

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  
член-корреспондент РАН  
\_\_\_\_\_ А. А. Шпедт  
«    » января 2026 г.

ОТЧЕТ  
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛОЖНЫХ  
ФИЗИЧЕСКИХ И ПРОИЗВОДСТВЕННЫХ ПРОЦЕССОВ И СИСТЕМ  
(промежуточный, этап 2)

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

Руководитель НИР  
директор ИВМ СО РАН  
академик РАН

\_\_\_\_\_ В. В. Шайдуров

Красноярск 2026

## СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

|  |                 |                              |
|--|-----------------|------------------------------|
| Руководитель темы<br>директор ИВМ СО РАН<br>академик РАН             | _____           | В.В. Шайдуров<br>(Раздел 1)  |
|  | (подпись, дата) |                              |
| Исполнители:   |                 |                              |
| зам. директора ИВМ СО РАН по<br>научной работе, канд. техн. наук     | _____           | С.В. Исаев<br>(Раздел 3)     |
|  | (подпись, дата) |                              |
| зам. директора ИВМ СО РАН по<br>научной работе, канд. физ.-мат. наук | _____           | Д.А. Нестеров<br>(Раздел 1)  |
|  | (подпись, дата) |                              |
| уч. секр., канд. физ.-мат. наук                                      | _____           | А.В. Вяткин<br>(Раздел 1)    |
|  | (подпись, дата) |                              |
| зав. отд., канд. физ.-мат. наук                                      | _____           | В.С. Герасимов<br>(Раздел 2) |
|  | (подпись, дата) |                              |
| зав. отд., канд. техн. наук  | _____           | Т.Г. Пенькова<br>(Раздел 3)  |
|  | (подпись, дата) |                              |
| гл. науч. сотр., д-р физ.-мат. наук                                  | _____           | Н.В. Еркаев<br>(Раздел 1)    |
|  | (подпись, дата) |                              |
| гл. науч. сотр., д-р техн. наук                                      | _____           | Л.Ф. Ноженкова<br>(Раздел 3) |
|  | (подпись, дата) |                              |
| гл. науч. сотр., д-р физ.-мат. наук                                  | _____           | И.И. Рыжков<br>(Раздел 2)    |
|  | (подпись, дата) |                              |
| вед. науч. сотр., д-р физ.-мат. наук                                 | _____           | В.В. Денисенко<br>(Раздел 1) |
|  | (подпись, дата) |                              |
| вед. науч. сотр., д-р техн. наук                                     | _____           | О.С. Исаева<br>(Раздел 3)    |
|  | (подпись, дата) |                              |
| вед. науч. сотр., д-р физ.-мат. наук                                 | _____           | И.В. Краснов<br>(Раздел 2)   |
|  | (подпись, дата) |                              |
| ст. науч. сотр., канд. физ.-мат. наук                                | _____           | Е.Н. Васильев<br>(Раздел 1)  |
|  | (подпись, дата) |                              |
| ст. науч. сотр., канд. физ.-мат. наук                                | _____           | В.А. Деревянко<br>(Раздел 1) |
|  | (подпись, дата) |                              |
| ст. науч. сотр., канд. хим. наук                                     | _____           | Е.В. Елсуфьев<br>(Раздел 2)  |
|  | (подпись, дата) |                              |
| ст. науч. сотр., канд. физ.-мат. наук                                | _____           | А.Е. Ершов<br>(Раздел 2)     |
|  | (подпись, дата) |                              |

|                                       |                 |                              |
|---------------------------------------|-----------------|------------------------------|
| ст. науч. сотр., канд. физ.-мат. наук | _____           | В.С. Петракова<br>(Раздел 3) |
|                                       | (подпись, дата) |                              |
| науч. сотр., канд. физ.-мат. наук     | _____           | Л.В. Гилева<br>(Раздел 1)    |
|                                       | (подпись, дата) |                              |
| науч. сотр.                           | _____           | Д.Д. Кононов<br>(Раздел 3)   |
|                                       | (подпись, дата) |                              |
| науч. сотр., канд. техн. наук         | _____           | А.И. Ноженков<br>(Раздел 3)  |
|                                       | (подпись, дата) |                              |
| мл. науч. сотр., канд. физ.-мат. наук | _____           | В.В. Деревянко<br>(Раздел 1) |
|                                       | (подпись, дата) |                              |
| мл. науч. сотр., канд. техн. наук     | _____           | А.Н. Романов<br>(Раздел 1)   |
|                                       | (подпись, дата) |                              |
| мл. науч. сотр.                       | _____           | Н.П. Фадеева<br>(Раздел 2)   |
|                                       | (подпись, дата) |                              |
| мл. науч. сотр.                       | _____           | М.В. Якубович<br>(Раздел 1)  |
|                                       | (подпись, дата) |                              |
| прогр. 1-ой кат.                      | _____           | А.М. Алдошкина<br>(Раздел 3) |
|                                       | (подпись, дата) |                              |
| прогр. 1-ой кат.                      | _____           | Н.В. Кулясов<br>(Раздел 3)   |
|                                       | (подпись, дата) |                              |
| прогр. 1-ой кат.                      | _____           | И.А. Ларионова<br>(Раздел 3) |
|                                       | (подпись, дата) |                              |
| прогр. 1-ой кат.                      | _____           | А.В. Малышев<br>(Раздел 3)   |
|                                       | (подпись, дата) |                              |
| ст. инж.                              | _____           | Д.П. Емельянов<br>(Раздел 1) |
|                                       | (подпись, дата) |                              |
| ст. инж.                              | _____           | А.А. Сиротинин<br>(Раздел 3) |
|                                       | (подпись, дата) |                              |
| ст. инж.                              | _____           | И.В. Тимошина<br>(Раздел 1)  |
|                                       | (подпись, дата) |                              |
| инж.                                  | _____           | И.Р. Адаев<br>(Раздел 1)     |
|                                       | (подпись, дата) |                              |
| инж.                                  | _____           | Р.А. Голубев<br>(Раздел 1)   |
|                                       | (подпись, дата) |                              |
| инж.                                  | _____           | К.Д. Горбунова<br>(Раздел 1) |
|                                       | (подпись, дата) |                              |

|               |                 |                             |
|---------------|-----------------|-----------------------------|
| ИНЖ.          | _____           | В.М. Гусейнов<br>(Раздел 1) |
|               | (подпись, дата) |                             |
| ИНЖ.          | _____           | М.С. Максимов<br>(Раздел 1) |
|               | (подпись, дата) |                             |
| ИНЖ.          | _____           | И.А. Харченко<br>(Раздел 2) |
|               | (подпись, дата) |                             |
| ИНЖ.          | _____           | Г.В. Шадрина<br>(Раздел 2)  |
|               | (подпись, дата) |                             |
| нормоконтроль | _____           | А.А. Кадочников             |
|               | (подпись, дата) |                             |

## РЕФЕРАТ

Отчёт 85 с., 37 рис., 5 табл., 3 прил.

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

В соответствии с планами работ на 2025 год исследования проводились по трем разделам.

В разделе «Математическое моделирование процессов и устройств в условиях ближнего космоса» для количественного описания генерации электрического поля на границе магнитосферы Земли разработана математическая модель, основанная на численном решении уравнений холловской диссипативной магнито-гидродинамики, которая включает аномальную неоднородную удельную электропроводимость плазмы. На основе анализа результатов численного моделирования получены новые аналитические формулы, определяющие глобальную разность электрических потенциалов поперек магнитосферы Земли в зависимости от параметров набегающего на магнитосферу солнечного ветра: плотности, скорости и южной компоненты межпланетного магнитного поля. Эта разность потенциалов является важной величиной, характеризующей уровень возмущенности магнитосферы и ионосферы Земли при южной ориентации межпланетного магнитного поля.

Уточнена стационарная модель электропроводности ионосферного электрического поля, обусловленного движением среды. В уравнении электропроводности коэффициенты представляют собой тензор второго ранга. Поскольку проводимость в направлении магнитного поля на много порядков превосходит проводимости в поперечных направлениях, приближенно считается неизменность электрического потенциала вдоль каждой магнитной силовой линии. Это позволяет перейти к двумерному уравнению электропроводности, коэффициенты в котором получаются путем интегрирования вдоль лежащих на высотах 80-500 км участков магнитных силовых линий локальных Педерсеновской и Холловской проводимостей. Решаемое уравнение представляет собой закон сохранения заряда для полного тока, который наряду с током проводимости содержит динамо-часть, связанную с переходом в систему координат, движущуюся со скоростью среды.

Разработана математическая модель и выполнена её численная реализация для расчета тепло- и массопереноса в конструкциях со встроенными гипертеплопроводящими

(ГТП) структурами. Математическая модель обеспечивает расчет двумерного распределения температуры в продольном сечении и капиллярной нагрузки на границе раздела фаз теплоносителя. Капиллярная нагрузка позволяет определять ограничение по тепловой мощности, то есть максимальное тепловыделение источников тепла, при котором ГТП структура будет работать эффективно. С помощью математической модели по измеренным значениям теплофизических характеристик экспериментального образца, созданного по аддитивной технологии, были определены параметры его капиллярной структуры: эффективный радиус пор, проницаемость и эффективная теплопроводность. Полученные значения параметров позволяют использовать разработанные вычислительные алгоритмы для расчета конструкций со встроенными ГТП структурами сложной формы, что актуально для изделий, создаваемых по аддитивным технологиям на 3D принтерах.

В разделе «Математическое моделирование физических микро- и нано-процессов» в целях создания репрезентативного обучающего набора данных для моделирования связанных состояний в континууме (ССК) в диэлектрических метаповерхностях разработана и сформирована специализированная база данных, содержащая 18 836 успешно идентифицированных случаев симметрично-защищённых ССК. Набор включает четыре входных параметра (геометрические и оптические характеристики структуры) и четыре целевых параметра (спектральные характеристики резонанса Фано). Данные получены в результате автоматизированного численного моделирования 100 000 конфигураций методом конечных элементов с последующей фильтрацией мод по критериям симметрии, локализации и модовой структуры.

Построена математическая модель, описывающая трехмерные нелинейные интерференционные явления в эффекте светоиндуцированного дрейфа атомов (СИД). На основании этой модели разработана трехмерная оптическая сверхрешетка нового типа, позволяющая формировать стабильный периодический массив локализованных, отделённых друг от друга атомных кластеров.

Разработана математическая модель фильтрации водных растворов с большим числом компонент. С помощью модели теоретически исследован эффект концентрации соли и заряда поверхности мембраны на разделение соли (хлорид натрия) и анионного красителя Бриллиантовый желтый в водном растворе. Показано, что коэффициент разделения возрастает с уменьшением концентрации соли и увеличением абсолютной величины заряда поверхности в отрицательной области. Это объясняется электростатическим взаимодействием анионов красителя с отрицательно заряженной поверхностью мембраны, а также экранированием заряда мембраны ионами натрия при повышении концентрации соли. Полученные результаты могут быть использованы для

теоретического обоснования мембранных методов разделения солей и красителей при очистке сточных вод, получаемых в процессе синтеза красителей для нужд текстильной и лакокрасочной промышленности.

В разделе «Технологии создания информационно-аналитических систем территориального и промышленного управления» представлены разработанные модели, методы и программные средства для интеллектуального анализа в задачах поддержки принятия решений территориального и промышленного управления. В рамках развития аналитических средств цифровой платформы для интегрального оценивания социально-экономического состояния территорий разработаны инструменты построения многоверсионных нормативных моделей и анализа результатов многоверсионного моделирования. Созданные инструменты позволяют выполнять тонкую настройку коэффициентов и структуры нормативных моделей комплексных показателей и исследовать результаты оценивания для выявления «проблемных» территорий и формирования соответствующих управляющих воздействий.

В рамках развития средств информационной поддержки задач управления предупреждением чрезвычайных и аварийных ситуаций выполнена систематизация и разработана универсальная структура информационных ресурсов. Структура отражает необходимость и достаточность данных для планирования, реализации и контроля оперативных и предупредительных мероприятий, позволяет формализовать описание сценариев для формирования баз знаний и алгоритмизации процессов поддержки принятия решений.

С целью обеспечения оперативного контроля технологии производства алюминия выполнена разработка интеллектуальных моделей и алгоритмических средств для раннего выявления отклонений в технологическом процессе по данным мгновенного мониторинга на основе применения методов интеллектуального анализа и нейросетевых технологий. Разработанные средства позволяют своевременно определять тип нарушения и определять источник его возникновения для устранения проблемы.

Разработан метод подготовки обучающих наборов данных из многоуровневых источников на основе введенной единицы агрегации «сеанс». Полученные наборы могут быть использованы в системах обнаружения и предотвращения вторжений на веб-сервисы на основе машинного обучения. Метод включает использование дополнительных признаков на основе характеристик источников трафика. Разработан кроссплатформенный программный комплекс для автоматизированного распределенного формирования обучающих наборов данных из многоуровневых источников на уровнях L3, L4, L7 модели OSI.

Предложен и апробирован метод обработки данных сетевой активности, который решает ключевые проблемы высокоразмерных данных в задачах кибербезопасности. Он представляет собой многоэтапную процедуру отбора признаков, сочетающую анализ линейных зависимостей (коэффициент корреляции, VIF – variance inflation factor), анализ нелинейных зависимостей (взаимная информация), оценку стабильности признаков на бутстреп-выборках. Метод повышает эффективность систем обнаружения аномалий за счёт компактного и устойчивого признакового пространства, а также обеспечивает интерпретируемость, необходимую для принятия решений в реальных системах безопасности. Метод применим к широкому кругу задач с зависимыми, шумными и многомерными данными.

## СОДЕРЖАНИЕ

|   |    |
|---|----|
| ВВЕДЕНИЕ .....  | 11 |
| 1 Математическое моделирование процессов и устройств в условиях ближнего космоса..  | 15 |
| 1.1 Накопление магнитной энергии и ее преобразование в тепло и кинетическую энергию плазмы .....  | 15 |
| 1.2 Математическая модель ионосферного электрического поля, обусловленного движением среды .....  | 19 |
| 1.3 Численная реализация математических моделей и проведение расчетов на примере конструкции образца плоской тепловой трубы, созданной по аддитивной технологии ..                              | 21 |
| 2 Математическое моделирование физических микро- и нано-процессов.....  | 34 |
| 2.1 Разработка и анализ обучающего набора данных методом машинного обучения для моделирования связанных состояний в континууме .....  | 34 |
| 2.2 Математическая модель глубокой трёхмерной полихроматической оптической сверхрешётки нового типа для пленения и долговременного удержания резонансных примесных атомов в буферном газе ..... | 42 |
| 2.3 Математическая модель фильтрации многокомпонентных систем и ее применение к разделению красителей и солей в водных растворах .....  | 44 |
| 2.4 Список использованных источников .....  | 51 |
| 3 Технологии создания информационно-аналитических систем территориального и промышленного управления.....   | 54 |
| 3.1 Средства многоверсионного анализа результатов оценивания социально-экономического состояния территорий .....  | 54 |
| 3.2 Средства информационной поддержки управления природно-техногенной безопасностью территорий .....  | 58 |
| 3.3 Средства раннего выявления отклонений в технологическом процессе на основе применения методов интеллектуального анализа и нейросетевых технологий.....                                      | 60 |
| 3.4 Алгоритм сегментации числовых временных рядов с многомодальным распределением элементов .....   | 65 |
| 3.5 Методы обработки данных и критерии оценки для обнаружения киберугроз в информационно-телекоммуникационных системах на основе алгоритмов машинного обучения.....                             | 68 |
| 3.6 Список использованных источников .....  | 75 |
| ЗАКЛЮЧЕНИЕ. ПРАКТИЧЕСКАЯ ЗНАЧИМОСТЬ РЕЗУЛЬТАТОВ .....   | 76 |

|  |    |
|--|----|
| ПРИЛОЖЕНИЕ А. Список основных публикаций 2025 года по материалам<br>представляемого отчета .....               | 79 |
| ПРИЛОЖЕНИЕ В. Свидетельства о регистрации программ для ЭВМ в 2025 году.....                                    | 82 |
| ПРИЛОЖЕНИЕ С. Список основных докладов на конференциях 2025 года по материалам<br>представляемого отчета ..... | 83 |

## ВВЕДЕНИЕ

В 2025 году работа по проекту велась по трем разделам:

- Математическое моделирование процессов и устройств в условиях ближнего космоса;
- Математическое моделирование физических микро- и нано-процессов;
- Технологии создания информационно-аналитических систем территориального и промышленного управления.

В разделе «Математическое моделирование процессов и устройств в условиях ближнего космоса» для количественного описания генерации электрического поля на границе магнитосферы Земли разработана математическая модель, основанная на численном решении уравнений холловской диссипативной магнито-гидродинамики, которая включает аномальную неоднородную удельную электропроводимость плазмы. На основе анализа результатов численного моделирования получены новые аналитические формулы, определяющие глобальную разность электрических потенциалов поперек магнитосферы Земли в зависимости от параметров набегающего на магнитосферу солнечного ветра: плотности, скорости и южной компоненты межпланетного магнитного поля. Эта разность потенциалов является важной величиной, характеризующей уровень возмущенности магнитосферы и ионосферы Земли при южной ориентации межпланетного магнитного поля.

Уточнена стационарная модель электропроводности ионосферного электрического поля, обусловленного движением среды. В уравнении электропроводности коэффициенты представляют собой тензор второго ранга. Поскольку проводимость в направлении магнитного поля на много порядков превосходит проводимости в поперечных направлениях, приближенно считается неизменность электрического потенциала вдоль каждой магнитной силовой линии. Это позволяет перейти к двумерному уравнению электропроводности, коэффициенты в котором получаются путем интегрирования вдоль лежащих на высотах 80-500 км участков магнитных силовых линий локальных Педерсеновской и Холловской проводимостей. Решаемое уравнение представляет собой закон сохранения заряда для полного тока, который наряду с током проводимости содержит динамо-часть, связанную с переходом в систему координат, движущуюся со скоростью среды.

Разработана математическая модель и выполнена её численная реализация для расчета тепло- и массопереноса в конструкциях со встроенными гипертеплопроводящими (ГТП) структурами. Математическая модель обеспечивает расчет двумерного распределения температуры в продольном сечении и капиллярной нагрузки на границе

раздела фаз теплоносителя. Капиллярная нагрузка позволяет определять ограничение по тепловой мощности, то есть максимальное тепловыделение источников тепла, при котором ГТП структура будет работать эффективно. С помощью математической модели по измеренным значениям теплофизических характеристик экспериментального образца, созданного по аддитивной технологии, были определены параметры его капиллярной структуры: эффективный радиус пор, проницаемость и эффективная теплопроводность. Полученные значения параметров позволяют использовать разработанные вычислительные алгоритмы для расчета конструкций со встроенными ГТП структурами сложной формы, что актуально для изделий, создаваемых по аддитивным технологиям на 3D принтерах.

В разделе «Математическое моделирование физических микро- и нано-процессов» в целях создания репрезентативного обучающего набора данных для моделирования связанных состояний в континууме (ССК) в диэлектрических метаповерхностях разработана и сформирована специализированная база данных, содержащая 18 836 успешно идентифицированных случаев симметрично-защищённых ССК. Набор включает четыре входных параметра (геометрические и оптические характеристики структуры) и четыре целевых параметра (спектральные характеристики резонанса Фано). Данные получены в результате автоматизированного численного моделирования 100 000 конфигураций методом конечных элементов с последующей фильтрацией мод по критериям симметрии, локализации и модовой структуры.

Построена математическая модель, описывающая трехмерные нелинейные интерференционные явления в эффекте светоиндуцированного дрейфа атомов (СИД). На основании этой модели разработана трехмерная оптическая сверхрешетка нового типа, позволяющая формировать стабильный периодический массив локализованных, отделённых друг от друга атомных кластеров.

Разработана математическая модель фильтрации водных растворов с большим числом компонент. С помощью модели теоретически исследован эффект концентрации соли и заряда поверхности мембраны на разделение соли (хлорид натрия) и анионного красителя Бриллиантовый желтый в водном растворе. Показано, что коэффициент разделения возрастает с уменьшением концентрации соли и увеличением абсолютной величины заряда поверхности в отрицательной области. Это объясняется электростатическим взаимодействием анионов красителя с отрицательно заряженной поверхностью мембраны, а также экранированием заряда мембраны ионами натрия при повышении концентрации соли. Полученные результаты могут быть использованы для теоретического обоснования мембранных методов разделения солей и красителей при

очистке сточных вод, получаемых в процессе синтеза красителей для нужд текстильной и лакокрасочной промышленности.

В разделе «Технологии создания информационно-аналитических систем территориального и промышленного управления» представлены разработанные модели, методы и программные средства для интеллектуального анализа в задачах поддержки принятия решений территориального и промышленного управления. В рамках развития аналитических средств цифровой платформы для интегрального оценивания социально-экономического состояния территорий разработаны инструменты построения многоверсионных нормативных моделей и анализа результатов многоверсионного моделирования. Созданные инструменты позволяют выполнять тонкую настройку коэффициентов и структуры нормативных моделей комплексных показателей и исследовать результаты оценивания для выявления «проблемных» территорий и формирования соответствующих управляющих воздействий.

В рамках развития средств информационной поддержки задач управления предупреждением чрезвычайных и аварийных ситуаций выполнена систематизация и разработана универсальная структура информационных ресурсов. Структура отражает необходимость и достаточность данных для планирования, реализации и контроля оперативных и предупредительных мероприятий, позволяет формализовать описание сценариев для формирования баз знаний и алгоритмизации процессов поддержки принятия решений.

С целью обеспечения оперативного контроля технологии производства алюминия выполнена разработка интеллектуальных моделей и алгоритмических средств для раннего выявления отклонений в технологическом процессе по данным мгновенного мониторинга на основе применения методов интеллектуального анализа и нейросетевых технологий. Разработанные средства позволяют своевременно определять тип нарушения и определять источник его возникновения для устранения проблемы.

Разработан метод подготовки обучающих наборов данных из многоуровневых источников на основе введенной единицы агрегации «сеанс». Полученные наборы могут быть использованы в системах обнаружения и предотвращения вторжений на веб-сервисы на основе машинного обучения. Метод включает использование дополнительных признаков на основе характеристик источников трафика. Разработан кроссплатформенный программный комплекс для автоматизированного распределенного формирования обучающих наборов данных из многоуровневых источников на уровнях L3, L4, L7 модели OSI.

Предложен и апробирован метод обработки данных сетевой активности, который решает ключевые проблемы высокоразмерных данных в задачах кибербезопасности. Он представляет собой многоэтапную процедуру отбора признаков, сочетающую анализ линейных зависимостей (коэффициент корреляции, VIF – variance inflation factor), анализ нелинейных зависимостей (взаимная информация), оценку стабильности признаков на бутстреп-выборках. Метод повышает эффективность систем обнаружения аномалий за счёт компактного и устойчивого признакового пространства, а также обеспечивает интерпретируемость, необходимую для принятия решений в реальных системах безопасности. Метод применим к широкому кругу задач с зависимыми, шумными и многомерными данными.

# 1 Математическое моделирование процессов и устройств в условиях ближнего космоса

## 1.1 Накопление магнитной энергии и ее преобразование в тепло и кинетическую энергию плазмы

При обтекании солнечным ветром магнитосферы Земли формируется магнитослой, в котором накапливается магнитная энергия, которая при определенных условиях может затрачиваться на ускорение плазмы, проникающей внутрь магнитосферы, а также на диссипацию электрических токов, втекающих в ионосферу Земли и порождающих наземные магнитные возмущения. При этом ключевыми факторами, определяющими процессы накопления и уменьшения магнитной энергии в магнитослое, являются величина и направление межпланетного магнитного поля (ММП) солнечного происхождения. Для количественного описания этих процессов разработана математическая модель, основанная на численном решении уравнений холловской диссипативной магнито-гидродинамики, которая включает неоднородную удельную электропроводимость плазмы и позволяет рассчитать электрическое поле на границе магнитосферы, а также глобальную разность электрических потенциалов поперек магнитосферы:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{V}) + \nabla \cdot \left( \rho \mathbf{V} \mathbf{V} - \frac{1}{4\pi} \mathbf{B} \mathbf{B} \right) + \nabla \left( P + \frac{1}{8\pi} B^2 \right) &= 0, \\
 \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} \rho V^2 + \frac{1}{8\pi} B^2 + \frac{3}{2} P \right) + \nabla \cdot \left[ \mathbf{V} \left( \frac{1}{2} \rho V^2 + \frac{5}{2} P \right) \right] \\
 + \nabla \cdot \left[ \frac{1}{4\pi} \mathbf{B} \times \mathbf{V} \times \mathbf{B} + \frac{1}{4\pi e n_e} \mathbf{J} \times \mathbf{B} \times \mathbf{B} + \frac{c}{4\pi} \eta \mathbf{J} \times \mathbf{B} \right] &= 0, \\
 \frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{B}) - \nabla \times (\mathbf{V} \times \mathbf{B}) + \nabla \times \left( \frac{1}{e n_e} \mathbf{J} \times \mathbf{B} \right) + \nabla \times (c \eta \mathbf{J}) &= 0, \\
 \frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) &= 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \\
 \mathbf{J} &= \frac{c}{4\pi} \nabla \times \mathbf{B}.
 \end{aligned}$$

В этих уравнениях  $\rho$ ,  $P$ ,  $\mathbf{V}$  – массовая плотность, давление и скорость плазмы, состоящей из протонов и электронов,  $\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{J}$  – магнитная индукция и плотность электрического тока,  $n_e$  – концентрация электронов, равная концентрации протонов в силу условия квази-нейтральности,  $\eta$  – удельное электрическое сопротивление плазмы,  $c$  – скорость света,  $e$  – заряд электрона. Модель описывает как процесс накопления магнитной энергии в магнитослое, прилегающем к магнитосферной границе, так и диффузию магнитных полей на границе магнитосферы земли.

На рисунке 1.1 показана зависимость от времени интенсивности магнитного поля в магнитослое в точке стагнации солнечного ветра при северном направлении ММП. Из этого графика видно, что максимальное магнитное поле на границе магнитосферы возрастает и постепенно приближается к своему предельному значению, при котором плотность магнитной энергии ограничена динамическим напором солнечного ветра  $P_{dsw} = \rho_{sw} V_{sw}^2$ . При этом характерное время перехода к установившемуся состоянию составляет  $t = 6R/V_{sw}$  ( $R$  – расстояние от центра Земли до подсолнечной границы магнитосферы,  $V_{sw}$  – скорость солнечного ветра). Для типичных значений параметров ветра  $V_{sw} = 500$  км/с и  $R = 10 R_E$  ( $R_E$  – радиус Земли) максимальная интенсивность магнитного поля устанавливается примерно за 13 минут. В течение этого времени распределение всех плазменных параметров магнитослоя (давления, плотности, температуры) приходит в стационарное состояние.

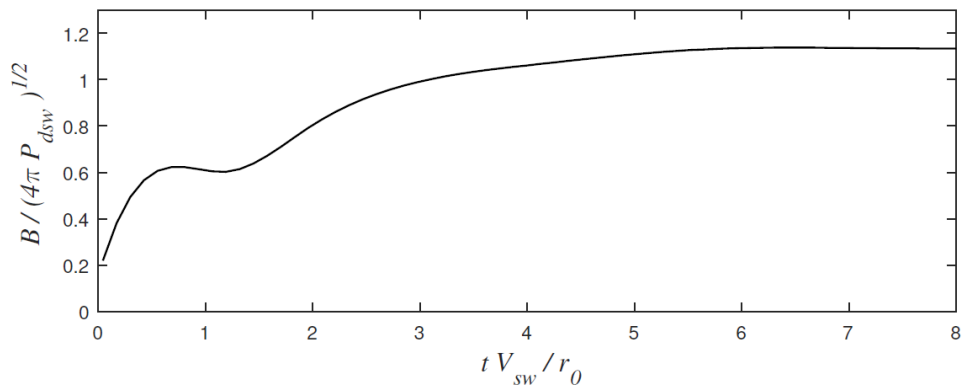


Рисунок 1.1 – Изменение максимальной индукции магнитного поля на границе магнитосферы Земли в зависимости от времени

На рисунке 1.2 показаны стационарные распределения напряженности магнитного поля солнечного происхождения в магнитослое, граничащим с магнитосферой, внутри которой заключено магнитное поле Земли. При этих условиях накопленная в магнитослое энергия магнитного поля внутрь магнитосферы не поступает, а магнитные силовые линии в солнечном ветре и внутри магнитосферы топологически не связаны. Ситуация кардинально меняется, когда ММП резко меняет направление от севера к югу. Особенно часто такое бывает в периоды активного Солнца. При южном направлении ММП магнитное поле в магнитослое становится антипараллельным магнитному полю Земли. При наличии конечной электропроводимости плазмы возникает взаимная диффузия магнитных полей на границе магнитосферы, генерируется электрическое поле и возникает поток электромагнитной энергии из магнитослоя внутрь магнитосферы. В результате уменьшается магнитная энергия в магнитослое и кардинально меняется топологическая картина магнитных силовых линий, а именно силовые линии из солнечного ветра, берущие

начало на Солнце, проникают внутрь магнитосферы вплоть до поверхности Земли. Вдоль открытых магнитных силовых линий могут свободно перемещаться заряженные частицы и втекать электрические токи с границы магнитосферы в ионосферу Земли. Эти токи создают магнитные возмущения, регистрируемые на уровне Земли. При этом формируется глобальное распределение электрического потенциала на границе магнитосферы, которое проецируется в ионосферу.

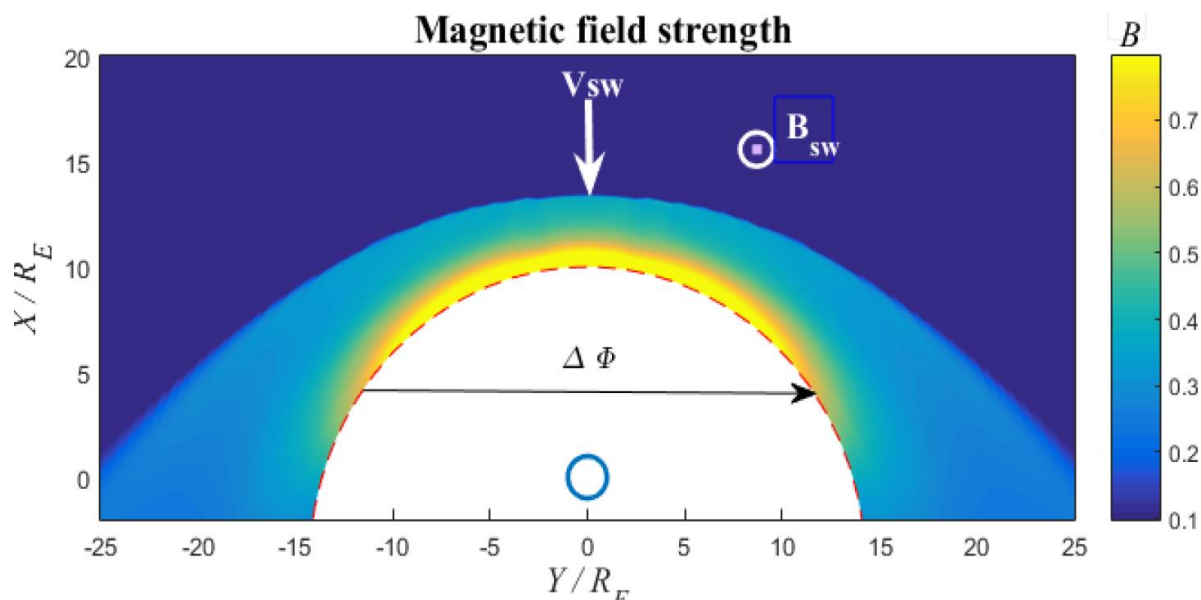


Рисунок 1.2 – Распределение интенсивности магнитного поля вокруг магнитосферы Земли,  $\Delta\Phi$  — глобальная разность электрических потенциалов поперек магнитосферы, связанная с параметрами солнечного ветра

Показано, что сильно неоднородная конечная электропроводимость, обусловленная плазменной турбулентностью, играет важную роль в генерации электрического поля в тонком диссипативном пограничном слое на границе магнитосферы, показанном на рисунке 1.3, где красным цветом выделена зона повышенного удельного сопротивления плазмы.

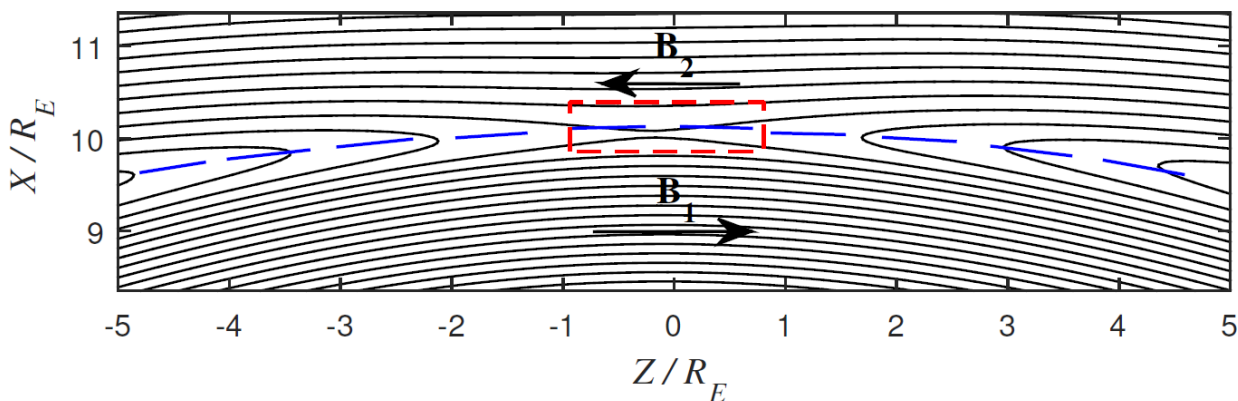


Рисунок 1.3 – Диссипативный пограничный слой (область магнитной диффузии)

Численное моделирование этого слоя, согласующееся с внешним обтеканием магнитосферы солнечным ветром, позволило установить связь между глобальной разностью электрических потенциалов поперек магнитосферы и параметрами солнечного ветра: плотностью и скоростью ветра, а также с величиной и направлением ММП. Для южного направления ММП на основе серии расчетов получена аналитическая формула для глобальной разности электрических потенциалов

$$\Delta\Phi = k (V_{sw}B_{sw\perp}) R_m, \quad (1.1)$$

где  $B_{sw\perp}$  – ортогональная скорости компонента магнитного поля в солнечном ветре,  $R_m$  – радиус кривизны границы магнитосферы в дневной части, обращенной к Солнцу, коэффициент  $k$  максимален при строго южном направлении  $B_{sw\perp}$  и монотонно убывает с увеличением угла отклонения вектора от южного направления; кроме того, коэффициент  $k$  является функцией безразмерного параметра  $M_{A\perp} = (4\pi m n_{sw})^{1/2} V_{sw} / B_{sw\perp}$  в солнечном ветре. В частности, при увеличении  $M_{A\perp}$  в два раза от 5 до 10 коэффициент  $k$  увеличивается от 0.6 до 0.7. Радиус кривизны  $R_m$  зависит от динамического давления ( $P_{dsw}$ ) солнечного ветра

$$R_m = 0.68 R_E P_d^{-1/6.6}, \quad P_{dsw} = m n_{sw} V_{sw}^2, \quad (1.2)$$

где  $m$  и  $n_{sw}$  – масса и плотность частиц в солнечном ветре, давление  $P_d$  измеряется в системе СИ (Па). Для довольно типичных значений  $B_{sw} = 5$  нТл,  $V_{sw} = 500$  км/с и  $P_d = 2$  нПа получаем значения  $k = 0.65$ ,  $R_m = 14 R_E$ ,  $\Delta\Phi = 145$  кВ.

На основе анализа результатов численного моделирования получены новые аналитические формулы (1.1), (1.2), определяющие глобальную разность электрических потенциалов поперек магнитосферы Земли в зависимости от параметров набегающего на магнитосферу солнечного ветра: плотности, скорости и южной компоненты межпланетного магнитного поля. Эта разность потенциалов является важной величиной, характеризующей уровень возмущенности магнитосферы и ионосферы Земли при южном направлении межпланетного магнитного поля.

В результате численного моделирования были определены ключевые факторы, определяющие скорость накопления магнитной энергии на границе магнитосферы Земли, а также преобразования магнитной энергии в тепло и кинетическую энергию плазмы.

## 1.2 Математическая модель ионосферного электрического поля, обусловленного движением среды

Используется стационарная модель электропроводности. В уравнении электропроводности коэффициенты представляют собой тензор второго ранга. Поскольку проводимость в направлении магнитного поля на много порядков превосходит проводимости в поперечных направлениях, приближенно считается, что электрический потенциал неизменен вдоль каждой магнитной силовой линии. Это позволяет перейти к двумерному уравнению электропроводности, коэффициенты в котором получаются путем интегрирования вдоль лежащих на высотах 80-500 км участков магнитных силовых линий локальных Педерсеновской и Холловской проводимостей. Эти интегралы обозначаем  $\Sigma_P$  и  $\Sigma_H$ . Трехмерные распределения локальных проводимостей мы получаем с помощью эмпирических моделей ионосферной среды IRI-2016, MSIS 1990 E, а также модели геомагнитного поля IGRF, которая используется еще и для построения силовых линий. Особый интерес представляет низкоширотная часть модели, где определяющей является интегральная проводимость Каулинга  $\Sigma_C = \Sigma_P + \Sigma_H^2 / \Sigma_P$ . Ее распределение в ионосфере в 18 часов универсального времени 1 февраля 2025 года показано на рисунке 1.4.

Математическое содержание модели состоит в численном решении двумерной эллиптической краевой задачи с несамосопряженным оператором. Для этого используется созданный ранее комплекс программ, основанный на предварительной переформулировке классической задачи электропроводности для электрического потенциала в виде задачи для пары специальных потенциалов, которая имеет симметричный положительно определенный оператор. Это позволило построить квадратичный функционал энергии, минимизация которого на кусочно-линейных функциях дает систему линейных алгебраических уравнений для узловых значений аппроксимирующих функций. Решение этой системы находится с помощью многосеточного метода Федоренко.

Решаемое уравнение представляет собой закон сохранения заряда для полного тока, который наряду с током проводимости содержит динамо-часть, связанную с переходом в систему координат, движущуюся со скоростью среды. Поэтому еще одним входным параметром нашей модели является пространственное распределение скорости ветра в ионосфере. В созданной версии мы используем простейшую эмпирическую модель, в которой ветер полагается горизонтальным и не меняющимся с высотой. Его функция тока задается в виде одной сферической гармоники  $v_0 \sin \varphi_m \sin(2\lambda_m) / 2$ , где  $v_0$  - максимальная скорость ветра, равная 100 м/сек в рассматриваемом случае. Хотя эта гармоника и является основной, реальные распределения ветра являются более сложными. Они могут быть получены только с помощью более общих моделей ионосферы, и наша модель

предназначена для использования в качестве блока расчета электрического поля в составе таких моделей.

Распределение электрического потенциала, полученное в результате численного решения задачи, представлено на нижнем фрагменте рисунка. 1.4.

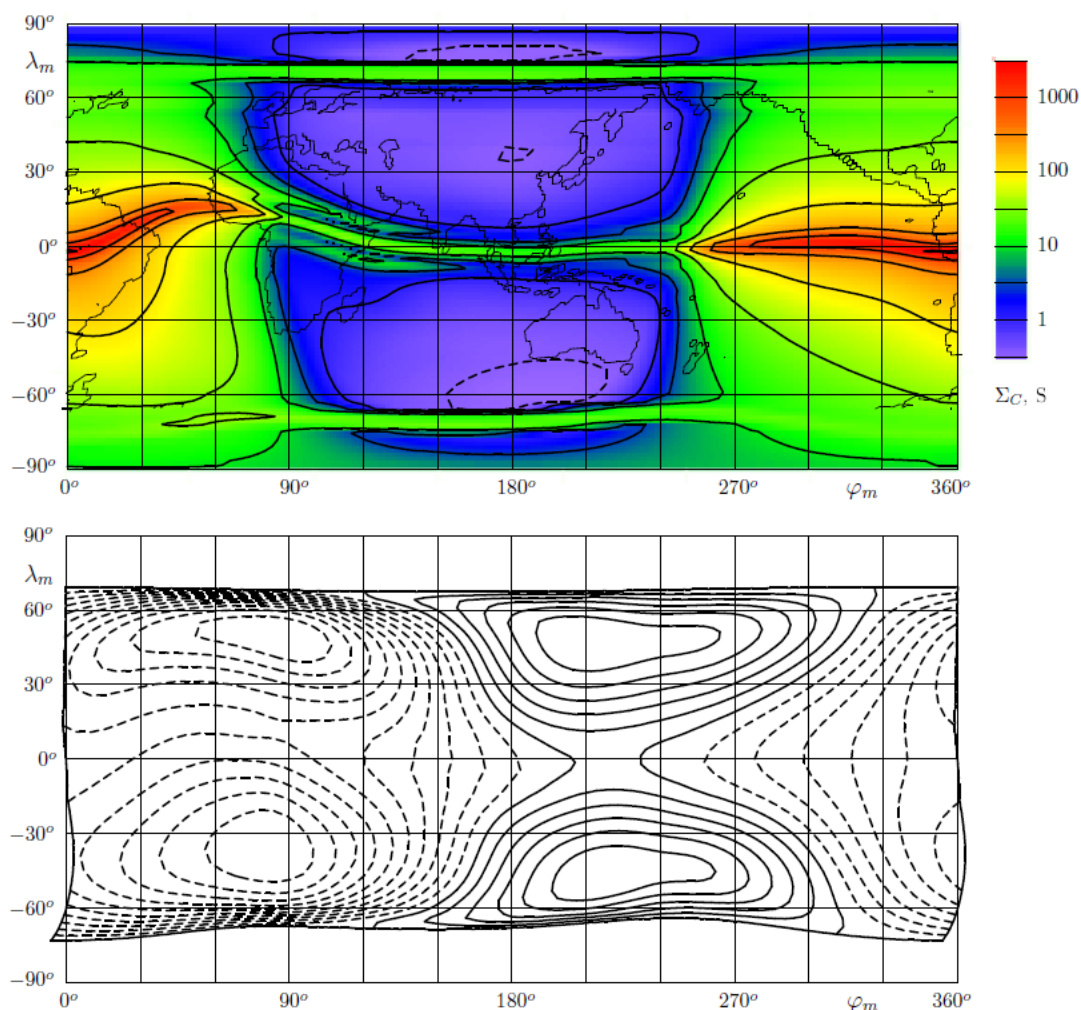


Рисунок 1.4 – Интегральная проводимость Каулинга  $\Sigma_C$  в ионосфере – верхний фрагмент. Полученное распределение электрического потенциала – нижний фрагмент. Построены эквипотенциалы с шагом 1 кВ, штриховые линии – отрицательные значения,  $\varphi_m$  и  $\lambda_m$  - геомагнитные долгота и широта

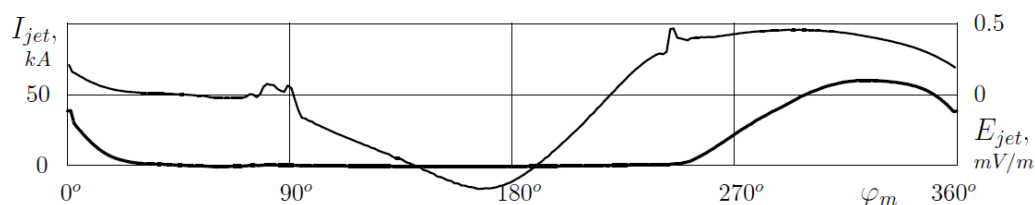


Рисунок 1.5 – Азимутальная компонента напряженности электрического поля на геомагнитном экваторе  $E_{jet}$  – тонкая кривая, правая шкала; и сила тока экваториальной электроструи  $I_{jet}$  – жирная кривая, левая шкала

На рисунке 1.5 показаны соответствующие распределения азимутальной компоненты напряженности электрического поля и силы тока экваториальной электроструи

вдоль геомагнитного экватора. В рассматриваемый момент универсального времени местная полночь соответствует центру рисунков, около геомагнитного меридиана  $\varphi_m = 180^\circ$ . Интенсивность экваториальной электроструи, которая течет вдоль экватора, фиксируется с помощью наземных и спутниковых измерений возмущений геомагнитного поля. Полученные в созданной модели поля и токи отражают основные характеристики наблюдаемых: направления и величины днем и ночью, хотя для передачи деталей требуется использование более сложных моделей ветров.

Еще одним полученным в отчетном году результатом является обоснование принципа минимума функционала энергии для нелинейной задачи магнитостатики. Исходная краевая задача магнитостатики представляет собой систему квазилинейных уравнений первого порядка для неизвестной векторной функции. Рассмотрен случай, когда за границей рассматриваемой области находится идеальный проводник, что соответствует обращению в нуль нормальной компоненты магнитной индукции на границе. Эта задача с помощью построения решения вспомогательной линейной задачи преобразована в задачу для одного квазилинейного эллиптического уравнения для скалярного потенциала. Рассмотрены только однозначные зависимости магнитной индукции от напряженности магнитного поля, то есть исключен гистерезис. В рамках энергетического метода доказано существование и единственность обобщенного решения задачи для потенциала. Такое решение позволяет построить магнитное поле, являющееся решением исходной задачи и обладающее конечной энергией. Предложенный и обоснованный принцип минимума функционала энергии целесообразно использовать при численном решении задач магнитостатики, поскольку он позволяет строить вариационно-разностные схемы, используя стандартные аппроксимирующие функции, например, кусочно-линейные.

### **1.3 Численная реализация математических моделей и проведение расчетов на примере конструкции образца плоской тепловой трубы, созданной по аддитивной технологии**

Выполнена численная реализация разработанной ранее математической модели тепло и массопереноса в конструкциях со встроенными гипертеплопроводящими (ГТП) структурами. С помощью модели по экспериментально измеренным значениям теплофизических характеристик образца плоской тепловой трубы, созданной по аддитивной технологии, были определены параметры капиллярной структуры: эффективный радиус пор, проницаемость и эффективная теплопроводность. Полученные значения параметров позволяют использовать разработанную математическую модель для

расчета допустимой предельной тепловой нагрузки и распределения температуры для изделий со встроенными ГТП структурами.

Моделирование тепло и массопереноса в изделии со встроенной ГТП структурой сводится к последовательному решению следующих двухмерных стационарных уравнений:

$$\operatorname{div}(-\lambda(x, y, T) \cdot \nabla T(x, y)) = 0, \quad (1.3)$$

$$\operatorname{div}(\beta_l \cdot \nabla P_l - \rho_l \mathbf{g}) = 0, \quad \operatorname{div}(\beta_v \cdot \nabla P_v) = 0, \quad (1.4)$$

где  $T(x, y)$  – распределение температуры, °С;  $\lambda$  – эффективная теплопроводность материала, значение которой задается разной в разных областях, Вт/(м·К);  $\beta_l = K_l \frac{\rho_l}{\mu_l}$  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, м<sup>2</sup>;  $\mathbf{g}$  – вектор ускорения свободного падения (учитывается в условиях силы тяжести);  $P_l(x, y)$  и  $P_v(x, y)$  – распределение давления в жидкости и паре, Па.

На первом шаге из уравнения (1.3) определяются распределения температуры и теплового потока для заданной геометрии изделия. Внешние притоки и стоки тепла задаются в виде граничных условий третьего рода:

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

где  $q(x, y)$  – плотность притока тепла на единицу длины границы, (Вт/м);  $\mathbf{n}$  – перпендикулярный к границе единичный вектор;  $T_f(x, y)$  – распределение температуры стока тепла, °С;  $\alpha_f$  – коэффициент теплопередачи между стенкой и стоком тепла, Вт/(м<sup>2</sup>·К);  $W_{hp}$  – ширина изделия в перпендикулярном к плоскости задачи направлении, м. Значение теплопроводности  $\lambda$  задается в зависимости от области: для сплошного металла задается теплопроводность материала; для капиллярной структуры – эффективная теплопроводность капиллярной структуры; для парового пространства – величина вида:

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

где  $H_{ev}$  – скрытая теплота парообразования теплоносителя, Дж/кг;  $K_v$  – эффективная проницаемость парового пространства, м<sup>2</sup>;  $\rho_v$  и  $\mu_v$  – плотность и вязкость

пара, кг/м<sup>3</sup> и кг/(м·с);  $\frac{\partial P_v}{\partial T_v}$  – скорость измерения давления насыщенного пара при измерении температуры, Па.

На втором шаге из уравнений (1.4) определяются распределения давлений жидкости в капиллярной структуре  $P_l(x, y)$  и давления пара в паровом пространстве  $P_v(x, y)$ . На границе соприкосновения области парового пространства и области капиллярной структуры учитывается испарение и конденсация теплоносителя, которые определяют приток/отток массы пара и жидкости и представляют собой граничные условия в виде:

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

где  $q_{ev}(x, y)$  поток тепла через границу на единицу площади границы, Вт/м<sup>2</sup>. Величина  $q_{ev}$  определяется из решения уравнения (1.3).

Далее определяется распределение капиллярной нагрузки на границе раздела фаз:

$$\alpha(x, y) = \Delta P(x, y)/P_c(x, y), \quad (1.5)$$

где  $\Delta P(x, y) = P_v(x, y) - P_l(x, y)$  – перепад давлений между фазами теплоносителя, Па;  $P_c(x, y) = 2\sigma/r_c$  – предельное капиллярное давление пористой структуры, Па;  $\sigma$  – коэффициент поверхностного натяжения жидкости, Н/м;  $r_c$  – эффективный радиус пор, м; *Если величина  $\alpha(x, y)$  всюду меньше единицы, то капиллярное условие выполняется и ГТП структура успешно работает без осушения.* Анализ распределения капиллярной нагрузки позволяет оценить запас по капиллярному ограничению (оценить возможность увеличения мощности) и в итерационном процессе определить предельную тепловую нагрузку на изделие.

Численное решение уравнений (1.3) и (1.4) выполняется с помощью метода конечных элементов с использованием треугольного элемента Лагранжа. Решение задачи теплопроводности (1.3) сводится к минимизации функционала в виде:

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

где  $V$  – рассматриваемое сечение с границей  $S$ ;  $q(x, y)$  – плотность потока тепла на единицу длины границы, (Вт/м);  $T_f(x, y)$  – распределение температуры стока тепла, °С;  $\alpha_f$  –

коэффициент теплопередачи между стенкой и стоком тепла, Вт/(м<sup>2</sup>·К). Для решения уравнений (1.4) аналогичным образом минимизируется 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. Для нахождения минимума функционалов строится нерегулярная треугольная сетка, согласованная с границами областей. Размер элемента выбирается таким образом, чтобы интеграл потока в области испарения и конденсации был достаточно мал.

Опишем подробнее расчет распределения температуры. Для получения решения вводится вектор  $T$  размерностью  $n$ , где  $n$  – число узлов сетки. Минимизируемый функционал представляется в виде суммы интегралов по всем треугольникам сетки:

$$\frac{1}{2} \sum_{l=1}^m \iint_{V_l} (T^l)^T D_l^T \Lambda D_l T^l dV_l + \int_{S_l} \left( \alpha_f \cdot (T^l - T_f^l)^2 + q_l T^l \right) dS_l,$$

где  $V_l$  – область  $l$ -го конечного элемента,  $T^l$  – локальный вектор температуры,  $\Lambda$  – матрица теплопроводности,  $D_l$  – матрица дифференцирования, верхний индекс  $T$  означает транспонирование. Глобальная матрица теплопроводности  $C$  составляется путем сложения в определенных позициях элементов локальных матриц жесткости  $C_l = D_l^T \Lambda D_l$ . В результате получается функционал

$$J(T) = \frac{1}{2} \left( T^T C T + \alpha_f (T - T_f)^2 + q T \right),$$

минимальное значение которого соответствует системе уравнений, позволяющей определить значения температур в узлах конечно-элементной сетки:

$$\frac{\partial J}{\partial T} \equiv C T + \alpha_f (T - T_f) + q = 0.$$

Описанная математическая модель и численный метод реализованы в виде программы на языке Python. Программа обеспечивает расчет распределения температуры по теплопроводящей конструкции со встроенной ГТП структурой и распределения

капиллярной нагрузки на границе раздела фаз. Капиллярная нагрузка позволяет определять ограничение по тепловой мощности, то есть максимальное тепловыделение источника тепла, при котором ГТП структура будет работать эффективно. Алгоритм работы программы следующий.

1. Создание конечно-элементной сетки в соответствии с геометрией задачи. Формируются массивы узлов и элементов сетки с принадлежностью к соответствующей области: корпус конструкции, капиллярная структура, паровое пространство.
2. Создание массивов, описывающих граничные условия: области нагрева, охлаждения, излучения и конвективного теплообмена.
3. Расчет эффективной проницаемости парового пространства и характеристик капиллярной структуры.
4. Запуск процедуры решения задачи (блок-схема показана на рисунке 1.6):
  - 4.1. Итерационный расчет поля температур – решение уравнения (1):
    - 4.1.1. Задаётся начальное распределение температуры.
    - 4.1.2. Строится глобальная матрица теплопроводности в зависимости от температуры на текущей итерации.
    - 4.1.3. Учет граничных условий для областей подвода тепла и охлаждения, конвективного теплообмена и излучения с внешних открытых поверхностей (при необходимости).
    - 4.1.4. Решение полученной системы линейных уравнений (СЛУ) и получение распределения температуры на очередном шаге.
    - 4.1.5. Проводится сравнение полученного решения с решением с предыдущего шага, если разница превышает заданную величину  $\epsilon$ , то для полученного решения повторяются шаги 4.1.2 – 4.1.5 до достижения заданной точности.
  - 4.2. Расчет распределений давлений пара в паровом пространстве и жидкости в пористой структуре – решение уравнений (1.4).
  - 4.3. Расчет капиллярной нагрузки по формуле (1.5).
5. Вывод результатов расчета, построение графиков.

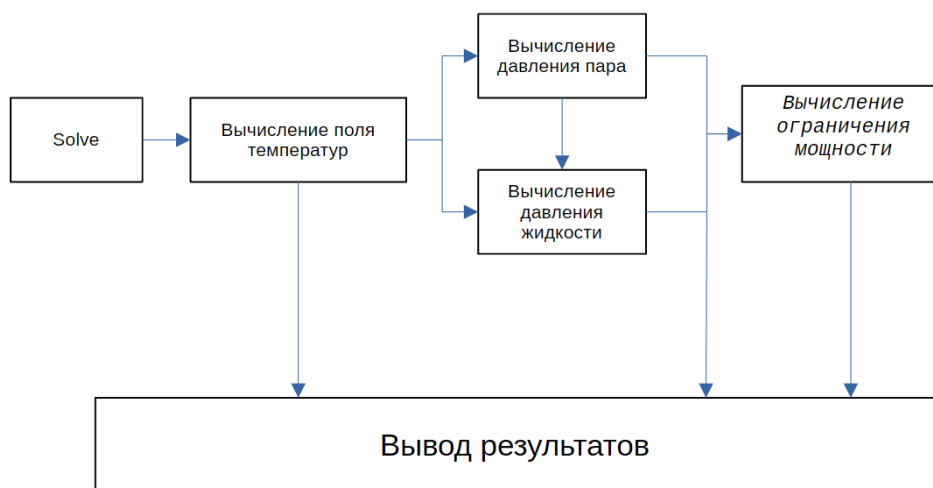


Рисунок 1.6 – Блок-схема процедуры решения задачи

Решение СЛУ выполняется с помощью общедоступной библиотеки «SciPy» с применением метода для разреженных матриц. Расчет давлений жидкой и газообразной фазы теплоносителя проводится отдельно для пористой структуры и парового пространства, соответственно. При расчете полей давлений граничные условия и параметры теплоносителя определяются исходя из полученного поля температур. Результаты расчета выводятся в виде графиков температуры, давления жидкости в капиллярной структуре, давления пара в паровом пространстве и график ограничения мощности на границе капиллярной структуры и парового пространства.

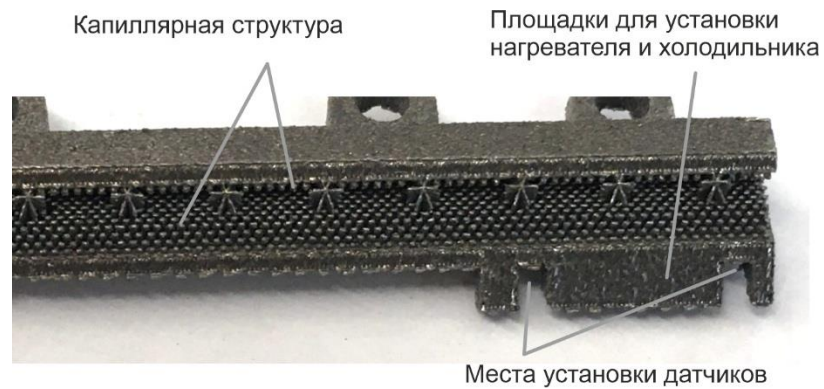
Для дальнейшего использования математической модели были определены значения характеристик реальной капиллярной структуры по результатам экспериментов с образцом плоской тепловой трубы (рисунок 1.7 «а»), который был изготовлен по аддитивной технологии на 3D принтере из алюминиевого порошка (AlSi10Mg). Образец имеет размеры 102 мм × 22 мм × 5 мм. Внутри образца имеется пространство для движения пара и капиллярная структура в виде расположенных в шахматном порядке столбиков (рисунки 1.7 «б» и «в»), которые обеспечивают движение жидкости за счет капиллярных сил.

Образец в ходе экспериментальных измерений (рисунок 1.8) располагался в различных ориентациях: горизонтально, с перепадом высот от 0 мм до 50 мм при работе против гравитации (нагреватель выше холодильника) и по гравитации (нагреватель ниже холодильника). К образцу через термопасту присоединялся электрический нагреватель и жидкостной холодильник, через который подавалась охлаждающая жидкость с заданной температурой  $T_f = 15\text{ }^{\circ}\text{C}$  с помощью термостата. Образец был изолирован от окружающей среды. Эксперименты проведены с разным количеством заправки теплоносителя в образец.

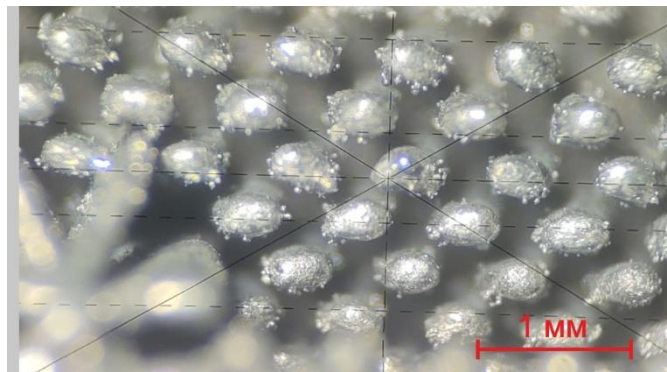
Уровень заправки характеризовался параметром  $\gamma$ , равным отношению объема теплоносителя (при 25 °С) к объему пор капиллярной структуры.



а) внешний вид



б) внутренняя конструкция – косое сечение



в) микрофотография капиллярной структуры

Рисунок 1.7 – Образец плоской тепловой трубы, изготовленной на 3D принтере

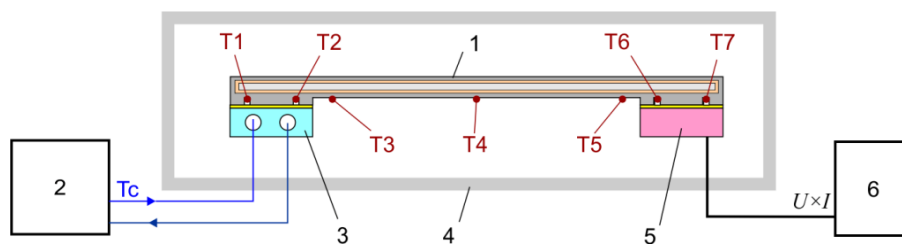


Рисунок 1.8 – Схема эксперимента и расположение температурных датчиков; 1 – образец, 2 – термостат, 3 – холодильник, 4 – теплоизоляция, 5 – нагреватель, 6 – блок питания

В ходе каждого эксперимента мощность нагревателя увеличивалась ступенчато. Для каждого значения мощности после достижения стационарного состояния фиксировались значения температур. Увеличение мощности и замеры выполнялись до тех пор, пока не возникал резкий рост температуры в области нагревателя. Для каждого замера определялись следующие величины:

$T_s = (T_1 + T_2) / 2$  – температура стенки в области подвода тепла;

$T_a = (T_3 + T_4 + T_5) / 3$  – температура адиабатической части, которая соответствует температуре пара;

$T_c = (T_6 + T_7) / 2$  – температура стенки с области отвода тепла.

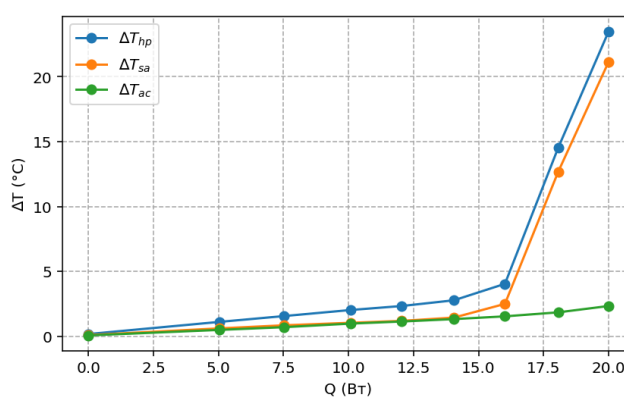
Рассчитывались следующие перепады температур:

$\Delta T_{sa} = T_s - T_a$  – между стенкой под нагревателем и паром в области подвода тепла;

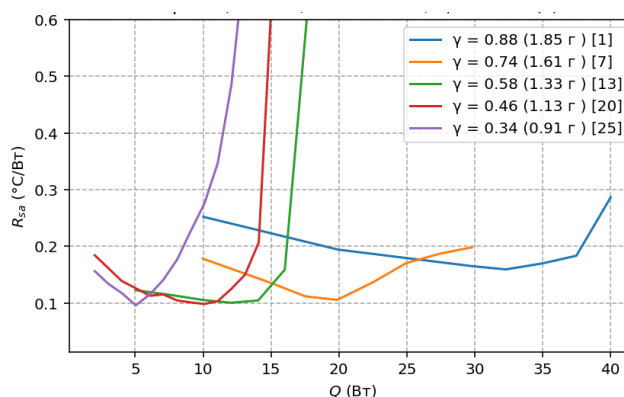
$\Delta T_{ac} = T_a - T_c$  – между паром и стенкой в области отвода тепла;

$\Delta T_{hp} = \Delta T_{sa} + \Delta T_{ac}$  – полный перепад температуры по тепловой трубе.

Также определялись соответствующие термические сопротивления  $R_{sa}$ ,  $R_{ac}$  и  $R_{hp}$  по формуле:  $R = \Delta T / Q$ , где  $Q$  – мощность источника тепла.



а)



б)

Рисунок 1.9 – Пример экспериментальных зависимостей перепадов температур по тепловой трубе (а) и термического сопротивления в области подвода тепла в зависимости от мощности нагревателя (б)

Типичная зависимость перепадов температур по тепловой трубе от мощности нагревателя показана на рисунке 1.9 «а». С ростом мощности нагревателя перепады температур возрастают, но остаются небольшими. При достижении критического значения  $Q_{dry} \approx 15$  Вт перепад температуры в области нагревателя  $\Delta T_{sa}$  начинает резко возрастать из-за достижения капиллярного ограничения и локального осушения фитиля. Оптимальным вариантом определения мощности осушения  $Q_{dry}$  является анализ зависимостей термического сопротивления в области подвода тепла  $R_{sa}$ , пример которых для

горизонтальной ориентации образца для разного  $\gamma$  показан на рисунке 1.9 «б». Мощность, при которой начинается резкий рост  $R_{sa}$  на графиках, соответствует мощности начала осушения фитиля  $Q_{dry}$ .

Важно отметить, что полученная в экспериментах мощность начала осушения фитиля  $Q_{dry}$  зависит от уровня заправки теплоносителем (см. рисунок 1.9 «б»), то есть от параметра  $\gamma$ . Сводные данные по полученным значениям мощностей начала осушения фитиля  $Q_{dry}$  в зависимости от перепада высоты между нагревателем и холодильником  $\Delta h$  (наклон тепловой трубы) для разных значений  $\gamma$  показаны на рисунке 1.10. С увеличением  $\Delta h$  (нагреватель выше холодильника) мощность начала осушения фитиля  $Q_{dry}$  снижается, поскольку капиллярное давление должно дополнительно компенсировать гидростатический перепад давления. Предельная высота подъема жидкого теплоносителя капиллярной структурой находится на уровне около 40 мм, что соответствует полученным результатам (рисунок 1.10).

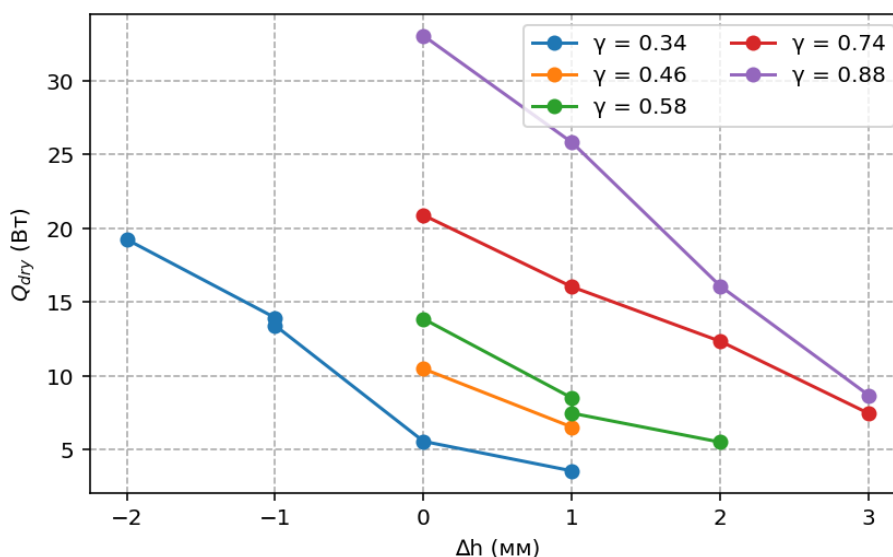


Рисунок 1.10 – Экспериментальные зависимости предельной мощности  $Q_{dry}$  от перепада высоты между нагревателем и холодильником для различного уровня заправки теплоносителем

Для соответствия модели экспериментальным данным были определены значения следующих параметров: эффективная проницаемость капиллярной структуры  $K_l$ , эффективный радиус пор капиллярной структуры  $r_c$ , теплопроводность капиллярной структуры  $\lambda_{wick}$  и коэффициент теплопередачи между стенкой тепловой трубы и стоком тепла  $\alpha_f$ . Значения  $\lambda_{wick} = 30.16$  Вт/(м·К) и  $\alpha_f = 7832$  Вт/(м<sup>2</sup>·К) были рассчитаны по измеренным перепадам температур и соответствующим плотностям мощности в областях подвода и отвода тепла.

Определение значений проницаемости  $K_l$  и эффективного радиуса пор капиллярной структуры  $r_c$  по экспериментальным данным потребовало использования методов многомерной оптимизации, поскольку данные параметры влияют на значение предельной мощности осушения  $Q_{dry}$  сложным образом. Минимизировалась функция вида:

$$g(r_c, K_l) = \sum_{i=1}^n (Q_{dry}(r_c, K_l) - Q_{dry}^{exp})_i^2,$$

где  $Q_{dry}$  и  $Q_{dry}^{exp}$  – расчетная по модели и измеренная экспериментально предельная мощность осушения для каждого эксперимента  $i$ .

В результате минимизации были получены значения параметров, представленные в таблице 1. Значение эффективного радиуса пор капиллярной структуры равно  $r_c = 184$  мкм. Значения проницаемостей  $K_l$  были найдены для каждого уровня заправки  $\gamma$  независимо, и далее полученная экспериментальная зависимость учитывается в модели в виде квадратичного выражения (рисунок 1.11 «а»):

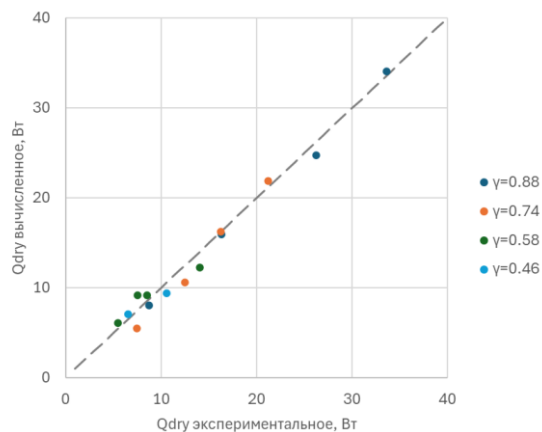
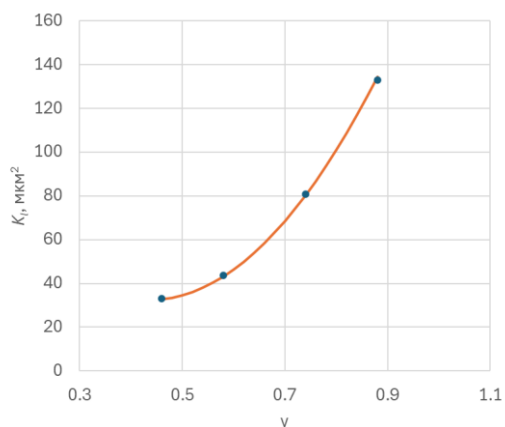
$$K_l(\gamma) = 517\gamma^2 - 450\gamma + 131.$$

Такой подход позволил учесть зависимость мощности осушения  $Q_{dry}$  от  $\gamma$ , которая имеется в экспериментальных данных.

Таблица 1. – Значения полученных параметров  $r_c$  и  $K_l$

| $r_c$ , мкм | $\gamma$ | $K_l$ , мкм <sup>2</sup> |
|-------------|----------|--------------------------|
| 184         | 0.88     | 131                      |
|             | 0.74     | 81                       |
|             | 0.58     | 44                       |
|             | 0.46     | 33                       |

Точность полученной в итоге модели расчета предельной мощности  $Q_{dry}$  демонстрируется на рисунке 1.11 «б». В диапазоне  $\gamma$  от 0.4 до 0.9 модель хорошо описывает экспериментальные данные: отклонение находится в пределах 2 Вт.



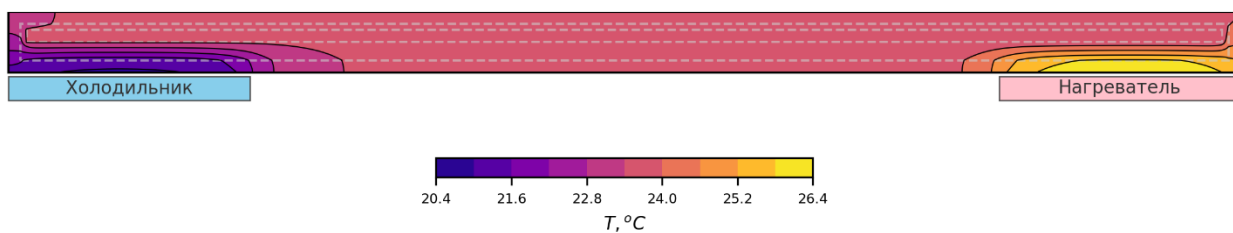
а)

б)

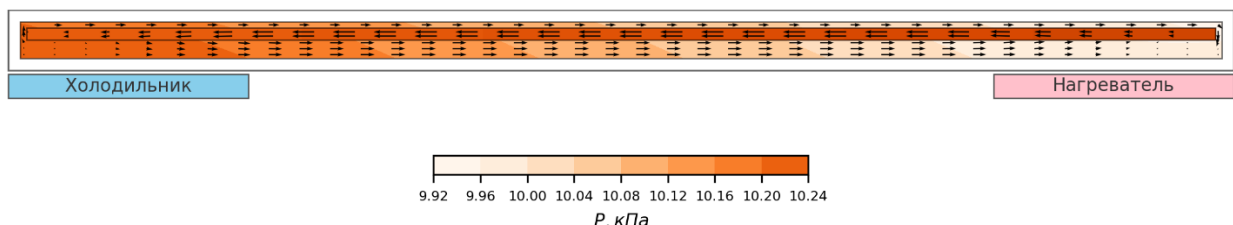
Рисунок 1.11 – Эффективная проницаемость капиллярной структуры в зависимости от заполнения фитиля жидкостью (а) и сопоставление расчетных и экспериментальных значений мощности осушения фитиля  $Q_{dry}$  (б)

На рисунке 1.12 представлен пример использования модели для расчета поля температуры и капиллярной нагрузки для плоской тепловой трубы при уровне заправки  $\gamma = 0.74$ ; которая располагается горизонтально в поле тяжести. Температура охлаждающей жидкости криостата равна  $15\text{ }^{\circ}\text{C}$ , мощность нагревателя –  $21\text{ Вт}$ . На рисунке 1.12 «а» показано двухмерное распределение температуры в продольном сечении. Перепад температуры по тепловой трубе между областями подвода и отвода тепла достигает  $4.86\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Можно видеть, что основной перепад температуры формируется на слое капиллярной структуры в областях подвода и отвода тепла, при этом перепад температуры вдоль адиабатической части (вдоль парового канала) очень мал – в пределах  $0.2\text{ }^{\circ}\text{C}$ .

На рисунке 1.12 «б» демонстрируется распределение давления жидкости в капиллярной структуре и пара в паровом канале. При рассматриваемых условиях основной перепад давления формируется по жидкости в капиллярной структуре, в паровом пространстве перепад давления на порядок меньше. В области конденсации теплоносителя (около холодильника) перепад давления между фазами теплоносителя близок к нулю. В области испарения (около нагревателя), перепад давления между паром и жидкостью максимальный и почти достигает предельного капиллярного давления, которое способно обеспечивать капиллярная структура. Значение капиллярной нагрузки в этой области почти достигает единицы. Это означает, что тепловая труба работает на близкой к предельной мощности.



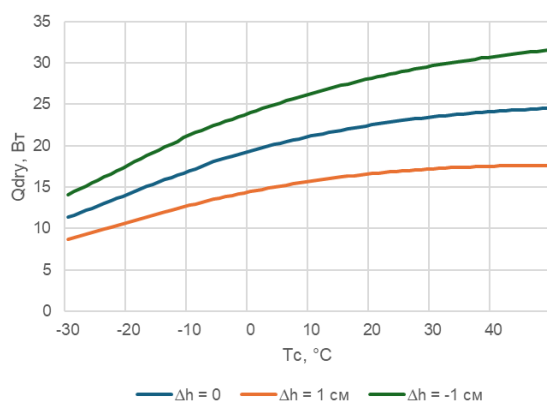
а) распределение температуры



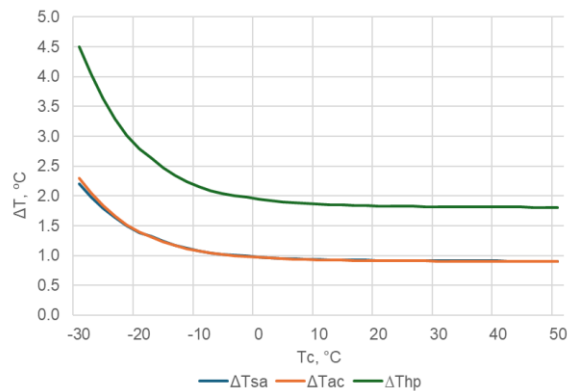
б) распределения давления и потока массы теплоносителя

Рисунок 1.12 – Расчет для плоской тепловой трубы при уровне заправки  $\gamma = 0.74$  и мощности нагревателя 21 Вт: а) распределение температуры по тепловой трубе, б) распределение давления и потока массы теплоносителя

На рисунке 1.13 показаны расчеты зависимостей предельной мощности и перепадов температуры (при 10 Вт) для аналогичной плоской тепловой трубы для диапазона температуры холодильника от минус 30 °С до плюс 40 °С. Приводятся расчеты предельной мощности  $Q_{dry}$  (рисунок 13 «а») в условиях гравитации для горизонтального расположения ( $\Delta h = 0$ ), а также с наклоном против ( $\Delta h = 1$  см) и по гравитации ( $\Delta h = -1$  см). Перепады температуры приводятся для горизонтальной ориентации (рисунок 1.13 «б»). Можно видеть снижение эффективности передачи тепла при уменьшении температуры области охлаждения, что связано с изменением теплофизических характеристик теплоносителя (ацетонитрила).



а)



б)

Рисунок 1.13 – Расчет предельной мощности осушения (а) и перепадов температур по плоской тепловой трубе (б) в зависимости от температуры холодильника

Разработанная математическая модель и численная реализация в виде программы позволяют рассчитывать мощность капиллярного ограничения и распределение температуры по конструкциями со встроенными ГТТ структурами. Двухмерная модель позволяет выполнять расчеты для конструкций сложной формы, что особенно актуально для изделий, создаваемых по аддитивным технологиям на 3D принтерах.

## **2 Математическое моделирование физических микро- и нано-процессов**

### **2.1 Разработка и анализ обучающего набора данных методом машинного обучения для моделирования связанных состояний в континууме**

Метод деревьев решений представляет собой один из фундаментальных подходов машинного обучения, ценность которого заключается в высокой интерпретируемости получаемых моделей [1, 2]. Однако эта интерпретируемость традиционно достигается за счет сравнительно невысокой прогнозной точности. Классические деревья решений осуществляют сегментацию данных с помощью плоскостей, ортогональных осям пространства признаков, что зачастую является слишком грубым приближением для сложных нелинейных зависимостей у реальных данных. Одним из распространенных методов повышения точности является использование метода Kernel Trick, который позволяет неявно работать в пространстве признаков повышенной размерности. Однако, как правило, такое преобразование применяется к данным до построения дерева, что не решает проблему адаптивности сегментации на каждом узле. Более гибким подходом является метод деревьев решений с нечеткой кластеризацией, который позволяет каждому объекту принадлежать нескольким кластерам с определенным весом. Этот метод демонстрирует более высокую точность и способен решать как задачи классификации, так и регрессии, но его существенным недостатком является значительное снижение прозрачности и интерпретируемости итоговой модели.

Альтернативным направлением является использование гиперплоскостей, оптимизированных, например, с помощью метода опорных векторов, для разделения данных на каждом узле дерева. Такие деревья решений, например, реализованные в алгоритме OS1 [3, 4], позволяют строить более сложные границы решений по сравнению с ортогональными разбиениями. Однако и этот подход имеет принципиальные ограничения. Во-первых, он оперирует исключительно гиперплоскостями (поверхностями первого порядка), что может требовать построения очень глубоких деревьев для аппроксимации сложных нелинейных границ. Во-вторых, оптимизация коэффициентов разбиения в таких алгоритмах часто основана на эвристических или стохастических методах, что не гарантирует нахождения глобально оптимального решения и может приводить к неэффективным разбиениям и локальным минимумам [5].

Таким образом, в применении деревьев решений сложилась двойственная ситуация: исследователи вынуждены выбирать между моделями с высокой объяснимостью, но низкой точностью, либо сложными моделями с хорошей точностью, но практически полной потерей интерпретируемости. Настоящий проект направлен на преодоление этого компромисса.

В рамках данного раздела проекта разрабатывалась новая методика построения дерева решений, основанная на сегментации данных с помощью гиперповерхностей произвольного порядка. Ключевой особенностью подхода является детерминированное вычисление коэффициентов разбиения на каждом узле с помощью метода наименьших квадратов, что позволяет гарантировать глобальную оптимальность построенной разделяющей поверхности для заданного порядка полинома и избежать недостатков, связанных со стохастической оптимизацией. Такой подход позволяет гибко адаптировать сложность модели к структуре данных: от простых плоскостей до сложных полиномиальных поверхностей высокого порядка, обеспечивая при этом сохранение принципиальной интерпретируемости модели дерева.

Разрабатываемую методику, основанную на гибком использовании гиперповерхностей, для валидации и демонстрации эффективности полезно применить к решению актуальной и сложной физической задачи. В качестве такой задачи был выбран прогноз формы резонанса Фано, индуцированного связанным состоянием в континууме [6, 7] в диэлектрических метаповерхностях. Эта задача из области нанофотоники идеально подходит для тестирования нашего подхода, поскольку связывает набор управляемых геометрических и материальных параметров структуры (признаков) со сложными, нелинейно зависящими от них спектральными характеристиками (целевыми переменными). Для успешного обучения любой модели машинного обучения, включая усовершенствованное дерево решений, необходим качественный, репрезентативный и объемный набор данных.

Таким образом, следующим критически важным этапом работы стала подготовка обучающей базы данных. Этот процесс подразумевал не просто сбор численных результатов, но и тщательное проектирование пространства параметров, проведение сравнительных масштабных численных экспериментов и последующую обработку сырых данных для извлечения значимых физических величин. Созданная база данных служит фундаментом, на котором впоследствии будет протестирована и продемонстрирована способность нового алгоритма находить сложные зависимости между признаками и целевыми переменными, обеспечивая при этом высокую точность и сохраняя интерпретируемость модели.

Связанные состояния в континууме (ССК) представляют собой локализованные решения уравнений Максвелла, не связанные с источниками и существующие на фоне непрерывного спектра рассеивающих мод [8]. В диэлектрических метаповерхностях такие состояния стали важным инструментом для резонансного усиления взаимодействия света с веществом, что открывает перспективы их применения в задачах резонансного поглощения

света [9], сенсорики [10], генерации оптических гармоник и создания лазерных источников [11]. Хотя классические ССК не связаны с падающим извне излучением, нарушение симметрии системы при изменении управляющих параметров приводит к формированию квази-ССК — долгоживущих резонансных мод, добротность которых стремится к бесконечности при приближении к точке ССК в параметрическом пространстве. Это явление проявляется в спектре пропускания как коллапсирующий резонанс Фано и одновременно сопровождается значительным усилением электромагнитного поля в метаповерхности.

В рамках настоящего проекта исследуется форма линии резонанса Фано, индуцированного симметрично-защищенными ССК в диэлектрических дифракционных решетках. Преобразование ССК в квази-ССК управляется малым отклонением угла падения от нормали. Основным теоретическим инструментом для описания формы резонанса служит метод связанных мод во временной области, который благодаря своей универсальности и наглядности физической картины широко применяется для моделирования спектральных характеристик различных фотонных устройств [12]. Важно отметить, что рассматриваемые в данном проекте оптические системы не обладают симметрией «верх-низ», что может оказывать влияние на формирование асимметричной линии резонанса.

Оптические и геометрические параметры, приводящие к возникновению ССК и квази-ССК в метаповерхностях (см. рисунок 2.1), традиционно определяются путем численного решения уравнений Максвелла. Однако такой подход является вычислительно затратным, что делает крайне желательным поиск альтернативных методов прогнозирования, позволяющих избежать прямого решения дифференциальных уравнений для каждого набора параметров. В этом контексте интерполяционные методы, основанные на существующих данных, представляются эффективным подходом. Методы машинного обучения уже нашли применение для решения широкого круга задач нанофотоники, включая задачи, связанные с оптическими ССК. В частности, в предыдущих работах было показано, что метод случайного леса способен с высокой точностью предсказывать частоту ССК в симметричных диэлектрических метаповерхностях.

Исследуемая структура представляет собой периодическую решётку диэлектрических стержней, нанесённых на непоглощающую диэлектрическую подложку как показано на рисунке 2.1. Материалы подложки и стержней характеризуются показателями преломления  $n_s$  и  $n_b$  соответственно. Верхнее полупространство считается заполненным воздухом с  $n_0 = 1$ . Детальное описание геометрии (период, высоты, ширина) приведено на рисунке 2.3.

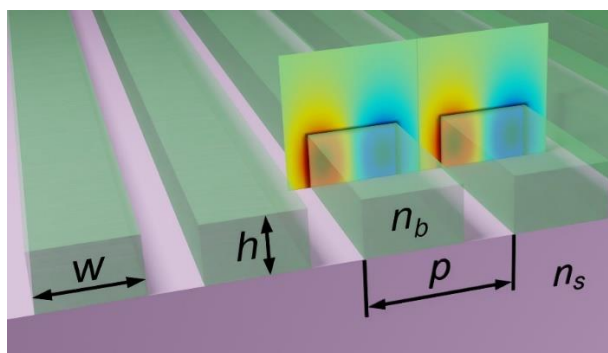


Рисунок 2.1 – Схематичное изображение исследуемой метаповерхности с электрическим полем моды ССК на вставке

Процедура численного эксперимента включала следующие шаги. На первом шаге были заданы параметры модели: период решетки  $p = 0.697$  мкм, высота стержней  $h \in [0.2p, 0.8p]$ , ширина стержней  $w \in [0.2p, 0.8p]$ , показатель преломления стержней  $n_b \in [2, 5]$ , показатель преломления подложки  $n_s \in [1.5, 4]$ . Далее проведено автоматизированное сканирование параметров с генерацией 100 000 различных случайных комбинаций. Для каждой комбинации проводилось решение оптической задачи и анализ полученного спектра пропускания в диапазоне длин волн 1100–2000 нм. Для найденных квази-ССК, проводилась идентификация его параметров: центральной частоты  $\omega_0$  (соответственно и длины волны  $\lambda$ ), ширины резонанса  $\gamma$ , а также параметров формы резонанса  $\tau$  и  $\alpha$  путём аппроксимации спектральной кривой обобщённой формулой, полученной с использованием теории связанных мод во временной области (ТСМТ) [13]

$$T = \frac{[\tau(\omega_0 - \omega) + \rho\gamma \sin(2\alpha)]^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2}$$

методом наименьших квадратов. В этом выражении  $\omega$  – частота падающего поля,  $\tau, \gamma, \omega_0$  – параметры аппроксимации,  $\rho = \sqrt{1 - \tau^2}$ .

Решение оптической задачи при этом выполнялось в среде COMSOL Multiphysics, в которой был применен метод конечных элементов (МКЭ) в частотной постановке. Моделирование проводилось в два последовательных этапа. На первом этапе для каждого набора геометрических параметров решалась двумерная (2D) задача на собственные частоты при нулевом волновом векторе в плоскости решетки (нормальное падение). Это позволило найти спектральное положение и распределение полей истинного симметрично-защищенного связанного состояния в континууме, которое, будучи истинным ССК, не взаимодействует с излучательными модами и обладает бесконечной добротностью.

При численном решении задачи на собственные частоты на первом этапе, для геометрии с открытыми границами, реализованными с помощью PML, решатель находит дискретный спектр комплексных собственных частот. Однако в этот спектр наряду с искомыми, физически значимыми модами (рисунок 2.2) попадает большое число решений иного происхождения, которые необходимо корректно отфильтровать. К таким «паразитным» модам (рисунок 2.2 «б») относятся артефактные моды PML, возникающие из-за дискретизации и неидеального поглощения в слоях PML. Эти моды часто локализованы внутри или на границах PML-областей и не соответствуют реальным резонансам фотонной структуры. Проявляются также моды более высоких поперечных порядков, обладающие сходной симметрией, но имеющие более сложную пространственную структуру поля (например, два и более максимумов интенсивности вдоль оси элементарной ячейки). Кроме того, возникают прочие резонансные моды исследуемой системы, не соответствующие целевому типу связанного состояния. Для автоматизированного и надежного выделения из полного набора собственных решений именно тех мод, которые соответствуют истинному симметрично-защищенному ССК, был разработан и реализован алгоритм последовательной фильтрации на основе ряда строгих критериев. Отбор производился по следующим ключевым признакам:

1. Критерий симметрии поля. Искомая мода при нормальном падении должна демонстрировать строго антисимметричное распределение основной компоненты поля относительно вертикальной плоскости симметрии, проходящей через центр элементарной ячейки. Моды с симметричным или иным распределением отбраковываются.

2. Критерий локализации поля. Поскольку ССК по определению является связанным состоянием, не связанным с каналами излучения, его электромагнитная энергия должна быть сконцентрирована внутри и в непосредственной близости от диэлектрических стержней. Алгоритм анализирует распределение плотности электромагнитной энергии и проверяет, что амплитуда поля экспоненциально затухает при удалении от структуры в подложку и воздушное пространство. Моды с существенной энергией, распределенной в объеме подложки или, тем более, в PML-слоях, признаются артефактными и отбраковываются.

3. Критерий поперечной и продольной модовой структуры. Для целевой фундаментальной моды ССК распределение поля вдоль подложки и вдоль оси симметрии элементарной ячейки должно иметь единственный четко выраженный максимум амплитуды. Данный критерий позволяет эффективно отсеивать моды более высоких поперечных и продольных порядков, для которых характерно наличие нескольких максимумов или сложных узловых структур.

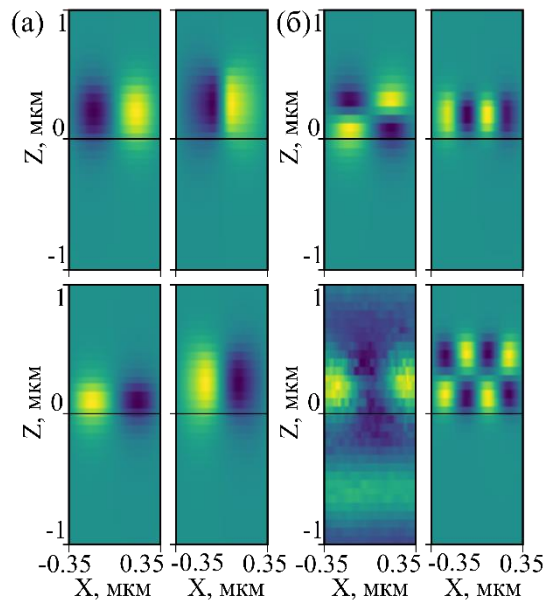


Рисунок 2.2 – Распределение поля в модах, полученных при решении задачи на собственные частоты. (а) – искомые моды симметрично-защищенного ССК, (б) – иные резонансные моды

Алгоритм последовательно применяет эти три критерия ко всем найденным собственным модам в окрестности ожидаемой частоты. Режим, удовлетворяющий всем условиям одновременно, идентифицируется как искомое истинное ССК. Его комплексная собственная частота (с нулевой или исчезающе малой мнимой частью в пределах точности метода) и распределение полей затем используются в качестве исходных данных для второго этапа моделирования – расчета возмущенной системы и спектров рассеяния. Такой подход обеспечивает надежность и воспроизводимость идентификации физически значимых ССК.

На втором этапе, зная резонансную частоту, найденную на первом этапе, решалась задача рассеяния электромагнитной волны ТМ поляризации на периодической диэлектрической решетке. Угол падения плоской волны фиксировался на значении  $\theta = 2^\circ$ . Такое слабое отклонение от нормали нарушает условие симметричной защиты, в результате чего истинное ССК превращается в квази-ССК с высокой, но конечной добротностью. Это приводит к формированию резонанса Фано в спектрах пропускания и отражения, которые и анализировались на данном этапе.

В рамках ТМ-поляризации вектор магнитного поля был направлен вдоль оси стержней (перпендикулярно плоскости моделирования), что позволило свести задачу к решению скалярного уравнения Гельмгольца относительно компоненты магнитного поля, в то время как компоненты электрического поля восстанавливались из уравнений Максвелла.

Геометрия расчетной области была построена следующим образом: вдоль горизонтальной оси ( $x$ ) задавалась единичная ячейка решетки. На первом этапе использовались периодические граничные условия, а на втором – условия Флоке-Блоха, учитывающие угол падения и корректно задающие бесконечную периодичность структуры. По вертикальной оси ( $y$ ) область моделирования была ограничена сверху и снизу идеально согласованными слоями или Perfectly Matched Layer (PML) – специальными поглощающими областями, имитирующими открытое пространство и предотвращающими нефизические отражения волн от границ расчетного домена. Верхняя PML-область соответствовала воздушной среде ( $n_0 = 1$ ), нижняя – подложке с показателем преломления  $n_s$ .

Сетка конечных элементов адаптивно сгущалась в областях сильных градиентов поля, особенно вблизи границ диэлектрических стержней и в зонах локализации резонансных мод, что обеспечивало высокую точность решения при разумных вычислительных затратах. Сходимость результатов контролировалась на каждом этапе путем последовательного измельчения сетки и сравнения ключевых выходных параметров: собственных частот и форм мод на первом этапе, спектров пропускания и распределений поля – на втором.

В результате моделирования из 100 000 расчётов в 18 836 случаях были успешно обнаружены симметрично-защищённые ССК в заданном спектральном диапазоне. Эти случаи составили базу данных обучения и тестирования, содержащую четыре параметра ( $h$ ,  $n_b$ ,  $w$ ,  $n_s$ ) и четыре целевых свойства ( $\lambda$ ,  $\gamma$ ,  $\tau$ ,  $g$ ), где  $g = \sqrt{1 - \tau^2} \sin(2\alpha)$ .

На рисунке 2.3 представлены ключевые характеристики набора данных, сформированного для машинного обучения, которые визуализируют распределение параметров и взаимосвязи между ними. Прежде всего, показано распределение входных параметров (признаков). На рисунке 2.3 «а» представлены гистограммы распределения признаков параметров (feature parameters). Эти параметры, такие как геометрические размеры элементарной ячейки, стержней или оптические постоянные материалов, являются исходными, независимыми переменными, варьируемыми при моделировании. Кроме того, показано распределение целевых параметров (свойств). На рисунке 2.3 «б» представлены гистограммы распределения целевых параметров (property parameters), основным из которых является резонансная длина волны истинного симметрично-защищенного связанного состояния в континууме.

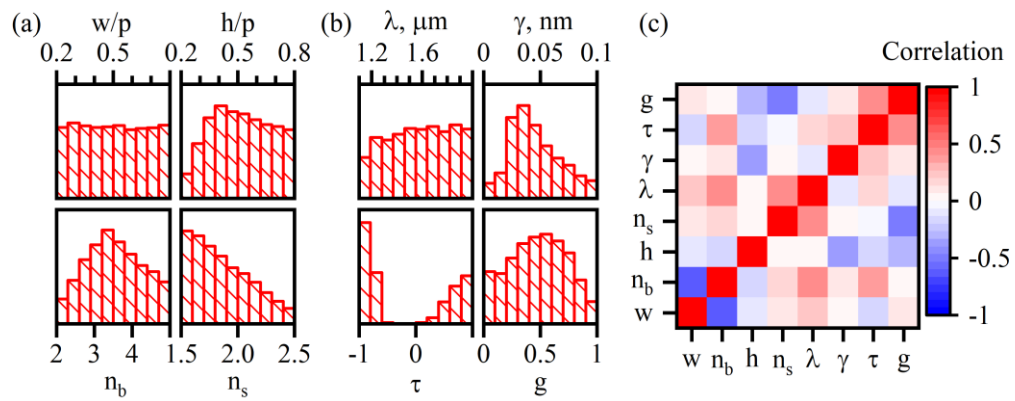


Рисунок 2.3 – Распределение (а) — параметров признаков и (б) — вычисленных значений параметров свойств. (в) — Корреляционная матрица между параметрами признаков и свойствами

Анализ результатов, представленных на рисунках 2.3 «а» и 2.3 «б» показывает, что большинство варьируемых признаков и результирующая длина волны ССК имеют почти равномерное распределение в исследованных диапазонах. Это неслучайно и является результатом целенаправленного планирования численных экспериментов. Такое равномерное покрытие пространства параметров критически важно, поскольку гарантирует репрезентативность набора данных и охват широкого спектра возможных конфигураций без существенных перекосов или пробелов. Это повышает надежность обучения модели на следующем этапе выполнения проекта и качество ее прогнозов на новых данных.

На рисунке 2.3 «в» представлена матрица линейных корреляций (Пирсона) между всеми параметрами набора данных. Тепловая карта демонстрирует, что коэффициенты корреляции между различными признаками, а главное – между признаками и целевыми свойствами квази-ССК, имеют низкие значения. Отсутствие сильных линейных зависимостей является важным диагностическим признаком. Оно, во-первых, указывает на сложный, нелинейный характер физической взаимосвязи между геометрией структуры и положением резонанса, что ожидаемо для подобных фотонных систем. Во-вторых, это прямо обосновывает применение методов машинного обучения, в частности алгоритмов, способных выявлять скрытые нелинейные закономерности. Если бы связь была строго линейной, задача могла быть решена простыми регрессионными методами.

Таким образом, представленные результаты подтверждают корректность формирования набора данных и дают веские основания для использования нелинейных моделей машинного обучения для построения связи между параметрами метаповерхности и спектральным положением связанного состояния в континууме.

## 2.2 Математическая модель глубокой трёхмерной полихроматической оптической сверхрешётки нового типа для пленения и долговременного удержания резонансных примесных атомов в буферном газе

Построена математическая модель глубокой трёхмерной (3D) полихроматической оптической сверхрешётки (ОСР) нового типа, предназначенной для 3D пленения и долговременного удержания резонансных примесных атомов, погруженных в буферный газ. Кроме того, данная ОСР обеспечивает надёжную изоляцию атомов от стенок сосуда, содержащего газовую смесь. Полученные результаты существенно развивают идею использования нелинейных интерференционных явлений в эффекте светоиндуцированного дрейфа (СИД) для манипуляции примесными атомами. Она была предложена ранее в исследованиях по госзаданию 2024 года [14] и обосновывалась с помощью простой (скалярной двухуровневой) модели атома в бихроматическом поле с двумерной пространственной конфигурацией. Модель позволяла описывать 2D эффекты механического действия света. В настоящем исследовании рассматривается более реалистичная модель четырёхуровневых атомов с квантовым переходом типа  $F=0 \rightarrow F=1$  (где  $F$  полный угловой момент для основного и возбуждённого состояний частицы). Подобные переходы характерны для изотопов щелочноземельных элементов, а также для Hg, Cd и Zn. Оптическое поле представлялось в виде суперпозиции полихроматического когерентного поля (состоящего из пересекающихся бегущих волн с взаимно ортогональными поляризациями и большими расстройками от резонанса (far-off-resonant field, FORF) и частично когерентного квазирезонансного поля с относительно малой частотной расстройкой (содержащего как статистически независимые (неинтерферирующие) так и интерферирующие компоненты). Необходимым условием проявления нелинейного интерференционного эффекта в СИД и генерации ОСР является присутствие в спектре пространственных частот FORF и частично когерентного поля близких частот, расстроенных на малую (в сравнении с самими частотами) величину, определяемую малыми рассогласованиями направлений бегущих квазирезонансных и FARF волн, т. е. угловыми расстройками. Ансамбль примесных атомов в световом поле описывался квазиклассическими квантовыми кинетическими уравнениями для 16 элементов матрицы плотности в представлении Вигнера, учитывающими столкновения атомов с частицами буферного газа. Посредством последовательного применения специальных процедур (усреднения по высокочастотным временным осцилляциям, осреднения по случайным флуктуациям фаз компонент квазирезонансного поля с использованием модели диффузии фаз Винера-Леви, а затем метода Чепмена-Энскога в комбинации с осреднением по мелкомасштабным пространственным осцилляциям

функции распределения атомов в фазовом пространстве) эти уравнения редуцировались к диффузионно-дрейфовому уравнению (ДДУ) для плотности атомов. Эффективные, пространственно-периодические выпрямленные силы (с периодом  $L$ , значительно превышающем длину волны света) в ДДУ являются интегральными функционалами оптического поля и их потенциалы пропорциональны большому параметру (отношению макроскопического периода  $L$  к длине световой волны) и температуре газовой смеси. Конкретные расчёты ОСР с помощью анализа решений ДДУ проводились для примесных атомов Mg и конфигурации оптических полей, в которой значения угловых расстройек для каждой из трёх групп компонент поля (отличающихся поляризациями) обеспечивали консервативность эффективных выпрямленных сил. Показано, что результатом воздействия ОСР на газовую смесь может быть расслоение первоначально однородно распределенной примеси на периодический массив 3D кластеров (плотных сгустков атомов), локализованных вблизи аттракторов (центров) кубических элементарных ячеек ОСР, рисунок 2.4. Плотность атомов в кластере значительно больше невозмущенной плотности резонансных атомов  $n_0$ , а его объём значительно меньше объёма элементарной ячейки. В периферийной области ячейки содержится лишь незначительная доля (весьма неравномерно распределённых) атомов со средней плотностью существенно меньшей  $n_0$ . Одной из серьёзных технических проблем при наблюдении и использовании эффекта СИД является взаимодействие резонансных примесных атомов со стенкой сосуда с газовой смесью. Чтобы показать эффективность применения ОСР для подавления взаимодействия атомов со стенкой, исследовались нестационарные решения ДДУ с поглощающими (т. е. нулевыми) граничными условиями. Показано, что время жизни примесных атомов в сосуде определяется наименьшим собственным значением одномерной краевой задачи Штурма-Лиувилля и является экспоненциально большим по параметру равному отношению глубины ОСР к температуре. В конкретном расчёте это время увеличивалось (при включении ОСР) с долей секунды до десятков минут.

Полученные результаты могут быть использованы для разработки новых лазерных методов разделения газов (в том числе изотопных смесей), в спектроскопии и для исследования столкновений.

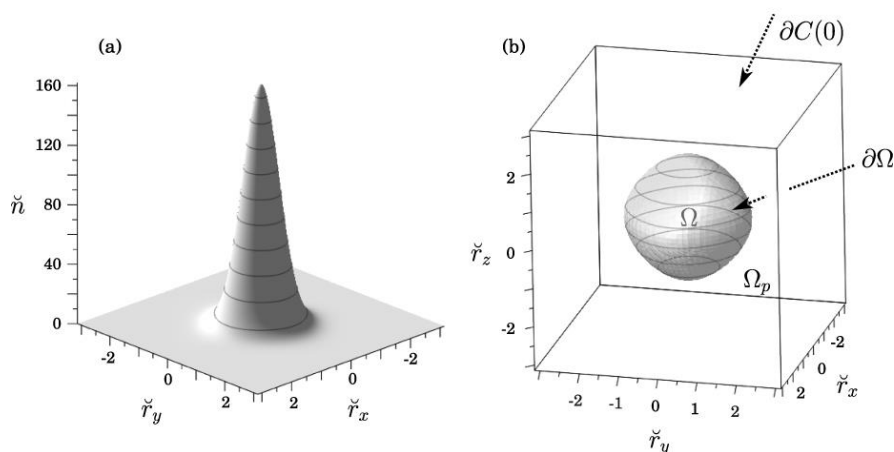


Рисунок 2.4 – Атомный кластер внутри ячейки ОСР. (а) Относительная плотность атомов  $\tilde{n}$  в плоскости  $\tilde{r}_z = 0$ . Распределения плотности в любой ячейке ОСР и любой другой плоскости, проходящей через центры ячеек практически идентичны. (б) Область  $\Omega$  с границей  $\partial\Omega$ , занимаемая атомным кластером. Внутри кластера объемом  $\sim 0.05$  объема ячейки содержится 97% всех атомов в ячейке. В периферийной области  $\Omega_p$  средняя плотность  $\tilde{n} \ll 1$

### 2.3 Математическая модель фильтрации многокомпонентных систем и ее применение к разделению красителей и солей в водных растворах

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. В баромембранных процессах широко используются полимерные мембраны, которые отличаются высокой производительностью и относительно низкой стоимостью, а также керамические мембраны, характеризующиеся механической прочностью, термической и химической устойчивостью, а также способностью к регенерации.

При производстве веществ для окрашивания изделий из различных материалов, а также для придания цвета продуктам питания (промышленных и пищевых красителей) возникает задача их отделения от солей, которые являются промежуточным продуктом в процессе синтеза красителей. Баромембранный процесс ультрафильтрации можно использовать для разделения красителей и солей благодаря мембранам с размером пор в диапазоне 2–50 нм. Такие мембраны задерживают крупные молекулы красителей и примесей, но пропускают мелкие молекулы солей, что позволяет очищать стоки красителей и концентрировать их путем прокачки растворов через мембрану под давлением. Этот мембранный метод используется в текстильной и пищевой промышленности для очистки сточных вод и регенерации. Поскольку многие красители являются ионными (т.е.

диссоциируют на ионы в водных растворах), для их задержания можно использовать мембраны, обладающие зарядом поверхности (как химическим, так и электронным). Электростатическое взаимодействие катионов и анионов красителей, а также ионов солей с поверхностью мембраны является одним из важных механизмов селективного разделения красителей и солей в водных растворах.

Ранее нами была предложена модель фильтрации растворов, содержащих ионы солей и заряженных микрозагрязнителей [15]. В отчетном периоде данная модель была адаптирована для описания процессов разделения ионных красителей и солей и проведено теоретическое исследование процесса разделения на примере водного раствора красителя Бриллиантовый желтый и соли (хлорид натрия).

Модель основана на следующих предположениях:

1. Концентрации ионов красителей и солей, электрический потенциал и давление изменяются только в направлении  $z$ , перпендикулярном поверхности мембраны, имеющей толщину  $L$ .

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

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

Здесь  $n$  – общее число компонентов (ионов),  $J_i$  – 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,  $\bar{K}_i$  – коэффициент трения (взаимодействия ионов с растворителем),  $\Phi$  – электрический потенциал,  $T$  – температура,  $F$  – постоянная Фарадея,  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $\varepsilon$  – коэффициент пористости мембраны.

3. Для всех ионов в растворе выполняется условие электронейтральности и отсутствия ионного тока

$$\sum_{i=1}^n z_i C_i + X = 0, \quad \sum_{i=1}^n z_i J_i = 0, \quad (2.2)$$

где  $X$  – объемная плотность электронного заряда мембраны, определяемая формулой

$$X = C_s (\Phi_w - \Phi). \quad (2.3)$$

Здесь  $\Phi_w$  – потенциал поверхности мембраны,  $C_s = 2c_s / R_p F$ , где  $c_s$  – емкость слоя Штерна (слоя толщиной порядка 0.5 нм, прилегающего к стенке поры и содержащего ориентированные молекулы воды) и  $R_p$  – радиус пор мембраны. В сырьевом потоке и пермеате должно выполняться первое из условий (2) при  $X = 0$ .

4. Объемный поток растворителя определяется градиентом давления и электрического потенциала в соответствии с уравнением

$$J_V = AL \left( -\frac{dP}{dz} + FX \frac{d\Phi}{dz} \right), \quad (2.4)$$

где  $A$  – проницаемость мембраны по воде ( $\text{м}^3/\text{м}^2 \text{ ч бар}$ ).

5. Потоки компонентов определяются формулами

$$J_i = C_i^P J_V, \quad (2.5)$$

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

6. На границе мембрана / раствор ( $z = 0$ ) выполняются условия равновесия Доннана и условия осмотического скачка давления

$$\Phi(0) = \Phi^0, \quad (2.6)$$

$$C_i(0) = C_i^f \phi_i \exp \left( -\frac{z_i F}{RT} (\Phi^0 - \Phi^f) \right), \quad P(0) = P^f + RT \sum_{i=1}^n (C_i(0) - C_i^f).$$

Здесь  $C_i$  – концентрация компонента внутри мембраны,  $C_i^f$  – концентрация компонента в сырьевом потоке,  $\phi_i = (1 - r_i / R_p)^2$  – стерический коэффициент, определяемый соотношением радиуса пор мембраны  $R_p$  и радиуса компонентов  $r_i$ ,  $\Phi^f$  – потенциал и

$P^f$  – давление в сырьевом потоке. Электрический потенциал  $\Phi^0$  на входе в мембрану определяется из условия электронейтральности (см. (2.2)):

$$\sum_{i=1}^n z_i C_i(0) + X = 0. \quad (2.7)$$

Граничные условия на выходе из мембраны ( $z = L$ ) даются формулами

$$\Phi(L) = \Phi^L, \quad (2.8)$$

$$C_i(L) = C_i^p \phi_i \exp\left(-\frac{z_i F}{RT} (\Phi^L - \Phi^p)\right), \quad P(L) = P^p + RT \sum_{i=1}^n (C_i(L) - C_i^p).$$

Предложенная модель с краевыми условиями сводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений для концентраций компонентов  $C_i$ , электрического потенциала  $\Phi$  и давления  $P$ . В модели задается трансмембранная разность давлений  $\Delta P = P^f - P^p = P^f$ , потенциал  $\Phi^f = 0$  и концентрации компонентов в сырьевом потоке  $C_i^f$ , а также проницаемость мембраны по воде  $A$ . В результате численного решения определяются концентрации компонентов в пермеате  $C_i^p$ , потенциал  $\Phi^p$ , а также скорость потока пермеата  $J_V$ . Задержание ионов рассчитывается согласно формуле

$$R_i = 1 - \frac{C_i^p}{C_i^f}. \quad (2.9)$$

В работе рассматривается модельный водный раствор красителя Бриллиантовый желтый и соли хлорид натрия (NaCl). Этот краситель имеет молекулярную массу 624.6 Да и зарядовое число  $-2$ . Ион красителя содержит две сульфогруппы  $\text{SO}_3^-$  и два иона натрия  $\text{Na}^+$  для обеспечения электронейтральности (рисунок 2.5). Таким образом, раствор содержит три типа ионов – ион красителя  $\text{BY}^{2-}$ , ион хлора  $\text{Cl}^-$  и ион натрия  $\text{Na}^+$ .

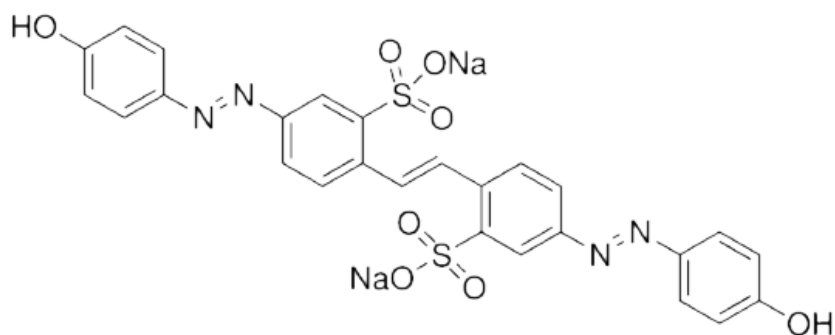


Рисунок 2.5 – Структурная формула красителя Бриллиантовый желтый

Концентрация красителя в растворе составляет 0.5 мМ, а концентрация соли варьируется в ряду 0.1, 1, 10 и 100 мМ. Потенциал поверхности мембраны в расчетах варьировался от  $-0.1$  до  $+0.1$  В. Свойства мембраны и параметры раствора приведены в таблице 2.

Таблица 2 – Свойства мембраны и параметры раствора.

| Параметр  | Значение        |
|---|-----------------|
| Радиус пор мембраны, нм                                   | 10              |
| Толщина селективного слоя мембраны, мкм                   | 30              |
| Проницаемость мембраны, л / м <sup>2</sup> ч бар          | 20              |
| Коэффициент пористости                                    | 0.6             |
| Коэффициент трения  | 1               |
| Емкость слоя Штерна, Ф / м <sup>2</sup>                   | 0.05            |
| Разность давлений, бар                                    | 5               |
| <b>Ион натрия Na<sup>+</sup></b>                          |                 |
| Радиус иона   | 0.116           |
| Коэффициент диффузии, 10 <sup>-9</sup> м <sup>2</sup> / с | 1.330           |
| Концентрация в сырьевом потоке, мМ                        | 1.1, 2, 11, 101 |
| <b>Ион хлора Cl<sup>-</sup></b>                           |                 |
| Радиус иона, нм   | 0.2             |
| Коэффициент диффузии, 10 <sup>-9</sup> м <sup>2</sup> / с | 2.032           |
| Концентрация в сырьевом потоке, мМ                        | 0.1, 1, 10, 100 |
| <b>Ион красителя Бриллиантовый желтый BY<sup>2-</sup></b> |                 |
| Радиус иона, нм   | 0.6             |
| Коэффициент диффузии, 10 <sup>-9</sup> м <sup>2</sup> / с | 0.32            |
| Концентрация в сырьевом потоке, мМ                        | 0.5             |

Зависимость объемного заряда мембраны, усредненного по толщине, от потенциала ее поверхности показана на рисунке 2.6 «а». Как видно, изменение потенциала от положительного к отрицательному приводит к соответствующему изменению заряда мембраны. В области отрицательных потенциалов наблюдается некоторое уменьшение эффективного заряда поверхности при снижении концентрации соли. Это связано с увеличением абсолютной величины потенциала диффузного слоя (рисунок 2.6 «б», см. также формулу (2.3)) за счет экранирования поверхности ионами натрия в условиях их повышенной концентрации внутри пор.

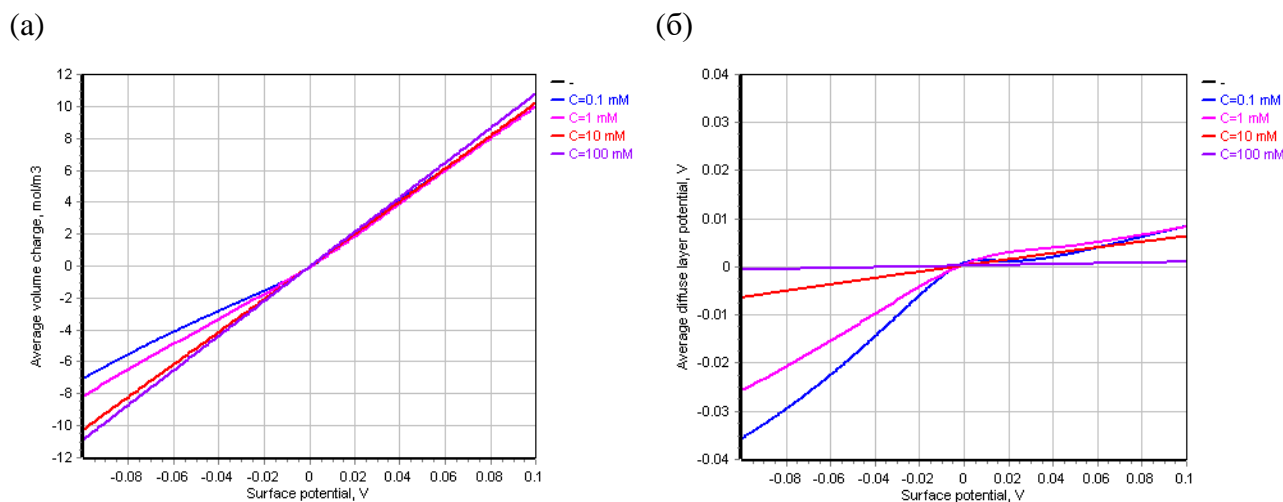


Рисунок 2.6 – Зависимость объемного заряда мембраны (а) и потенциала диффузного слоя (б) от потенциала поверхности мембраны для различных концентраций соли в растворе

Зависимость задержания ионов раствора от потенциала поверхности мембраны представлена на рисунке 2.7. Как видно из рисунка 2.7 «в», при отрицательных потенциалах и малых концентрациях соли (0.1 и 1 мМ) задержание ионов красителя  $\text{BY}^{2-}$  возрастает и приближается к 1 (т.е. к 100%) с ростом величины потенциала. Это происходит за счет уменьшения концентрации ионов в порах вследствие их электростатического взаимодействия с одноименно заряженной поверхностью пор. В области положительных потенциалов задержание резко снижается и даже может стать отрицательным, что соответствует повышению концентрации красителя в пермеате по сравнению с его концентрацией в сырьевом потоке. Задержание иона хлора  $\text{Cl}^-$  определяет задержание соли хлорид натрия. Соответствующая зависимость показана на рисунке 2.7 «б». В области небольших отрицательных потенциалов здесь также наблюдается отрицательное задержание, соответствующее повышению концентрации соли в пермеате. С ростом концентрации соли задержание красителя снижается. Это происходит по причине

экранирования поверхностного заряда мембраны ионами натрия  $\text{Na}^+$ , что снижает электростатическое взаимодействие ионов красителя  $\text{BY}^{2-}$  с поверхностью.

Для оценки степени разделения красителя и соли вводится коэффициент разделения, равный отношению концентраций соли и красителя в пермеате, деленному на отношение концентраций соли и красителя в сырьевом потоке:

$$\alpha = \frac{C_{\text{Cl}^-}^p / C_{\text{BY}^{2-}}^p}{C_{\text{Cl}^-}^f / C_{\text{BY}^{2-}}^f} = \frac{1 - R_{\text{Cl}^-}}{1 - R_{\text{BY}^{2-}}} \quad (2.10)$$

Чем больше этот коэффициент, тем больше соли и тем меньше красителя содержится в пермеате.

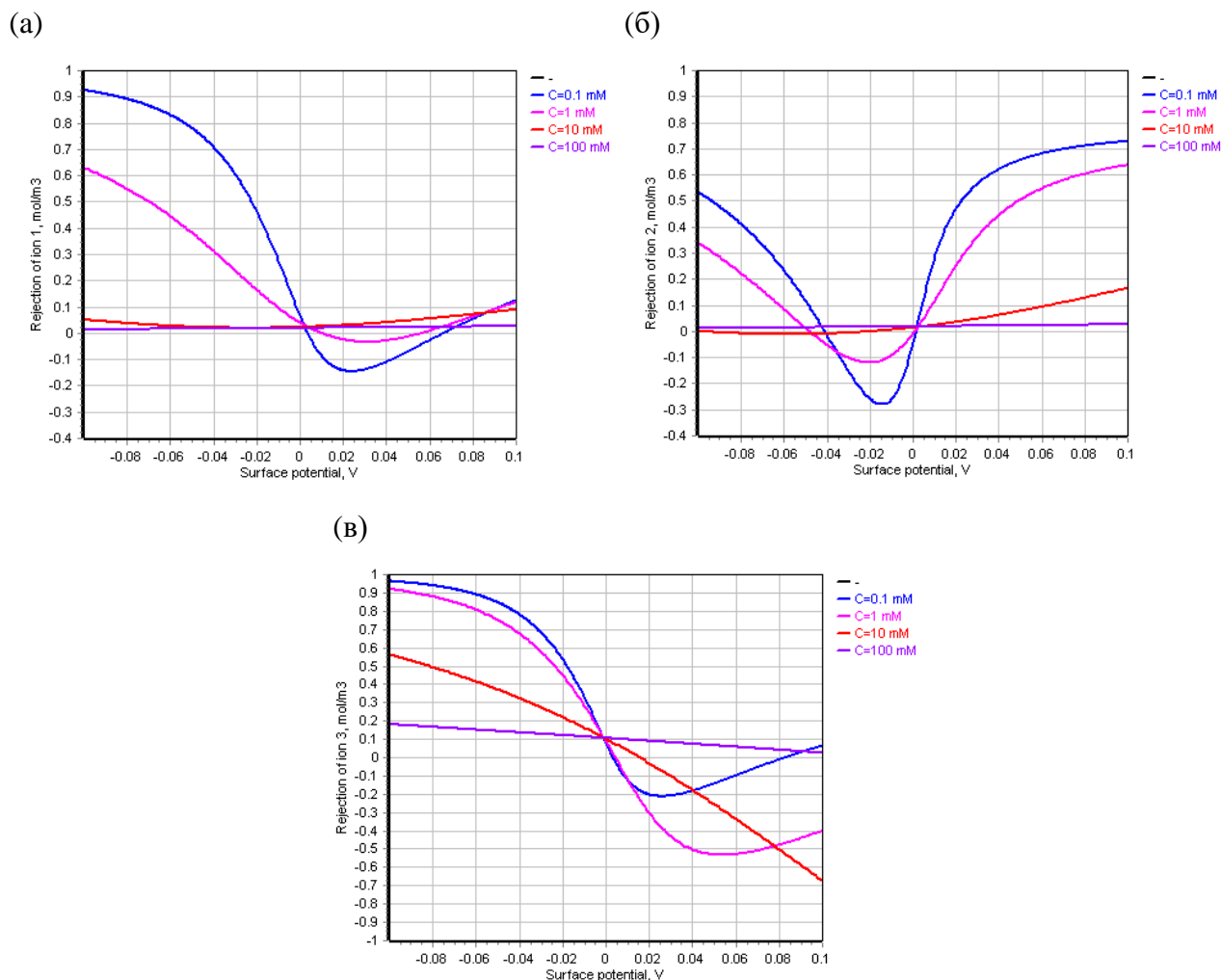


Рисунок 2.7 – Зависимость задержания ионов  $\text{Na}^+$  (а),  $\text{Cl}^-$  (б),  $\text{BY}^{2-}$  (в) от потенциала поверхности для различных концентраций соли в растворе

На рисунке 2.8 показана зависимость коэффициента разделения от потенциала поверхности мембраны. При малой концентрации соли (0.1 мМ) этот коэффициент растет с ростом абсолютной величины потенциала в отрицательной области и достигает 12.8 при  $-0.1$  В, что соответствует достаточно большой степени разделения. С увеличением концентрации в ряду 1, 10, 100 мМ коэффициент разделения снижается до 8.27, 2.27 и 1.21 соответственно при том же значении потенциала. Данный результат объясняется снижением задержания красителя с ростом концентрации соли. При изменении потенциала поверхности от отрицательных значений к положительным коэффициент разделения значительно падает за счет изменения заряда мембраны. Положительный заряд способствует транспорту анионов красителя через мембрану, что приводит к снижению задержания красителя и соответственно уменьшению коэффициента разделения.

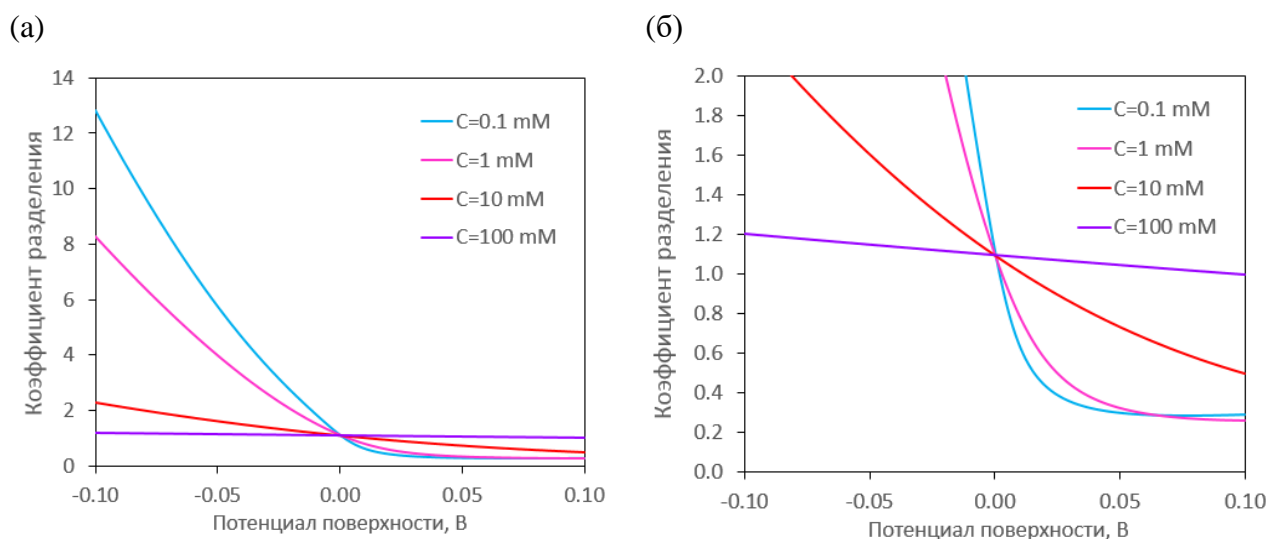


Рисунок 2.8 – Зависимость коэффициента разделения от потенциала поверхности мембраны для различных концентраций соли в растворе

Таким образом, теоретически исследован эффект концентрации соли и потенциала поверхности мембраны на разделение соли и красителя в водном растворе. Показано, что коэффициент разделения возрастает с уменьшением концентрации соли и увеличением абсолютной величины потенциала (заряда) поверхности в отрицательной области.

#### 2.4 Список использованных источников

1. Breiman L. Random forests // Mach. Learn. – 2001. – V. 45. – P. 5–32, DOI: 10.1023/A:1010933404324
2. Ho Т.К. Random decision forests // In: Proceedings of 3rd International Conference on Document Analysis and Recognition. – 1995. – V. 1. – P. 278–282. DOI: 10.1109/ICDAR.1995.598994

3. Heath D., Kasif S., Salzberg S. Induction of oblique decision trees // In: IJCAI, Citeseer. – 1993. – P. 1002–1007.
4. Hada S.S., Carreira-Perpinan M.A., Zharmagambetov A., Sparse oblique decision trees: A tool to understand and manipulate neural net features // Data Mining and Knowledge Discovery. – 2024. – V. 38, No. 5. – P. 2863–2902.
5. Chaturvedi S., Patil S. Oblique decision tree learning approaches - a critical review // International Journal of Computer Applications. – 2013. – V. 82, No. 1. – P. 6–10. DOI: 10.5120/14174-2023
6. Hsu C.W., Zhen B., Stone A.D., Joannopoulos J.D., Soljacic M. Bound states in the continuum // Nat. Rev. Mater. – 2016. – V. 1 – Art. 16048. DOI: 10.1038/natrevmats.2016.48
7. Koshelev K., Bogdanov A., Kivshar Y. Meta-optics and bound states in the continuum // Sci. Bull. – 2019. – V. 64. – P. 836–842.
8. Joseph S., Pandey S., Sarkar S. & Joseph J. Bound states in the continuum in resonant nanostructures: an overview of engineered materials for tailored applications // Nanophotonics. – 2021. – V. 10. – P. 4175–4207.
9. Cai Y., Liu X., Zhu K., Wu H. & Huang Y. Enhancing light absorption of graphene with dual quasi bound states in the continuum resonances // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. – 2022. – V. 283. – Art. 108150.
10. Liu Y., Zhou W. & Sun Y. Optical refractive index sensing based on high-Q bound states in the continuum in free-space coupled photonic crystal slabs // Sensors. – 2017. –V. 17. – Art. 1861. DOI: 10.3390/s17081861
11. Ndagali F.R. & Shabanov S.V. The resonant nonlinear scattering theory with bound states in the radiation continuum and the second harmonic generation. In Active Photonic Materials V. 8808, 88081F (International Society for Optics and Photonics, 2013).
12. Fan S., Suh W. & Joannopoulos J. D. Temporal coupled-mode theory for the fano resonance in optical resonators // J. Opt. Soc. Am. A – 2003. – V. 20. – Art. 569. DOI: 10.1364/josaa.20.000569
13. Gerasimov V.S., Kostyukov A.S., Ershov A.E., Maksimov D.N., Kimberg V., Molokeyev M.S., Polyutov S.P. Machine learning method for predicting line-shapes of Fano resonances induced by bound states in the continuum // Scientific Reports. – 2025. – V. 15. – № 1. – Art. 31187. DOI:10.1038/s41598-025-16192-1
14. 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. – 7 p. DOI: 10.1088/1612-202X/ad6e6e

15. Osorio S.C., 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. – V. 713. – Art. 123347.

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

#### 3.1 Средства многоверсионного анализа результатов оценивания социально-экономического состояния территорий

В рамках развития аналитических средств цифровой платформы для интегрального оценивания социально-экономического состояния территорий разработаны инструменты построения многоверсионных нормативных моделей и анализа результатов многоверсионного моделирования. Диаграмма на рисунке 3.1 представляет инструменты построения разных версий нормативной модели.

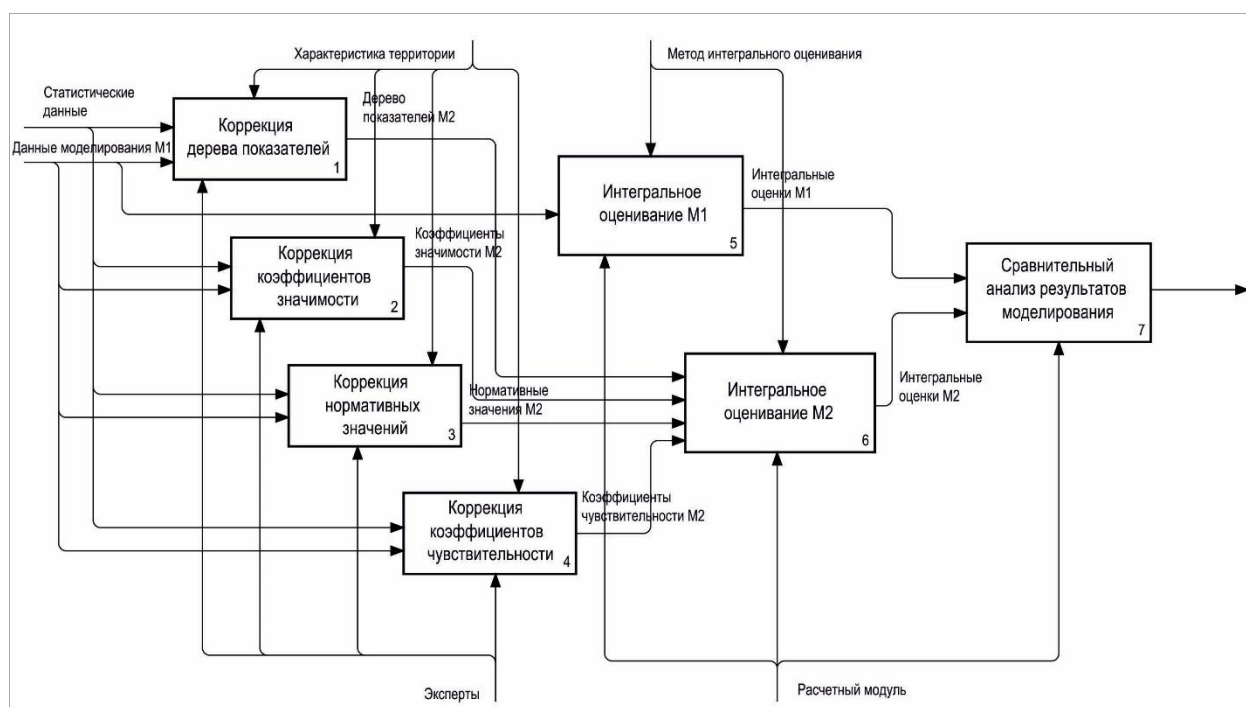


Рисунок 3.1 – Диаграмма мультиверсионного моделирования

Версии нормативной модели могут строиться с целью исследования результатов оценивания одного или нескольких интегральных показателей. Инструменты построения версий нормативной модели включают расширенные функции редактирования, в их числе: коррекция дерева показателей, коррекция коэффициентов значимости, интервала нормативных значений и коэффициентов чувствительности оценок показателей. Разные версии моделей сохраняются, выполняется многоверсионное оценивание интегральных (комплексных) показателей. На диаграмме рисунка 3.1 для примера показаны две версии моделей –  $M_1$  и  $M_2$ . В реальности версий может быть больше. Сравнительный анализ результатов моделирования выполняется с применением картографических и инфографических инструментов.

На рисунке 3.2 представлен конструктор дерева показателей, позволяющий формировать множества базовых и комплексных показателей, а также структуру иерархии. Разные версии дерева показателей строятся путем формирования или коррекции подмножеств базовых, или комплексных показателей на разных уровнях иерархии. Например, комплексный показатель «Экология», включающий в себя базовый показатель «Объем выбросов в атмосферный воздух загрязняющих веществ», может быть скорректирован путем замены на более детальные показатели «Выброшено в атмосферный воздух загрязняющих веществ от стационарных источников загрязнения атмосферного воздуха» и «Объем выбросов в атмосферный воздух загрязняющих веществ от передвижных источников». Структура иерархии показателей может изменяться за счет переноса комплексного показателя на другой уровень иерархии. Например, для оценивания интегрального показателя «Качество жизни» комплексный показатель «Экология» рассматривается в составе комплексного показателя «Комфортная среда». Для оценивания интегрального показателя «Устойчивое развитие» показатель «Экология» помещается на более высокий уровень иерархии и включается в состав показателя «Окружающая среда».

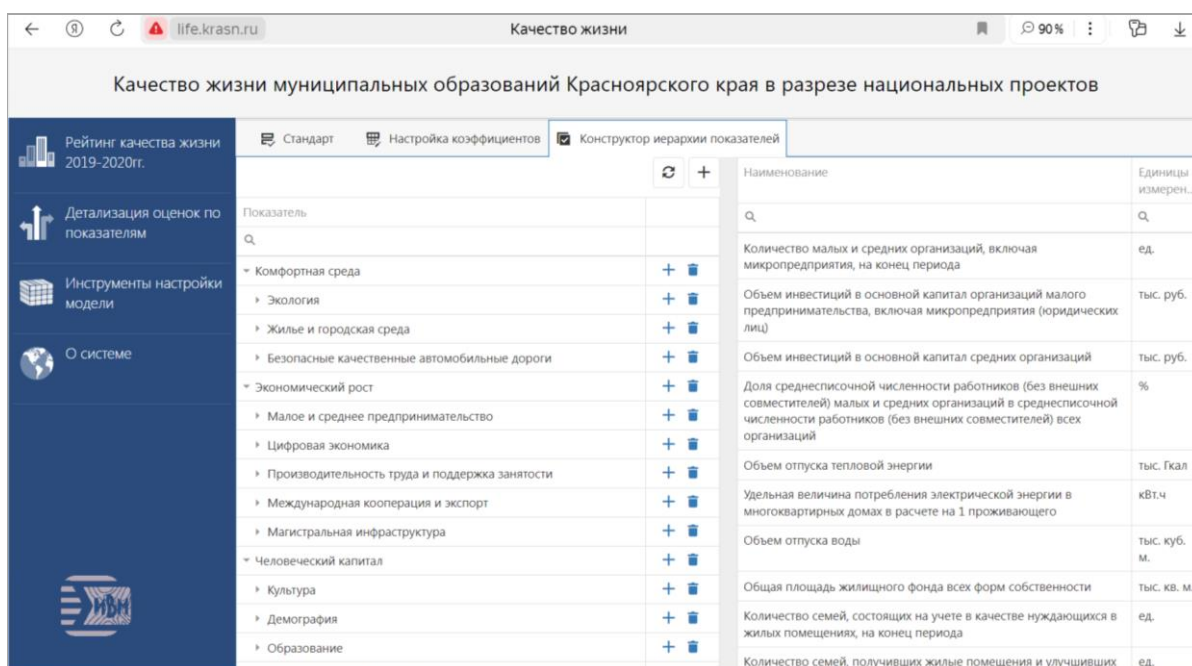


Рисунок 3.2 – Построение версий нормативной модели путем изменения структуры дерева показателей

На рисунке 3.3 представлены инструменты настройки коэффициентов нормативной модели. Для любого показателя возможна коррекция коэффициента значимости, который показывает его «вклад» в состав комплексного показателя более высокого уровня. При этом важно, что сумма коэффициентов значимости всех показателей, включенных в состав

комплексного показателя, должна быть равна 1. Для базовых показателей возможна также коррекция коэффициентов чувствительности и рассчитанных интервалов нормативных значений.

The screenshot shows a web browser window with the URL 'life.krasn.ru'. The page title is 'Quality of Life of Municipalities of the Krasnoyarsk Krai in the Context of National Projects'. The interface includes a sidebar with navigation options like 'Rating of Quality of Life 2019-2020', 'Detailing of scores by indicators', 'Adjustment tools', and 'About the system'. The main content area features a table with columns for 'Indicator', 'Units of measurement', 'Sensitivity coefficient', 'Desired trend', and 'Significance coefficients' (subdivided into 'City district', 'MO with large industrial objects', and 'Rural areas').

| Показатель  | Единицы измерений | Коэффициент чувствительности | Желаемый тренд | Коэффициенты значимости показателей |                                       |                             |
|---|-------------------|------------------------------|----------------|-------------------------------------|---------------------------------------|-----------------------------|
|   |                   |                              |                | Городские округа                    | МО с крупными промышленными объектами | Сельскохозяйственные районы |
| Комфортная среда  |                   |                              |                | 0.35                                |                                       | 0.3                         |
| Экология  |                   |                              |                | 0.4                                 |                                       | 0.2                         |
| Количество очистных сооружений, оснащенных средствами учета и контроля качества сбрасываемых сточных вод        | ед.               | 0.8                          | +              | 0.05                                |                                       | 0.05                        |
| Выброшено в атмосферный воздух загрязняющих веществ от стационарных источников загрязнения атмосферного воздуха | тонн              | 0.8                          | -              | 0.1                                 |                                       | 0.05                        |
| Объем выбросов в атмосферный воздух загрязняющих веществ от передвижных источников                              | тонн              | 0.8                          | -              | 0.1                                 |                                       | 0.05                        |
| Образование отходов производства и потребления  | тонн              | 1.5                          | -              | 0.1                                 |                                       | 0.1                         |
| Количество организаций, использующих отходы в качестве вторичных материальных ресурсов, всех форм собственности | ед.               | 1                            | +              | 0.05                                |                                       | 0.05                        |
| Количество организаций по обезвреживанию отходов  | ед.               | 1                            | +              | 0.05                                |                                       | 0.05                        |
| Количество объектов размещения отходов, выполненных и   | ед.               | 0.8                          | +              | 0.1                                 |                                       | 0.1                         |

Рисунок 3.3 – Построение версий нормативной модели путем настройки коэффициентов

В составе платформы разработан модуль анализа результатов многоверсионного моделирования состояния территорий, позволяющий выполнять сравнительный анализ результатов работы разных версий нормативных моделей. Здесь реализованы средства многомерного, инфографического и картографического анализа результатов оценивания на основе нескольких вариантов исходной структуры показателей, их коэффициентов значимости, чувствительности и нормативных значений. Средства многомерного представления с применением кросс-таблиц позволяют выполнять анализ показателей и их оценок путем агрегирования и детализации значений. Средства инфографического и картографического представления результатов оценивания обеспечивают сравнительный анализ территорий по оценкам и фактическим значениям показателей за выбранный период времени. На рисунке 3.4 представлены результаты расчета интегрального показателя «Качество жизни муниципальных образований Красноярского края» на основе двух версий нормативной модели, отличающихся по структуре дерева показателей.

Разработанные средства позволяют также выполнять сопоставление результатов оценивания разных показателей для муниципальных образований Красноярского края (рисунок 3.5).

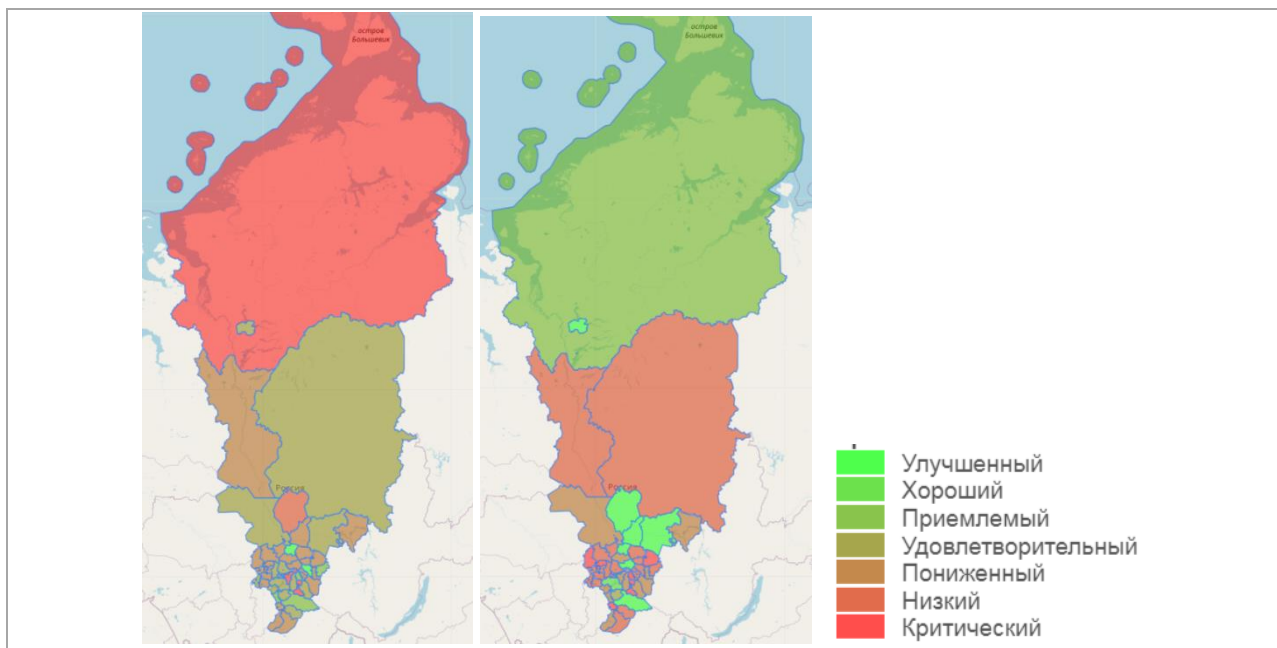


Рисунок 3.4 – Картографический анализ результатов многоверсионного моделирования

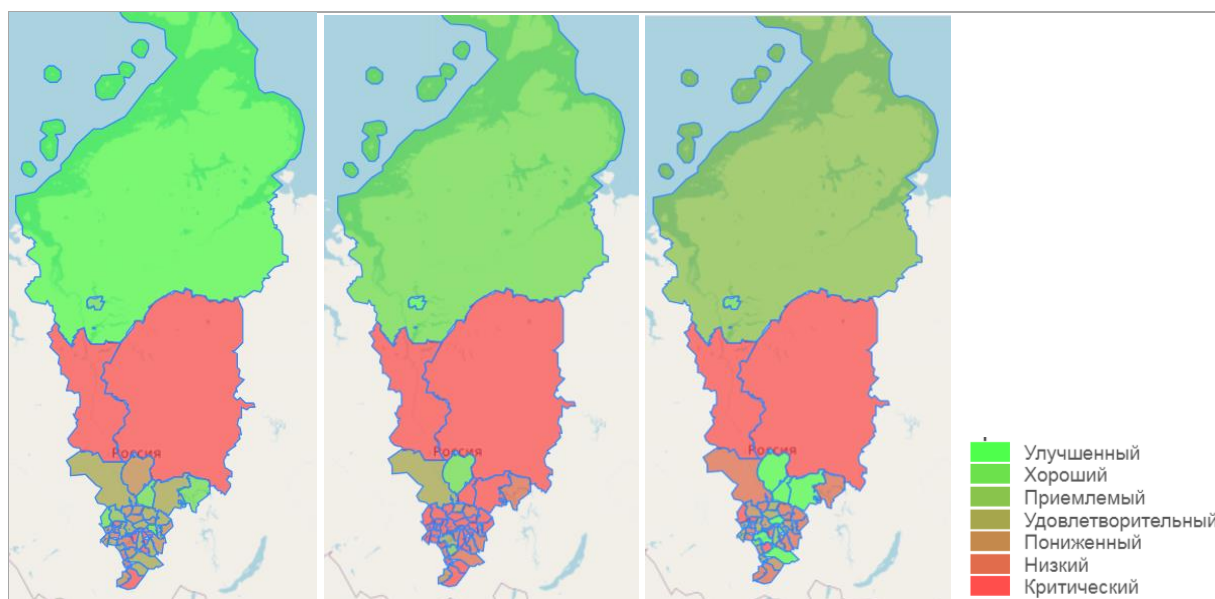


Рисунок 3.5 – Сопоставление показателей «Экология», «Человеческий капитал», «Комфортная среда»

Разработанные новые инструменты многоверсионного моделирования позволяют выполнять тонкую настройку коэффициентов и структуры иерархии нормативных моделей комплексных показателей состояния территорий. Сравнительный анализ результатов моделирования может применяться для исследования результатов оценивания как одного, так и нескольких интегральных показателей, что позволяет выявлять «проблемные» территории и формировать соответствующие управляющие воздействия на территориальном уровне.

### 3.2 Средства информационной поддержки управления природно-техногенной безопасностью территорий

В рамках развития средств информационной поддержки управления предупреждением чрезвычайных и аварийных ситуаций выполнена систематизация и разработана универсальная структура информационных ресурсов. Компактность представления упрощает реализацию независимых сервисов для получения и обработки данных, позволяет системно реализовать мероприятия по снижению рисков ЧС. Структура информационных ресурсов (рисунок 3.6) отражает необходимость и достаточность данных для планирования, реализации и контроля оперативных и предупредительных мероприятий. Смежные задачи управления, такие как мониторинг обстановки, меры в режиме повышенной готовности при угрозе ЧС можно представить как экземпляры структуры без потери информативности.

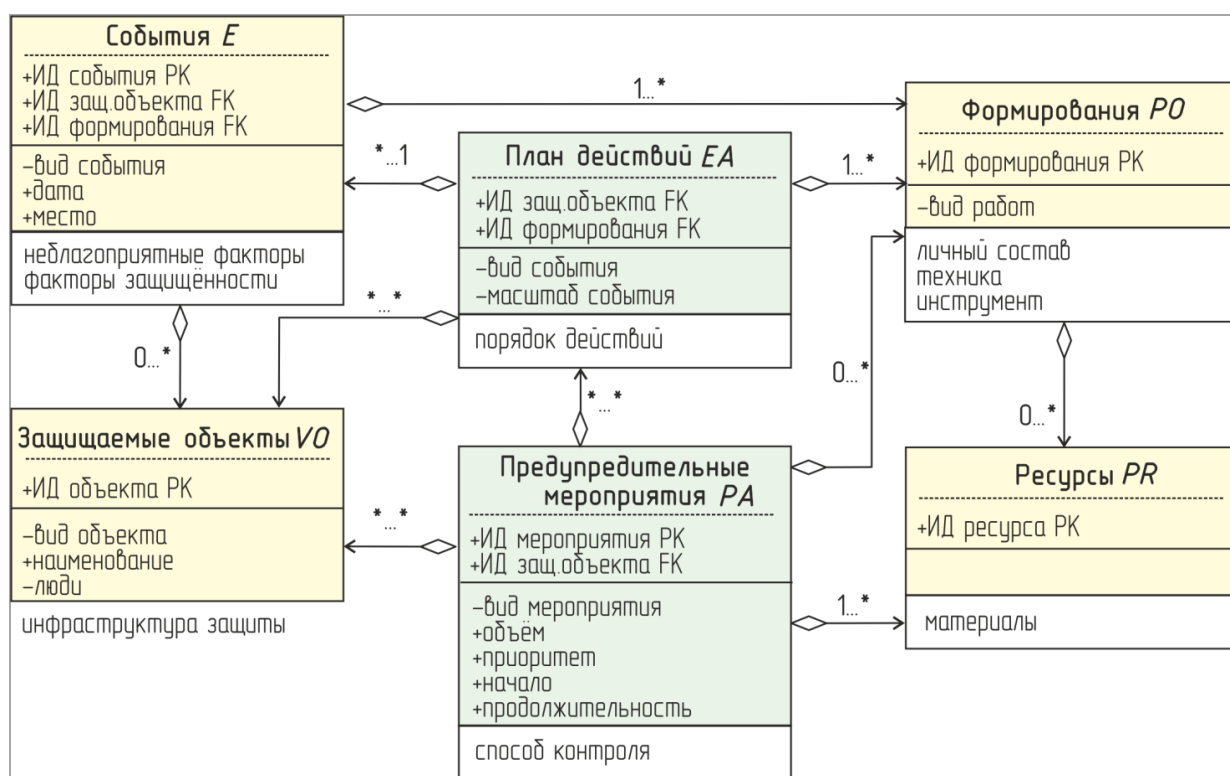


Рисунок 3.6 – Базовая структура информационных ресурсов управления предупреждением чрезвычайных ситуаций

В представленной структуре общие части реестров объектов и событий показаны желтым фоном; белым фоном показаны характеристики, изменяющиеся в зависимости от видов ситуаций и масштаба защищаемых объектов (здание, поселение, территория). Зеленый фон показаны сущности, на основе которых формируются управленческие решения. Пространственная привязка позволяет визуализировать результаты

ситуационного и аналитического моделирования. Логическую целостность данных обеспечивают связи через первичные (РК) и вторичные ключи (ФК). Знаком «+» отмечены показатели, на основе которых строятся аналитические модели. Знаком «+» отмечены справочники, такие как «Вид события», «Категория объекта», «Вид мероприятия», содержание которых определяется нормативно. Представление связей между сущностями в виде онтологии (рисунок 3.7) позволяет проектировать аналитические и ситуационные модели для формирования решений.

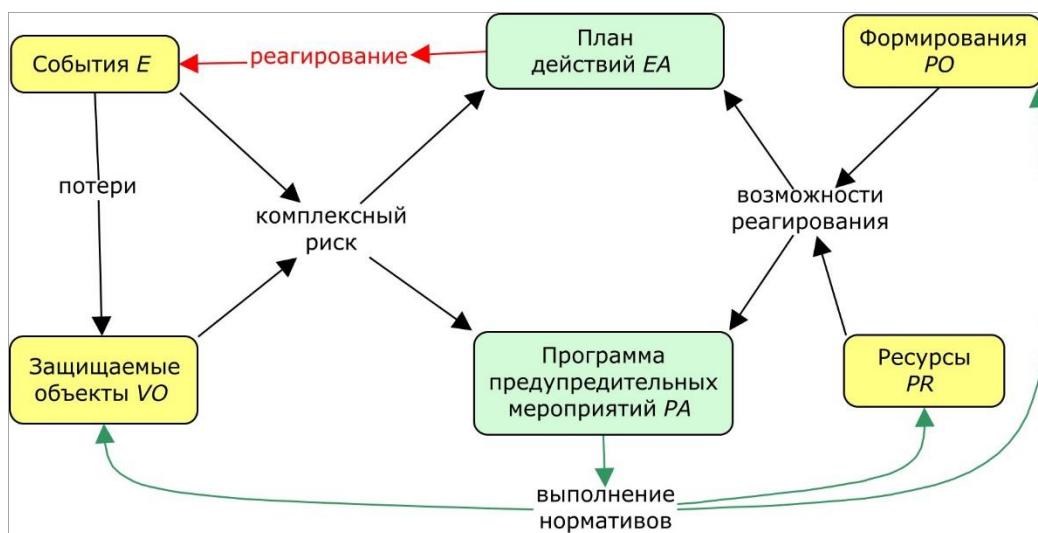


Рисунок 3.7 – Онтология связей в структуре информационных ресурсов управления предупреждением чрезвычайных ситуаций

Информационная поддержка оперативного и стратегического управления базируется на результатах оценок комплексных рисков и уровня готовности к ликвидации опасных ситуаций. Для обоснования управленческих решений такие оценки представляются в виде:

- условий реализации процессов реагирования EA. Масштабность, последовательность и длительность работ по ликвидации ситуаций, их последствий являются числовыми показателями, определяемыми на основе прецедентов либо экспертно;
- списка критериев соответствия показателей норме для вычисления приоритетности предупредительных мероприятий PA. При отсутствии утвержденных нормативных значений они рассчитываются путем кластеризации имеющихся данных. Например, в паспортах сельских населенных пунктов (VO) время реагирования на пожар составляет от 10 до 120 минут. Учитывая время горения деревянного дома, полагаем, что поселения с временем прибытия более 20 минут относятся к зоне неприемлемого риска. Караулы федеральной противопожарной службы локализуют очаги возгорания, а загоревшиеся строения не подлежат восстановлению. Удаленность VO является критерием создания добровольных формирований PO, их оснащение первичными средствами

пожаротушения. Наличие безводных зон в поселениях и садоводческих товариществах также считается триггером для  $PA$ .

Обоснование решений по проведению превентивных мероприятий применяется в отношении сущностей ( $PA \rightarrow VO$ ;  $PA \rightarrow PO$ ;  $PA \rightarrow PR$ ) и реализуется с использованием ситуационного моделирования. Целесообразно применение обратного порядка проектирования процессов формирования решений: содержание управления определяет вид аналитических моделей, которые, в свою очередь, состоят из атомарных сущностей, получаемых из конкретных источников. Тем самым реализуется принцип компактности информации «если отсутствуют или недостаточно полномочий и ресурсов для управления ситуацией, то информация игнорируется или к ней предоставляется доступ в фоновом режиме. Сбор только показателей, используемых для формирования решений  $PA$  и  $EA$ , позволяет избежать избыточности собираемых данных, уменьшить трудозатраты на их актуализацию и информационный обмен. Формирование решений для оперативного управления ( $EA \rightarrow E$ ) реализуется на основе ситуационного моделирования опасностей  $E$ , уязвимости  $VO$  и защищенности  $PO + PR$ .

Важным аспектом создания баз знаний для систем поддержки принятия решений, детализации и корректировки планов действий является изменение форм оперативных донесений о реагировании на ЧС и опасные ситуации, а также статистической отчетности. Максимизация сходства описаний сценариев реагирования в планах действий и динамики реальных ситуаций позволяет снизить трудоемкость формализации принятых решений для базы знаний и тиражирования уникального опыта, полученного в экстремальных условиях.

### **3.3 Средства раннего выявления отклонений в технологическом процессе на основе применения методов интеллектуального анализа и нейросетевых технологий**

С целью обеспечения оперативного контроля технологии производства алюминия выполнена разработка интеллектуальных моделей и алгоритмических средств для раннего выявления отклонений в технологическом процессе (возникновение анодного эффекта, нарушение концентрации глинозема, нарушение на аноде) по данным мгновенного мониторинга на основе применения методов интеллектуального анализа и нейросетевых технологий. Общая схема работы алгоритмических средств представлена на рисунке 3.8.

Работа алгоритмических средств включает три основных этапа: прогнозирование значений технологических параметров, идентификация нарушений и локализация источника возникновения отклонений.

Первый этап. На каждом такте формируется скользящее окно исторических данных длительностью 6 минут, по которому строится прогноз значений технологических параметров («ток на аноде») по всем анодам электролизера на 6 минут вперед.

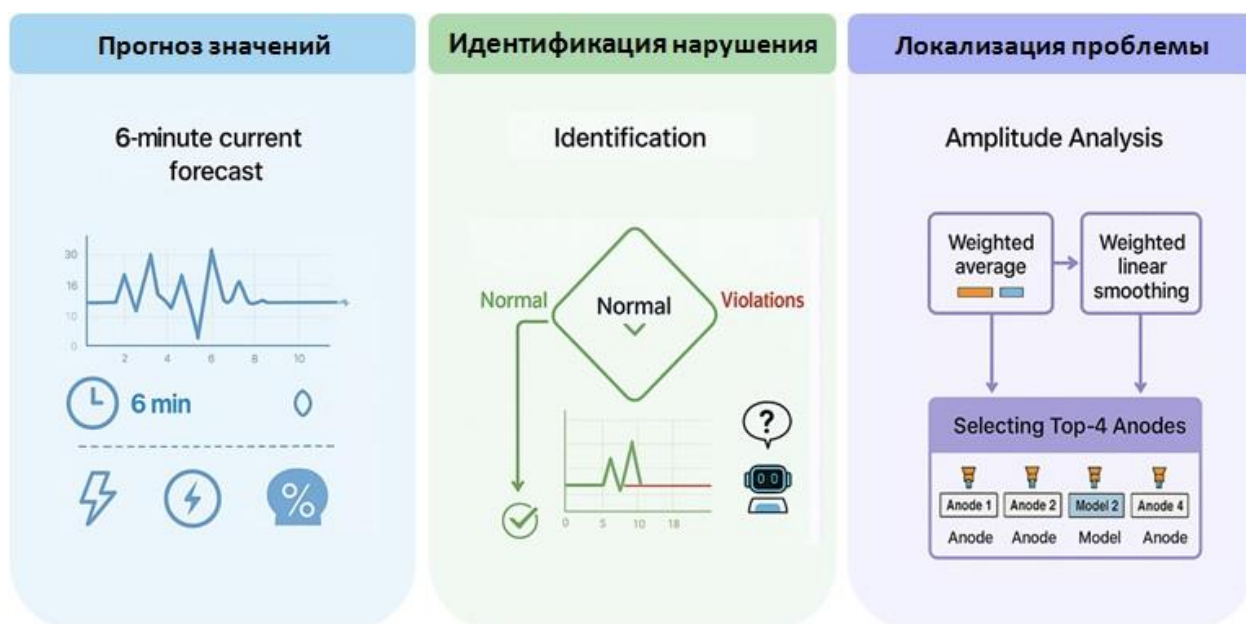


Рисунок 3.8 – Схема работы алгоритмических средств выявления отклонений в технологическом процессе по данным мгновенного мониторинга

Для прогнозирования значений технологических параметров разработана интеллектуальная нейросетевая модель на основе архитектуры *TimeMixer*, показавшей наилучшие значения метрик оценки качества модели. Данная архитектура основана на многослойном персептроне и применяет подход мультимасштабного смешивания, сначала разделяя ряды на сезонные и трендовые компоненты, а затем объединяя результаты нескольких предикторов, обеспечивая более согласованный и точный прогноз временных рядов. Параметры разработанной модели представлены в таблице 3. Пример работы модели прогнозирования показан на рисунке 3.9.

Таблица 3 – Параметры нейросетевой модели для прогнозирования значений технологических параметров

| № | Параметр | Значение | Описание   |
|---|----------|----------|--|
| 1 | n_layers | 6        | Количество Микс-блоков   |
| 2 | d_model  | 256      | Размерность скрытого представления                                   |
| 3 | d_ffn    | 512      | Размер скрытого слоя в позиционно-зависимой feed-forward сети        |
| 4 | top_k    | 8        | Сколько наибольших амплитуд (частот) отбирать для спектральной части |

| №  | Параметр            | Значение   | Описание  |
|----|---------------------|------------|---|
| 5  | dropout             | 0.3        | Коэффициент дропаута                            |
| 6  | decomp_method       | moving_avg | Метод декомпозиции                              |
| 7  | moving_avg          | 25         | Окно скользящего среднего для декомпозиции      |
| 8  | downsampling_layers | 2          | Количество слоёв даунсэмплинга во временной оси |
| 9  | downsampling_window | 3          | Окно для даунсэмплинга/агрегации                |
| 10 | epochs              | 100        | Количество эпох                                 |
| 11 | patience            | 10         | Ранняя остановка по валидации                   |
| 12 | batch_size          | 32         | Размер батча                                    |

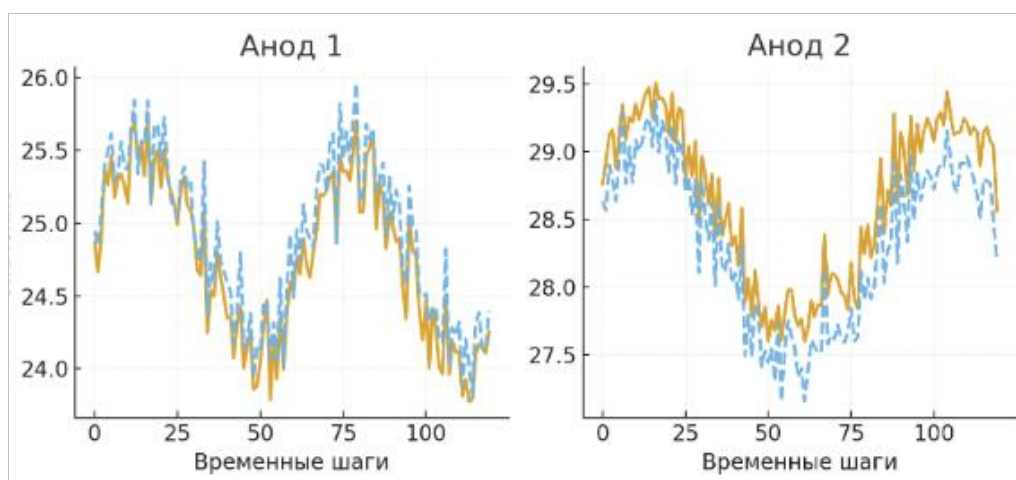


Рисунок 3.9 – Пример работы прогнозной модели (сплошная линия оранжевого цвета – фактические значения, пунктирная линия синего цвета – модельные прогнозные значения)

Второй этап. Полученные прогнозные временные ряды анализируются на предмет соответствия характера их поведения одному из состояний: «нормальное» или «с нарушением». Классификатор временных рядов возвращает вероятность возникновения нарушения.

Для идентификации нарушений разработана интеллектуальная нейросетевая модель на основе архитектуры *SAITS (Self-Attention-based Imputation for Time Series)*, показавшей наилучшие значения метрик оценки качества модели. Данная архитектура использует механизм самовнимания (*Self-Attention*), позволяющем модели захватывать временные зависимости и корреляции между признаками, успешно решая задачи классификации многомерных временных рядов с пропусками и нерегулярностью. Параметры разработанной модели представлены в таблице 4.

Таблица 4 – Параметры нейросетевой модели для идентификации отклонений в технологическом процессе

| №  | Параметр   | Значение | Описание  |
|----|------------|----------|---|
| 1  | n_layers   | 4        | Количество слоёв в DMSA-блоках                                |
| 2  | d_model    | 256      | Размерность multi-head  |
| 3  | n_heads    | 8        | Число голов в multi-head                                      |
| 4  | d_k        | 64       | Размерность ключей  |
| 5  | d_v        | 64       | Размерность значений  |
| 6  | d_ffn      | 256      | Размер скрытого слоя в позиционно-зависимой feed-forward сети |
| 7  | dropout    | 0.3      | Коэффициент дропаута  |
| 8  | epochs     | 100      | Количество эпох   |
| 9  | patience   | 10       | Ранняя остановка по валидации                                 |
| 10 | batch_size | 32       | Размер батча  |

Полученные по результатам тестирования модели оценки качества демонстрируют хорошую способность модели распознавать состояния «нормы» и фиксировать такие нарушения как возникновение анодных эффектов и нарушения концентрации глинозема ( $precision \approx 0.77-0.96$ ,  $recall \approx 0.70-0.91$ ,  $F1 \approx 0.82-0.91$ ).

Третий этап. При обнаружении отклонения, выполняется поиск места нахождения источника – «проблемного» анода на основе анализа поведения временных рядов технологических параметров («ток на аноде») с учетом их прогнозных значений.

Для каждого анода на текущем такте вычисляются два индикатора:

– взвешенное среднее параметра (характеризует текущую нагрузку анода с учетом недавней истории):

$$\mu_i^w(t) = \frac{\sum_{k=0}^{W-1} w_k I_i(t-k)}{\sum_{k=0}^{W-1} w_k}, \quad (3.1)$$

где для  $i$ -го анода есть последние  $W$  минут данных по току  $I_i(t-k)$ ,  $k = 1, \dots, W$ ;  $w_k = \lambda^k$ ,  $\lambda \in (0,1)$  – весовой коэффициент.

– взвешенное линейное отклонение от среднего (характеризует внутривременную нестабильность тока):

$$MAD_i^w(t) = \frac{\sum_{k=0}^{W-1} w_k |I_i(t-k) - \mu_i^w(t)|}{\sum_{k=0}^{W-1} w_k}. \quad (3.2)$$

Затем определяются приращения указанных индикаторов относительно предыдущего такта:

$$\Delta\mu_i^w = \mu_i^w(t) - \mu_i^w(t-1), \Delta MAD_i^w = MAD_i^w(t) - MAD_i^w(t-1). \quad (3.3)$$

Все величины нормируются по «фону» электролизной ванны на текущем такте, чтобы учесть моментальное состояние всего массива анодов:

- среднее по ванне:

$$\bar{\mu}^w(t) = \frac{1}{N} \sum_i \mu_i^w(t) \quad (3.4)$$

- разброс по ванне:

$$\sigma_\mu(t) = IQR/1.349 \quad (3.5)$$

- z-оценки:

$$z_{\mu,i} = \frac{\mu_i^w(t) - \bar{\mu}^w(t)}{\sigma_\mu(t)}, z_{\Delta\mu,i} = \frac{\Delta\mu_i^w}{\sigma_{\Delta\mu}(t)}, z_{\Delta MAD,i} = \frac{\Delta MAD_i^w}{\sigma_{\Delta MAD}(t)} \quad (3.6)$$

где  $IQR = Q_3 - Q_1$  – межквартильный размах.

На основе нормированных приращений и уровня отклонения формируется композитный показатель как неотрицательная взвешенная сумма:

$$S_i = \alpha \cdot z_{\Delta\mu,i}^+ + \beta \cdot z_{\Delta MAD,i}^+ + \gamma \cdot z_{\mu,i}^+ \quad (3.7)$$

$x^+ = \max(x, 0)$ ,  $\alpha, \beta, \gamma$  – весовые коэффициенты, 0.5, 0.3 и 0.2 соответственно.

Вклад роста взвешенного среднего отражает перераспределение тока в пользу конкретного анода, вклад роста взвешенного отклонения соответствует нарастанию нестабильности, вклад текущего уровня отклонения фиксирует факт перегрузки относительно типичных значений работы электролизера. В результате работы алгоритма формируется список из четырех анодов с максимальными значениями композитного показателя. Такой порядок обеспечивает возможность выявления и локализации источника отклонений. Например, при нарушениях концентрации глинозема выявление четырех

«проблемных» анода позволяет определить «проблемную» точку автоматической подачи глинозема в электролизере и своевременно устранить «непробой».

Разработанные модели и алгоритмические средства выявления отклонений в технологическом процессе по данным мгновенного мониторинга проходят апробацию в рамках действующей информационно-аналитической системы оперативного контроля технологии производства алюминия на опытном участке РА-550.

#### **3.4 Алгоритм сегментации числовых временных рядов с многомодальным распределением элементов**

Данные, представленные в виде временных рядов, являются ключевым и наиболее распространенным типом данных для систем поддержки принятия решений. Методы анализа временных рядов позволяют закладывать исторические наблюдения в основу для прогнозов и сценарного анализа развития системы. Одной из трудностей, возникающих при анализе реальных данных, представленных в виде временных рядов, является мультимодальность выборки, порождаемой элементами ряда, то есть наличие нескольких мод в ее гистограмме [1]. Такие данные являются характерными для задач промышленности и принятия решений, поскольку означают наличие нескольких устойчивых режимов работы системы, каждый из которых должен быть выделен в отдельную выборку. На практике наличие мультимодальности приводит к невозможности применения многих статистических критериев, выявления трендов, автокорреляций, стационарности и других свойств ряда или его частей. Ситуация усложняется, если мультимодальность не объясняется сезонностью или некоторые моды близки друг к другу или не сильно выражены.

В рамках этапа работы был предложен алгоритм сегментации числовых временных рядов, элементы которых имеют многомодальное распределение. Сегментация в данном случае означает отнесение каждого элемента ряда к классу с унимодальным распределением. Такая постановка задачи близка к задаче классификации элементов ряда [2] по заданному признаку. В настоящее время предлагается использовать критерий нормальности для оценки полученных распределений, но в будущих работах планируется предложить модификации, которые могли бы работать и со смесью распределений, отличных от нормального. Было проведено сравнение предлагаемого алгоритма с методами, решающими схожие задачи: метод порога из теории распознавания изображений; алгоритм Дженкса, являющийся одномерным аналогом метода  $k$ -средних; и модель гауссовой смеси.

В рамках этапа работы были проведены исследования по эффективности предложенного алгоритма на синтетических и реальных данных. Например, на рисунках 3.10-3.12 приведено сравнение действия по разделению на классы синтетически сгенерированных бимодальных рядов (с известной классификацией) с помощью порогового метода и предложенного алгоритма.

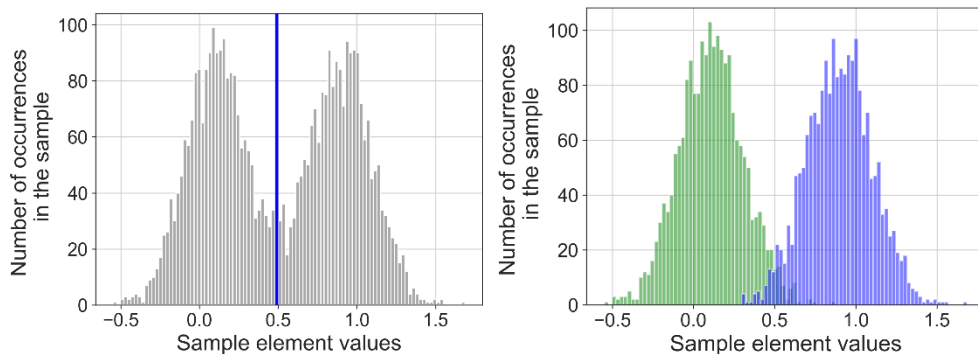


Рисунок 3.10. Результат применения порогового алгоритма сегментации временных рядов (слева) и предложенного алгоритма (справа) к синтетически сгенерированным временным рядам с хорошо разделяемыми модами

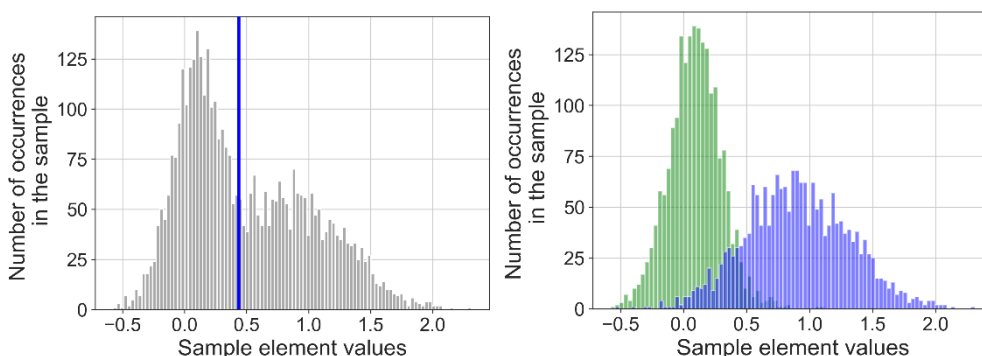


Рисунок 3.11. Результат применения порогового алгоритма сегментации временных рядов (слева) и предложенного алгоритма (справа) к синтетически сгенерированным временным рядам с близко расположенными модами

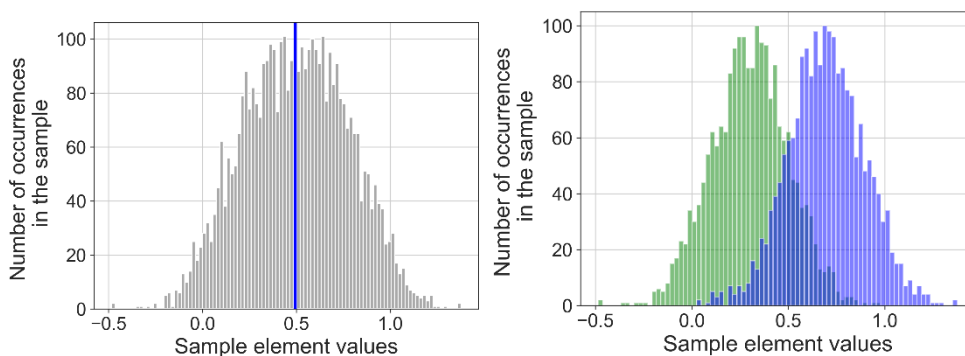


Рисунок 3.12. Результат применения порогового алгоритма сегментации временных рядов (слева) и предложенного алгоритма (справа) к синтетически сгенерированным временным рядам с нечеткой модальностью

В таблице 5 показаны ошибки классификации для сравниваемых алгоритмов на синтетических данных, представленных на рисунках 3.10-3.12. Здесь под ошибкой понимается процент элементов выборки, которые классифицированы неверно.

Таблица 5 – Доля элементов выборки, отнесенных к неправильному классу (процент, %) для синтетических данных, представленных на рисунках 3.10-3.12

| Алгоритм               | Бимодальная выборка                         |  |   |
|------------------------|---|--|---|
|                        | хорошо<br>разделимые моды<br>(рисунок 3.10) | близко<br>расположенные<br>моды (рисунок 3.11) | нечеткая<br>модальность<br>(рисунок 3.12) |
| Пороговый алгоритм     | 2.53  | 8.25   | 15.73                                     |
| Алгоритм Дженкса       | 2.50  | 12.58  | 15.78                                     |
| Модель гауссовой смеси | 2.60  | 9.45   | 15.65                                     |
| Предложенный алгоритм  | 0.00  | 0.60   | 0.23                                      |

Как видно из таблицы 5, алгоритм даёт на порядки меньшую ошибку сегментации по сравнению с конкурентными методами. Это происходит по следующей причине. Общим для существующих алгоритмов, решающих схожую задачу, является то, что они классифицируют исходные данные по  $D$ -классам, не используя возможную связность нескольких соседних элементов (свойство, важное для временных рядов). Это приводит к тому, что классификация для таких методов основана на нахождении  $D-1$  значения между минимумом и максимумом выборки всех элементов исходного ряда. Именно по этим значениям элементы ряда разбиваются на классы. Авторский алгоритм предлагает сравнивать не отдельные элементы временного ряда, а некоторый отрезок, удовлетворяющий вводимому нами в рассмотрение условию однородности сегмента  $X_i^j = \{x_i, x_{i+1}, \dots, x_j\}$ ,  $i < j$  временного ряда  $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$

$$|\max X_i^j - \min X_i^j| \leq T,$$

где  $T$  - гиперпараметр метода.

Узким местом предлагаемого алгоритма является оптимальный выбор порогового значения  $T$ , определяющего однородность подпоследовательности. Здесь в качестве критерия предлагается минимум максимумов значения статистики Харке-Бера, полученных для  $D$  классов при переборе допустимых значений  $T$ . Однако, распределение элементов реального временного ряда редко представляет собой смесь нормальных

распределений. В этом случае соответствие между минимумом статистики Харке-Бера и ошибкой сегментации остаётся открытой проблемой. Тем не менее, для реализации предлагаемого алгоритма сегментации временных рядов условие выбора значения  $T$  является переменным и может быть легко заменено на более подходящее для конкретной ситуации. Более подробное описание метода приведено в статье [3].

### **3.5 Методы обработки данных и критерии оценки для обнаружения киберугроз в информационно-телекоммуникационных системах на основе алгоритмов машинного обучения**

В отчетном периоде были продолжены исследования по созданию методов обработки данных на основе алгоритмов машинного обучения и формулирования критериев оценки для обнаружения киберугроз в информационно-телекоммуникационных системах.

Для создания расширенных наборов данных сетевой активности Веб-сервисов предложен новый подход, который вводит новую единицу агрегации «сеанс», использует сигнатурный анализ и многоуровневые разнородные источники данных. С использованием предложенного подхода разработан программный комплекс для создания обучающих наборов данных из многоуровневых источников согласно модели OSI (Open Systems Interconnection). Предложенный подход позволяет использовать полученные наборы для создания более эффективных критериев обнаружения и предотвращения вторжения с помощью различных методов анализа данных и машинного обучения.

Для построения набора данных используются разнородные источники, соответствующие сетевому L3, транспортному L4 и прикладному L7 уровням модели OSI. Источниками являются данные сетевой активности PCAP пограничного маршрутизатора и журналы веб-сервисов корпоративной сети Красноярского научного центра. Объем данных за 1 месяц для журналов трафика PCAP составляет 600 Гб и 1 млрд. записей, для журналов веб-сервисов – 4 Гб и 20 млн. записей. Значительный объем данных требует применения высокопроизводительных методов обработки и анализа.

Для формирования обучающих наборов данных был предложен метод, основанный использовании сигнатурного анализа на прикладном уровне для формирования и разметки набора данных. При создании набора данных формируются дополнительные атрибуты, характеризующие общие закономерности профиля атаки, которые в дальнейшем будут использоваться для выявления атаки без использования сведений о сигнатуре. Обобщающая способность классификаторов на основе данной обучающей выборки позволит выявить атаки с неизвестными ранее сигнатурами. Также авторами вводится

новый элемент «сеанс», включающий все запросы на прикладном, транспортном и сетевом уровнях за непрерывный период активности и дополнительную информацию об источнике трафика. Сеанс является целостной сущностью, для него формируются атрибуты набора данных. Упрощенный алгоритм метода представлен на рисунке 3.13.

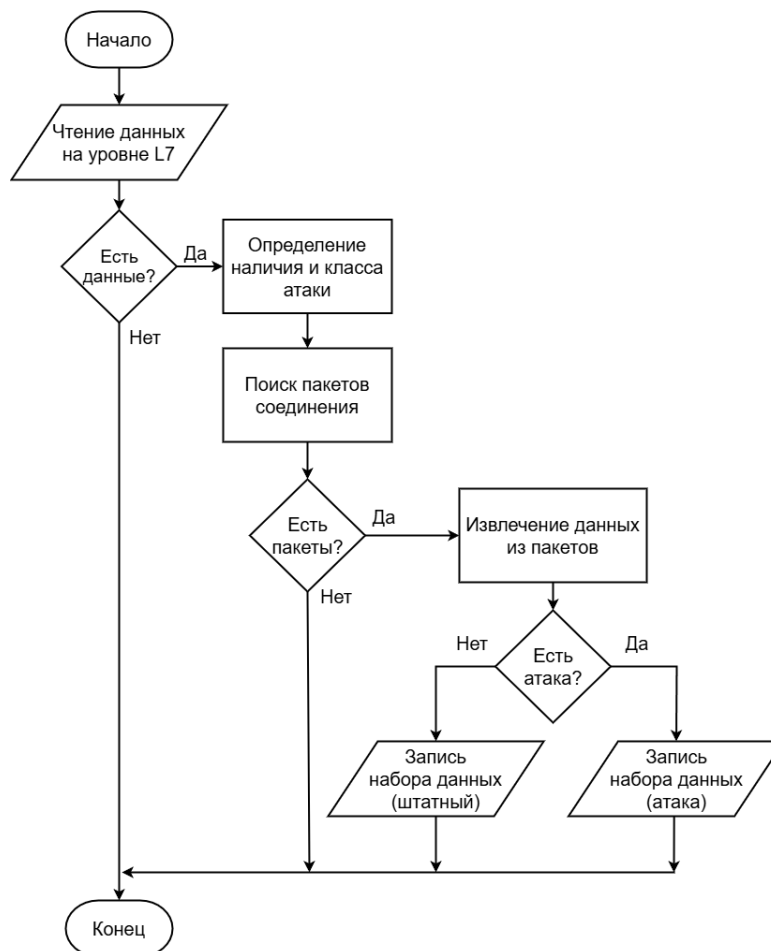


Рисунок 3.13 – Алгоритм формирования набора данных

Для каждой записи в прикладном журнале на уровне L7 выполняется поиск пакетов соединения в других источниках на основе временных меток и IP-адреса источника. Из найденных пакетов соединения извлекаются дополнительные атрибуты на уровнях L3 и L4, производится их агрегация, агрегированные значения добавляются в обучающие наборы данных. Также извлекаются байты из пустых областей пакетов, из них формируются строки при наличии непустых значений. Далее запускается сигнатурный анализ на прикладном уровне L7 для выявления наличия веб-атаки. При обнаружении атаки извлекается ее тип согласно заданной классификации, который добавляется в набор данных – данный набор считается атакой. Если сигнатурный метод не обнаруживает веб-атаку, признак типа атаки не заполняются, набор данных считается штатным. Таким образом, разработанный метод

позволяет агрегировать данные из источников на различных уровнях модели OSI. Агрегирование происходит на основе сеансов, для которых заполняются атрибуты создаваемого набора данных.

Разработан программный комплекс автоматизированной подготовки обучающих наборов данных активности веб-сервисов для машинного обучения. Программный комплекс позволяет осуществлять распределенную обработку данных и состоит из нескольких частей: обработчик, клиент, сервер, брокер сообщений, вычислительный кластер (рисунок 3.14). Обработчик получает данные из нескольких источников на разных уровнях модели OSI. На уровнях L3 и L4 данные извлекаются из наборов файлов в формате PCAP, на уровне L7 – из журналов веб-сервера. Для выявления атак применяется сигнатурный метод анализа. При обнаружении атаки сохраняются данные о ее типе, пакеты сеанса, из которых извлекаются атрибуты, выполняется их агрегация, рассчитываются статистические показатели. Серверная часть состоит из множества узлов вычислительного кластера, каждый узел может запускать несколько обработчиков параллельно, что обеспечивает параллельную обработку данных и позволяет уменьшить время выполнения заданий. Обработчик обращается к брокеру сообщений, получает новое задание, запускает его на выполнение, сохраняет результаты обработки, затем получает новое задание. Брокер сообщений распределяет задания на обработчиках. Для хранения и обработки очереди заданий используется СУБД Redis.

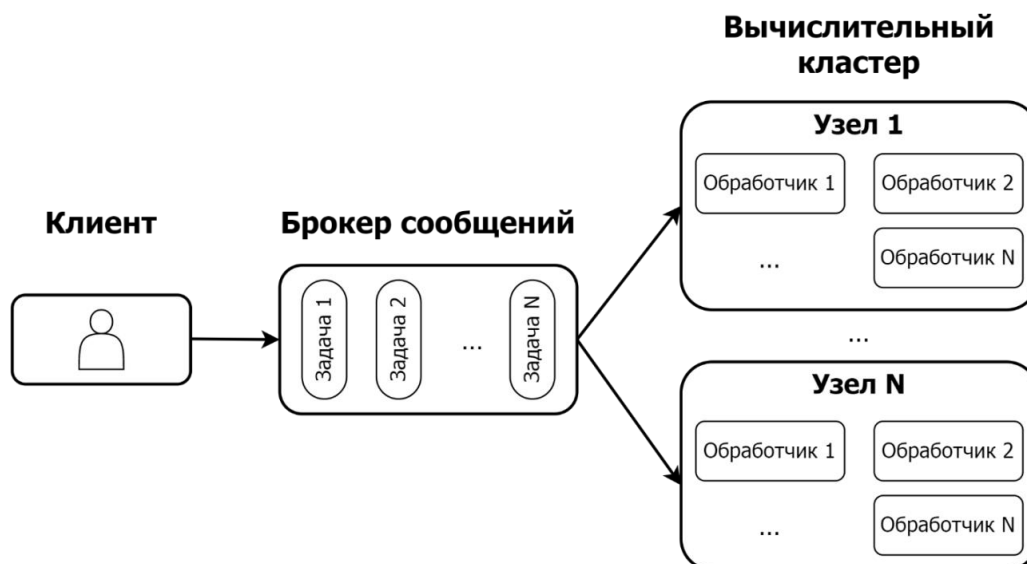


Рисунок 3.14 – Архитектура программного комплекса

Программный комплекс имеет модуль для сигнатурного анализа журналов прикладного уровня и определения типа атаки по классификациям OWASP TOP10 и CAPEC. Модуль основан на программном коде открытого проекта ModSecurity,

межсетевого экрана веб-приложений (WAF – Web Application Firewall). Архитектура программного обеспечения позволяет добавлять новые признаки с использованием функций преобразования на основе существующих признаков. Имеется возможность агрегирования признаков согласно заданным функциям (количество, сумма, минимум, максимум, различные статистические показатели). Использование в качестве единицы агрегации сеанса связи, а не TCP-сессии позволяет более полно характеризовать поведение источника трафика за длительный период времени.

Программный комплекс написан на компилируемом языке Go и является кроссплатформенным, что обеспечивает возможность его запуска на различных операционных системах, включая Linux, \*BSD, Windows. Выходные данные записываются в широко распространенном формате CSV с указанием имен признаков. При работе программного комплекса для каждого входного набора формируется следующий выходной набор данных: список обнаруженных атак сигнатурным методом, агрегированные наборы данных (штатные и атаки). Всего для каждого сеанса извлекается и агрегируется 50 признаков. С использованием созданного программного комплекса сформированы обучающие наборы данных за период 01.2025–11.2025 по атакам на протоколы HTTP/HTTPS.

Продолжились работы по созданию методов обработки данных для обнаружения киберугроз на основе методов машинного обучения. Как правило киберугрозы проявляются в виде аномального поведения сетевых сервисов. Для эффективного обнаружения аномалий в сетевом трафике, требуется построить адекватную структуру признакового пространства, которое отличается высокой размерностью, наличием избыточных и коррелирующих признаков, сильной мультиколлинеарностью и нестабильностью характеристик. Для решения указанных проблем разработан метод «Прогрессивной фильтрации признаков по критериям стабильности и значимости» («Progressive Feature Filtering with Stability and Significance», PFF-SS), который обеспечивает формирование компактного, устойчивого и интерпретируемого признакового пространства.

Для исследования использовались данные, собранные в реальных условиях эксплуатации IoT-инфраструктуры, развёрнутой в Красноярском научном центре и предназначенной для мониторинга микроклимата в технологических помещениях с телекоммуникационным оборудованием. Сбор трафика осуществлялся как на уровне брокеров, развёрнутых на платформах Mosquitto, EMQX, NanoMQ, VerneMQ, так и на прокси-сервере. Фиксируются легитимные сессии, осуществляемые по протоколу MQTT и несанкционированные попытки подключений к устройствам интернета вещей. Из

неструктурированного сетевого трафика были извлечены более 300 признаков, сгруппированных в шесть категорий: временные характеристики, флаги протоколов ТСР и MQTT, параметры скорости соединений, статистика заголовков пакетов, свойства полезной нагрузки, объёмные характеристики массовой передачи.

Несмотря на богатство информации, такое признаковое пространство оказалось избыточным, признаки сильно коррелированы, демонстрируют мультиколлинеарность и нелинейные взаимозависимости. Была исследована применимость методов снижения размерности, в их числе PCA и RFE на собираемых данных. Показано, что они имеют ряд ограничений для применения при анализе данных сетевой безопасности. Так, PCA преобразует признаки в ортогональные компоненты, теряя семантический смысл, что критично для экспертного анализа. RFE адаптирован под конкретную модель (например, случайный лес), но не учитывает ни линейные, ни нелинейные зависимости между признаками и не гарантирует устранение мультиколлинеарности. Стабильность кластеризации полученных признаков пространств, оценённая скорректированным индексом Рэнда (Adjusted Rand Index, ARI) оказалась низкой.

Предложенный метод PFF-SS представляет собой многоэтапную процедуру отбора признаков, сочетающую анализ линейных зависимостей (коэффициент корреляции, VIF – variance inflation factor), анализ нелинейных зависимостей (взаимная информация), оценку стабильности признаков на бутстреп-выборках.

Рассматривается матрица наблюдений  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times m}$  и множество признаков  $\mathbf{P}$ .  $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_i | i \in \{1, 2, \dots, n\})$ , где  $n$  – количество наблюдений,  $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{im}) \in \mathbb{R}^m$  – строки матрицы,  $\mathbf{P} = (\mathbf{p}_j | j \in \{1, 2, \dots, m\})$ ,  $m$  – количество признаков,  $\mathbf{p}_j = (x_{1j}, x_{2j}, \dots, x_{nj}) \in \mathbb{R}^n$ . Построена центрированная матрица  $\tilde{\mathbf{X}} = (\tilde{\mathbf{x}}_1, \tilde{\mathbf{x}}_2, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_n)$ ,  $\tilde{\mathbf{x}}_i = (\tilde{x}_{i1}, \tilde{x}_{i2}, \dots, \tilde{x}_{im})$ , полученная из  $\mathbf{X}$  путём преобразования значений  $\tilde{x}_{ij} = \frac{x_{ij} - \bar{x}_j}{\sigma_j}$ , где  $\bar{x}_j$  – среднее,  $\sigma_j$  – стандартное отклонение.

Целевая функция оценки признакового пространства задаётся следующим образом:

$$L(\tilde{\mathbf{X}}) = \alpha_1 \cdot K(\tilde{\mathbf{X}}) + \alpha_2 \cdot M(\tilde{\mathbf{X}}) + \sum_{l=1}^{n_F} \alpha_{3,l} \cdot R(F, \tilde{\mathbf{X}}),$$

где  $K$  – число обусловленности матрицы  $\tilde{\mathbf{X}}$ , отражающее степень мультиколлинеарности,  $M$  – средняя взаимная информация между признаками, оценивающая нелинейную зависимость,  $R$  – мера сложности по Радемахеру для семейства функций  $F = (f_l | l \in \{1, 2, \dots, n_F\})$ ,  $n_F$  – количество функций,  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{3,l}$  – весовые коэффициенты, позволяющие настраивать приоритеты между компонентами (по умолчанию все  $\alpha = 1$ ).

Минимизация  $L$  соответствует улучшению структуры признакового пространства за счёт снижения зависимости между признаками и повышения устойчивости результата.

Метод PFF-SS выполняет сокращение признакового пространства  $\mathbf{P}$  до подмножества  $\mathbf{P}^H \subseteq \mathbf{P}$ , удовлетворяющего критериям информативности, устойчивости и независимости путём выполнения  $H$  действий над подмножествами зависимых признаков:

1. Удаление коррелирующих и нестабильных признаков.
2. Исключение коррелирующих и незначимых признаков.
3. Устранение мультиколлинеарных и нестабильных компонент.
4. Фильтрация взаимозависимых и нестабильных признаков.
5. Отбор только значимых и устойчивых признаков.

Пусть  $\mathbf{A} = \{A^k \mid k \in \{1, 2, \dots, H\}\}$  – множество действий по изменению признакового пространства. На каждом шаге  $h = \{0, 1, \dots, H\}$  из множества  $\mathbf{A}$  выбирается операция  $A^h \in \mathbf{A}$  для исключения признака, удовлетворяющая условию:

$$A^h = \arg \min_{A' \in \mathbf{A}} L(A'(P^{h-1})),$$

где  $A'$  – операция, для которой  $L(A'(P^{h-1})) \leq L(P^{h-1})$ .

Если такая  $A^h$  существует, она применяется к текущему множеству признаков  $P^h = A^h(P^{h-1})$ . Итоговое признаковое пространство определяется композицией всех преобразований:

$$P^H = A^H \circ A^{H-1} \circ \dots \circ A^1(P),$$

где  $P$  – исходное признаковое пространство, « $\circ$ » – операция композиции.

Фильтрация признакового пространства завершается, если  $\min_{A' \in \mathbf{A}} L(A'(P^h)) > L(P^h)$ .

Применение метода PFF-SS для признакового пространства позволило сократить его размерность с 347 на начальном этапе до 17 признаков, полностью исключить коррелирующие и взаимозависимые признаки, повысить силуэтный коэффициент с 0.67 до 0.86 (рисунок 3.15), снизить обобщённое значение сложности по Радемахеру (рассматривается как мера склонности модели к переобучению) с 0.417 до 0.087, снизить число обусловленности с 75.17 до 2.83, повысить воспроизводимость кластеризации, оценённую как средний скорректированный индекс Рэнда (ARI) между результатами на бутстрап-выборках с 0.003 до 0.9 (рисунок 3.16).

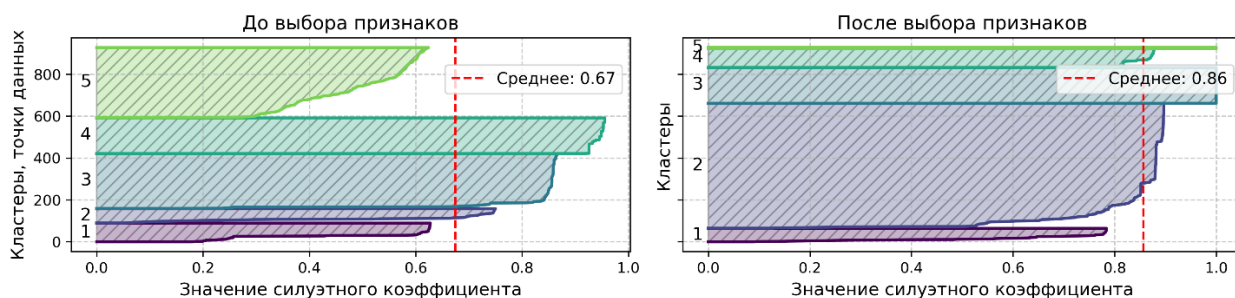


Рисунок. 3.15 – Сравнение силуэтного коэффициента

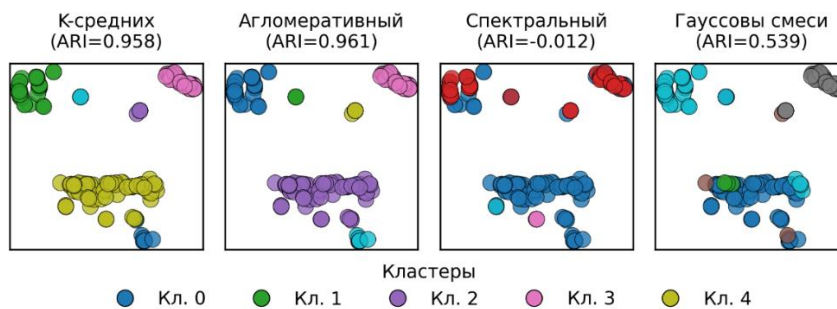


Рисунок 3.16 – Кластеризация с оценкой ARI в пространстве PFF-SS

Выполнена семантическая интерпретация построенного признакового пространства и результатов кластеризации. В пространство PFF-SS вошли информативные и устойчивые признаки: минимальный размер пакета, интервалы между пакетами, скорости передачи данных, количество пакетов с флагами и другие релевантные для анализа сетевого трафика. Выделены 5 кластеров: кластер 0 содержит одиночные пакеты (SYN, ACK, RST) – сканирование портов и фоновый трафик, в кластер 1 вошли средние сессии с двусторонним обменом, кластер 2 объединил высокоскоростные сессии (поточная передача), в кластер 3 выделился трафик с признаками сетевой перегрузки, кластер 4 собрал очень короткие сессии.

Таким образом за отчетный период предложен новый метод подготовки обучающих наборов данных из многоуровневых источников, на основе введенной единицы агрегации «сеанс». Полученные наборы могут быть использованы в системах обнаружения и предотвращения вторжений на веб-сервисы на основе машинного обучения. Метод включает использование дополнительных признаков на основе характеристик источников трафика. Предложенный подход позволит увеличить точность обнаружения кибератак с помощью методов машинного обучения. Разработан кроссплатформенный программный комплекс для автоматизированного распределенного формирования обучающих наборов данных из многоуровневых источников на уровнях L3, L4, L7 модели OSI. Предполагается использование полученных наборов данных для тестирования существующих и разработки новых методов идентификации и предотвращения сетевых угроз.

Разработан и апробирован новый метод обработки данных сетевой активности, который решает ключевые проблемы высокоразмерных данных в задачах кибербезопасности. Он повышает эффективность систем обнаружения аномалий за счёт компактного и устойчивого признакового пространства, обеспечивает интерпретируемость, необходимую для принятия решений в реальных системах безопасности. Метод универсален – применим к любым задачам с зависимыми, шумными и многомерными данными.

### **3.6 Список использованных источников**

1. Moraffah R. et al. Causal inference for time series analysis: Problems, methods and evaluation // Knowledge and Information Systems. – 2021. – V. 63. – P. 3041-3085.
2. Zolhavarieh S., Saeed A., Ying W. A review of subsequence time series clustering // The Scientific World Journal. – 2014. – V. 1. – P. 312521.
3. Petrakova V., Karepova E. Algorithm for segmentation of multimodally distributed time series in accordance with their modes // Journal of Computational Science. – 2026. – Vol. 94. – P. 102765.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ. ПРАКТИЧЕСКАЯ ЗНАЧИМОСТЬ РЕЗУЛЬТАТОВ

По разделу «Математическое моделирование процессов и устройств в условиях ближнего космоса» в 2025 году получены следующие результаты.

Для количественного описания генерации электрического поля на границе магнитосферы Земли разработана математическая модель, основанная на численном решении уравнений холловской диссипативной магнито-гидродинамики, которая включает аномальную неоднородную удельную электропроводимость плазмы. На основе анализа результатов численного моделирования получены новые аналитические формулы, определяющие глобальную разность электрических потенциалов поперек магнитосферы Земли в зависимости от параметров набегающего на магнитосферу солнечного ветра: плотности, скорости и южной компоненты межпланетного магнитного поля. Эта разность потенциалов является важной величиной, характеризующей уровень возмущенности магнитосферы и ионосферы Земли при южной ориентации межпланетного магнитного поля.

Уточнена стационарная модель электропроводности ионосферного электрического поля, обусловленного движением среды. В уравнении электропроводности коэффициенты представляют собой тензор второго ранга. Поскольку проводимость в направлении магнитного поля на много порядков превосходит проводимости в поперечных направлениях, можно приближенно считать, что электрический потенциал неизменен вдоль каждой магнитной силовой линии. Это позволяет перейти к двумерному уравнению электропроводности, коэффициенты в котором получаются путем интегрирования вдоль лежащих на высотах 80-500 км участков магнитных силовых линий локальных Педерсеновской и Холловской проводимостей. Решаемое уравнение представляет собой закон сохранения заряда для полного тока, который наряду с током проводимости содержит динамо-часть, связанную с переходом в систему координат, движущуюся со скоростью среды.

Разработана математическая модель и выполнена её численная реализация для расчета тепло и массопереноса в конструкциях со встроенными гипертеплопроводящими (ГТП) структурами. Математическая модель обеспечивает расчет двухмерного распределения температуры в продольном сечении и капиллярной нагрузки на границе раздела фаз теплоносителя. Капиллярная нагрузка позволяет определять ограничение по тепловой мощности, то есть максимальное тепловыделение источников тепла, при котором ГТП структура будет работать эффективно. С помощью математической модели по измеренным значениям теплофизических характеристик экспериментального образца,

созданного по аддитивной технологии, были определены параметры капиллярной структуры образца: эффективный радиус пор, проницаемость и эффективная теплопроводность. Полученные значения параметров позволяют использовать разработанные вычислительные алгоритмы для расчета конструкций со встроенными ГТП структурами сложной формы, что особенно актуально для изделий, создаваемых по аддитивным технологиям на 3D принтерах.

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

Разработана и сформирована специализированная база данных, содержащая 18 836 успешно идентифицированных случаев симметрично-защищённых связанных состояний в континууме (ССК). Набор включает четыре входных параметра (геометрические и оптические характеристики структуры) и четыре целевых параметра (спектральные характеристики резонанса Фано). Данные получены в результате автоматизированного численного моделирования 100 000 конфигураций методом конечных элементов с последующей фильтрацией мод по критериям симметрии, локализации и модовой структуры. Равномерное распределение параметров и низкая линейная корреляция между признаками и целевыми переменными подтверждают репрезентативность и пригодность набора для обучения нелинейных моделей машинного обучения.

Построена математическая модель, описывающая трехмерные нелинейные интерференционные явления в эффекте светоиндуцированного дрейфа атомов (СИД). На основании этой модели разработана трехмерная оптическая сверхрешетка нового типа (основанная на эффекте СИД), позволяющая формировать стабильный периодический массив локализованных, отделённых друг от друга атомных кластеров, т.е. сгустков атомов с плотностью, значительно превышающей исходную плотность примеси в буферном газе.

Разработана математическая модель фильтрации многокомпонентных растворов. С помощью модели теоретически исследован эффект концентрации соли хлорид натрия и заряда поверхности мембраны на разделение соли и красителя в водном растворе. Показано, что коэффициент разделения возрастает с уменьшением концентрации соли и увеличением абсолютной величины заряда поверхности в отрицательной области.

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

Разработаны инструменты построения многоверсионных нормативных моделей оценивания социально-экономического состояния территорий и анализа результатов многоверсионного моделирования. Созданные инструменты позволяют выполнять тонкую настройку коэффициентов и структуры нормативных моделей комплексных показателей и

исследовать результаты для выявления «проблемных» территорий и формирования соответствующих управляющих воздействий.

Выполнена систематизация и разработана универсальная структура информационных ресурсов, отражающая необходимость и достаточность данных для планирования, реализации и контроля оперативных и предупредительных мероприятий. Структура позволяет формализовать описание сценариев для формирования баз знаний и алгоритмизации процессов поддержки принятия решений.

Выполнена разработка интеллектуальных моделей и алгоритмических средств для раннего выявления отклонений в технологическом процессе производства алюминия по данным мгновенного мониторинга на основе применения методов интеллектуального анализа и нейросетевых технологий. Разработанные средства позволяют своевременно определять тип нарушения и определять источник его возникновения для устранения проблемы.

Разработан метод подготовки обучающих наборов данных из многоуровневых источников, на основе введенной единицы агрегации «сеанс». Полученные наборы могут быть использованы в системах обнаружения и предотвращения вторжений на веб-сервисы на основе машинного обучения. Метод включает использование дополнительных признаков на основе характеристик источников трафика. Разработан кроссплатформенный программный комплекс для автоматизированного распределенного формирования обучающих наборов данных из многоуровневых источников на уровнях L3, L4, L7 модели OSI.

Предложен и апробирован метод обработки данных сетевой активности, который решает ключевые проблемы высокоразмерных данных в задачах кибербезопасности. Он представляет собой многоэтапную процедуру отбора признаков, сочетающую анализ линейных зависимостей (коэффициент корреляции, VIF – variance inflation factor), анализ нелинейных зависимостей (взаимная информация), оценку стабильности признаков на бутстреп-выборках. Метод повышает эффективность систем обнаружения аномалий за счёт компактного и устойчивого признакового пространства, обеспечивает интерпретируемость, необходимую для принятия решений в реальных системах безопасности. Метод универсален – применим к широкому кругу задач с зависимыми, шумными и многомерными данными.

## ПРИЛОЖЕНИЕ А

### Список основных публикаций 2025 года по материалам отчета

1. Шайдуrow В.В., Петракова В.С., Чередниченко О.М., Голубев Р.А., Вяткин А.В. Полулагранжевы аппроксимации нестационарных задач. – Красноярск: Сиб. федер. ун-т, 2025. – 248 с. ISBN 978-5-7638-5026-0
2. Gerasimov V.S., Kostyukov A.S., Ershov A.E., Maksimov D.N., Kimberg V., Molokeev M.S., Polyutov S.P. Machine learning method for predicting line-shapes of Fano resonances induced by bound states in the continuum // *Scientific Reports*. – 2025. – V. 15. – Art. 31181. DOI: 10.1038/s41598-025-16192-1 (УБС 1; ядро РИНЦ)
3. Shadrina G.V., Maksimov D.N., Bulgakov E.N. (2025). Thermo-optic bistability in two-dimensional all-dielectric resonators // *Physical Review B*. – V. 112. – Art. 125416. DOI: 10.1103/1z7s-wcw6 (УБС 1; ядро РИНЦ)
4. Denisenko V.V., Rozanov E.V. Influence of clouds on spatial distribution of conductivity in the atmosphere // *Sol.-Terr. Phys.* – 2025. – V. 11, Iss. 4. – P. 72-82. DOI: 10.12737/stp-114202508 (УБС 2; ядро РИНЦ, ВАК)
5. Васильев Е.Н. Измерение тепловых потоков в лабораторной модели термоэлектрического холодильника. // *Журнал СФУ. Техника и технологии*. – 2025. – Т. 18, № 4. – С. 440–451. EDN: JWAVXN (УБС 3; ядро РИНЦ, ВАК)
6. Petrakova V.S. Planner model for estimating the dynamic of epidemic spread under limited resources // *Eurasian journal of mathematical and computer applications*. – 2025. – Т. 13, № 1. – С. 89-99. DOI: 10.32523/2306-6172-2025-13-1-89-99 (УБС 3; ядро РИНЦ)
7. Petrakova V., Karepova E. Algorithm for segmentation of multimodally distributed time series in accordance with their modes // *Journal of Computational Science*. – 2026. – V. 94. – Art. 102765. DOI: 10.1016/j.jocs.2025.102765 (УБС 1; ядро РИНЦ)
8. Shaydurov V., Petrakova V. Correction of Dynamic Model Parameters by Observed Data // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. – 2025. – Т. 46, №. 2. – С. 879-887. DOI: 10.1134/S1995080225600281 (УБС 2; ядро РИНЦ, ВАК)
9. Fedorov A.S., Eremkin E.V., Gerasimov V.S. Calculation of charge-transfer plasmonic properties in one- and two-dimensional periodic systems // *Journal of Optical Technology*. – 2024. – V. 91, № 11. – P. 711-716. DOI: 10.1364/JOT.91.000711 (УБС 4; ядро РИНЦ, ВАК)
10. Bulgakov E.N., Ershov A.E., Kimberg V., Gerasimov V.S., Maksimov D.N. Orbital rotation of spheroidal Mie particles driven by counter-propagating circularly-polarized beams // *Optics Express*. – 2025. – V. 33, № 25. – P. 52075-52083. DOI: 10.1364/OE.578879 (УБС 1; ядро РИНЦ)

11. Исаева О.С., Исаев С.В., Кулясов Н.В. Подход к выделению значимых признаков сетевой активности устройств Интернета вещей // Вестник Томского государственного университета. Управление, вычислительная техника и информатика. – 2025. – № 73. – С. 100–109. DOI: 10.17223/19988605/73/12 (УБС 3; ядро РИНЦ, ВАК)
12. Исаева О. С. Метод фильтрации признаков по критериям стабильности и значимости // Информационно-управляющие системы. – 2025. – № 6. – С. 15–27. DOI: 10.31799/1684-8853-2025-6-15-27 (УБС 3; ядро РИНЦ, ВАК)
13. Кононов Д. Д., Исаев С. В. Использование многоуровневых источников данных для подготовки обучающих наборов для обнаружения кибератак // Программные системы: теория и приложения. – 2025. – Т. 16. №4. – С. 267-285. DOI: 10.25209/2079-3316-2025-16-4-267-285 (УБС 3; ядро РИНЦ, ВАК)
14. Исаева О. С., Кулясов Н. В., Исаев С. В. Инфраструктура сбора данных и имитации угроз безопасности сети интернета вещей // Сибирский аэрокосмический журнал. – 2025. – Т. 26, № 1. – С. 8–20. DOI: 10.31772/2712-8970-2025-26-1-8-20 (УБС 2; ядро РИНЦ, ВАК)
15. Сиротинин А.А, Володько О.С. Применение генетического алгоритма для проектирования структуры оптимальной беспроводной сенсорной сети на трехмерной модели здания // Информационные и математические технологии в науке и управлении. – 2025. – № 1. – С. 34-40. DOI: 10.25729/ESI.2025.37.1.004 (УБС 4; ВАК)
16. Ershov A.E., Mashinets Y.O., Bulgakov E.N., Maksimov D.N., Gerasimov V.S. Drift of non-spherical optical particles driven by counter-propagating beams in a viscous medium // Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications. – 2026. – V. 68. – Art. 101489. DOI: 10.1016/j.photonics.2025.101489 (УБС 1; ядро РИНЦ)
17. Bulgakov E., Shadrina G. Optical chromatography of ultrasmall particles by Brownian motion in a tilted optical potential induced by bound states in the continuum // Journal of the Optical Society of America B. – 2025. – V. 42, No. 2. – P. 358-367. DOI: 10.1364/JOSAB.544962 (УБС 2; ядро РИНЦ)
18. Lammer H., Scherf M., Erkaev N.V., Kubyschkina D., Gorbunova K.D., Fossati L., Woitke P. Earth-mass planets with He atmospheres in the habitable zone of Sun-like stars // Nature Astronomy. – 2025. – V. 9, No. 7. – P. 1022-1030. DOI: 10.1038/s41550-025-02550-6 (УБС 1; ядро РИНЦ)
19. Tsyganenko N.A., Gubaidulin N.T., Semenov V.S., Erkaev N.V. Magnetosheath proton density and temperature as derived from data-constrained modeling // Journal of geophysical research – Space physics. – 2025. – V. 130, No. 12. – Art. e2025JA034343. DOI: 10.1029/2025JA034343 (УБС 2; ядро РИНЦ)

20. Wu H.L., Chen S.S., Sun Y.X., Xie J.X., Cao X., Jia Y.W., Wang Z.Y., Ryzhkov I.I., Sun S.P. Unraveling fluid dynamics in full-scale hollow fiber nanofiltration membrane modules: From a perspective of CFD study // *Separation and Purification Technology*. – 2025. – V. 364, No. 3. Art. 132631. DOI: 10.1016/j.seppur.2025.132631 (УБС 1; ядро РИНЦ)
21. Osorio S.C., 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. – V. 713. – Art. 123347. DOI: 10.1016/j.memsci.2024.123347 (УБС 1; ядро РИНЦ)
22. Pyatnov M.V., Volkova I.R., Buzin D.S., Vetrov S.Ya., Volochaev M.N., Ryzhkov I.I., Timofeev I.V. Spectral Properties of an Anodic Alumina Photonic Crystal with a Variable Period // *JETP Letters*. – 2025. – V. 121, No. 3. – P. 166-169. DOI: 10.1134/S0021364024604706 (УБС 1; ядро РИНЦ, ВАК)
23. Kharchenko I.A., Volkova I.R., Fadeeva N.P., El'suf'ev E.V., Fomenko E.V., Akimochkina G.V., Safronov P.A., Ryzhkov I.I. Application of electrobaromembrane process for separation of aqueous solutions of ionic dyes // *Membranes and Membrane Technologies*. – 2025. – V. 7, No. 2. – P. 144-153. DOI: 10.1134/S2517751625600566 (УБС 2; ядро РИНЦ)
24. Krasnov I.V. Three-dimensional polychromatic optical superlattice for impurity atom trapping in cold buffer gas // *Laser Physics*. – 2025. – V. 35, No. 8. – Art. 085501. DOI: 10.1088/1555-6611/adf0f4 (УБС 2; ядро РИНЦ, ВАК)
25. Altunin R.R., Moiseenko E.T., Nemtsev I.V., Lukyanenko A.V., Rautskii M.V., Tarasov A.S., Gerasimov V.S., Belousov O.V., Zharkov S.M. Thickness effect on structural, electrical, and optical properties of ultrathin platinum films // *Molecules*. – 2025. – V. 30, No. 24. – Art. 4794 DOI: 10.3390/molecules30244794 (УБС 1; ядро РИНЦ)
26. Erkaev N.V., Gorbunova K.D. Fractionation of heavier species in the hydrogen atmosphere. Asymptotic approach // *Planetary and Space Science*. – 2025. – V. 270. – Art. 106232 DOI: 10.1016/j.pss.2025.106232 (УБС 2; ядро РИНЦ)
27. Pianykh A.A., Isaev I.L., Komogortsev S.V., Semina P.N., Kostyukov A.S., Khrennikov D.E., Felk V.A., Polyutov S.P., Karpov S.V. Enhancing magnetomechanical anticancer therapy: impact of nanoparticle aggregation // *Journal of Nanoparticle Research*. – 2025. – V. 27, No. 3. – P. 74. DOI: 10.1007/s11051-025-06271-9 (УБС 2; ядро РИНЦ)

## ПРИЛОЖЕНИЕ В

### Свидетельства о регистрации программ для ЭВМ в 2025 г.

1. Пенькова Т.Г., Ноженкова Л.Ф., Ноженков А.И., Морозов Р.В. Модуль управления многоверсионностью нормативных моделей оценивания состояния территорий. // Федеральная служба по интеллектуальной собственности (Роспатент). Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2025661664 от 12.05.2025.
2. Шехова А.А., Каропова Е.Д. Программа для вычисления «свёртки» символьных последовательностей с помощью быстрого преобразования Фурье. // Федеральная служба по интеллектуальной собственности (Роспатент). Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2025682353 от 22.08.2025.
3. Сиротинин А.А., Володько О.С. Модуль для преобразования растровых изображений планов этажей в цифровую карту здания. // Федеральная служба по интеллектуальной собственности (Роспатент). Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2025683493 от 03.09.2025.
4. Исаев С.В., Исаева О.С. Модуль фильтрации признаков набора данных по критериям стабильности и значимости методом PFF-SS. // Федеральная служба по интеллектуальной собственности (Роспатент). Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2025689749 от 30.10.2025.
5. Кононов Д.Д. Распределенная система создания агрегированных обучающих наборов данных активности веб-сервисов. // Федеральная служба по интеллектуальной собственности (Роспатент). Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2025694749 от 08.12.2025.

## ПРИЛОЖЕНИЕ С

### Список основных докладов на конференциях 2025 года по материалам отчета

1. Романов А.Н., Нестеров Д.А. Применение аддитивных технологий для создания высокотеплопроводящего основания электронных приборов // Секционный доклад 15.04.2025 на Всероссийском форуме «Енисейская Теплофизика - 2025». - г. Красноярск, Россия. <https://conf.sfu-kras.ru/etf-2025>
2. Деревянко В.В., Нестеров Д.А. Математическая модель высокоточной системы термостабилизации приборов // Секционный доклад 15.04.2025 на Всероссийском форуме «Енисейская Теплофизика - 2025». - г. Красноярск, Россия. <https://conf.sfu-kras.ru/etf-2025>
3. Петракова В.С., Каропова Е.Д. Алгоритм сегментации мультимодального временного ряда в соответствии с модами его распределения // Секционный доклад 11.11.2025 на XXIX Международной научно-практической конференции «РЕШЕТНЕВСКИЕ ЧТЕНИЯ», г. Красноярск, Россия. [https://reshetnev.sibsau.ru/main\\_page](https://reshetnev.sibsau.ru/main_page)
4. Петракова В.С. About primary analysis of time series of field measurements and non-stationarity concept // Секционный доклад 17.10.2025 на 5th International Siberian Scientific Workshop on Data Analysis Technologies with Applications (SibDATA) – г. Красноярск, Россия. <https://sibdata.ieees.org/>
5. Петракова В.С. Об обратных задачах оптимального управления для описания социо-эпидемиологических процессов // Секционный доклад 13.10.2025 на Всероссийской конференции «Мультиагентные системы: теория, социально-экономические приложения и машинное обучение». г. Сочи, Сириус, Россия. <https://siriusmathcenter.ru/063w>
6. Петракова В.С., Шайдуров В.В. Коррекция параметров динамических моделей по наблюдаемым данным // Пленарный доклад 29.09.2025 на XVII Международной молодежной научной школе-конференции «Теория и численные методы решения обратных и некорректных задач», г. Новосибирск, Россия. <https://conf.nsc.ru/tcmiip2025/ru/topics>
7. Петракова В.С. Обратные задачи оптимального управления для описания социо-эпидемиологических процессов // Секционный доклад 21.08.2025 на III Международной научной конференции «Дифференциальные уравнения и математическое моделирование», г. Улан-Удэ, Россия. <https://demm.bsu.ru/basic/web/>
8. Петракова В.С. Optimization problems in modeling real systems // Секционный доклад 10.07.2025 на International Asian School-Seminar Optimization Problems of Complex Systems (OPCS), г. Новосибирск, Россия. <https://opcs.ieeesiberia.org/>

9. Петракова В.С. Reconstruction of control parameters in optimization problems of mathematical epidemiology // Секционный доклад 24.02.2025 на Всероссийской конференции «Dynamics in Siberia», г. Новосибирск, Россия. <http://old.math.nsc.ru/conference/ds/2025/>
10. Шайдуров В.В., Петракова В.С. Solving the underdetermined systems of algebraic equations arising in dynamic models // Пленарный доклад 25.07.2025 на международной конференции The Eleventh China-Russia Conference on Numerical Algebra with Applications, г. Чанша, КНР. <https://lsec.cc.ac.cn/~NASCNAG/workshops.htm>
11. Шайдуров В.В., Гилева Л.В., Голубев Р.А. Использование решений разностных схем для последующего повышения порядка сходимости // Пленарный доклад 30.06.2025 на Международной конференции «Марчуковские научные чтения 2025», г. Новосибирск, Россия. <https://conf.icmmg.nsc.ru/e/msr2025>
12. Шайдуров В.В., Гилева Л.В., Голубев Р.А. Использование решений разностных схем для последующего улучшения аппроксимации // Пленарный доклад 20.08.2025 на Всероссийской конференции «Вычислительная математика и приложения», г. Сочи, Сириус, Россия. <https://siriusmathcenter.ru/060w>
13. Камышев Н.Л., Исаева О.С. Инструменты мониторинга данных устройств интернета вещей // Секционный доклад 02.07.2025 на XXX Байкальской Всероссийской с международным участием конференции «Информационные и математические технологии в науке и управлении», г. Иркутск, Россия. <https://conference.isem.irk.ru/conf/imt/imt-2025/>
14. Исаев С.В., Кулясов Н.В., Исаева О.С. Создание многофункционального исследовательского стенда для изучения IT-технологий интернета вещей и анализа данных // Секционный доклад 18.09.2025 на VI Международной научной конференции по проблемам управления в технических системах (ПУТС-2025), г. Санкт-Петербург, Россия. <https://cts.etu.ru/>
15. Исаева О.С. Построение классов сетевой активности устройств интернета вещей // Секционный доклад 19.09.2025 на VI Международной научной конференции по проблемам управления в технических системах (ПУТС-2025), г. Санкт-Петербург, Россия. <https://cts.etu.ru/>
16. Михалев А.С., Веселовский Д.В., Пенькова Т.Г., Ноженкова Л.Ф. Application of Recurrent Neural Networks to Predict Technological Disruptions in the Aluminum Production // Секционный доклад 17.10.2025 на 5th International Siberian Scientific Workshop on Data Analysis Technologies with Applications (SibDATA), г. Красноярск, Россия. <https://sibdata.ieees.org>
17. Герасимов В.С., Костюков А.С., Ершов А.Е., Максимов Д.Н., Молокеев М.С., Полюттов С.П. Прогнозирование формы линии резонансов Фано, индуцированных связанными

состояниями в континууме в диэлектрических метаповерхностях, методом машинного обучения // Секционный доклад 10.10.2025 на Международной конференции "Functional Materials" ICFM-2025, Форос, Республика Крым, Россия. <https://lomonosov-msu.ru/eng/event/9501/>

18. Рыжков И.И., Харченко И.А., Волкова И.Р., Елсуфьев Е.В., Акимочкина Г.В., Фоменко Е.В., Симунин М.М. Dye removal from aqueous solutions by electro / baromembrane process with electrically conductive ceramic membranes // Пленарный доклад 13.12.2025 The 8th International Symposium on Physics of Membrane Processes (PMP2025), Шанхай, КНР. <https://pmp2025.org.cn/>

19. Рыжков И.И., Харченко И.А., Волкова И.Р., Елсуфьев Е.В., Фоменко Е.В., Акимочкина Г.В., Ронжин Н.О., Петрова И.В., Сафронов П.А. Разделение водных растворов ионных красителей с помощью электро / баромембранного процесса на основе керамических электропроводящих мембран // Пленарный доклад 16.09.2025 на XVI Международной научной конференции «Мембраны - 2025» г. Минск, Беларусь. <https://www.rusmem.ru/>

20. Рыжков И.И., Харченко И.А., Волкова И.Р., Фадеева Н.П., Елсуфьев Е.В., Капитонов А.А., Симунин М.М., Акимочкина Г.В., Фоменко Е.В., Петрова И.В., Сафронов П.А. Electro / baromembrane process for dye removal from aqueous solutions using electrically conductive ceramic membranes // Пленарный доклад 26.05.2025 на Международной конференции «Ионный перенос в органических и неорганических мембранах», г. Сочи, Россия. <https://sites.google.com/view/itim2025/>