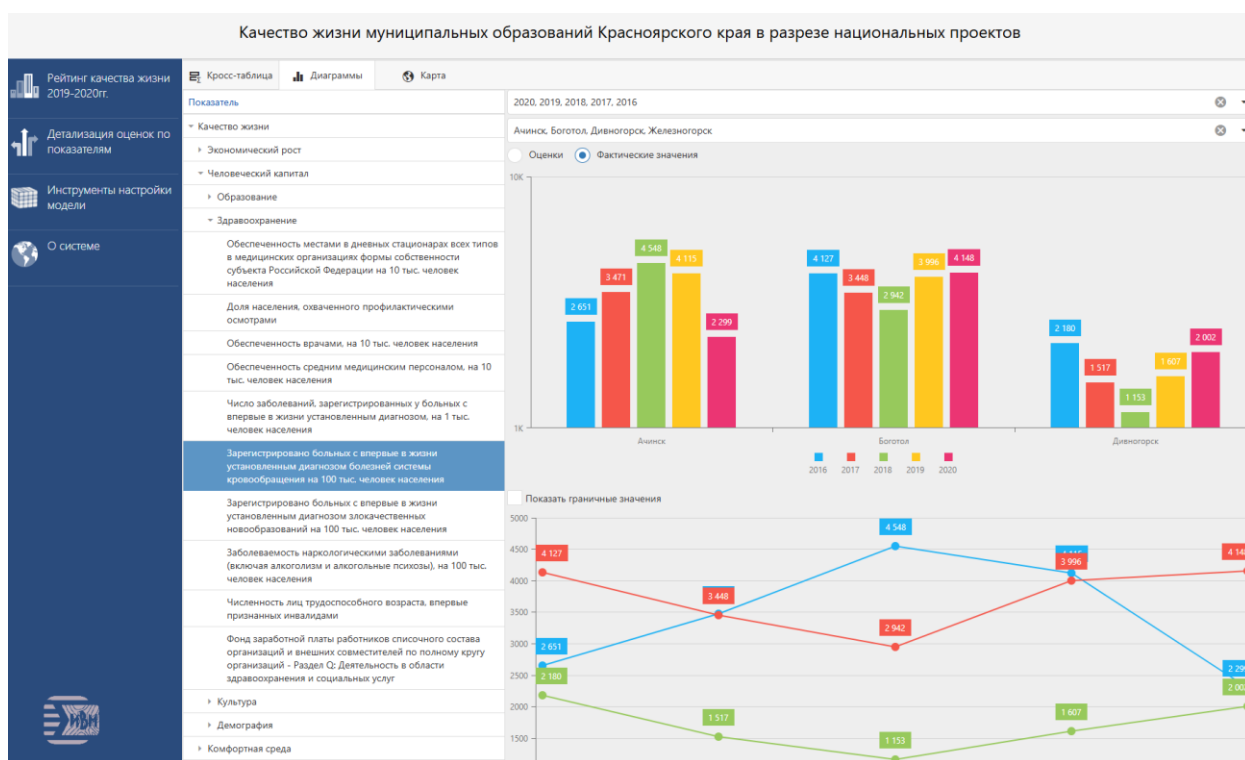


Рисунок 3.3 – Средства визуализации результатов оценивания на основе нормативной модели в веб-сервисе анализа качества жизни территорий

3.2. Инструменты информационной поддержки формирования решений в задачах управления природно-техногенной безопасностью территорий

В рамках развития средств информационной поддержки задач управления предупреждением чрезвычайных и аварийных ситуаций разработаны принципы построения интеллектуальной платформы. Предложена архитектура платформы, объединяющей разные аналитические методы и сервисы формирования управляющих решений. Разработана структура информационных ресурсов, логически увязывающая каталоги опасных событий, паспорта безопасности территорий, реестр аварийно-спасательных формирований и управленческие решения. Выполнена формализация перечисленных сущностей в виде показателей, позволяющая расширить возможности применения методов аналитической обработки и визуализации данных. Для реализации сервиса формирования решений проведена формализация и экспертная оценка прецедентов принятых решений. Совместная обработка числовых характеристик ситуаций и результатов управления позволяет сформировать базу знаний шаблонов управляющих решений. Архитектура платформы предусматривает

трансформацию существующих аналитических систем и дополнение информационных ресурсов за счет организации межсистемного обмена и федерализации данных мониторинга. Хранилище данных платформы обеспечивает не только реализацию методов оперативного и интеллектуального анализа данных, но и работу с пространственными данными и сценариями ситуаций. Для гибкости использования данных в предложенной архитектуре предусмотрены сервисы экспорта и аналитических функций сторонних BI-систем. Для построения прототипа платформы разработана система тестов, позволяющих оценивать надежность, масштабируемость и адаптивность компонентов.

3.3. Инструменты оперативного контроля технологии производства алюминия на основе обработки данных перемещения анодного массива в электролизерах

С целью обеспечения оперативного контроля технологии производства алюминия, предупреждения возникновения нарушений в технологическом процессе электролиза и повышения качества продукции разработан алгоритм оценки жидкого незавершенного производства на основе анализа временных рядов данных перемещения анодного массива в электролизерах.

Оценка незавершенного производства выполняется исходя из расчета разницы значений положения анодного массива в моменты окончания одной выливки и начала другой. Обнаружение начала и конца выливки выполняется с помощью алгоритма «смены уровней» (level shifts). Предполагается, что временной ряд состоит из последовательных интервалов, в которых данные находятся на стабильном уровне, и между этими интервалами возможны резкие изменения значений. Смена уровня определяется с помощью разности медиан между последовательными интервалами. Для выявленных изменений выполняется проверка значимости, позволяющая отделить изменения уровня от случайных шумов. После того как алгоритм выявляет потенциальные смены уровня, выполняется дополнительная обработка, включающая фильтрацию ложных срабатываний и агрегирование близко расположенных смен уровней, используя минимальный временной интервал между сменами уровня.

Апробация алгоритма оценки незавершенного производства выполнена для электролизеров опытного участка РА-550 АО «Саяногорск». На рисунке 3.4 представлен график перемещения анодного массива, где красными выделены точки, обнаруженные как моменты начала и конца выливки. На рисунке 3.5 представлен график динамики незавершенного производства, позволяющий технологам оценить риски снижения производительности электролизеров.

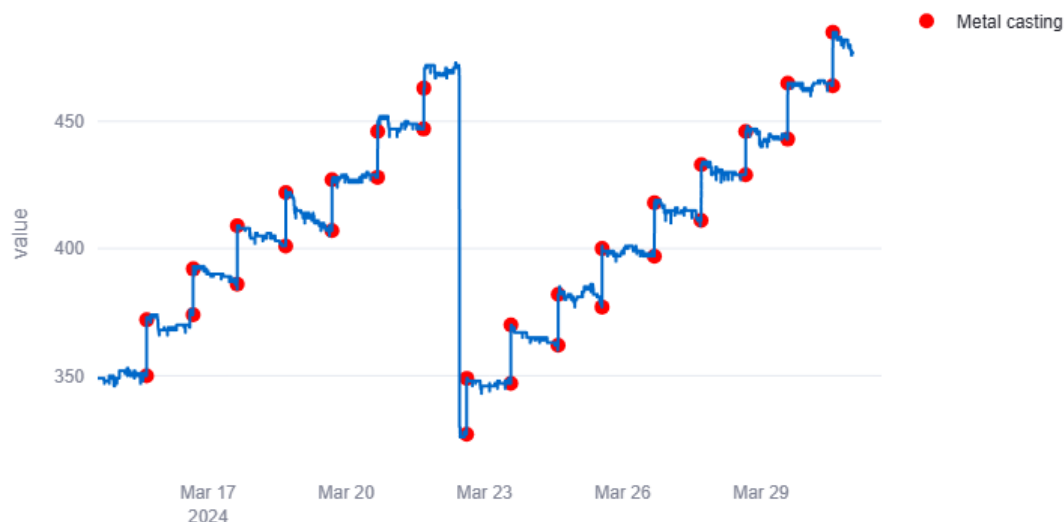


Рисунок 3.4 – График перемещения анодного массива: март 2024 года, электролизер № 2

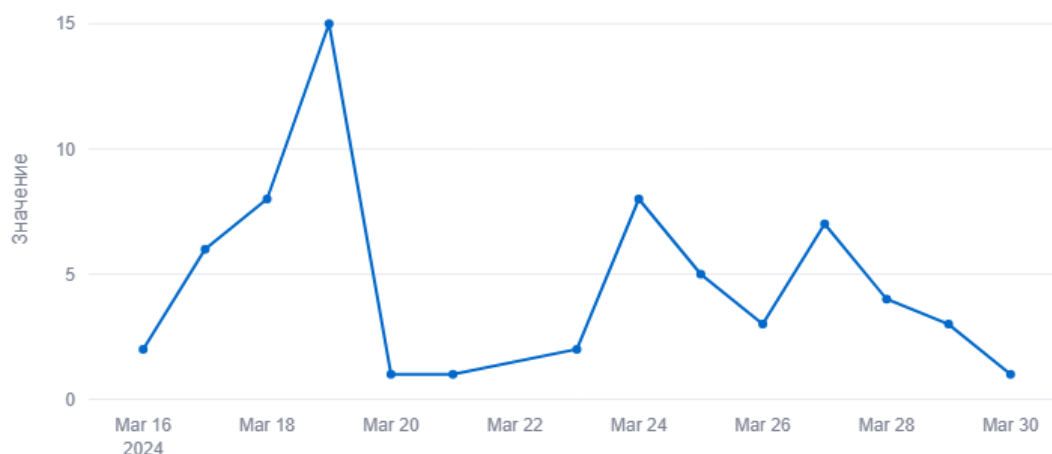


Рисунок 3.5 – Динамика уровня незавершенного производства: март 2024 года, электролизер № 2

3.4. Создание наборов данных сетевой активности информационно-телекоммуникационных систем для идентификации киберугроз методами машинного обучения

Активное развитие информационных технологий в различных областях, включая веб-сервисы и сервисы Интернета вещей (Internet of Things – IoT) сопряжено с ростом сложности сетевой инфраструктуры и повышением рисков киберугроз на которые необходимо реагировать адекватными способами. Задача обеспечения информационной безопасности является комплексной и требует применения различных технологий, в их числе сигнатурный анализ и методы машинного обучения для выявления сетевых аномалий, описывающих статистические расхождения между легитимными и наблюдаемыми событиями. Сложность

задачи заключается в наличии больших массивов данных, собираемых в сетевых инфраструктурах, конфигурации которых меняются с течением времени. Необходима автоматизация обработки и анализа данных для снижения трудоёмкости процессов обеспечения информационной безопасности. Методы машинного обучения позволяют автоматизировать обнаружение сетевых атак, получать дополнительную информацию о происходящих в сетевой инфраструктуре событиях безопасности, а также предотвращать нежелательные инциденты.

Исследование проблем накопления первичных данных и построения наборов данных (датасетов) для идентификации кибератак методами машинного обучения выполнялось на примере корпоративной сети Красноярского научного центра (ФИЦ КНЦ СО РАН) и развёрнутой в ней сети Интернета вещей.

Проведено исследование применимости существующих публичных наборов данных по киберугрозам для анализа безопасности применительно к рассматриваемой сети. Существующие датасеты имеют следующие недостатки: обученные на одном протоколе модели плохо работают на других; невозможно использовать признаки прикладного уровня из-за повсеместного использования шифрования; в большинстве наборов используются только признаки сетевого и транспортного уровней (L3/L4); устаревшие данные в наборах (некоторые наборы от 1999 года). Используемые для построения датасетов инструменты предобработки показывают значительные расхождения при выделении сетевых сессий и ошибки в расчётах значений их признаков, что может иметь существенное влияние на результаты машинного обучения. Практически все датасеты полностью получены в искусственной имитационной среде или изолированных окружениях с имитацией устройств, что не отражает реальные условия функционирования. Кроме того, с течением времени, интенсивность сетевого трафика и его временные параметры становятся совершенно другими, поэтому нужно учитывать информацию о загрузке и состоянии инфраструктуры передачи данных. В этой связи поведение сетевого трафика, продемонстрированное в собираемых для анализа данных, с течением времени перестаёт соответствовать его поведению в производственной среде. Системы обнаружения вторжений должны иметь значительное количество примеров реального сетевого трафика с характерными для целевых сервисов видами атак и данными типичного поведения пользователей, учитывающих свойства реальных сетей и охватывающих длительные периоды наблюдения, а также им необходимы средства актуализации, обеспечивающие регулярное пополнение примерами, отражающими влияние дрейфа атакующих концепций.

Исходя из вышеперечисленного было принято решение создавать собственные наборы, которые содержат актуальные данные из различных источников для сетевого, транспортного, прикладного уровней модели OSI и имеют расширенные признаки. Были сформулированы требования к наборам данных, которые включают общую и специальную части. Общая часть содержит требования, характерные для общедоступных наборов данных, в том числе: использование отраслевых стандартов и терминологии; возможность сравнения метаданных по различным признакам; полнота и сбалансированность; использование различных уровней источников по классификации OSI; единая классификация видов атак. Специальная часть содержит разработанные авторами дополнительные требования, которые не применяются при формировании общедоступных наборов данных: сохранение нескольких первых пакетов соединений; сохранение всех областей пакетов, включая заполнитель; сохранение расширенной информации об источнике аномального трафика (геопривязка, номер автономной системы). Использование указанных дополнительных признаков позволит выявлять атаки по скрытым каналам связи, а также замаскированные под легитимный трафик атаки на основе характеристик источника трафика.



Рисунок 3.6 – Источники данных по web-сервисам сети КНЦ СО РАН

На рисунке 3.6 показан фрагмент сети Красноярского научного центра, на котором собирались данные по web-сервисам. Красными рамками выделены источники данных:

центральный маршрутизатор, WWW-сервер. Ведётся сбор данных по протоколам DNS и HTTP/HTTPS, размер данных за 1 месяц составляет для журналов PCAP (Packet Capture) 1 млрд записей и 600 ГБ, для журналов WWW 20 млн записей и 4 ГБ.

Разработан программный комплекс, который предназначен для автоматизированной подготовки обучающих наборов данных для методов машинного обучения. Программа использует сигнатурные методы для выявления известных веб-атак и формирует обучающие наборы на основе пакетов вредоносного соединения из журналов PCAP. Схема алгоритма работы программного комплекса представлена на рисунке 3.7.

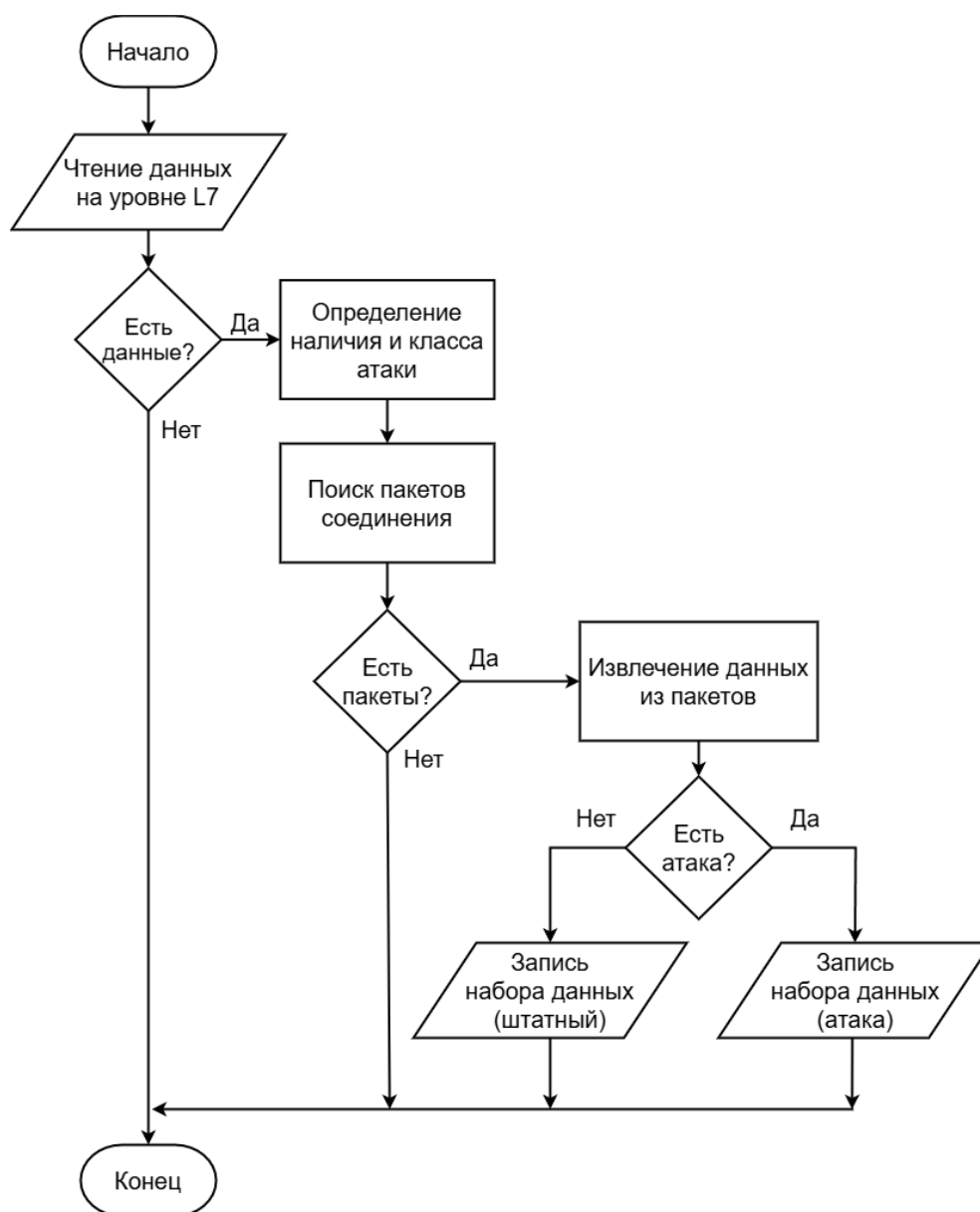


Рисунок 3.7 – Алгоритм работы программного комплекса

Программный комплекс получает входные данные в формате журнала веб-сервера nginx и apache, а также информацию о передаваемых пакетах в формате PCAP. Для идентификации атак используется метод сигнатурного анализа, который предоставляет информацию о типе атаки по классификациям OWASP TOP 10 и CAPEC. В случае выявления атаки для каждой сессии извлекается информация о пакетах источника по уровням модели OSI (канальный, сетевой, транспортный, прикладной). В результате формируются обучающие наборы для легитимного и нелегитимного трафика. Использование разнородных источников позволяет получать дополнительную информацию из штатных и скрытых полей сетевых пакетов, недоступную в журналах веб-серверов. Это позволит создать методы выявления кибератак по скрытым каналам связи, которые невозможно определить на прикладном уровне. С использованием разработанного программного комплекса сформированы обучающие наборы данных за период 06.2024–11.2024 по атакам на протоколы HTTP/HTTPS.

Еще одной областью интересов для создания обучающих наборов является безопасность коммуникаций в технологии Интернета вещей. Особенностью сетевого трафика Интернета вещей, с точки зрения его применимости для анализа аномалий, является изменчивость его характеристик, вызванная разнородностью событий, сценариев атак и их результатов, зависящих от развития методов защиты и применяемых средств уклонения. Для создания датасета разработана инфраструктура сбора данных Интернета вещей, обеспечивающая накопление сетевого трафика и имитацию кибератак (рисунок 3.8). Инфраструктура IoT располагается в корпоративной сети Красноярского научного центра СО РАН и включает устройства Интернета вещей, осуществляющие мониторинг технологических помещений с телекоммуникационным оборудованием, сервера сбора и распределения данных и прикладные программные системы мониторинга и анализа. Характеристики сетевой активности, входящие в популярные датасеты, выбраны в качестве словарей, используемых при разработке методов сбора и анализа данных, что позволит выполнять сравнение результатов работы методов машинного обучения, настроенных на собственные данные с исследованиями, использующими публичные датасеты.

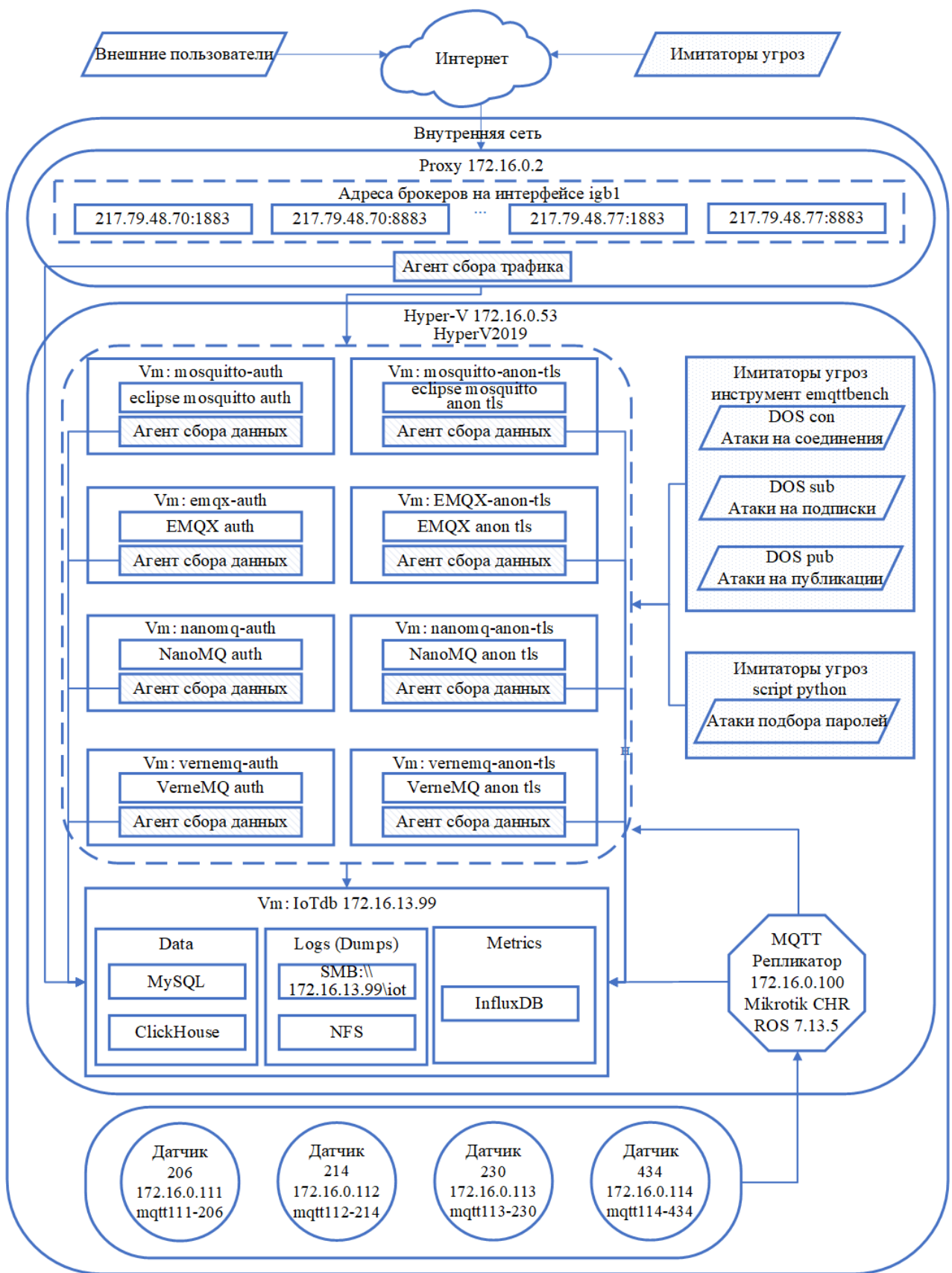


Рисунок 3.8 – Схема инфраструктуры сбора данных IoT

В качестве прикладного протокола Интернета вещей выбран стандарт MQTT, основанный на шаблоне «Публикации-Подписки». В обмене данными участвуют: Издатель (Publisher), MQTT Брокер (Broker) и Подписчик (Subscriber). Издатель собирает информацию или выполняет измерения, Подписчик получает и использует эту информацию, Брокер служит посредником между ними и раздаёт данные по подпискам на темы, определяющие их вид и источник. Выбор программной платформы для реализации MQTT брокеров определяется требованиями обеспечения производительности, уменьшения задержки, поддержки кластеризации, ограничения ресурсов и пр. Для учёта особенностей различных брокеров в инфраструктуре развёрнуты независимые инсталляции программных платформ: Eclipse Mosquitto, EMQX, NanoMQ, VerneMQ, на которых развёрнута работа 16 брокеров. Брокеры различаются настройками политик безопасности: авторизации, шифрования, а также расположением и доступностью их внешней и внутренней сети. Для публикации данных на каждую инсталляцию создан реплицирующий брокер.

Для сбора сетевого трафика в инфраструктуре реализованы программные агенты, расположенные на Proxu-сервере и на серверах брокеров. Агенты собирают нормальный трафик и трафик, возникающий при имитации угроз безопасности. Показатели сетевой активности, получаемые из трафика транспортного уровня на основе протокола TCP, объединяются с показателями, описывающими прикладной протокол Интернета вещей MQTT. Данные, собираемые на Proxu-сервере, содержат сведения о всех внешних источниках угроз. Агенты, работающие на брокерах, собирают как внешний, так и «внутренний» сетевой трафик. Кроме того, ими собираются метрики серверов: показатели утилизации процессора, памяти, сетевого канала, количество операций ввода/вывода, метрики, предоставляемые программным обеспечением брокера: количество активных клиентов, полученных и отправленных сообщений, их объём. Выполняется расчёт статических показателей, полученных анализом дампов сетевого трафика.

Расширение наборов данных выполняется с помощью имитации угроз безопасности, таких как:

- DOS con, массовые запросы к брокеру на подключение;
- DOS sub, массовые запросы к брокеру на подписку;
- DOS pub, массовые обращения к брокеру на публикацию;
- Brute-force attack, подбор пары логин/пароль для брокеров с настроенной аутентификацией.

Имитация атак выполняется как с одного источника, так и в распределенном виде. Собираемые агентами сырые данные не структурированы и для их использования будет выполняться деление трафика на сессии и расчёт характеристик полученных сессий.

Результатом исследований являются датасеты и инструменты их сбора и накопления, построенные на основе трафика реальной корпоративной сети, включающего данные веб-сервисов и сервисов Интернета вещей. Полученные датасеты предназначены для создания ML-систем идентификации и предотвращения вторжений, учитывающих характерные свойства сетевых инфраструктур и протоколов межмашинного взаимодействия. Применение актуальных и адекватных наборов данных позволяет выполнять тестирование корпоративных сетей и сервисов на устойчивость к атакам и снижать риски киберугроз.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ. ПРАКТИЧЕСКАЯ ЗНАЧИМОСТЬ РЕЗУЛЬТАТОВ

По разделу «Математическое моделирование процессов и устройств в условиях ближнего космоса» в 2024 году получены следующие результаты.

Представлена трехмерная численная двухжидкостная магнитогидродинамическая (МГД) модель накопления магнитной энергии при взаимодействии потока плазмы с препятствием. Эта модель применялась для решения задачи обтекания Венеры солнечным ветром. Согласно данным космических аппаратов перед планетой возникает слой усиленного магнитного поля, называемый магнитным барьером. В результате моделирования выявлены два фактора, объясняющие наблюдаемую асимметрию в направлении электрического поля.

Представлена математическая модель электрического поля в низкоширотной ионосфере в периоды высокой геомагнитной активности. Эта квазистационарная модель единого проводника ионосфера – атмосфера разработана для расчета электрических полей, создаваемых в околоземном пространстве токами, приходящими в ионосферу из магнитосферы. Для описания реалистичного магнитосферного электрического генератора использованы данные спутников группировки AMPERE о глобальном распределении продольных токов. Реалистичное описание электрического поля на высотах от 20 км и более играет важную роль в оценке вероятности пробоев радиоэлектронных устройств баллистических аппаратов.

В течение года разработаны математические модели тепло- и массопереноса в капиллярных структурах, создаваемых по аддитивной технологии. В частности, представлена математическая модель тепло- и массопереноса в бортовых конструкциях спутников со встроенными гипертеплопроводящими (ГТП) структурами. С помощью этих моделей проводится предварительный расчет несущих конструкций для бортовой радиоэлектронной аппаратуры спутников разных категорий от малых спутников до микроспутников с целью стабилизации температурного режима работы аппаратуры в условиях ближнего космоса. Стабилизация температурного режима ее работы увеличивает срок службы спутников, увеличивает их энерговооруженность и повышает надежность работы, а в требуемых случаях повышает точность предоставляемых ими данных.

По разделу «Математическое моделирование физических процессов и устройств» получены следующие результаты.

Создан вычислительный метод сортировки данных для спектров пропускания набора фотонных структур из диэлектрических материалов с периодической решеткой для построения

дерева решений. Сформулирована новая разновидность метода, называемого расширенным деревом решений, которая обеспечивает более высокую точность прогноза модели одновременно с хорошей объяснимостью. Разработанный метод расширенного дерева решений обеспечивает:

- бóльшую точность по сравнению с классическим деревом решений;
- для достижения аналогичной точности расширенному дереву решений требуется меньше данных по сравнению с классическим деревом решений;
- в сравнении с деревом решений с нечеткой кластеризацией разработанный метод при несколько более низкой точности позволяет получать объяснимую модель.

Созданный метод машинного обучения с учителем можно практически использовать в приложениях, где уже применяется обычное дерево решений, нейросети, случайный лес и другие методы машинного обучения с учителем как для классификационных, так и регрессионных задач. К примеру, он может быть использован на практике для анализа научных данных, распознавания и классификации текстов, изображений. Отличительной особенностью дерева решений относительно других методов машинного обучения с учителем является высокая «объяснимость» модели, т.е. возможность интерпретации результатов с целью раскрытия внутренних механизмов функционирования объекта исследований. Эта особенность полезна в научных исследованиях, особенно в таких сферах как медицина и автоматическое управление транспортом с людьми, где требуется критическая оценка прогноза и обнаружение вариантов сбоя в процессе работы.

Сформулирована математическая модель описания интерференционные проявлений эффекта LID (light-induced drift) в бихроматических оптических полях. На ее основании теоретически предсказана возможность генерации глубоких оптических супер-решёток для пленения и вращения резонансных примесных атомов, погруженных в холодный буферный газ.

В 2024 году в рамках сотрудничества с коллегами из Европейского центра передовых технологий водоподготовки (Wetsus) разработана модель нанофильтрации растворов, содержащих ионы солей и заряженные / незаряженные микрозагрязнители (вещества, используемые в фармацевтических препаратах). Расчетные данные сравнивались с данными физических экспериментов, которые проводились в Центре Wetsus с коммерческими нанофильтрационными мембранами и показали хорошее соответствие. Созданные модели для нанофильтрационной очистки подходят для эффективного удаления из растворов органических веществ. К ним, в частности, относятся микрозагрязнители, которые содержат

ингредиенты фармацевтических препаратов, косметических средств, анальгетических средств, а также рекреационных препаратов. С помощью этих моделей проводится предварительная настройка данных физических экспериментов для улучшения их результатов по задержанию примесей.

По разделу «Исследование больших данных, обнаружение новых знаний и прогнозирование состояния сложных систем и объектов» получены следующие результаты.

Разработаны инструменты поддержки формирования управленческих решений на основе интегрального оценивания социально-экономического состояния территорий. Разработана модель формирования управляющих рекомендаций на основе интегрального оценивания социально-экономического состояния территорий путем выявления и исследования проблем и причин. Модель построена на основе иерархии оценок показателей, позволяя выделять «проблемы» и «причины» текущего состояния. Разработаны инструменты управления многоверсионностью нормативных моделей, позволяющие исследовать влияние различных нормативных моделей на результаты интегрального оценивания. Разработанные инструменты применены в веб-сервисе анализа качества жизни территорий Красноярского края.

Представлены также инструменты информационной поддержки формирования решений в задачах управления природно-техногенной безопасностью территорий. Предложена архитектура платформы, объединяющей разные аналитические методы и сервисы формирования управляющих решений. Разработана структура информационных ресурсов, логически увязывающая каталоги опасных событий, паспорта безопасности территорий, реестр аварийно-спасательных формирований и управленческие решения для практического применения.

В качестве инструмента оперативного контроля технологии производства алюминия на основе обработки данных о перемещении анодного массива в электролизерах разработан алгоритм оценки жидкого незавершенного производства на основе анализа временных рядов таких данных. Апробация алгоритма оценки незавершенного производства выполнена для электролизеров опытного участка РА-550 АО «Саяногорск». Разработка обладает потенциалом для практического использования на других предприятиях.

Созданы наборы данных сетевой активности информационно-телекоммуникационных систем для идентификации киберугроз методами машинного обучения. Исследование проблем накопления первичных данных и построения наборов данных (датасетов) для идентификации кибератак методами машинного обучения выполнялось на примере корпоративной сети

Федерального исследовательского центра «Красноярский научный центр СО РАН» и развёрнутой в ней сети Интернета вещей. Разработка вносит существенный вклад в практическую защиту данных корпоративной сети и ее пользователей от систематических вредоносных атак. Созданные наборы могут быть полезны для других корпоративных сетей в целях идентификации киберугроз.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Список основных публикаций 2024 года по материалам итогового отчета

1. Еркаев Н.В., Горбунова К.Д. Компактная разностная схема для гидродинамической модели истечения атмосфер планет. // Вычислительные технологии. – 2024. – Т. 29, № 1. – С. 5-17. [Scopus Q4] DOI: 10.25743/ICT.2024.29.1.002
2. Boudjada M.Y., Biagi P.F., Eichelberger H.U., Nico G., Schwingenschuh K., Galopeau P.H.M., Solovieva M., Contadakis M., Denisenko V., Lammer H., Voller W., Giner F. Unusual Sunrise and Sunset terminator variations in the behavior of sub-ionospheric VLF phase and amplitude signals prior to the Mw7.8 Turkey Syria earthquakes of February 6, 2023 // Remote Sensing. – 2024. – Vol. 16. – Art. 4448. – 25 p. [WoS Q2] DOI: 10.3390/rs16234448
3. Zamay S.S., Denisenko V.V., Maxim V. Klimenko, Vladimir V. Klimenko, Sergey V. Anisimov. Mathematical simulation of the atmospheric electric field disturbance during geomagnetic storm on 17 March 2015 // Russian J. Physical Chemistry B. – 2024. – Vol. 18, No. 3. – P. 844-851. [WoS Q4] DOI: 10.1134/S1990793124700283
4. Замай С.С., Денисенко В.В., Клименко М.В., Клименко В.В., Анисимов С.В. Математическое моделирование возмущения атмосферного электрического поля во время геомагнитной бури 17 марта 2015 года // Химическая физика. – 2024. – Т. 43, № 6. – С. 81-90. DOI: 10.31857/S0207401X24060094
5. Denisenko V.V., Rozanov E.V., Belyuchenko K.V., Bessarab F.S., Golubenko K.S., Klimenko M.V. The ionospheric electric field perturbation with an increase in radon emanation // Russian J. Physical Chemistry B. – 2024. – Vol. 18, No. 3. – P. 837-843. [WoS Q4] DOI: 10.1134/S199079312470026X
6. Денисенко В.В., Розанов Е.В., Белюченко К.В., Бессараб Ф.С., Голубенко К.С., Клименко М.В. Возмущение ионосферного электрического поля при повышении эманации радона // Химическая физика. – 2024. – Т. 43, № 6. – С.72-80. DOI: 10.31857/S0207401X24060086
7. Denisenko V.V. Influence of relief on the atmospheric electric field // Solar-Terrestrial Physics. – 2024. – Vol. 10, Iss. 1. – P. 49-53. [WoS Q4] DOI: 10.12737/stp-101202407
8. Денисенко В.В. Влияние рельефа на атмосферное электрическое поле // Солнечно-земная физика. – 2024. – Т. 10, № 1. – С. 53-58. DOI: 10.12737/szf-101202407
9. Vasil'ev E.N. Simulation of the Process of Frost Formation on the Surface of the Heat Exchanger Fin. // Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics. – 2024. – Vol. 17 (3). – P. 388-397. [WoS Q4]

10. Vasil'ev E.N. Coordination of Parameters of a Thermoelectric System for Cooling Heat-Loaded Electronic Elements // Russian Microelectronics. – 2024. – Vol. 53 (5). – P. 464-470. [Scopus Q4]
11. Васильев Е. Н. Моделирование температурного режима и прочности ледяного покрова // Журнал Сибирского федерального университета. Техника и технологии. – 2024. – Т. 17 (7). – С. 853-862.
12. Васильев Е.Н. Оценка влияния снежного покрова на динамику льдообразования в пресном водоеме // Теплофизика и аэромеханика. – 2024. – Т. 31 (5). – С. 1033-1044.
13. Lasse K. Sørensen, Valeriy S. Gerasimov, Sergey V. Karpov and Hans Ågren. Development of discrete interaction models for ultra-fine nanoparticle plasmonics // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2024. – 26. – P. 24209-24245. [WoS Q1] DOI: 10.1039/D4CP00778F
14. A.S. Fedorov, E.V. Eremkin, P.O. Krasnov, V.S. Gerasimov, H. Ågren, S.P. Polyutov. A hybrid quantum–classical theory for predicting terahertz charge-transfer plasmons in metal nanoparticles on graphene // Journal of chemical physics. – 2024. – 160 (4). –P. 044117. [WoS Q1] DOI: 10.1063/5.0178247
15. Krasnov I.V. Optical manipulations without light forces: deep superlattice for trapping and rotation of impurity particles in a buffer gas // Laser Physics Letters. – 2024. – Vol. 21, No 9. – Art. 095501. – 7p. [WoS Q4] DOI: 10.1088/1612-202X/ad6e6e
16. Osorio S. Castaño, Ryzhkov I.I., Spruijt E., van der Wal A., Biesheuvel P.M., Dykstra J.E. Micropollutant removal via nanofiltration: The effect of salt concentration – Theory and experimental validation // Journal of Membrane Science. – 2025. – Vol. 713. – Art. 123347. [WoS Q1]
17. Apel P.Yu., Biesheuvel P.M., Bobreshova O.V., Borisov I.L., Vasil'eva V.I., Volkov V.V., Grushevenko E.A., Nikonenko V.V., Parshina A.V., Pismenskaya N.D., Ryzhkov I.I., Sharafan M.V., Yaroslavtsev A.B. Concentration Polarization in Membrane Systems // Membranes and Membrane Technologies. – 2024. – Vol. 6, No. 3. – P. 133-161. [WoS Q3]
18. Penkova T. Approbation of Intelligent Models for Predicting Technological Disruptions in the Aluminum Production // IEEE International Multi-Conference on Engineering, Computer and Information Sciences (SIBIRCON) / Novosibirsk, Russian Federation. – 2024. – P. 341-345. DOI: 10.1109/SIBIRCON63777.2024.10758500
19. Nicheporchuk V.V., Penkova T.G. Architecture of an intelligent territory security management system // IEEE International Multi-Conference on Engineering, Computer and Information

- Sciences (SIBIRCON) / Novosibirsk, Russian Federation. – 2024. – P. 372-377. DOI: 10.1109/SIBIRCON63777.2024.10758467
20. Morozov R., Mikhalev A. Neural Network Model of Traffic Flow Forecasting // IEEE International Multi-Conference on Engineering, Computer and Information Sciences (SIBIRCON) / Novosibirsk, Russian Federation. – 2024. – P. 401-404. DOI: 10.1109/SIBIRCON63777.2024.10758541
21. Korobko A., Benko N., Erina I., Aldoshkina A. M. Support for Building Infographic Models on the Multiforms Platform // IEEE International Multi-Conference on Engineering, Computer and Information Sciences (SIBIRCON) / Novosibirsk, Russian Federation. – 2024. – P. 384-390. DOI: 10.1109/SIBIRCON63777.2024.10758450
22. Алдошкина А.М., Пенькова Т.Г., Ноженкова Л.Ф. Поддержка принятия решений в территориальном управлении на основе метода интегрального оценивания качества жизни (на примере Красноярского края) // Информационные и математические технологии в науке и управлении. – 2024. – № 2(34). – С. 123-134. DOI: 10.25729/ESI.2024.34.2.012
23. Ничепорчук В.В., Ноженкова Л.Ф., Пенькова Т.Г., Ноженков А.И. Архитектура мультиагентной системы управления орбитальной группировкой // Сборник статей по материалам научной VII Всероссийской Пospelовской конференции «Гибридные и синергетические интеллектуальные системы». – 2024. – С. 371-379.
24. Безопасность России. Правовые, социально-экономические и научно-технические аспекты. Тематический блок «Региональные проблемы безопасности». Раздел I. Мониторинг, риски и безопасность Сибирского федерального округа. / Науч. руков. чл. корр. РАН Махутов Н.А., под ред. Москвичёва В.В. – М.: МГОФ «Знание», 2024. – 644 с.
25. Безопасность России. Правовые, социально-экономические и научно-технические аспекты. Тематический блок «Региональные проблемы безопасности». Раздел II. Территориальные риски Сибири. Кузбасс. Енисейская Сибирь. Байкал. / Науч. руков. чл. корр. РАН Махутов Н.А., под ред. Москвичёва В.В. – М.: МГОФ «Знание», 2024. – 624 с.
26. Исаева О.С. Построение онтологии для систематизации характеристик сети Интернета вещей // Онтология проектирования. – 2024. – Т. 14, № 2 (52). – С. 243-255. DOI: 10.18287/2223-9537-2024-14-2-243-255
27. Isaeva O. S. Formal model of the Internet of Things network // CSOC 2024, Lecture Notes in Networks and Systems. – 2024. – Vol. 1120. – P. 279–290. [Scopus Q4] DOI: 10.1007/978-3-031-70518-2

28. Isaev S., Doncov D. Internet Resource Analysis for Cyber Threat Source Detection // IEEE International Multi-Conference on Engineering, Computer and Information Sciences (SIBIRCON) / Novosibirsk, Russian Federation. – 2024. – P. 350-354. DOI: 10.1109/SIBIRCON63777.2024.10758459
29. Shaydurov V., Petrakova V. Three-parameter Regularization Algorithm for Pseudo-solution of Non-compatible Systems // Lobachevskii J. Mathematics. – 2024. – Vol. 45, № 1. – P. 328-335. [WoS Q2] DOI: 10.1134/S1995080224010487
30. Shaydurov V.V., Petrakova V.S. Semi-Lagrangian approximations of the transfer operator in divergent form // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. – 2024. – Vol. 39, № 3. – P. 157-164. [WoS Q4] DOI: 10.1515/rnam-2024-0015

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Свидетельства о регистрации программ для ЭВМ в 2024 г.

1. Адаев И.Р., Кареева Е.Д., Шанько Ю.В. Модуль расчета коэффициентов симметричного линейного многошагового метода для численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка. // Свидетельство о регистрации программ для ЭВМ № 2024610261 от 9 января 2024 г. – Правообладатель: ФИЦ КНЦ СО РАН.
2. Адаев И.Р., Кареева Е.Д., Шанько Ю.В. Модуль вычисления интервалов периодичности и устойчивости линейного многошагового метода для численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка. // Свидетельство о регистрации программ для ЭВМ № 2024686978 от 13 ноября 2024 г. – Правообладатель: ФИЦ КНЦ СО РАН.
3. Сиротинин А.А., Володько О.С. Программа для проектирования структуры оптимальной базовой сенсорной сети внутри здания с помощью генетического алгоритма. // Свидетельство о регистрации программ для ЭВМ № 2024682730 от 26 сентября 2024 г. – Правообладатель: ФИЦ КНЦ СО РАН.
4. Кононов Д.Д. Автоматизированная система подготовки обучающих наборов данных активности веб-сервисов на основе разнородных источников. // Свидетельство о регистрации программ для ЭВМ № 2024686983 от 13 ноября 2024 г. – Правообладатель: ФИЦ КНЦ СО РАН.