

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
имени М. В. Ломоносова

XXIX Международная конференция  
студентов, аспирантов и молодых ученых  
по фундаментальным наукам



Международный  
молодежный научный форум

**“ЛОМОНОСОВ–2022”**

Секция **“ФИЗИКА”**

Подсекция  
**“МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ”**

**Сборник тезисов докладов**

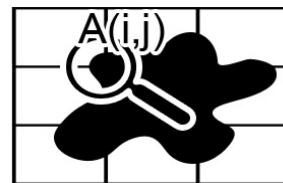
МОСКВА  
Физический факультет МГУ  
2022

**XXIX Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых по фундаментальным наукам «Ломоносов—2022». Секция «Физика». Сборник тезисов. — М. Физический факультет МГУ, 2022. ISBN 978-5-8279-0220-1**

**ПОДСЕКЦИЯ «МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ»**

Анализ и сравнение моделей восстановления пропущенных данных во временных рядах концентрации углекислого газа .....	162
Алешновский В.С., Безрукова А.В. ....	162
Разработка моделей прогнозирования разлива нефтепродуктов в условиях Арктики .....	163
Гребнев Я. В. ....	163
Использование метода Монте-Карло для расчета ряда изомеров некоторых квантовых систем .....	164
Гусев Я. С. ....	164
Морфологические методы обнаружения инфразвуковых сигналов от импульсных источников .....	165
Закиров М.Н. ....	165
Моделирование мультифрактального турбулентного электромагнитного поля в хвосте магнитосферы земли .....	166
Левашов Н.Н., Попов В. Ю., Малова Х.В., Л.М. Зеленый .....	166
Моделирование движения транспортного потока .....	167
Погребняк М. А. ....	167
Прогнозирование уровня паводковых вод на реке Енисей с использованием методов математического моделирования .....	169
Шагидулина Д. И. ....	169
Моделирование магнитных полей галактик с потоками спиральности с использованием суперкомпьютерных вычислений .....	170
Сердюков М.Г., Михайлов Е.А. ....	170
Расчет деформаций структурированного магнитоактивного эластомера с магнитожесткими включениями в 2D постановке .....	172
Игнатов А. А. ....	172
Модифицированный метод ARIMA для восстановления пропусков данных во временных рядах .....	173
Фадеева П.А. ....	173
Управление терминальными маневрами БПЛА самолетного типа методом «гибких» траекторий .....	174
Сергеев А.А. ....	174
Предиктивное управление светофорами системы перекрестков на основе макроскопической модели дорожно-транспортной сети .....	175
Матросов С.В. ....	175
Расчёт термодинамических свойств гейзенберговской цепочки спинов методом Монте-Карло для взаимодействующих кластеров .....	176
Нужин С.В. ....	176
Математическая модель водно-химического баланса систем оборотного охлаждения Петрозаводской ТЭЦ .....	177
Ходак М. С. ....	177
Создание нейронной сети для анализа локальной атомной структуры .....	178
Хаметова Э.Ф., Бакиева О.Р. ....	178
Применение метрического подхода для приближенного решения NP-трудных задач .....	179
Букуева Е. С. ....	179
Нейросетевой подход к решению задачи перехвата машиной Дубинса цели на прямолинейной и круговой траекториях .....	180
И. А. Насонов, А. И. Медведев .....	180
Моделирование гидродинамики кислородного конвертера .....	181
Ишимбаев А.В., Матюхин В.И. ....	181
Численное исследование влияния силы и температуры ветра на образование вихревых структур при формировании волн в кольцевом канале .....	183
Лапонин В. С. ....	183
Численное моделирование сортировки частиц в канале с детерминированным боковым смещением .....	184

Фахретдинова А.Л., Киселева А.А.....	184
Кристаллизация гидрата метана при высоких переохлаждениях: результаты моделирования молекулярной динамики.....	185
Сазанов А.В.....	185
Моделирование клеточных упаковок: раковые и здоровые монослои .....	186
Федоренко К.К., Рошаль Д.С., Мартин М., В. Молл, Рошаль С.Б., Багдигян С. ....	186
Моделирование свойств жёсткости наноразмерных структур кремниевой электроники с учётом неровности .....	187
Демидов С.О., Шарапов А.А. ....	187
Моделирование термолюминесценции сферической кварцевой частицы .....	189
Ерина Ю.Ю. ....	189
Алгоритмы колориметрического анализа.....	190
Назарук С.А. ....	190
Исследование процессов кристаллизации наночастиц Si-Al и Si-Au методом молекулярной динамики	191
Зеленина А.И. Гордеев И.С., Колотова Л.Н.....	191
Фрактальная модель шероховатости лазерно-индуцированных нанокластерных Ag/Au пленок .....	191
Бухаров Д. Н., Абрамов А.С.....	191
Прогнозирование значений атмосферного давления с использованием технологий анализа больших данных.....	193
Черных Е.А. ....	193
Моделирование динамики роста пузырьков в воде с растворенным газом CO <sub>2</sub> .....	195
М.А. Ямщикова, В.М. Ямщиков .....	195
Использование самосборки плитки ДНК для решения задачи Рюкзака.....	196
Барашов Е.Б. ....	196
Электронные и теплофизические свойства газогидратов: результаты квантово-механических расчетов	197
Юнусов М.Б., Хуснутдинов Р.М.....	197



## АНАЛИЗ И СРАВНЕНИЕ МОДЕЛЕЙ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ПРОПУЩЕННЫХ ДАННЫХ ВО ВРЕМЕННЫХ РЯДАХ КОНЦЕНТРАЦИИ УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА

Алешновский В.С., Безрукова А.В.

МГУ им. М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия

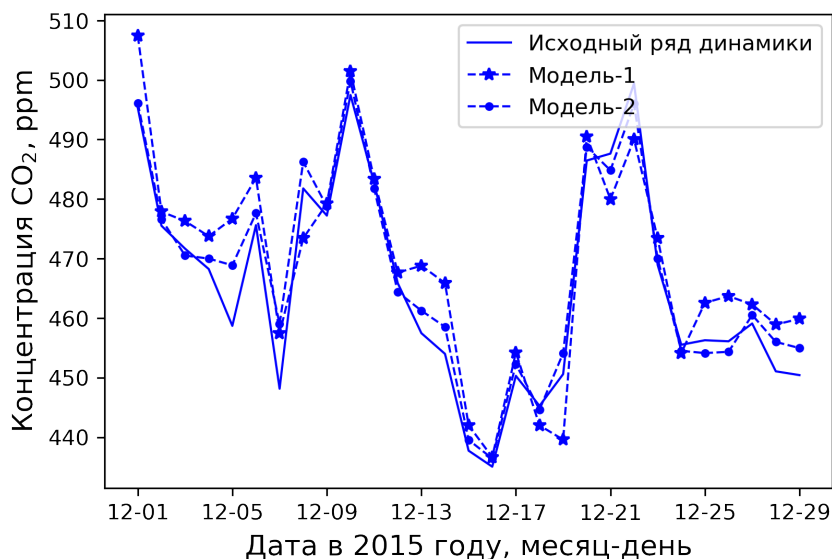
E-mail: [aleshnovskii.vs17@physics.msu.ru](mailto:aleshnovskii.vs17@physics.msu.ru)

Углекислый газ является основным углеродсодержащим газом атмосферы. На сегодняшний день прослеживается повышение концентрации  $\text{CO}_2$  в атмосфере из-за появления новых искусственных и естественных источников, что приводит к повышению температуры на планете вследствие так называемого парникового эффекта. Таким образом, анализ концентрации  $\text{CO}_2$  является актуальной задачей.

Рассматриваются ряды динамики – расположенные в хронологической последовательности значения метеорологического показателя  $f(t)$  ( в данном случае концентрации  $\text{CO}_2$  ) в точках  $t_1, t_2, \dots, t_N$ . Они позволяют наблюдать всю историю изменения интересующих нас величин, что дает возможность судить о «типичном» поведении этих величины и о всякого рода отклонениях.

Однако измерительные приборы иногда допускали работу со сбоями, поэтому для некоторых моментов времени показания отсутствуют. Обработать такой ряд с помощью статистических методов не представляется возможным, поскольку наличие временных промежутков с отсутствующими показаниями может плохо сказаться на построении математической модели и последующем анализе ряда.

Рассмотрены варианты восстановления временных рядов, основанные на методах математической статистики – **методе линейного прогноза (Модель-1)** и **авторегрессии (ARIMA) (Модель-2)**. Приведено описание и сравнительный анализ точности восстановления пропусков алгоритмами.



На графике представлены результаты восстановления показателя концентрации углекислого газа с помощью различных моделей на высоте 50 метров.

Анализ моделей показал, что Модель-2 справилась лучше с данными с датчика на большей высоте, где все слои воздуха уже хорошо перемешаны и сами данные имеют определенную структуру, в то время как на более низких высотах оба метода показали себя не очень хорошо.

### Литература

1. Газарян В.А., Курбатова Ю.А., Овсянников Т.А., Шапкина Н.Е. // ВМУ.Серия 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 2015. № 5. Современные климатические изменения на юго-западе Валдайской возвышенности: статистический анализ многолетней динамики температуры воздуха, 2015, Москва.
2. Андерсон Т. Статистический анализ временных рядов. М.: Мир. 1976.
3. Box George E.P., Jenkins Gwilym M. Time series analysis, forecasting and control. Holdenday, Inc., 1976. P.300
4. Вуколов Э.А. Основы статистического анализа. М.: Форум. 2008. - 464 с.
5. Hyndman Rob. J., Khandakar Yeasmin. Automatic Time Series Forecasting: The forecast Package for R. Journal of Statistical Software. 2008. Vol. 27. Issue 3. P. 9.
6. Akaike, H. A new look at the statistical model identification. IEEE Transactions on Automatic Control. 1974. T. 19.
7. Hocke K., Kämpfer N. Gap filling and noise reduction of unevenly sampled data by means of the Lomb-Scargle periodogram. Atmos. Chem. Phys. 2009. No. 9. Pp. 4197–4206.

## РАЗРАБОТКА МОДЕЛЕЙ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ РОЗЛИВА НЕФТЕПРОДУКТОВ В УСЛОВИЯХ АРКТИКИ

Гребнев Я. В.

*ФГАОУ ВО «Сибирский Федеральный университет», Институт  
инженерной физики и радиоэлектроники, Красноярск, Россия  
E-mail: yaroslav.grebnev@gmail.com*

На планете каждый год происходит множество природных и техногенных аварий, оказывающих значительное влияние на инфраструктуру и нормальную жизнедеятельность общества. В 2020 году на территории Красноярского края произошло 2 крупные техногенные аварии, связанные с разливом нефтепродуктов и нанесением значительного ущерба экологии, что свидетельствует о высокой значимости проблемы мониторинга и прогнозирования, а также необходимости осуществления надзора за предприятиями осуществляющих хранение и заправку техники нефтепродуктами. Данная проблематика также приобретает большое значение в связи с выработкой проектного ресурса, резервуарного парка и технологического оборудования, которые продолжают эксплуатироваться. Решение данной проблематики лежит в русле организации непрерывного мониторинга, повышения надзорных мероприятий, организации прогнозирования сценариев развития обстановки в целях разработки планов действия при реализации одного из рассчитанных сценариев, для оперативного реагирования и снижения последствий от возникшей аварийной ситуации[1]. В данной работе решалась задача разработки сценариев развития аварийных ситуаций на нефтебазе и прогнозирования возможных последствий в целях снижения вероятности данных событий. Для решения поставленной задачи произведено моделирование 12 сценариев развития аварийных ситуаций и произведено моделирование ситуации с попаданием нефтепродуктов в реку Енисей в целях оценки площади разлива нефтепродуктов. Моделирование аварийных ситуаций производилось по средствам применения программного продукта Toxу+risk [2] и методики нейросетевого прогнозирования с использованием библиотеки Scikit-Learn на языке программирования python [3]. Произведено сравнение аналитического

метода определения площади разлива нефтепродуктов в водоеме и нейросетевого метода.

Выражаю благодарность моему научному руководителю кандидату физико-математических наук профессору кафедры экспериментальной физики и инновационных технологий Института инженерной физики и радиоэлектроники ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет» Москалеву А.К., за неоценимый вклад и поддержку настоящей работы.

### Литература

1. Москвичёв В.В., Бычков И.В., Потапов В.П., Тасейко О.В., Шокин Ю.И. Информационная система территориального управления рисками развития и безопасностью // Вестник РАН, 2017. – том 87, №8. – с. 696-705.
2. Автоматизированная система моделирования обстановки Toxu+risk. [Электронный ресурс]: Режим доступа: <https://toxi.ru/>
3. Phyton. [Электронный ресурс]: Режим доступа: <https://www.python.org/>

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ РАСЧЕТА РЯДА ИЗОМЕРОВ НЕКОТОРЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

Гусев Я. С.

*МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*  
*E-mail: gusev.is18@physics.msu.ru*

При изучении физико-химических процессов, происходящих в человеческом организме, важно знание о физических свойствах нейромедиаторов, которые представляют из себя квантовые системы – молекулы. Их свойства напрямую зависят от внутреннего строения, которое описывается уравнением Шредингера. Из-за большой размерности, решение такого уравнения не может быть получено конструктивно [1]. Существуют разные подходы, позволяющие преодолеть указанную неконструктивность. Отметим группу вариационных методов и подходов, начиная с классического метода самосоглазованного поля Хартри-Фока [2] и последующие вариации и модернизации типа метода функционала плотности [3].

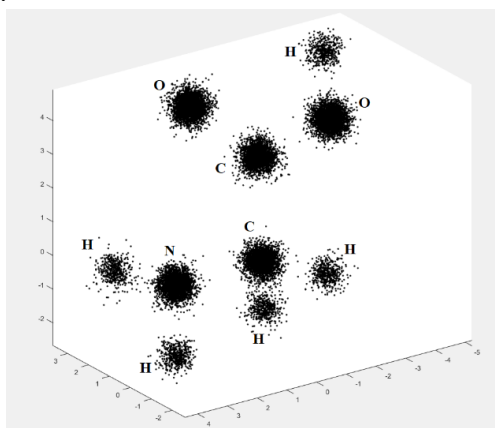


Рис 1. Пример результата расчетов одного из возможных изомеров молекулы глицина (C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>NO<sub>2</sub>)

В настоящей работе излагается и применяется иной метод [4,5,6], позволяющий решать уравнение Шредингера для расчёта строения молекул любой сложности. Предлагаемый численный метод является эффективным и экономичным с точки зрения вычислений и может быть отнесен к пересечению конечно-разностных и Монте-Карло методов. Кроме того, алгоритм численного решения может быть легко распараллелен.

Метод был успешно применён к расчёту строения молекул некоторых нейромедиаторов, а именно: глицин (рис. 1), дофамин. Был также получен ряд их энергетических изомеров.

### Литература

1. Ожигов Ю.И. Конструктивная физика. — М. — Ижевск: НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, 2010. — 424 с.
2. Хартри Д. Расчёты атомных структур (Под ред. В.А. Фока). — М.: Изд-во иностр. лит., 1960. — 271 с.
3. Kohn W. Nobel Lecture: Electronic structure of matter — wave functions and density functionals// *Reviews of Modern Physics*, Vol. 71, No. 5, October 1999, p.1253 – 1266.
4. Плохотников К.Э. Об одном методе численного решения уравнения Шредингера// *Математическое моделирование*, 2019, т.31, №8, с.61-78. DOI: 10.1134/S0234087919080045
5. Plokhonnikov K.E. About One Method of Numerical Solution of Schrodinger’s Equation// *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2020, Vol. 12, No. 2, pp. 221–231; DOI: 10.1134/S2070048220020106
6. Plokhonnikov K.E. Solving the Schrodinger Equation on the Basis of Finite-Difference and Monte-Carlo Approaches// *Journal of Applied Mathematics and Physics*, 2021, vol.9, no.2, p.328-369; doi.org/10.4236/jamp.2021.92024

## МОРФОЛОГИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ОБНАРУЖЕНИЯ ИНФРАЗВУКОВЫХ СИГНАЛОВ ОТ ИМПУЛЬСНЫХ ИСТОЧНИКОВ

Закиров М.Н.

*МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*  
*E-mail: zakirov1998@list.ru*

Различные природные и антропогенные явления порождают импульсные сигналы, при этом инфразвук способен распространяться на многие сотни километров от источника. Инфразвуковая составляющая атмосферных сигналов несёт в себе информацию о крупных процессах, происходящих на Земле, таких как взрывы, извержения вулканов, землетрясения, падения метеоритов и др. Обнаружение инфразвуковых сигналов от импульсных источников на фоне шумов является достаточно сложной задачей [3]. Её сложность связана с неопределённостью в моделях сигналов, интересующих исследователя, нелинейных эффектах прохождения инфразвуковых волн через атмосферу и влиянием фоновых помех, связанных с локальными шумами. Возможность эффективно распознавать акустические сигналы от импульсных источников позволяет своевременно отслеживать наличие таких явлений, как взрывы, извержения вулканов, падения метеоритов и других, происходящих в разных точках Земли, даже на достаточно большом расстоянии от источника.

В настоящей работе морфологические методы, разработанные проф. Ю.П.Пытьевым [2], применяются для анализа двумерных изображений вейвлет-спектров [1] инфразвуковых сигналов. Преимущество морфологических методов заключается в том, что для их применения требуется знание лишь самых общих особенностей зарегистрированного сигнала. В работе такой особенностью является упорядоченность особым образом геометрических областей постоянной яркости на вейвлет-спектрах сигналов. Форма изображений спектров сигналов от импульсных источников имеет вид характерных ярких пятен, это свойство позволяет выделять такие сигналы среди множества других.

Предложен морфологический метод поиска участков спектров, характерных для импульсных источников. Форма спектра сигнала от импульсного источника определяется как множество кусочно-постоянных изображений с заданными областями посто-

янной яркости, упорядоченными по неубыванию яркостей. Вейвлет-спектр аппроксимируется изображением из этого множества. Введена количественная характеристика близости анализируемого изображения спектра к форме изображения спектра импульсного сигнала.

Исследовались сигналы различной природы, зарегистрированные на нескольких инфразвуковых станциях в разное время. Получены графики морфологической близости изображений в зависимости от положения импульсного сигнала на оси времени. Если близость изображений превышает заданный порог, тогда сигнал в данный момент времени считается обнаруженным. Приведённые результаты свидетельствуют об эффективности метода для обнаружения сигналов от импульсных источников.

### Литература

1. Блаттер К.В. Вейвлет-анализ. Основы теории. — М.: Техносфера, 2004. — 273 с.
2. Пытьев Ю.П., Чуличков А.И. Методы морфологического анализа изображений. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010
3. Чунчuzов И.П., Куличков С.Н. Распространение инфразвуковых волн в анизотропной флуктуирующей атмосфере. М.: ГЕОС, 2020, 260 с.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ МУЛЬТИФРАКТАЛЬНОГО ТУРБУЛЕНТНОГО ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ В ХВОСТЕ МАГНИТОСФЕРЫ ЗЕМЛИ

Левашов Н.Н., Попов В. Ю., Малова Х.В., Л.М. Зеленый

*МГУ им. М. В. Ломоносова, физический факультет, ИКИ РАН, НИУ «ВШЭ», НИИЯФ им. Д.В. Скобельцына МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия*

*E-mail: nn.levashov@physics.msu.ru*

Турбулентное электромагнитное поле в хвосте магнитосферы Земли, является нестационарным и склонно к появлению структур таких как токовые слои, вихри, жгуты, плазмоиды. Из-за наличия подобных локальных особенностей, поле неоднородно и имеет мультифрактальный, перемежаемый характер [3]. Моделировать такое поле можно при помощи вейвлетов. Вейвлеты позволяют довольно гибко управлять амплитудой моделируемого поля в любой точке пространства и потому хорошо подходят для описания процессов с различными локальными особенностями.

$$Q(x, y)_{i,j} = h_{i,j} \cdot q_i \cdot \exp\left(-\frac{\pi}{2a_{i,j}} [(x - x_{i,j}(t))^2 + (y - y_{i,j}(t))^2]\right), \text{ где } x_{i,j}(t) \text{ и } y_{i,j}(t)$$

– координаты соответствующего вейвлета,  $q_i$  - коэффициенты нормировки для вейвлетов  $i$ -го масштаба,  $h_{i,j}$  - случайный коэффициент для каждого вейвлета.

Итоговое магнитное поле представляется в виде суммы вейвлетов, равномерно распределенных по вычислительной области:  $Q(x, y) = \sum_{i,j} Q(x, y)_{i,j}$ . Электрическое поле можно рассчитать при помощи уравнений Максвелла.

Для того, чтобы полученное таким образом поле было самоподобным, соотношение между размерами соседних классов вейвлетов должно быть независимым от  $i$ :  $\frac{a_{i+1}}{a_i} = l$ . Объём пространства,  $V$  занимаемый каждым классом вейвлетов, имеет степенную зависимость от  $l$ :  $\frac{V_{i+1}}{V_i} = l^\beta$ . В силу самоподобия, соотношение  $\frac{q_{i+1}}{q_i} = l^\lambda$  так же не зависит от  $i$ .

Спектр энергии полученного поля:  $W(k) \sim k^{-D-\beta-2\lambda}$ , где  $D$  - размерность пространства, в котором мы моделируем наше поле.



Положим что  $\beta = 0$ ,  $\lambda = 1/3$ ,  $l = 1/2$  а  $D = 2$ . Предположим, что нормировочные коэффициенты определенного класса вейвлетов распределены не равномерно по всему пространству: пусть вычислительная область разбита на квадратные ячейки, в каждой из которых свой нормировочный множитель у вейвлет-коэффициентов. Например, для самого крупного класса вейвлетов область будет разбита на 4 ячейки с нормировочными множителями  $q_0p_1, q_0p_2, q_0p_3, q_0p_4$  соответственно, где  $p_1 + p_2 + p_3 + p_4 = 1$ . Для класса вейвлетов, с масштабом вдвое меньше - разобьем каждую клеточку более крупного класса еще на 4 части, для класса вейвлетов с еще вдвое меньшим масштабом - снова разбиваем каждую клеточку на 4 части итд.

При таком разбиении, функция мультифрактального спектра,  $f(h)$ , где  $h$  - показатель Гельдера, будет выпуклая, и вблизи своего максимума может быть аппроксимирована параболой [1]. Все сигналы лабораторной и космической плазмы имеют подобный уширенный мультифрактальный спектр [2]. Максимум спектра будет приходиться на  $h = 1/3$ , а ширина спектра зависит от выбора параметров  $p_1, p_2, p_3, p_4$ . Показатели структурной функции  $\zeta_p = \inf[ph - f(h)]$  [4], таким образом, варьируя параметры  $p_1, p_2, p_3, p_4$ , мы можем контролировать степень отклонения  $\zeta_p$  от прямой, т.е. контролировать уровень перемежаемости.

### Литература

1. Божок С.В., Паршин Д.А., Фракталы и мультифракталы. Ижевск, 2001.
2. В. П. Будаев, С. П. Савин, Л. М. Зелёный // УФН, 2011, Т. 181, № 9, С. 905–952
3. Lui, Anthony T. Y. // Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics, 2001, P. 1379-1385.
4. Frisch U. Turbulence: The Legacy of A.N. Kolmogorov. U.K.: Cambridge Press, 1995.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ТРАНСПОРТНОГО ПОТОКА

Погребняк М. А.

Ярославский ГУ им. П. Г. Демидова, Ярославль, Россия

E-mail: pogrebnyakmaksim@mail.ru

Работа посвящена математическому моделированию движения транспортного потока. Построена модель, улучшающая результаты работы автора [1] и описывающая ряд новых дорожных ситуаций.

За  $x_n(t)$  ( $1 \leq n \leq N, N \in \mathbb{N}$ ) обозначено положение транспортного средства в момент времени  $t$ , а  $\dot{x}_n(t)$  и  $\ddot{x}_n(t)$  его скорость и ускорение соответственно. Все автомобили считаются материальными точками, поэтому их внутренняя структура и внешние габариты не учитываются.

В ходе работы была построена математическая модель движения транспортного потока, которая имеет вид системы дифференциальных уравнений с запаздывающим аргументом:

$$\begin{cases} \ddot{x}_n(t) = R_n \left[ a_n \left( \frac{v_{max} - \dot{x}_{n-1}(t - \tau)}{1 + e^{k_n(-\Delta x_n(t, \tau) + s_n)}} + \dot{x}_{n-1}(t - \tau) - \dot{x}_n(t) \right) \right] + \\ \quad + (1 - R_n) \left[ q_n \left( \frac{\dot{x}_n(t) [\dot{x}_{n-1}(t - \tau) - \dot{x}_n(t)]}{\Delta x_n(t, \tau) - l_{n, \varepsilon}} \right) \right], \\ x_n(t) = \lambda_n, \quad \dot{x}_n(t) = v_n, \quad \text{при } t \in [-\tau, 0] \text{ и } 2 \leq n \leq N, \end{cases} \quad (1)$$

где  $\tau$  — время реакции водителя;  $\Delta x_n(t, \tau) = x_{n-1}(t - \tau) - x_n(t)$  — расстояние между соседними автомобилями;  $a_n > 0$  и  $q_n > 0$  — коэффициенты, описывающие технические характеристики автомобиля, отвечающие за интенсивность его разгона и тормо-

жения соответственно;  $v_{max} > 0$  — максимальная желаемая скорость;  $l_{n,\varepsilon} > 0$  — безопасное расстояние вида  $l_{n,\varepsilon} = l_n - \varepsilon$ , где  $\varepsilon$  — добавка, служащая для предотвращения торможения автомобиля с огромной или даже бесконечной скоростью при  $l_n$  достаточно близком к  $\Delta x_n(t, \tau)$ ;  $k_n > 0$  и  $s_n > 0$  — параметры, описывающие поведения водителя:  $k_n$  показывает насколько плавно водитель преследующего автомобиля подстраивает свою скорость под впереди идущий, а  $s_n$  отражает расстояние, начиная с которого влияние впереди идущего автомобиля перестаёт превалировать;  $\lambda_n$  — начальное положение автомобилями;  $v_n$  — начальная скорость автомобилей, а  $R_n$  — релейная функция вида:

$$R_n = \begin{cases} 1, & \text{если } \Delta x_n(t, \tau) > \frac{\dot{x}_n^2(t)}{2\mu g} + l_n, \\ 0, & \text{если } \Delta x_n(t, \tau) \leq \frac{\dot{x}_n^2(t)}{2\mu g} + l_n, \end{cases}$$

где  $\mu$  — коэффициент трения, а  $g$  — ускорение свободного падения. Функция  $R_n$  описывает переключение «разгон-торможение».

Полученная дифференциально-разностная модель описывает каждый автомобиль потока, кроме первого. Для его описания модель необходимо дополнить: доопределить значения  $x_0(t)$  и  $\dot{x}_0(t)$ . В качестве  $x_0(t)$  берётся расстояние, которое должен проехать автомобиль, например, это может быть расстояние до светофора или иного препятствия  $x_0(t) = L$ . За  $\dot{x}_0(t)$  в первом слагаемом берётся максимальная желаемая скорость  $\dot{x}_0(t) = v_{max}$ , а во втором — скорость, до которой первому водителю необходимо сбросить свою текущую скорость  $\dot{x}_0(t) = v_{min,0}$ .

Для модели на основе физических законов, действующего законодательства Российской Федерации [2] и логических соображений были определены значения и единицы измерения параметров.

Для модели (1) был проведён анализ устойчивости равномерного режима движения, при котором  $N$  автомобилей в начальный момент времени имеют одинаковую начальную скорость  $v_{max}$  и расположены на расстояниях  $\Delta c_n = c_n - c_{n-1}$ , где  $c_n$  — убывающая последовательность. В таком случае, для любого набора  $\Delta c_n$  существует гладкое многообразие решений системы (1) вида:

$$x_n(t) = c_n + v_{max}t.$$

Устойчивость такого решения зависит от знаков выражений:

$$d_n = -\tau v_{max} + c_n - c_{n-1} - l_{n,\varepsilon}.$$

Справедлива следующая теорема:

**Теорема 1.** Если для  $\forall n$  выполняется неравенство  $d_n > 0$ , то равномерный режим устойчив. Если хотя бы при одном каком-то  $i$  выполняется неравенство  $d_n \leq 0$ , то равномерный режим неустойчив.

Из теоремы (1) следует, что если все автомобили потока двигаются на довольно большом расстоянии друг от друга, то такой режим движения устойчив. Устойчивость теряется при увеличении скорости  $v_{max}$ , времени реакции водителя  $\tau$ , безопасного расстояния между автомобилями  $l_{n,\varepsilon}$ , или при сокращении расстояния между двумя соседними автомобилями  $\Delta c_n$ .

На рисунке 1 изображены графики изменения скорости и расстояния для нескольких автомобилей, двигающихся согласно модели (1). Графики отражают динамику, при которой автомобили начинают движение, а затем останавливаются.

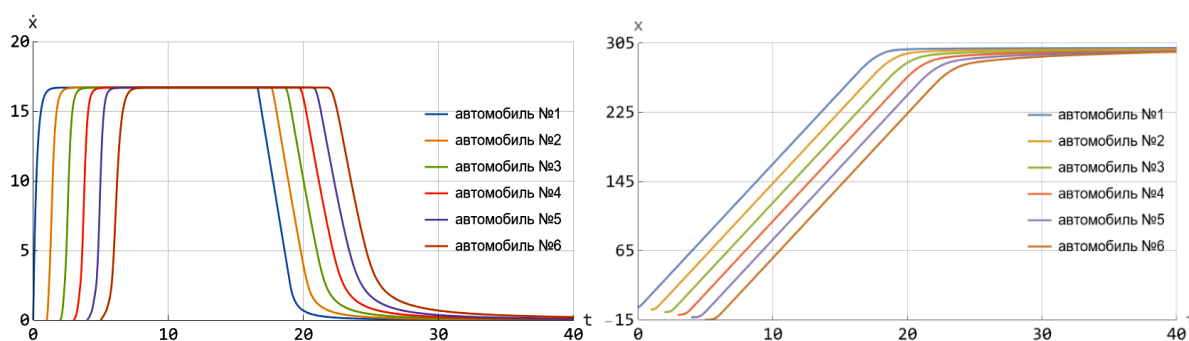


Рис. 1 Графики изменения скорости (слева) и расстояния (справа) для модели (1) при значениях параметров:  $\tau = 1$ ,  $\alpha = 4$ ,  $q = 3$ ,  $v_{max} = 16.7$ ,  $v_{min,0} = 0$ ,  $\lambda_n = 3$ ,  $l_n = 3$ ,  $L = 300$ ,  $x_0 = 0$ ,  $v_n = 0$ ,  $g = 9.8$ ,  $\mu = 0.6$ ,  $k_n = 0.5$ ,  $s = 35$ .

### Литература

1. Погребняк М. А. Моделирование движения транспортного потока / М. А. Погребняк // Материалы Международного молодежного научного форума «ЛОМОНОСОВ-2020». Второе издание: переработанное и дополненное / Отв.ред. И.А. Алешковский, А.В. Андриянов, Е.А. Антипов, 2020. ISBN 978-5-317-06519-5
2. Постановление Правительства РФ от 23.10.1993 N 1090 (ред. от 21.12.2019) «О правилах дорожного движения» (вместе с «Основными положениями по допуску транспортных средств к эксплуатации и обязанности должностных лиц по обеспечению безопасности дорожного движения»)

## ПРОГНОЗИРОВАНИЕ УРОВНЯ ПАВОДКОВЫХ ВОД НА РЕКЕ ЕНИСЕЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Шагидулина Д. И.

«Сибирский ФУ», Институт инженерной физики и радиоэлектроники,  
Красноярск, Россия

E-mail: shagidulina.dinara@mail.ru

Затопление территорий в результате влияния паводковых и грунтовых вод, на протяжении всего существования человеческой цивилизации угрожает нормальной жизнедеятельности[1]. Одним из способов предотвращения негативного влияния паводковых, является применение методов математического моделирование с использованием современных программных средств. В работе представлены результаты решения задачи моделирования динамики паводковых вод в границах населенного пункта Ярцево Красноярского края и составление прогноза возможных подтоплений на 2022 год. Для расчета зон затопления территорий в границах населенного пункта Ярцево весенними водами, был применен программный комплекс НЕС - RAS [2] и расширение ArcView НЕС-GEORAS, решающие одномерную задачу установившегося или неуставившегося движения воды на основе уравнений Сен-Венана. На основе инженерно-гидрографических работ, выполненных на пункте наблюдательной сети ФГБУ «Средне Сибирское УГМС» р. Енисей – с. Ярцево в последней декаде марта 2021 г., были собраны данные об отметках уровней воды расчетной обеспеченности и значениях высоких вод в этом районе

Для решения задачи моделирования затопляемых территорий в районе с. Ярцево на первом этапе был организован сбор необходимой для моделирования информации, включающий в себя получение, а также анализ материалов по затоплению и подтоплению исследуемой территории за период наблюдения с 1973 по 2021 гг., по результатам анализа исходной информации была составлена сводная таблица характерных значений

колебания уровней р. Енисей в створах гидрологического поста с. Ярцевом, были оценены фактические зоны подтопления и затопления и осуществлена постановка задачи проведения гидрологических работ и варианты противопаводковых работ.

По результатам инженерно-гидрографических работ, моделирования и данных прогнозирования посредством применения программного продукта ЭСПЛА-М [3] была построена двумерная цифровая модель рельефа с результатами моделирования весеннего половодья на реке Енисей.

Предложенный подход к использованию программного продукта HEC – RAS в сочетании с ЭСПЛА-М для прогноза паводковых ЧС, позволяет производить анализ данных и составлять среднесрочные и краткосрочные прогнозы уровней воды и производить оценки возможных последствий.

Выражаю благодарность моему научному руководителю кандидату физико-математических наук профессору кафедры экспериментальной физики и инновационных технологий Института инженерной физики и радиоэлектроники ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет» Москалеву А.К., за неоценимый вклад и поддержку настоящей работы.

### Литература

1. Стародумов И.О., Кинематическое уравнение Сен-Венана. Метод решения // Вестник Адыгейского государственного университета. Серия 4: Естественно-математические и технические науки, п. 2 (137), 2014, pp. 37-43
2. HEC - RAS [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://www.hec.usace.army.mil/>
3. Ноженкова Л. Ф., Ничепорчук В. В., Исаев С. В., Евсюков А. А., Морозов Р. В., Марков А. А., Ноженков А. И. ЭСПЛА-ПРО — система сбора, аналитической обработки данных и поддержки принятия решений по предупреждению и ликвидации чрезвычайных ситуаций // Тр. III Всерос. конф. «Безопасность и живучесть технических систем». — Красноярск: ИВМ СО РАН. — 2009. — С. 51-55.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ ГАЛАКТИК С ПОТОКАМИ СПИРАЛЬНОСТИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Сердюков М.Г., Михайлов Е.А.

*МГУ им. М. В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: serdiukov.mg19@physics.msu.ru*

Генерация магнитных полей галактик описывается с помощью механизма динамо [1]. Он основан на совместном действии альфа-эффекта и дифференциального вращения. Как правило, они характеризуются некоторыми усредненными параметрами, которые включают в себя типичные значения скоростей турбулентных движений, пространственных масштабов и т.д. [2] Подобный подход является оправданным в случае изучения магнитных полей объектов с довольно спокойной средой. В то же время, существуют галактики, в которых происходит большое количество взрывов сверхновых, присутствует интенсивное звездообразование и т.д. В таком случае использовать усредненные характеристики становится невозможным.

Одним из способов решения данной проблемы является использование уравнений для магнитного поля со случайными коэффициентами, когда параметры, отвечающие за альфа-эффект, турбулентную диффузию и другие механизмы принимают одно из двух значений, соответствующих спокойной или активной межзвездной среде [4]. Кроме того, в таком случае необходимо учитывать вертикальные потоки, которые связаны с переносом среды в направлении, перпендикулярном к галактическому диску. В таком

случае нужно принимать во внимание так называемую спиральность, которая является интегралом движения и переносится вместе с межзвездным газом [4].

Решение данной задачи требует усреднения большого количества решений. В предшествующих работах использовались выборки размером  $10^5 - 10^6$ , однако они являются не вполне достаточными как с математической, так и с астрофизической точки зрения. Применение выборок больших размеров требует гораздо больших вычислительных ресурсов.

В настоящей работе задача о генерации магнитного поля с учетом потоков спиральности рассматривалась численно [5] с использованием вычислений на суперкомпьютере «Ломоносов-2» Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова. В ходе работы были получены как типичные решения для магнитного поля, так и статистические моменты.

Важно отметить, что задача является нелинейной. На линейном этапе решение в целом демонстрирует такое же поведение, как и предшествующие модели. Показано, что присутствует явление перемежаемости: статистические моменты более высоких порядков растут с большей скоростью. В случае выхода на значения, соответствующие нелинейной стабилизации, можно говорить о колебаниях магнитного поля около стационарного значения (рис.1).

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхпроизводительными вычислительными ресурсами МГУ им. М.В. Ломоносова

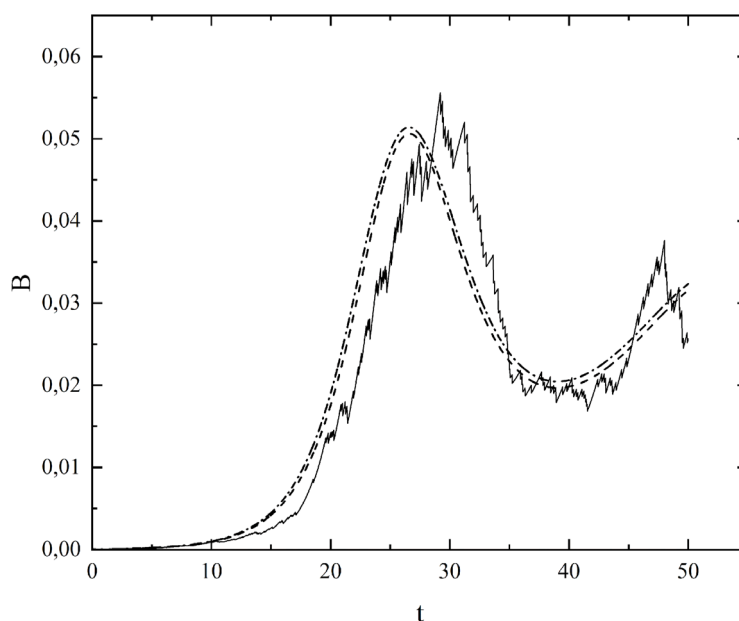


Рис. 1. Перемежаемость роста магнитного поля. Сплошная линия показывает типичное решение, пунктирная – среднее, штрихпунктирная – среднеквадратичное.

### Литература

1. Beck R., Brandenburg A., Moss D., Shukurov A., Sokoloff D.D., ARAA, 34, 155 (1996)
2. Sur S., Shukurov A. Subramanian K., MNRAS, 377, 874 (2007)
3. Михайлов Е.А., Пушкарёв В.В., Астрофизический бюллетень, 73, 451 (2018)
4. Михайлов Е.А., Письма в Астрон. журн., 39, 474 (2013)
5. Калиткин Н.Н., Численные методы (1978)

## РАСЧЕТ ДЕФОРМАЦИЙ СТРУКТУРИРОВАННОГО МАГНИТОАКТИВНОГО ЭЛАСТОМЕРА С МАГНИТОЖЕСТКИМИ ВКЛЮЧЕНИЯМИ В 2D ПОСТАНОВКЕ

Игнатов А. А.

*Балтийский ФУ им. Иммануила Канта, Институт физико-математических наук и информационных технологий, Калининград, Россия  
artem.ignatov98@gmail.com*

К композитным материалам на основе полимера с магнитными включениями наблюдается повышенный интерес в последние несколько лет [1, 2]. Для изучения количественных свойств таких материалов применяются численные методы [3]. В данной работе представлен результат расчетов деформаций во внешнем поле структурированного магнитоактивного эластомера с магнитожесткими включениями в 2D постановке. При расчетах использовался метод конечных элементов с использованием пакета FEniCS.

В начальном состоянии частицы (рис. 1) находились в узлах прямоугольной сетки 4 на 4 с квадратными ячейками и имели «шахматную» ориентацию магнитных моментов – любые соседние частички в «вертикальном» или «горизонтальном» ряду имеют антипараллельную ориентацию магнитных моментов.

Для описания гиперупругого материала матрицы использовался потенциал Нео-Гука [4]. При моделировании форма частиц предполагалась идеальным кругом, а сами частицы считались однодоменными. Также при моделировании исключалась возможность разрушения границы матрица-частица, т.е. предполагалась полная адгезия частиц и матрицы.

В результате были рассчитаны деформации материала в зависимости от начальной ориентации намагниченности частиц и величины их магнитных моментов.

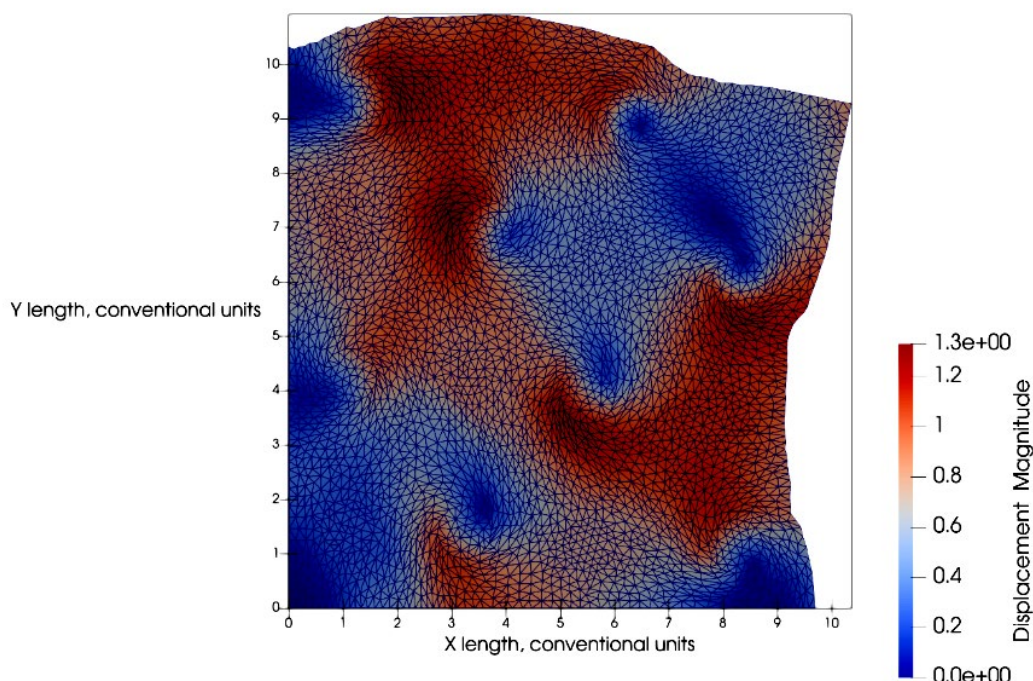


Рис. 1. Деформация эластичной матрицы с магнитожесткими частицами во внешнем магнитном поле.

Автор выражает благодарность Родионовой Валерии Викторовне, к. ф.-м. н., доцент, директор НОЦ «Умные материалы и биомедицинские приложения», и Столбову Олегу Валерьевичу, к.ф.-м.н., с.н.с. ИМСС УрО РАН, за помощь в работе. Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 21-72-30032.

### Литература

1. Allue, A., Corte-León, P., Gondra, K., Zhukova, V., Ipatov, M., Maria Blanco, J., Zhukov, A. (2019). Smart composites with embedded magnetic microwire inclusions allowing non-contact stresses and temperature monitoring. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*.
2. Varga, Z., Filipcsei, G., & Zrínyi, M. (2005). Smart composites with controlled anisotropy. *Polymer*, 46(18), 7779–7787.
3. Germain Sossou, Frédéric Demoly, Hadrien Belkebir, H. Jerry Qi, Samuel Gomes, Ghislain Montavon, Design for 4D printing: Modeling and computation of smart materials distributions, *Materials and Design*, 181 (2019) 108074.
4. Лурье А.И. Теория упругости, Наука, 1970.

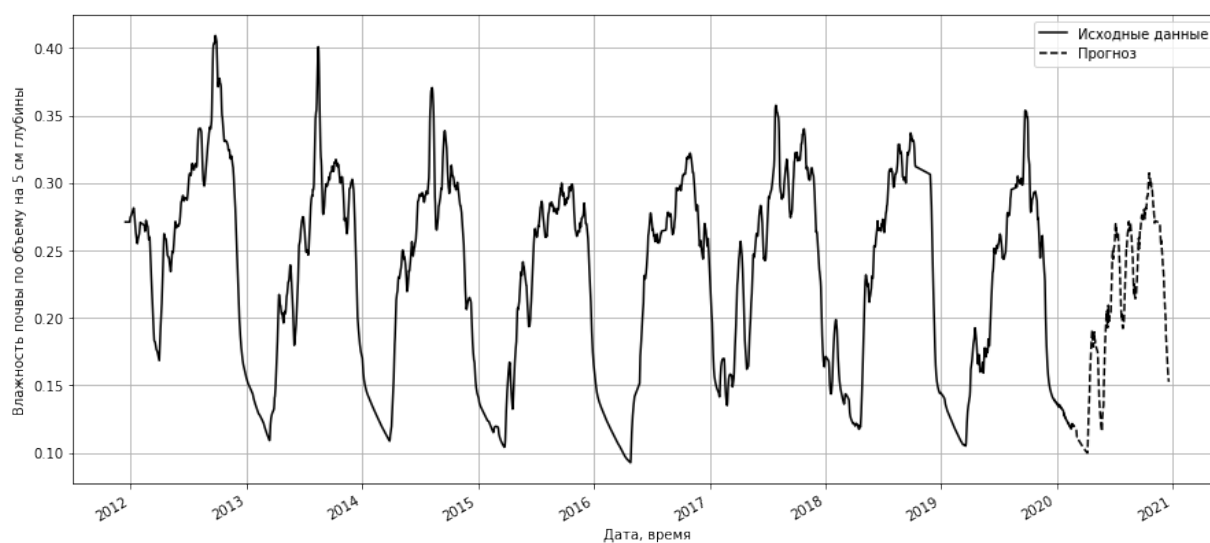
## МОДИФИЦИРОВАННЫЙ МЕТОД ARIMA ДЛЯ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ПРОПУСКОВ ДАННЫХ ВО ВРЕМЕННЫХ РЯДАХ

Фадеева П.А.

*МГУ им. М. В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*  
*E-mail: fadeeva.pa20@physics.msu.ru*

Метеорологические показания и их изменения оказывают глобальное влияние на функционирование экосистем и развитие экономической деятельности человека. Важным метеорологическим параметром является влажность почвы. Она, в свою очередь, оказывает существенное влияние на эффективность сельскохозяйственного производства, что является немаловажным фактором в жизни людей. Таким образом, прогнозирование показаний влажности почвы является актуальной темой. Для решения задачи анализа и прогнозирования изменений климата проводится анализ временных рядов влажности [1].

Временным рядом называется совокупность величин, представляющая собой значение какого-либо параметра, изменяющегося во времени, при этом каждое значение ряда соответствует значению параметра в определенный момент времени.



В представленной работе анализируются временные ряды влажности почвы, и прогнозируются показатели влажности на разной глубине во Вьетнаме с 2011 по 2020 год. На графике представлена зависимость влажности почвы от времени наблюдения, измеренная на 5 см глубины от поверхности, и прогноз на 2020 год с помощью метода ARIMA.

Рассмотрен модифицированный вариант метода линейного прогноза “назад”, основанного на построении интегрированной модели авторегрессии ARIMA в обратную сторону, а также сочетание классической и предложенной модификации модели с целью улучшения качества результатов прогноза. Модель, взятая в основу исследования – это ARIMA(p,d,q) - интегрированная модель авторегрессии - скользящего среднего, которая используется для прогнозирования и работы с нестационарными временными рядами, приводящая их к стационарному виду путем взятия разности d-го порядка. Модель ARIMA(p,d,q) имеет следующий вид[2]:

$$\Delta^d Y_t = \sum_{i=1}^p \alpha_i \Delta^d Y_{t-i} + \sum_{j=1}^q \beta_j \varepsilon_{t-j} - \varepsilon_t,$$

где  $Y_t$ - значение временного ряда в t-ый момент времени,  $Y_{t-i}$ - значения временного ряда в предшествующие моменты времени,  $\alpha_1, \dots, \alpha_p$  - коэффициенты авторегрессии,  $\beta_1, \dots, \beta_q$  - параметры модели,  $\varepsilon_t$  - шумовая компонента,  $\varepsilon_{t-j}$  - значения шумовой компоненты в предыдущие моменты времени,  $\Delta^d$  - оператор взятия разности d-го порядка (дифференцирования).

Полученные с помощью предложенного метода результаты оказались сравнимы по качеству с результатами классических методов прогнозирования [3], а также, в частных случаях, способствовали их улучшению.

### Литература

1. Газарян В.А., Курбатова Ю.А., Овсянников Т.А., Шапкина Н.Е. // ВМУ.Серия 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 2015. № 5.
2. Bianchi Marco. X-12 - ARIMA (Beta Version 1.1a) // The Economic Journal. Vol. 107. №. 444. Sep. 1997. p. 1613 - 1620
3. Kurbatova J., Tatarinov F., Molchanov A. et al. // Environ. Res. Lett. 2013.№ 8.045028.

## УПРАВЛЕНИЕ ТЕРМИНАЛЬНЫМИ МАНЕВРАМИ БПЛА САМОЛЕТНОГО ТИПА МЕТОДОМ «ГИБКИХ» ТРАЕКТОРИЙ

Сергеев А.А.

*МГУ им. М. В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия  
E-mail: alxsrg95@gmail.com*

В настоящее время в различных сферах человеческой деятельности все большее применение находят БПЛА самолетного типа, в задачах поиска, спасения, мониторинга, наблюдения, инспекции, научных исследований, патрулирования, разведки и т.д. Выполнение данных задач как правило сопровождается сложными маневрами, представляющими собой изменение положения аппарата, его ориентации в пространстве и скорости движения.

Процесс управления полетом БПЛА рассматривается как многоэтапный процесс, в котором движение аппарата разбивается на отдельные этапы полета. В динамике полета аппарата выделяется ряд режимов функционирования – типовых маневров, таких как взлет, посадка, подъем/снижение высоты (горка), поворот в горизонтальной плоскости, пикирование, боевой разворот и т.д. При этом каждый отдельный маневр будет инициироваться соответствующей ему динамической ситуацией, то есть совокупностью данных, на основе которой принимается решение о необходимости изменения типового маневра. Сложившиеся динамические ситуации определяются на основе распознавания и анализа множества возможных состояний как аппарата, так и внешней среды.

В докладе исследуется алгоритм управления терминальными маневрами БПЛА самолетного типа, основанный на принципе «гибких» траекторий.



Принцип «гибких» траекторий заключается в отказе от привязки управляемого движения объекта к заранее запланированной (номинальной) траектории и формировании более выгодных траекторий движения к целевому состоянию исходя из фактически сложившихся условий движения объекта [1, 2]. Возможны различные способы реализации данного принципа:

- Процесс управления разбивается на циклы планирования и на каждом из них рассчитывается желаемая траектория движения. В течение цикла расчетная траектория стабилизируется.
- Переход на новую плановую траекторию осуществляется при возмущениях расчетной траектории, превышающих заданный порог.
- Планирование траекторий осуществляется для каждого состояния объекта согласно принципу «размораживания» начальных условий.

Формализацию принципа «гибких» траекторий для класса задач управления летательными аппаратами естественно привязывать к кинематике их движения в физическом пространстве [3].

Рассматривается применение алгоритма для маневра посадки на движущуюся платформу и для маневра выравнивания. Апробация алгоритма управления на примере посадочного маневра БПЛА на движущуюся посадочную платформу [4, 5] и маневра выравнивания [3] методом цифрового моделирования проводилась в системе Matlab, показала высокое качество посадочного маневра и выполнение всех необходимых требований и ограничений для управляющих переменных.

#### Литература

1. Теряев Е.Д., Филимонов А.Б., Филимонов Н.Б., Петрин К.В. Концепция «гибких кинематических траекторий» в задачах терминального управления подвижными объектами // Мехатроника, автоматизация, управление. - 2011. - № 12. - С. 7-15.
2. Филимонов А.Б., Филимонов Н.Б. Методы «гибких» траекторий в задачах терминального управления вертикальными маневрами летательных аппаратов. В кн.: Проблемы управления сложными динамическими объектами авиационной и космической техники / Под ред. С.Н. Васильева. – М.: Машиностроение, 2015. – С. 51-110.
3. Филимонов Н.Б., Сергеев А.А. Синтез алгоритма управления вертикальным посадочным маневром БПЛА методом гибких кинематических траекторий // Journal of Advanced Research in Technical Science. 2019. Issue 17-2. P. 150-156.
4. Сергеев А.А., Филимонов Н.Б. Управление посадочным маневром беспилотного летательного аппарата на подвижную платформу методом «гибких» кинематических траекторий // Изв. вузов. Приборостроение. 2020. Т. 63, No 9. С. 803—812.
5. Sergeev A., Filimonov A., Filimonov N. Algorithmization of Autonomous Landing of Unmanned Aerial Vehicles by «Flexible» Kinematic Trajectories // High-Performance Computing Systems and Technologies in Scientific Research, Automation of Control and Production (HPCST 2020). Communications in Computer and Information Science. 2020. Vol 1304. Springer, Cham. – P. 181-200.

#### ПРЕДИКТИВНОЕ УПРАВЛЕНИЕ СВЕТОФОРАМИ СИСТЕМЫ ПЕРЕКРЕСТКОВ НА ОСНОВЕ МАКРОСКОПИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДОРОЖНО-ТРАНСПОРТНОЙ СЕТИ

Матросов С.В.

*МГУ им. М. В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*  
*E-mail: matrosik14@gmail.com*

Светофорное регулирование является одним из наиболее доступных и эффективных технических средств управления транспортными потоками. Чаще всего на практике для светофоров задается статичное расписание. Такой подход хорош своей просто-

той, однако в ряде ситуаций он приводит к неэффективной эксплуатации транспортной инфраструктуры. Мировой опыт показывает, что алгоритмы светофорного регулирования, адаптирующиеся к изменениям дорожной ситуации, могут обеспечить существенное увеличение пропускной способности дорожно-транспортной сети [1, 3]. При этом многие системы управления используют упрощенные модели трафика, что приводит к падению их эффективности при высокой нагрузке на транспортную сеть.

Работа посвящена разработке алгоритма светофорного регулирования, осуществляющего централизованное скоординированное управление системой перекрестков. Для решения задачи предлагается использовать алгоритм, основанный на подходе предиктивного управления, в рамках которого оптимальное управление подбирается при помощи прогнозов модели транспортной сети, способной корректно предсказывать поведение трафика даже при большой загруженности. Управляющие воздействия задаются как расписания для светофорных контроллеров с фиксированной последовательностью фаз.

Транспортная сеть задается как направленный граф, в котором каждому ребру в соответствие ставится дорога, а вершине – перекресток. Для моделирования динамики трафика на дороге используется макроскопическая модель транспортных потоков, которая задается как система уравнений в частных производных [4]. Граничные условия для пересекающихся на перекрестке дорог задаются как задача оптимизации с ограничениями.

Для выбора оптимального расписания решается задача дискретной оптимизации. С увеличением числа светофорных контроллеров в управляемой зоне размер пространства поиска растет экспоненциально, поэтому в работе предлагается искать приближенное решение при помощи генетического алгоритма, основанного на эвристике локального поиска.

Корректность работы предложенного алгоритма светофорного регулирования подтверждена результатами компьютерного моделирования. Численные эксперименты проводились при помощи программного пакета SUMO[2].

### Литература

1. Khattak Z. H., Magalotti M. J., Fontaine M. D. Operational performance evaluation of adaptive traffic control systems: A Bayesian modeling approach using real-world GPS and private sector PROBE data // *Journal of Intelligent Transportation Systems*. – 2020. – Т. 24. – №. 2. – С. 156-170.
2. Lopez P.A. et al., "Microscopic Traffic Simulation using SUMO," 2018 21<sup>st</sup> International Conference on Intelligent Transportation Systems (ITSC), 2018, pp. 2575-2582.
3. Samadi S. et al. Performance evaluation of intelligent adaptive traffic control systems: A case study // *Journal of transportation technologies*. – 2012. – Т. 2. – №. 03. – С. 248.
4. Shimaо Fan, Michael Herty, and Benjamin Seibold. Comparative model accuracy of a data-fitted generalized aw-rasclе-zhang model // *arXiv preprint arXiv:1310.8219*, 2013

## РАСЧЁТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКОЙ ЦЕПОЧКИ СПИНОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ КЛАСТЕРОВ

Нужин С.В.

*УФУ им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия*  
*E-mail: st.nygin@gmail.com*

Термодинамические параметры гейзенберговской цепочки спинов при малых размерах системы имеют зависимость от числа узлов, при больших размерах зависимость от числа узлов пропадает. Чтобы исследовать стремление интенсивной величины к термодинамическому пределу, на основе метода Монте-Карло (алгоритм Метрополиса)

разработана компьютерная программа, вычисляющая термодинамические величины гейзенберговской цепочки, состоящей из более, чем 200 узлов. Для этого последовательно выполнены следующие шаги:

1. Рассмотрено разбиение цепочки на кластеры, состоящие из пары ближайших узлов. Для отдельного кластера энергетический спектр вычислен точно. При учете взаимодействия между кластерами пренебрегается недиагональными элементами матрицы взаимодействия.
2. Вариант алгоритма Метрополиса, применяющейся для изинговской цепочки спинов, модернизирован для гейзенберговской цепочки, состоящей из взаимодействующих кластеров.
3. Рассмотрена аналогичная задача для кластеров из 3 узлов.

Сравнение энергий, полученных из точной диагонализации [1] и приближенных методов показано на рисунке 1.

Далее планируется модернизировать программу до CUDA-версии (число узлов более  $10^6$ ), затем применить алгоритм к двумерной гейзенберговской решетки с большим числом узлов.

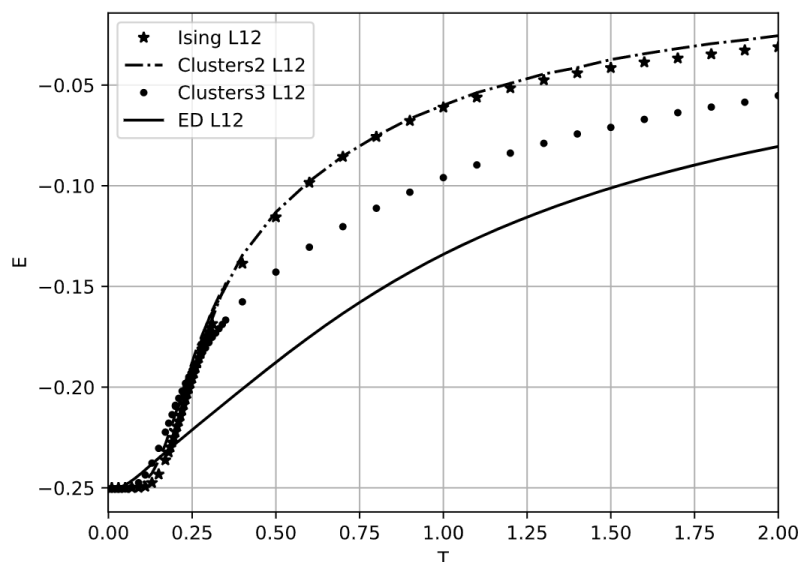


Рис. 1. Температурная зависимость средней энергии для цепочки из 12 узлов в отсутствие внешнего магнитного поля, вычисленных разными методами. Ising – цепочка Изинга; Clusters2 – гейзенберговская цепочка кластеров из 2 узлов; Clusters3 – гейзенберговская цепочка кластеров из 3 узлов; ED – точная диагонализация

### Литература

1. Junger I. et al. Green-function theory of the Heisenberg ferromagnet in a magnetic field //Physical Review B. – 2004. – Т. 70. – №. 10. – С. 104419.

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ВОДНО-ХИМИЧЕСКОГО БАЛАНСА СИСТЕМ ОБОРОТНОГО ОХЛАЖДЕНИЯ ПЕТРОЗАВОДСКОЙ ТЭЦ

Ходак М. С.

*Петрозаводский ГУ, физико-технический институт, Петрозаводск, Россия*  
E-mail: makar\_ss@mail.ru

В настоящее время на тепловых электрических станциях (ТЭС) и ТЭЦ РФ для охлаждения конденсаторов турбин (КТ) и вспомогательного оборудования наибольшее распространение получила система обратного охлаждения (СОО) с испарительными градирнями. В качестве добавочной воды в СОО используется главным образом при-

родная необработанная вода. При работе, в результате испарения воды, происходит концентрирование малорастворимых компонентов в воде СОО. В основном по этой причине образуются отложения малорастворимых веществ (накипь), ухудшающие процессы теплопередачи. От этого напрямую зависит эффективность работы ТЭС, а именно: перерасход топлива, состояние оборудования, его ресурс и аварийность.

Для оптимизации работы циркуляционной системы Петрозаводской ТЭЦ предлагается разработать математическую модель и реализовать её на языке программирования Python. На базе созданной математической модели конкретной системы охлаждения будет разработана прикладная программа для ЭВМ, помогающая оперативному персоналу легко подобрать требуемые параметры для корректировки водно-химического режима на очередные сутки.

### Литература

1. Расчет и визуальное отображение водно-химического режима систем оборотного охлаждения ТЭС / В. Ф. Очков [и др.] // Теплоэнергетика, 2013, №7. С 1-7.
2. Методика исследования состояния водного режима системы оборотного охлаждения на ТЭС / В. В. Козловский, А. Б. Ларин // Вестник ИГЭУ, 2019, Вып. 3.

## СОЗДАНИЕ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ДЛЯ АНАЛИЗА ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ

Хаметова Э.Ф.<sup>1,2</sup>, Бакиева О.Р.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Удмуртский ГУ, Институт математики, информационных технологий и физики, Ижевск, Россия

<sup>2</sup>Удмуртский ФИЦ Уральского отделения РАН, Физико-технический институт, Ижевск, Россия

E-mail: elinaphanilevna851@gmail.com

Нейронные сети - одно из перспективных направлений искусственного интеллекта, которое уже на сегодняшний день активно используется во многих направлениях: в медицине, в бизнесе, в сфере безопасности и в др [1,2].

В последнее десятилетие внимание исследователей занимают объекты наноразмерного масштаба – сильно локализованные особенности (квантовые точки), слоистые 2D материалы (например, оксид графена, MXenes), различные системы ядро-оболочка [3]. Для исследования структуры таких объектов используют комплекс поверхностно-чувствительных методов, в том числе и спектроскопию энергетических потерь электронов – EXELFS (Extended Electron Energy Loss Fine Structure).

При работе с экспериментальными данными каждый исследователь должен решить ряд проблем. Необходимо получить априорную информацию об исследуемом объекте. Она необходима для построения модели корректно описывающей исследуемую структуру реального объекта. А также нужно уметь обрабатывать данные эксперимента, не внося дополнительные погрешности. Комплекса этих проблем можно избежать при использовании нейронной сети, обладающей способностью обрабатывать экспериментальные спектры энергетических потерь электронов.

Данная работа направлена на решение проблемы получения из экспериментальных данных информации о параметрах локального атомного строения материала. Для построения корректной модели проводят расчеты, которые требуют значительных временных ресурсов и высокой вычислительной мощности. Поэтому создание нейронной сети, способной проводить анализ EXELFS спектров значительно облегчит получение информации о локальной атомной структуре.

В рамках данной работы была создана подпрограмма для нейронной сети, в которой закладывается необходимая информация: сведения об энергии связи и структурные

данные. Она принимает экспериментальный спектр и определяет энергию связи, а через нее химический элемент и край возбуждения, далее определяется структура.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ №121030100002-0. Исследования выполняли с использованием оборудования ЦКП «Центр физических и физико-химических методов анализа, исследования свойств и характеристик поверхности, наноструктур, материалов и изделий» УдмФИЦ УрО РАН.

### Литература

1. Абрикосов И. А., Сон Э.Е., Мухамедов Б.О., Хван А.В. Проектирование материалов атомной энергетики: первопринципные расчеты и методы искусственного интеллекта // Теплофизика высоких температур. 2020. Т. 58. С. 915-950.
2. Schmeide K., et al. Technetium immobilization by chukanovite and its oxidative transformation products: Neural network analysis of EXAFS spectra // Science of the Total Environment. 2021. V.770.
3. Yangjin Dong, et al. Smart MXene/agarose hydrogel with photothermal property for controlled drug release // International Journal of Biological Macromolecules. 2021. V. 190. P. 693-699.

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕТРИЧЕСКОГО ПОДХОДА ДЛЯ ПРИБЛИЖЕННОГО РЕШЕНИЯ NP-ТРУДНЫХ ЗАДАЧ

Букуева Е. С.

*МГУ им. М. В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: bukueva.es18@physics.msu.ru*

Большинство задач теории расписаний находятся в классе NP-полных, значит, исходя из предположения, что  $P \neq NF$ , для таких задач не существует полиномиального решения. Однако существуют различные методы нахождения приближенного решения быстрее полного перебора.

Одним из подходов, используемых для решения NP-трудных задач теории расписаний, является метрический подход. Главная идея этого подхода заключается в построении метрики между некоторой точкой полиномиально неразрешимого подпространства задач и точкой подпространства задач, где уже были найдены полиномиальные алгоритмы. С помощью построенной метрики предполагается нахождение оценки погрешности решения. На основе предыдущих исследований [1] было показано, что относительная ошибка для задачи на одном приборе уменьшается с увеличением количества требований в задаче, поэтому было выдвинуто предположение, что подобная зависимость проявляется и для задач других классов.

В данной работе рассматривается проблема минимизации задачи на быстродействие на двух параллельных приборах с известными отношениями предшествования, при проведении компьютерных экспериментов использовались известные алгоритмы со сложностью  $O(n^2)$  [3] и  $O(e + n\alpha(n))$  [2].

Исследована практическая применимость полиномиальной схемы решения задач NP-трудного класса [4]  $P2|prec, pj = \{1,2\}|Cmax$  через сведение их к задачам P-класса  $P2|prec, pj = p|Cmax$ . Изучены зависимости точности схемы от различных параметров графа предшествования. Результаты экспериментов, проведенных на большом числе случайных задач, показывают получение оптимального решения в около 80% случаев.

### Литература

1. Лазарев А. А., Лемтюжникова Д. В., Вернер Ф. A metric approach for scheduling problems with minimizing the maximum penalty // Oxford (Великобритания): Applied Mathematical Modelling 89, 2021. — С. 1163–1176.

2. R. Sethi. Scheduling graphs on two processors. // SIAM Journal on Computing, 5(1), 1976. С. 73–82.
3. E. G. Coffman and R. L. Graham. Optimal scheduling for two-processor systems. // Acta informatica, 1(3), 1972. С. 200–213.
4. R. Van Bevern, R. Bredereck, L. Bulteau, C. Komusiewicz, N. Talmon, and G. J. Woeginger. Precedence-constrained scheduling problems parameterized by partial order width. In International conference on discrete optimization and operations research, // Springer, 2016. С. 105–120.

## НЕЙРОСЕТЕВОЙ ПОДХОД К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧИ ПЕРЕХВАТА МАШИНОЙ ДУБИНСА ЦЕЛИ НА ПРЯМОЛИНЕЙНОЙ И КРУГОВОЙ ТРАЕКТОРИЯХ

И. А. Насонов, А. И. Медведев

*МГУ им. М. В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*

В прикладных задачах оптимального управления при моделировании движения объектов на плоскости и в пространстве зачастую используются относительно простые модели динамики, например, модель машины Дубинса [1]. Такой объект движется на плоскости с постоянной скоростью и управляется производной угла ориентации этой скорости с помощью воздействия  $u(t)$ , причем  $u(t)$  ограничено по модулю некоторой константой. Соответствующий выбор масштаба координат и времени позволяет без потери общности полагать скорость и минимальный радиус кривизны траектории такой машины единичными.

Настоящая работа посвящена нахождению нейросетевого решения задачи перехвата цели машиной Дубинса. Предполагается, что цель движется по прямолинейной или круговой, заранее известной непрерывной траектории, а её состояние описывается вектором непрерывных функций  $E(t) = (x_E(t), y_E(t))$  на декартовой плоскости. Под перехватом будем понимать такое положение машины и цели, при котором расстояние между ними не превышает заранее заданное расстояние  $L$ .

Так как невозможно применить Q-обучение к пространствам непрерывных действий, то для решения задачи обучения с подкреплением с непрерывными действиями был разработан алгоритм Deep Deterministic Policy Gradient (DDPG) [2], где была предложена модель структуры Actor-Critic, в которой структура Actor используется для выбора действий, а структура Critic применяется для оценки этого выбора. DDPG сочетает в себе достоинства предшествующих ему алгоритмов, что делает его более устойчивым и эффективным в обучении. Образцы, полученные в результате последовательного исследования в среде, не распределяются независимо и одинаково, поэтому DDPG использует идею Deep Q Networks (DQN) [3], называемую буфером воспроизведения. Буфер воспроизведения представляет собой буфер конечного размера. На каждом временном шаге Actor и Critic обновляются путем равномерной выборки mini-batch из буфера воспроизведения. Еще одной отличительной особенностью DDPG стала концепция обновлений целей вместо прямого копирования весов в целевую сеть. Поиск решения реализуется путем добавления шума, полученного от шумового процесса  $N$ , в управление Actor.

Решение, полученное при помощи нейросети не всегда является оптимальным и совпадает с аналитическим [1]. Это можно объяснить тем, что нейросеть осуществляет захват цели исходя из того, что его можно совершить в радиусе  $L$  от цели, когда как оптимальный алгоритм перехватывает цель точно при совпадении терминальных координат цели машины Дубинса. Поэтому нейросеть может показать такое же время перехвата или даже меньше, чем у оптимального алгоритма перехвата.

**Литература**

1. M. E. Buzikov, A. A. Galyaev Time-Optimal Interception of a Moving Target by a Dubins Car. *Autom Remote Control*, 82, 745–758 (2021).
2. Timothy P. Lillicrap, Jonathan J. Hunt, Alexander Pritzel, Nicolas Heess, Tom Erez, Yuval Tassa, David Silver, Daan Wierstra. Continuous control with deep reinforcement learning. arXiv:1509.02971
3. Mnih, V., Kavukcuoglu, K., Silver, D. et al. Human-level control through deep reinforcement learning. *Nature*, 518, 529–533 (2015).

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРОДИНАМИКИ КИСЛОРОДНОГО КОНВЕРТЕРА**

Ишимбаев А.В., Матюхин В.И.

*УФУ им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия*

*e-mail: aleks.ishimbaev@yandex.ru*

На кафедре теплофизики и информатики в металлургии института новых материалов и технологий Уральского Федерального университета была собрана установка холодной модели кислородного конвертера с комбинированной продувкой. В основе работы кислородного конвертера лежат тепломассообменные процессы, развитие которых определяются гидродинамикой ванны.

Моделирование гидродинамики конвертерного процесса, несмотря на имеющийся опыт практического его применения, по-прежнему является актуальной.

Вертикальный кислородный конвертер является агрегатом, с помощью которого получают сталь из чугуна с необходимым содержанием углерода, а выход годного металла является самым высоким по сравнению с другими сталеплавильными процессами. Данный конвертер имеет большую базу для совершенствования технологического процесса в будущем. Поэтому задача моделирования гидродинамики конвертерного процесса, несмотря на имеющийся опыт практического его применения, по-прежнему является актуальной. Новые исследования позволят улучшить работу самого конвертера и состав стали на выходе, а также уменьшить количество выбросов.

В ходе данной работы были проведены исследования моделирования гидродинамики кислородного конвертера, с помощью них выявлены распространение струй газа и движение жидкости в замкнутой среде.

Модель кислородного конвертера с комбинированной продувкой 1:20 от оригинала, показана на рисунке 1. В качестве образца выбрана модель вертикального конвертера, т.к. на данной модели возможно взаимодействие газа с жидкостью, и продувка как сверху, так и снизу.

Параметры анализа исследования:

$H$  – высота поднятия зоны барботажа в центральной части ванны;

$D$  – размер зоны циркуляции;

$H_B$  – амплитуда колебаний волн;

$\nu$  – частота зоны циркуляции.

При проведении экспериментов определяются осредненные во времени параметры газовой среды: давление воздуха, его расход, визуализация течение струй и вторичных газовых образований на модели с регистрацией гидродинамических процессов методами кино – и фотосъемки. Организовано исследование на использовании ротатбельного плана второго порядка, который позволяет при минимуме затрат и числе экспериментов получить большой объем информации об изучаемом процессе.

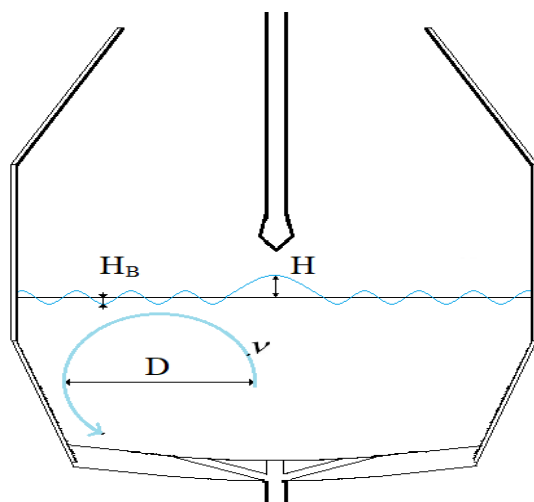


Рис. 1. Модель кислородного конвертера

После обработки полученных данных были установлены уравнения регрессии, которые с вероятностью 95% описывают реальные закономерности изменения соответствующих показателей работы ванны конвертера. Уравнения регрессии:

- Для относительной высоты поднятия зоны барботажа в центральной части ванны уравнение регрессии имеет вид:

$$H=17,8+2,4X_3-2,4X_1^2-3,1X_2^2-3,4X_1X_3 \quad (1)$$

- Для относительного размера зоны циркуляции в ванне уравнение регрессии имеет вид:

$$D=44,9-8,4X_3^2-1,9X_1X_3 \quad (2)$$

- Для относительной амплитуды колебаний ванны уравнение регрессии имеет вид:

$$H_B=20,4+6,2X_3-2,6X_3^2+2,9X_2X_3 \quad (3)$$

- Для частоты зоны циркуляции ванны уравнение регрессии имеет вид:

$$v=0,96+0,2X_3-0,16X_3^2-0,044X_1X_3+0,041X_2X_3 \quad (4)$$

С помощью полученных уравнений регрессии построены графики по трём факторам. Благодаря ним будет сделан анализ влияния факторов на выбранный параметр. В свою очередь именно этот процесс представляет собой взаимосвязь комбинированной работы верхнего и нижнего дутья в конвертер.

Были установлены рациональные соотношения интенсивности продувки ванны при совместной ее продувке сверху и снизу для улучшения тепломассообменных процессов в жидкой ванне. При использовании одновременного барботажа ванны двумя источниками будет происходить усиление тороидальной колебательной области с расширением ее объема и частоты циркуляции, увеличение амплитуды барботажа центральной зоны и поверхностных колебательных процессов с увеличением их амплитуды и частоты развития.

Наиболее эффективными значениями факторов для организации гидродинамических процессов ванны будут:

1. Относительная высота расположения верхней фурмы не должна превышать 24%;
2. Интенсивность продувки сверху должна находиться от 1,22 до  $1,59 \text{ м}^3/(\text{м}^2\text{мин})$ ;



3. Соотношение интенсивностей продувки ванны через верхнюю и нижнюю фурмы должно равняться 12–28 %.

Данные значения позволят более эффективно применять энергетические свойства газовых струй в жидкой ванне. Изучив данные факторы, можно сказать, что они могут обеспечить успешные тепломассообменные процессы, а также наибольшее освоение газов металлом. Благодаря комбинированной продувке сокращается количество выбросов в атмосферу.

## ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СИЛЫ И ТЕМПЕРАТУРЫ ВЕТРА НА ОБРАЗОВАНИЕ ВИХРЕВЫХ СТРУКТУР ПРИ ФОРМИРОВАНИИ ВОЛН В КОЛЬЦЕВОМ КАНАЛЕ

Лапонин В. С.

*МГУ им. М.В. Ломоносова, факультет вычислительной математики  
и кибернетики, Москва, Россия  
E-mail: lap@cs.msu.ru*

Уединенные ветровые волны исследуются уже давно, например [1-6]. Большинство вопросов до сих пор остаются весьма актуальными. В данный момент не так хорошо изучены как экспериментально, так и теоретически условия образования устойчивых ветровых волн [5] на поверхности жидкости. По этой причине данная работа посвящена изучению влияния силы и температуры ветра на образование вихревых структур у ветровых волн с помощью математического моделирования [1].

Движение частиц воды в гравитационной волне складывается из интенсивного орбитального и небольшого поступательного движения в направлении распространения волны, в результате происходит перенос воды в направлении распространения волны [6]. При наличии ветрового воздействия на водную поверхность этот перенос усиливается, вследствие чего изменяется профиль волны: наветренный склон становится более пологим, а подветренный круче.

Данная работа посвящена двухфазному (вода – воздух) моделированию формирования нелинейных волн на поверхности воды и сопутствующих вихревых структур в зависимости от силы и температуры ветра. Рассматривается внутренняя структура волны и ее вихревые особенности [3]. Природным аналогом данного процесса является формирование цунами. Предлагаемая математическая модель основана на трехмерной системе нелинейных дифференциальных уравнений газо-гидродинамики [4]. Исследование полноценной трехмерной математической модели стало возможно только благодаря эффективному использованию параллельных вычислительных средств и современным численным методам [2-4]. Полученные численные результаты соответствуют экспериментальным наблюдениям.

### Литература

1. Р.Н. Кузьмин, В.С. Лапонин, Н.П. Савенкова, С.А. Складчиков. Математическое моделирование формирования уединенной волны на поверхности жидкости // Инженерная физика. 2014, № 8, с. 19–24.
2. Laponin V.S., Savenkova N.P., Il'utko V.P. Numerical method for soliton solutions // Computational Mathematics and Modeling, 2012, Vol. 23, no. 3, p. 254–265.
3. U. Yusupaliyev, N.P. Savenkova, S.A. Shuteyev et al. Computer simulation of vortex self-maintenance and amplification // Moscow University Physics Bulletin, 2013, Vol. 68, no. 4, p. 317–319.
4. N.P. Savenkova, S.V. Anpilov, R.N. Kuzmin et al. Reduction cell multiphase 3-d model // Applied Physics, 2012, No. 3, p. 111–115.

5. Юэн Г., Лэйк Б. Нелинейная динамика гравитационных волн на глубокой воде. М.: Мир, 1987.
6. Степанянц Ю.А., Фабрикант А.Л. Распространение волн в сдвиговых потоках. Современные проблемы физики. М.: Физматлит, 1996.

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СОРТИРОВКИ ЧАСТИЦ В КАНАЛЕ С ДЕТЕРМИНИРОВАННЫМ БОКОВЫМ СМЕЩЕНИЕМ

Фахретдинова А.Л., Киселева А.А.

*Башкирский ГУ, физико-технический институт, Уфа, Россия*

*E-mail: f.4l5u@yandex.ru*

Необходимость разделения частиц, таких как циркулирующие опухолевые клетки, клетки крови, в медицине привели к созданию различных механизмов, основанных на размере частиц, деформируемости, плотности, поляризуемости и др. критериях.

Детерминированное боковое смещение (Deterministic Lateral Displacement, DLD) – это гидродинамический механизм разделения частиц по размеру. Данный метод использует массивы периодически расположенных микроканалов, как показано на рис.1, где сдвиг создает три равные линии потока. Пунктирные линии — это границы между линиями потока. Когда ламинарная жидкость течет через зазор соседних микроканалов, она раздваивается вокруг микроканала, с которым она встречается в следующем ряду. Зазор обычно больше, чем частицы, чтобы избежать засорения. Все частицы одинакового размера следуют эквивалентным путям миграции, характеризующимся либо зигзагообразным режимом, либо смещением при каждом препятствии. В первом случае частицы, размер которых меньше критического диаметра  $D_c$ , текут вместе с потоком, во втором случае частицы с размерами, превышающими  $D_c$ , перемещаются под углом [1].

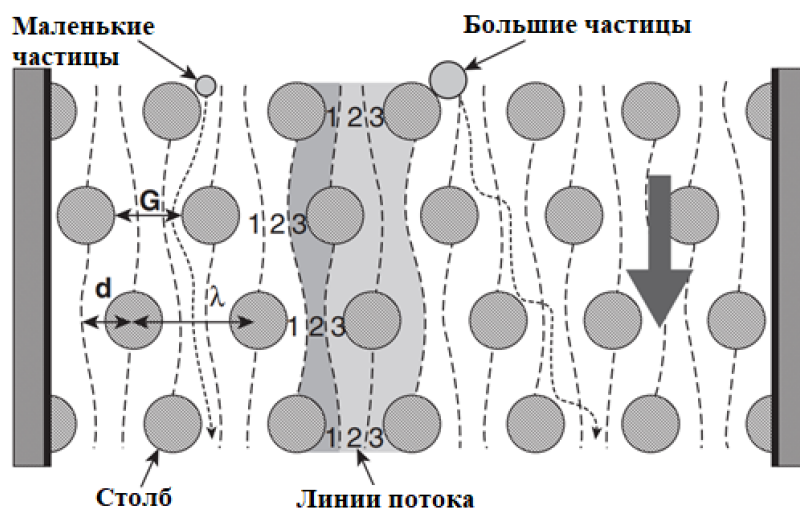


Рис. 1. Механизм разделения частиц с помощью DLD, с примером доли сдвига строки в одну треть.  $G$  - расстояние между зазорами,  $\lambda$  - расстояние между стойками от центра до центра,  $d$  - относительное смещение центров стоек в соседних рядах [1]

Данная работа посвящена численному исследованию особенностей сортировки деформируемых частиц в потоке жидкости, движение которой описывается уравнением Стокса, в микроканалах с DLD. Для численного моделирования используется метод граничных элементов, в котором производится преобразование дифференциального уравнения в частных производных, описывающее поведение неизвестной функции

внутри и на границе области, в интегральное уравнение, связывающее граничные значения.

### Литература

1. Fatoyinbo, H.O. *Microfluidic Devices for Biomedical Applications // Microfluidic devices for cell manipulation.*, 2013. P. 283–350

## КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ ГИДРАТА МЕТАНА ПРИ ВЫСОКИХ ПЕРЕОХЛАЖДЕНИЯХ: РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Сазанов А.В.

*Казанский (Приволжский) ФУ, Институт Физики, Казань, Россия*

*E-mail: sazanov.andrei1998@gmail.com*

Выяснение механизмов структурообразования в молекулярных комплексах по типу «хозяин-гость» представляет одну из важнейших задач физики конденсированного состояния. Примерами таких систем являются природные гидраты – газогидраты. Они образованы из молекул газа (молекулы-гости), которые заключены в полости трехмерных решеток из молекул воды – водные клатратные каркасы (каркасы хозяина). Природные гидраты являются одной из форм существования газа в недрах Земли и считаются перспективными источниками углеводородного газа [1].

В настоящей работе представлены результаты молекулярно-динамических исследований зарождения и кристаллизации гидрата метана из двухфазной системы метан-вода при температуре 250 К и давлении 50 МПа. Исследуемая система состояла из 2944 молекул воды, моделируемых потенциалом межмолекулярного взаимодействия TIP4P/Ice [2] и 512 молекул метана, взаимодействие между которыми осуществлялась посредством потенциала OPLS United Atom [3]. Кросс-взаимодействие между водой и метаном осуществлялось посредством потенциала Леннард-Джонса, где параметры взаимодействия находились по правилу смешения Лоренца-Бертло [4,5]. Сильное взаимодействие между водой и метаном в данной работе приводит к тому, что молекулы метана из газовой фазы могут быстро переходить в водную фазу с образованием пересыщенного раствора на начальной стадии, увеличивая вероятность зародышеобразования и скорость образования гидратов. Установлено, что в начальных конфигурациях с низким содержанием метана скорость зарождения и роста гидратов была низкой, что в большей степени способствовало образованию кристаллогидратов. В конфигурациях с низким содержанием метана кристаллические домены sI, кристаллические домены sII и поликристаллические структуры с сосуществованием sI-подобных и sII молекулярных комплексов-кластеров наблюдались явно. Результаты моделирования демонстрируют, что при достаточно высоких переохлаждениях в системе метан-вода все еще могут образовываться кристаллические формы гидрат метана.

Автор выражает благодарность своему научному руководителю Хуснутдинову Рамилю Миннегазовичу за помощь, предоставленную на всех этапах выполнения работы. Крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета. Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект № 22-22-00508).

### Литература

1. V. K. Michalis, J. Costandy, I. N. Tsimpanogiannis et al. Prediction of the phase equilibria of methane hydrates using the direct phase coexistence methodology // *J. Chem. Phys.* 2015. Vol. 142, 044501.
2. J. L. F. Abascal, E. Sanz, R. G. Fernández, and C. Vega. A potential model for the study of ices and amorphous water: TIP4P/Ice // *J. Chem. Phys.* 2005. Vol. 122, 234511.

3. W. L. Jorgensen, J. D. Madura and C. J. Swenson. Optimized Intermolecular Potential Functions for Liquid Hydrocarbons // J. Am. Chem. Soc. 1984. Vol. 106(22). P. 6638-6646.
4. Lorentz, H. A. Ueber die Anwendung des Satzes vom Virial in der kinetischen Theorie der Gase // Annalen der Physik. 1881. Vol. 248(1), P. 127–136.
5. D. Berthelot. Sur le mélange des gaz // Comptes rendus hebdomadaires des séances de l'Académie des Sciences. 1898. Vol. 126. P. 1703-1855.

### МОДЕЛИРОВАНИЕ КЛЕТОЧНЫХ УПАКОВОК: РАКОВЫЕ И ЗДОРОВЫЕ МОНОСЛОИ

Федоренко К.К.,<sup>1</sup> Рошаль Д.С.,<sup>1</sup> Мартин М.,<sup>2</sup> В. Молл,<sup>2</sup> Рошаль С.Б.,<sup>1</sup>  
Багдигян С.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ЮФУ, г. Ростов-на-Дону, Россия,

<sup>2</sup>Университет Монпелье, г. Монпелье, Франция

e-mail: fedorenkokiri@bk.ru

В настоящее время все острее становится проблема диагностики раковых заболеваний. Также всё очевиднее становится необходимость автоматизации и компьютеризации исследования образцов тканей на наличие раковых клеток.

Данное исследование посвящено моделированию топологии эпителиальных монослоев, а также поиску различий в упорядочении раковых и здоровых клеток. Основные задачи работы: создать модель, описывающую структуры раковых и здоровых монослоев клеток; проверить нарушается ли топологическая инвариантность (сохранение среднего числа соседей у клеток) при гиперпролиферации раковых клеток; сравнение топологии монослоев здоровых (HCEp1C) и поражённых раком (HeLa) клеток шейки матки человека.

В ходе исследования было проанализировано более 150 фотографий эпителиальных монослоев раковых (HeLa) и здоровых (HCEp1C) клеток, при этом на каждой фотографии было до 2000 клеток. Для обработки столь большого объема данных была разработана программа на языке Python. Она накладывает триангуляцию Делоне на центры ядер клеток эпителиального монослоя и строит разбиение Вороного. Она позволяет найти распределение клеток по числу их соседей, а также посчитать площади клеток, как площади ячеек Вороного.

Так же было проведено моделирование клеточной топологии. Был разработан алгоритм случайной упаковки клеток для оценки влияния гиперпролиферации на топологию эпителиального монослоя. Чтобы построить случайные полигональные упаковки, необходимо случайным образом распределить точки с минимально допустимым расстоянием между ними,  $d_{min}$ . Точки случайным образом и последовательно вставляются в основную область с областью  $A_r$ . Если расстояние между точкой, которая в данный момент размещается, и любой из ранее размещенных точек меньше расстояния  $d_{min}$ , то эта точка удаляется, и случайная вставка повторяется. Когда достигается желаемое число  $N$ , вставка прекращается. Оказалось, что модель случайных упаковок хорошо описывает топологию ракового монослоя (HeLa).

Для моделирования более упорядоченного здорового эпителия после случайного распределения точек с минимально допустимым расстоянием между ними производилась минимизация энергии упругой деформации монослоя:

$$E = \sum_{i=1}^N (A_i - A_i^0)^2 + \zeta \left( P_i - q \sqrt{A_i^0} \right)^2 \quad (1)$$

где  $N$  – число ячеек Вороного (клеток),  $A_i$ ,  $A_i^0$  и  $P_i$  – текущая и начальная площадь и текущий периметр  $i$ -ой ячейки, соответственно. Первый член связан с несжимаемостью

клетки, а второй член, ответственен за энергию “прилипания” клеток друг к другу и за силы поверхностного натяжения в оболочке клетки.

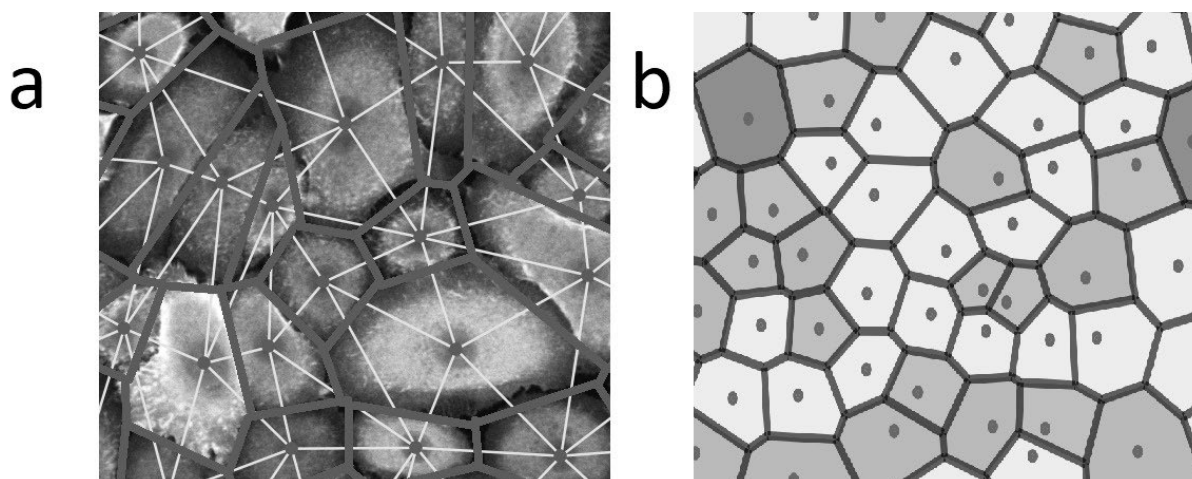


Рис. 1 – Микрофотография (а) и модель (б) монослоя клеток HСerEpiC. На образец (а) наложена триангуляция Делоне, вершины которой совпадают с ядрами клеток, показанная белыми тонкими линиями. Границы между ячейками показаны серым цветом. Модельная структура на панели (б) показана с помощью разбиения Вороного. Она получена путем минимизации модельных энергий упругого межклеточного взаимодействия (1). Наиболее светлым оттенком показаны клетки, имеющие 6 соседей.

Таким образом, создана модель, описывающая структуру как менее упорядоченных эпителиальных монослоев (HeLa), так и более упорядоченных (HСerEpiC). Было показано, что раковый монослой нарушает топологическую инвариантность в отличие от здорового эпителия, что подтверждает модель случайных упаковок. Используя энергию (1), можно более реалистично моделировать нормальный пролиферативный эпителий, в частности эпителий HСerEpiC. Поскольку многие виды рака имеют эпителиальное происхождение, результаты работы могут оказаться критически важными для изучения эпителиальных тканей во время неопластической трансформации.

### Литература

1. Roshal, D. S., Martin, M., Fedorenko, K. K., Molle, M., Rochal, S. B., & Baghdiguian, S. Cancer cell hyper-proliferation disrupts the topological invariance of epithelial monolayers. Biorxiv, 2021 <https://doi.org/10.1101/2021.08.12.455991>
2. Roshal D. S., Azzag K., Le Goff E., Rochal S.B., Baghdiguian S. Crystal-like order and defects in metazoan epithelia with spherical geometry // Scientific Reports. 2020. Т. 10. № 3. p. 1-11.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ЖЁСТКОСТИ НАНОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР КРЕМНИЕВОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ С УЧЁТОМ НЕРОВНОСТИ

Демидов С.О.<sup>1,2</sup>, Шарапов А.А.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>АО«НИИ молекулярной электроники», Зеленоград, Россия

<sup>2</sup>МФТИ (НИУ), Москва, Россия

E-mail: demidov.so@phystech.edu

Данная работа посвящается исследованию плавниковой наноструктуры по части механических свойств, особое внимание уделяется изменению ее поведения при наличии неровности боковых граней, так называемой шероховатости. Исследования в данной области ведутся в трех направлениях: изучение особенностей проявления шерохо-

ватости во время формирования наноструктур, разработка методов оценки величины шероховатости и моделирование, которому посвящается эта работа [1]. Кроме того, при переходе к поперечным размерам наноструктур ниже 100 нм вопрос управления шероховатостью стоит всё острее, так как увеличивается влияние геометрических неравномерностей на электрофизические параметры устройств [2, 3]. Также при уменьшении соотношения ширины к высоте плавниковых структур (они используются в FinFET) начинают всё более заметно проявляться пластические свойства [4, 5]. Мы задались целью с помощью численного моделирования оценить, приводит ли неровность наноструктур к изменению поведения структуры типа "плавник" под воздействием внешней постоянной механической силы.

При выполнении работы была построена геометрия плавниковой наноструктуры, аналогичная геометрии FinFET, в качестве материала использовался монокристаллический кремний. Исследуемая структура обладает следующими параметрами: при постоянной ширине плавника, равной 8 нм, мы будем варьировать значение его высоты от 8 до 50 нм, получая, таким образом, различное соотношение ширины и высоты, то есть форм-фактора. Механическую силу прикладываем перпендикулярно боковой грани, что имитирует латеральную компоненту воздействия технологических процессов. Данные вычисления проводятся для различных значений относительной амплитуды шероховатости (рис. 1).

В целом получается, что чем выше амплитуда шероховатости, тем менее жесткой становится структура. Это согласуется с тем, что неравномерность ширины означает наличие областей, в которых поперечное сечение меньше, то есть меньше самих кристаллических связей, обеспечивающих противодействие внешним напряжениям. Кроме того, хуже перераспределяется напряжение между соседними частями плавникового элемента, то есть такие зоны являются определяющими в части надежности приборов на основе рассматриваемых структур. Полученные особенности зависимости жесткости от форм-фактора могут быть частично объяснены проявлением пластических свойств наноструктуры.

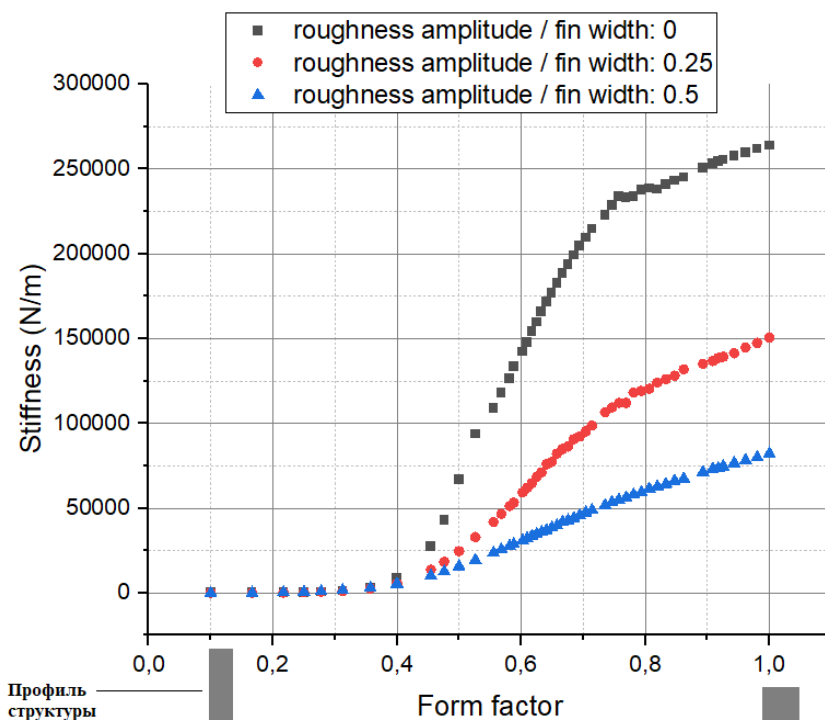


Рис. 1. Результаты расчёта жёсткости кремниевой наноструктуры типа «плавник» для фиксированных значений амплитуд шероховатости

**Литература**

1. Демидов С.О., Шарапов А.А. Моделирование изгиба кремниевой плавниковой наноструктуры. Сборник тезисов конференции МФТИ-64.
2. Бокарев, В. П. Влияние поверхности на свойства макро-и нанокристаллов / В. П. Бокарев // Кристаллография. – 2000. – Т. 45. – № 3. – С. 568-572.
3. Leung G. et al. Device-and circuit-level variability caused by line edge roughness for sub-32-nm Fin FET technologies // Electron Devices, IEEE Transactions on 2012. Т. 59. No 8. С. 2057–2063.
4. Красников, Г. Я. Возможности микроэлектронных технологий с топологическими размерами менее 5 нм / Г. Я. Красников // Наноиндустрия. – 2020. – Т. 13. – № S5-1(102). – С. 13-19. – DOI 10.22184/1993-8578.2020.13.5s.13.19.
5. Герасименко Н., Волоховский А., Запорожан О. Учет особенностей изменения свойств материала в технологии кремниевых наноструктур. М.: Нанотехнологии, 2017.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ  
СФЕРИЧЕСКОЙ КВАРЦЕВОЙ ЧАСТИЦЫ**

Ерина Ю.Ю.

*Тюменский ГУ, Институт мат-ки и компьютерных наук, Тюмень, Россия*

*E-mail: erina.yulya@inbox.ru*

Люминесцентное свечение – нетепловое стимулированное свечение некоторых веществ [1], позволяющее многосторонне исследовать их структуру и свойства. Анализируя характеристики люминесценции минералов, получают информацию о строении их кристаллической решетки, в том числе о наличии дефектов и примесей. Для природных веществ, извлеченных из толщи горных пород, по люминесценции оценивают свойства естественного радиационного поля, а также возраст пород точки пробоотбора и возраст самого образца [2].

Термолюминесцентный (ТЛ) метод, – наиболее простой и доступный среди люминесцентных методов, не получил большого распространения из-за избирательности действия. Авторы [1] отмечают, результаты ТЛ-исследований нередко противоречат другим работам или оказываются нефизичными. Одна из возможных причин избирательности метода вероятно [3] связана с использованием несовершенной математической модели самого явления. Классические модели, предложенные еще в 80х годах прошлого века, имеют либо эмпирическое происхождение, либо получены путем многократного упрощения общей модели [4].

Развитие современных программных пакетов и численных методов позволяет проводить цифровые исследования, в том числе таких сложных явлений, как люминесценция. В работе представлены результаты исследований, в рамках которых моделировалась термолюминесценция сферической частицы минерала, на примере природного кварца.

Показано, что на форму графика интенсивности ТЛ-сигнала влияет неравномерность теплопереноса внутри частицы. В отсутствии контроля скорости нагрева, а также размера песчаной фракции, частица прогревается не мгновенно, из-за чего в ее кристаллической решетке образуются неравномерности электронной плотности и люминесценция у центра сферы замедляется. Это отражается на форме ТЛ-сигнала и без учета тепловой задачи может быть ошибочно обосновано особенностями структуры образца. Моделирование проводилось в среде MatLab посредством численного решения систем дифференциальных уравнений, описывающих изменение электронной плотности в кристаллической решетке частицы [3]. Система решалась совместно с уравнением теплопроводности с центральной симметрией. В работе предложен безразмерный па-

раметр подобия, позволяющий оценивать необходимость моделирования тепловой задачи в заданной постановке ТЛ-эксперимента: чем ниже значение параметра  $K$ , тем больше вероятность неравномерности теплопереноса в частице.

$$k = \frac{C}{vR^2}$$

где  $C$  – некоторая константа, имеющая размерность  $Kc^{-1}m^{-2}$ ;  $v$  – скорость нагрева,  $K/c$ ;  $R$  – радиус частицы,  $m$ .

Исследование цифровой модели термолюминесценции сферической частицы позволило найти одну из возможных причин избирательности действия ТЛ-метода. Предложенный подход позволяет всесторонне совершенствовать его методику, и кроме того, благодаря универсальности, подход применим в других люминесцентных методах.

### Литература

1. Кюри Д. Люминесценция кристаллов / пер. с фр. Н. М. Лозинской ; под ред. [и с предисл.] Н. А. Толстого. М., 1961.
2. Шейнкман В. С. Проблема Абсолютного Датирования Четвертичных Геоморфологических Комплексов Сибири // География и природные ресурсы. 2013. No. 4. С. 18-27.
3. Шейнкман В. С., Ерина Ю. Ю., Симонов О. А. Численное моделирование воздействия радиоактивного излучения на кварц с дефектами кристаллической структуры и анализ термолюминесцентного сигнала // Вестник Тюменского государственного университета. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. 2020. Т. 6. No. 4 (24). С. 158–178.
4. Bos A. J. J. Theory of thermoluminescence // Radiation Measurements. 2007. No. 41. Pp. 45-56.

## АЛГОРИТМЫ КОЛОРИМЕТРИЧЕСКОГО АНАЛИЗА

Назарук С.А.

*МГУ им. М. В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*  
*E-mail: nazarukstanislav@gmail.com*

В настоящее время в лабораторной клинической диагностике используют стандартные методы прямого анализа биохимических материалов, которые подразумевают наличие лаборатории со специализированным оборудованием. Однако все большее применение находят портативные приборы, позволяющие осуществить анализ неинвазивными методами, что существенно облегчает процесс анализа. Один из таких методов основывается на колориметрическом анализе тест-полосок. Суть его заключается в том, что при взаимодействии вещества реагента с исследуемым аналитом в биологической жидкости, происходит химическая реакция, вызывающая окрашивание реагентной области. По цвету реагента при этом возможна характеристика концентрации исследуемого аналита в биологической жидкости пациента. Считывание цветов может быть осуществлено с помощью обычной цифровой камеры, в частности, камеры телефона. Однако ввиду отсутствия жестких лабораторных условий возникает ряд проблем, связанных с анализом и обработкой получаемых данных. В частности, при фотосъёмке в реальных условиях существенным образом могут варьироваться условия освещенности, что может приводить к некорректному автоматическому определению цвета. Данная работа ставит своей задачей исследование методов обработки изображений для корректировки освещенности, оценку точности работы алгоритмов распознавания цветов, а также повышение работоспособности методов определения цвета в условиях освещенности, приближенных к реальным.



## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ НАНОЧАСТИЦ Si-Al И Si-Au МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Зеленина А.И.<sup>1,2</sup>, Гордеев И.С.<sup>1,2</sup>, Колотова Л.Н.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>МФТИ (НИУ), физтех-школа электроники, фотоники и молекулярной физики, <sup>2</sup>Объединённый ИВТ РАН, Москва, Россия  
zelenina.ai@phystech.edu

Кремниевые наночастицы, легированные золотом и алюминием, демонстрируют различные свойства, важные для создания биосенсоров, поддержания флуоресценции, высокоскоростной обработки данных, в нелинейной оптике. Все физические свойства наночастиц объясняются особенностями кристаллической структуры [1].

В данной работе было проведено исследование кристаллизации расплавленных трёхмерных частиц. В результате расчётов получены объекты, имеющие сложную зернистую структуру. Была рассчитана пороговая скорость охлаждения, необходимая для кристаллизации [2] в широком диапазоне концентрации примесных металлов. В данной работе также рассмотрены некоторые свойства кристаллической структуры.

Полученные данные согласуются с изображениями, полученными в ходе эксперимента для Si-Au наночастиц. Результаты работы позволят создавать реальные объекты с физическими свойствами, заданными наперёд. Все расчёты проведены с использованием нового потенциала (разработанного для пакета LAMMPS [3]), который был создан в 2020 году и корректно описывает подобные системы [4].

**Литература**

1. Larin A.O.[et al.] Plasmonic nanosponges filled with silicon for enhanced white light emission // *Nanoscale*. 2020. V. 12. P. 1013–1021.
2. Makarov S. [et al.] Resonant silicon nanoparticles with controllable crystalline states and nonlinear optical responses // *Nanoscale*. 2018. V. 10. P. 11403–11409.
3. Plimpton S.J. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // *Journal of Computational Physics*. 1995. V. 117. P. 1-19.
4. Starikov S. [et al.] Optimized interatomic potential for study of structure and phase transitions in Si-Au and Si-Al systems // *Computational Materials Science*. 2020. V. 184. P. 109891.

## ФРАКТАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ ШЕРОХОВАТОСТИ ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННЫХ НАНОКЛАСТЕРНЫХ Ag/AU ПЛЕНОК

Бухаров Д. Н., Абрамов А.С.

*Владимирский ГУ им. А.Г. и Н.Г. Столетовых, институт прикладной математики и физики и информатики, Владимир, Россия  
E-mail: buharovdn@gmail.com*

Нанокластерные пленки комплексов серебра (Ag) и золота (Au) находят применение как материалы с уникальными свойствами, с возможным применением, например, для нужд современной биологии, нанoeлектроники и оптофотоники [1-3]. Шероховатость - важная характеристика, которая дает возможность задавать наперед новые уникальные свойства наноструктурированной поверхности, например, такие как твердость, трение, аэродинамическое и гидродинамическое сопротивление и др. Лазерные методы синтеза образцов нанокластерных пленок позволяют добиться в них требуемых свойств за счет контролируемая генерация их рельефа и шероховатости. Для оценки синтезированного рельефа или его прогноза удобно использовать аппарат математического моделирования.

В данной работе рассмотрены результаты исследований лазерно-индуцированных нанокластерных Ag/Au пленок. Исследуемые образцы были получены методом термодиффузионного осаждения на стеклянную подложку из предварительно приготовленного коллоидного раствора наночастиц золота и серебра в концентрации 50:50 [4]. Синтезированные в результате лазерного воздействия нанопленки благородных металлов (Ag, Au, их комплексы) на стеклянной подложке исследовали с помощью растрового электронного микроскопа Quanta 200 3D и зондовой нанолаборатории Integra-Aura. Анализируя динамику формирования их рельефа, было обнаружено, что их форма и особенности топологии существенно зависят от количества проходов пучка излучения по области осаждения. Например, для образцов Ag/Au на стеклянной подложке, полученных при использовании лазера мощностью 2,5 Вт со скоростью перемещения пучка 1,2 мм/с (рис. 1) уже после 5 сканирований средняя высота рельефа составляла величину 14 нм (рис. 1а). Более того, после 10 проходов пучка излучения (рис. 1б) площадь нанокластеров значительно увеличилась, а средняя высота рельефа составила уже величину 18 нм.

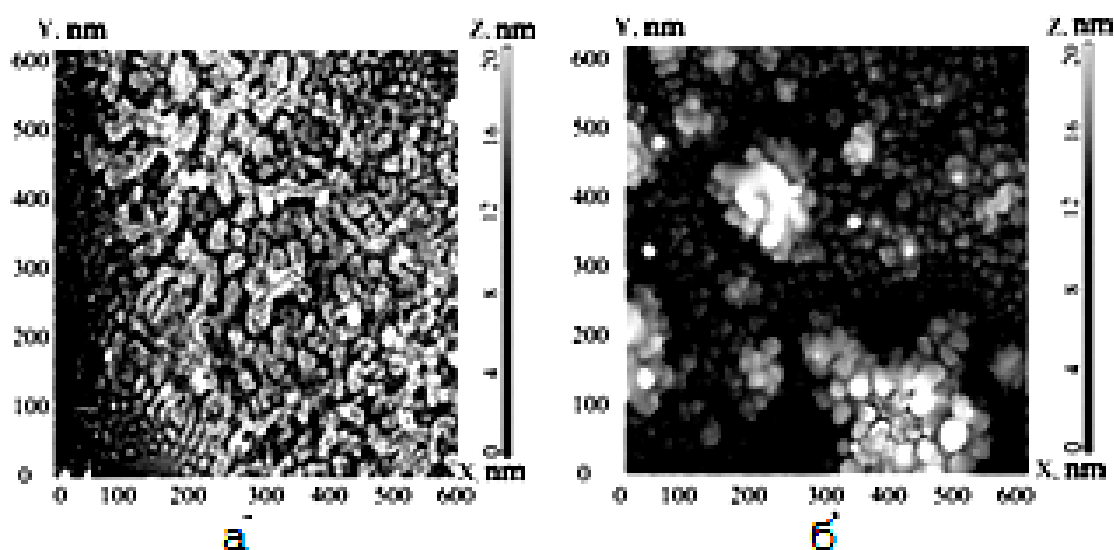


Рис. 1. АСМ-изображения структур Ag/Au после 5 (а), 10 (б) проходов

Для изображений образцов Ag/Au показатель Херста ( $H$ ) оценивался как  $H=2-D$ , где  $D$  – размерность хаусдорфа ( $D$ ), вычисленная по методу boxcounting [5]. Так, для образцов из рис.1 значения  $H$  составили величины 0,1321 (рис. 1а) и 0,1297 (рис.1б).

Для полученных величин показателя Херста проводилось моделирование шероховатых поверхностей, основанное на реализации алгоритма смещения средней точки. Этот алгоритм [6] реализуется рекурсивно в два этапа. На первом этапе исходная плоскость, представленная квадратом, делится на четыре меньших, путем добавления одной вершины в середину с последующим ее смещением на нормальную гауссову случайную величину. Эта процедура рекурсивно повторяется для каждого подквадрата, затем для всех их потомков и так далее. На втором этапе вычисляются точки на краях исходного квадрата. Квадрат виртуально поворачивается на угол  $45^{\circ}$  и вычисляются значения точек [6].

На рис. 2 показана модель шероховатой пленки, полученная на основе указанного выше алгоритма для показателей Херста, аналогичных показанным на рис. 1. На рис. 2а показана двухмерная модель, на рис. 2б - трехмерное изображение в относительных единицах.

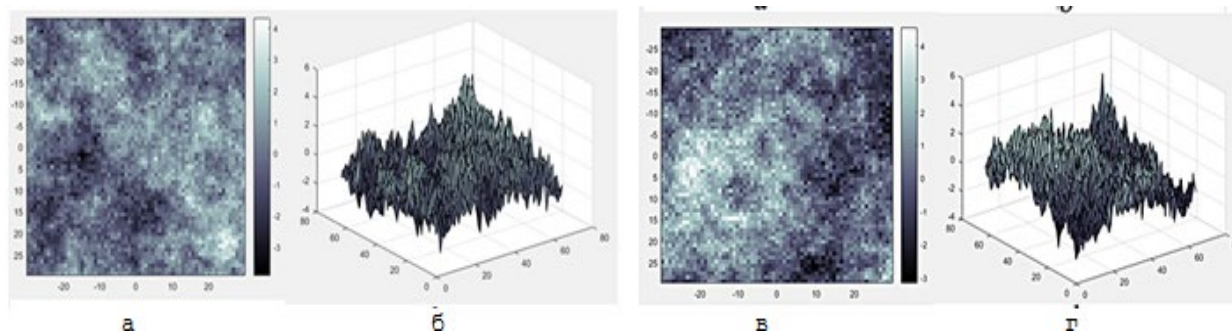


Рис. 2. Модель шероховатой пленки на основе алгоритма смещения средней точки:  $H = 0,1321$ ,  $2d$  (а),  $3d$  (б),  $H = 0,1279$ ,  $2d$  (в),  $3d$  (г)

Таким образом, предложенный подход может быть полезен для задач синтеза материалов с требуемыми свойствами. Рассмотренные модели носят случайный характер, но допускают оценку адекватности по результатам экспериментов в смысле сравнения показателей Херста. Совпадение модельных параметров и измеренных величин позволяет получить адекватное совпадение свойств, зависящих от топологии поверхности для модели и реального образца.

### Литература

1. Cobley C.M., Chen J., Cho E.C., Wang L.V., and Xia Y. Gold nanostructures: a class of multifunctional materials for biomedical applications // *Chem. Soc. Rev.* 2011. Vol.40. № 1. PP. 44–56.
2. Sun J., Jin Y. Fluorescent Au nanoclusters: recent progress and sensing applications // *J. Mater. Chem. C.* 2014. 2. 38. PP. 8000–8011.
3. Перов Е. В., Петина О. Н. Использование наноматериалов в наноэлектронике // *Stud-Net.* 2020. №8. С 484-489.
4. Kucherik A. O. et al. Laser deposition of bimetallic island films// *J. Phys.: Conf. Ser.* 2016. №737.
5. G Gonzato A practical implementation of the box counting algorithm//*Computers & Geosciences.* 1998. Vol. 24. №1.
6. Никулин Е. А. Исследование фрактальных полилиний // *Труды НГТУ им. П. Е. Алексеева.* 2018. №3 (122).С. 23-31.

## ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ЗНАЧЕНИЙ АТМОСФЕРНОГО ДАВЛЕНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕХНОЛОГИЙ АНАЛИЗА БОЛЬШИХ ДАННЫХ

Черных Е.А.

*МГУ им. М. В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*  
*e-mail: chernykh.ea18@physics.msu.ru*

На сегодняшний день одной из самых актуальных задач является анализ больших объемов данных (Big Data), качественная обработка которых требует больших вычислительных мощностей. Для этого разрабатываются специальные алгоритмы, которые дают возможность проводить анализ на нескольких машинах одновременно. Такой подход позволяет извлекать ценную информацию, которую и не предполагалось получить ранее, строить прогнозы и оценивать параметры по результатам их измерений.

В данной работе проводится моделирование атмосферных процессов на разных масштабах времени в рамках единой регрессионной модели. Исследуется временной ряд показателей атмосферного давления на территории заповедника во Вьетнаме (ме-

теорологическая станция "AsiaFlux" [3]) за период с 2016 по 2020 годы, измерения проводились ежедневно через каждые 30 минут.

Рассматривается временной ряд, состоящий из  $n$  измерений,  $y_i$  – это  $i$ -е измерение, соответствующее значению параметра  $x_i$ ,  $i = 1 \dots n$ . Строится регрессионная модель вида  $y_i = a_1 f_1(x_i) + \dots + a_m f_m(x_i) + \varepsilon_i = F(x_i)a + \varepsilon_i$ ,  $E(\varepsilon_i) = 0$ ,  $D(\varepsilon_i) = \sigma^2$ , где  $F(x) = (f_1(x), \dots, f_m(x))$ ,  $a = (a_1, \dots, a_m)^T$  – вектор-строка и вектор-столбец, содержащие  $m$  функций, которыми будет производиться аппроксимация, и коэффициенты перед ними соответственно. Коэффициенты оцениваются с помощью метода наименьших квадратов [1] в сочетании с методом накопления «канонической информации» [2]  $(T, v, V, n)$ , где  $T = \sum_{i=1}^n F^T(x_i)F(x_i)$ ,  $v = \sum_{i=1}^n F^T(x_i)y_i$ ,  $V = \sum_{i=1}^n y_i^2$ . На основании этих данных получается оценка коэффициентов регрессии  $\hat{a} = T^{-1}v$ , функции  $\widehat{f}(x) = \widehat{a}_1 f_1(x) + \dots + \widehat{a}_m f_m(x) = F(x)T^{-1}v$ , которая аппроксимирует исходный временной ряд, и коридора погрешности этой функции  $D\widehat{f}(x) = \frac{v - v^T T^{-1} v}{n - m} F(x)T^{-1} F^T(x)$ .

Заметим, что если разделить временной ряд на две части, которые состоят из  $n_1$  и  $n_2$  измерений соответственно, то для каждой из них можно получить совокупность величин  $(T_i, v_i, V_i, n_i)$ ,  $i = 1, 2$ . Каждая из этих величин занимает фиксированный объём в памяти компьютера, не зависящий от числа измерений. Просуммировав совокупности, мы получаем новый набор  $(T_1 + T_2, v_1 + v_2, V_1 + V_2, n_1 + n_2)$ , который описывает оба отрезка ряда одновременно, и этих данных вполне достаточно для нахождения аппроксимирующей функции. Таким образом, операция выделения канонической информации позволяет распределить исходные данные на несколько устройств, после чего собрать полученную информацию на одном компьютере и завершить обработку на нём. Кроме того, метод позволяет оперативно добавлять новые измерения.

Исходный временной ряд обладает ярко выраженной сезонностью, поэтому для описания годовых колебаний выбраны периодические функции вида синус и косинус, причём до третьей гармоники включительно (Рис.1). Кроме того, учтены изменения давления в течение суток одновременно с годовыми в одной модели (Рис. 2). Линия тренда аппроксимируется полиномом второй степени. Конечная функция имеет вид:

$$f(x) = \sum_{j=0}^2 a_j x^j + \sum_{k=1}^3 \left( b_k \cos\left(\frac{2\pi k}{T_y} x\right) + c_k \sin\left(\frac{2\pi k}{T_y} x\right) \right) + \sum_{l=1}^2 \left( d_l \cos\left(\frac{2\pi l}{T_d} x\right) + g_l \sin\left(\frac{2\pi l}{T_d} x\right) \right)$$

Здесь  $T_y, T_d$  – периоды, соответствующие году и дню.

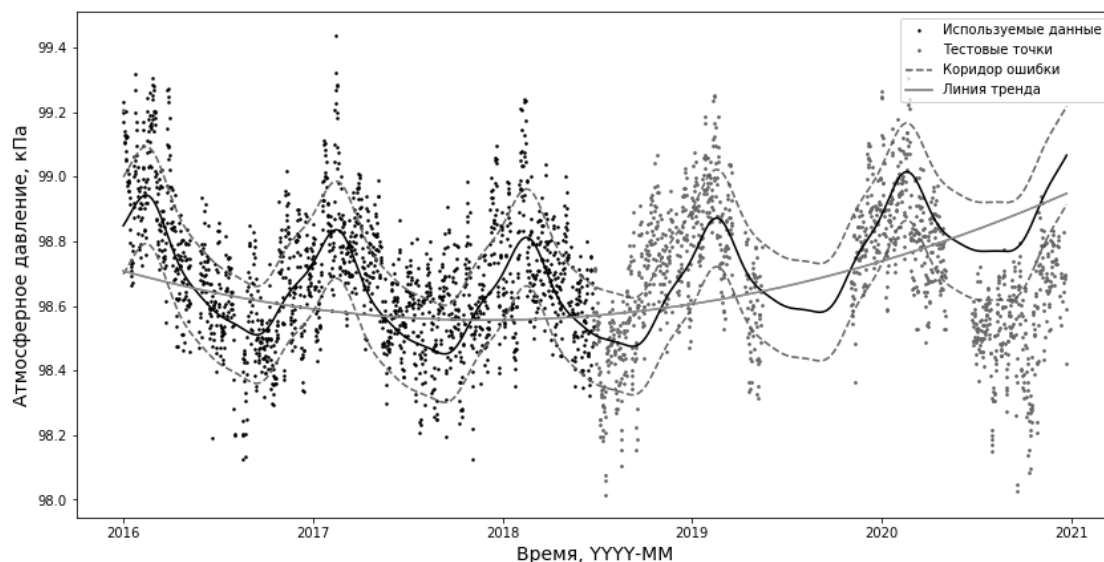


Рис. 1. Прогноз атмосферного давления в масштабе нескольких лет

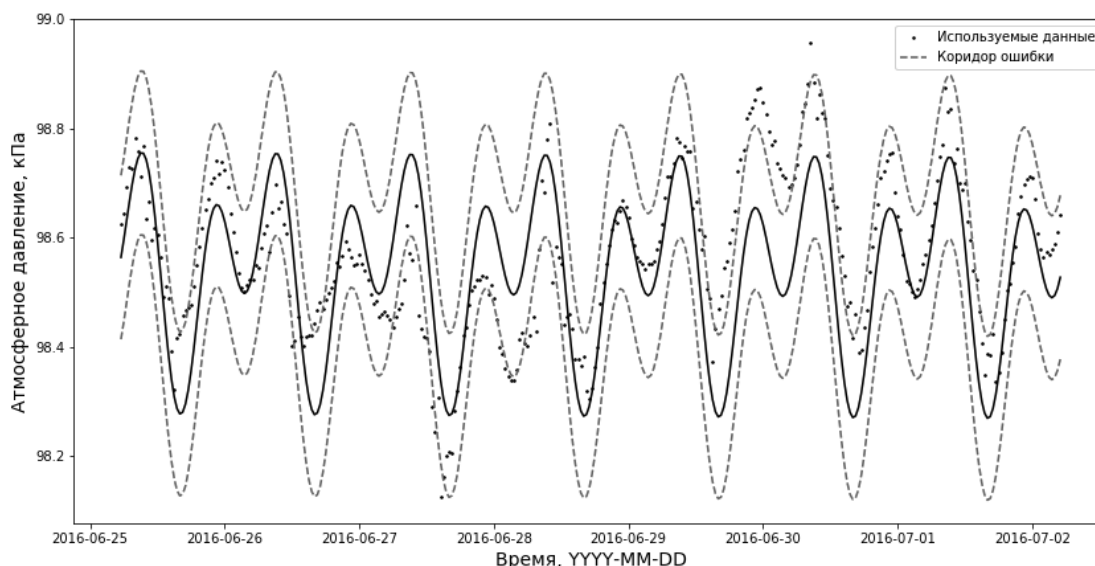


Рис. 2. Аппроксимация значений атмосферного давления в масштабах недели

Полученные графики наглядно демонстрируют, что выделенная информация позволяет явно оценивать медленный тренд, годовую периодичность, суточный профиль, строить прогноз и оценивать пропущенные значения во временном ряду, обусловленные несовершенством применяемой аппаратуры. Кроме того, полученное приближение позволяет заметить отклонения различной природы (например, погодные) на регулярном фоне.

### Литература

1. Горяинов В. Б. и др. Математическая статистика. М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана. 2001.
2. Golubtsov P. V. The concept of information in big data processing // Automatic Documentation and Mathematical Linguistics. – 2018. – Т. 52. – №. 1. – С. 38-43.
3. [http://asiaflux.net/index.php?page\\_id=86](http://asiaflux.net/index.php?page_id=86) (Сайт метеорологической станции AsiaFlux)

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ РОСТА ПУЗЫРЬКОВ В ВОДЕ С РАСТВОРЕННЫМ ГАЗОМ CO<sub>2</sub>

М.А. Ямщикова, В.М. Ямщиков

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г.Саров Нижегородской обл.

При работе сложных технических систем может происходить нагрев элементов конструкции. Одним из способов устранения этой проблемы является жидкостное охлаждение. Наличие растворенного газа в жидкости и перепада давления в системе охлаждения способствует образованию газовых пузырьков. В связи с этим необходимо изучить динамику роста пузырьков в объеме жидкости.

На примере пузырьков, образующихся в газированных напитках, исследован их рост. Изучение именно такого случая связано с несколькими причинами. Во-первых, динамика роста пузырьков в газированных напитках ни чем не отличается от случаев, когда в воде растворены любые другие газы. Во-вторых, за счет быстрого увеличения их размера, время численного расчета задачи намного меньше, чем для других растворенных газов. В третьих, это достаточно наглядный пример, который можно наблюдать в «домашних» условиях.

В работе рассмотрены два механизма роста газовых пузырьков в объеме жидкости с растворенным газом CO<sub>2</sub>. Первый механизм описывает рост пузырьков, образующихся

на стенке резервуара. Второй механизм описывает рост пузырьков, всплывающих в объеме жидкости [1].

### Литература

1. Чернов А.А., Пильник А.А. Особенности роста газовых пузырьков в высоковязком газонасыщенном растворе // Современная наука. 2013. № 1 (12). С. 446-451.

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ САМОСБОРКИ ПЛИТКИ ДНК ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ РЮКЗАКА

Барашов Е.Б.

*МГУ им. М. В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*  
*Институт проблем управления им. В. А. Трапезникова РАН, Москва, Россия*  
*E-mail: barashov.eb@gmail.com*

Задача о Рюкзаке является частным случаем многокритериальной комбинаторной оптимизации. Это NP-полная проблема в ее общем виде. Кроме того, в многокритериальном случае сообщается о многих реальных приложениях, связанных с составлением бюджета капитальных вложений, планированием восстановления загрязненных участков световых станций, проблемами перемещения, возникающими в биологии сохранения. В течение нескольких десятилетий в литературе исследовалось несколько эвристических и точных подходов к определению эффективного набора или уменьшенного эффективного набора для многокритериальной задачи рюкзака. Поскольку компьютеры имеют очевидные ограничения в хранении, скорости и интеллекте, появились методы вычисления ДНК, особенно для их эффективного параллелизма. В последнее время многие исследователи продемонстрировали, что вычисления с помощью самосборки ДНК-плиток могут быть масштабируемыми, и это рассматривается как перспективный метод в нанотехнологиях.

В то время как самосборка плитки ДНК страдает от высокой частоты ошибок, возможными источниками этих явлений являются либо ошибка в построении плиток, либо неправильное связывание плиток. Необходимо ввести методы контроля и исправления ошибок. Многие экспериментальные результаты в самосборке ДНК-плиток не апеллировали к преимуществам роста кристаллов; однако эти ранние работы по основам самосборки и физические экспериментальные доказательства реальных кристаллов ДНК-плиток предполагают светлое будущее для самосборки ДНК-плиток. Область нанотехнологий имеет огромные перспективы, но многие технические препятствия должны быть преодолены, прежде чем алгоритмическая самосборка ДНК-плиток может быть превращена в практическую коммерческую технологию. Если молекулами и супрамолекулами можно управлять по желанию, то, возможно, удастся добиться значительно лучшей производительности для компьютеров и памяти. Таким образом, мы видим, что модель самосборки ДНК-плитки имеет различные применения во многих областях, а также может открыть множество других применений в материаловедении, медицине, биологии и других областях. В том числе в результате реализации проекта необходимо будет решить задачу о том, как процесс самосборки ДНК может быть использован для решений задачи о Рюкзаке, о возможности приложения которой было сказано выше.

Работа выполнена при поддержке фонда Базис, грант № 21-2-9-37-1.

### Литература

1. Wang Y. et al. DNA tile assembly model for 0–1 knapsack problem //2010 IEEE Fifth International Conference on Bio-Inspired Computing: Theories and Applications (BIC-TA). – IEEE, 2010. – С. 180-184.

2. Cheng Z. et al. Implementation of the Multidimensional Knapsack Problem Using Self-Assembly of DNA Tiles //Journal of Computational and Theoretical Nanoscience. – 2010. – Т. 7. – №. 10. – С. 2122-2132.
3. Cui G. et al. Application of DNA computing by self-assembly on 0-1 knapsack problem //International Symposium on Neural Networks. – Springer, Berlin, Heidelberg, 2009. – С. 684-693.
4. Cheng U. et al. Solving the 0–1 multi-objective knapsack problem using self-assembly of DNA tiles //2009 Fourth International on Conference on Bio-Inspired Computing. – IEEE, 2009. – С. 1-9.
5. Yang J. et al. Search computing model for the knapsack problem based on DNA origami //Materials Express. – 2019. – Т. 9. – №. 6. – С. 553-562.

## ЭЛЕКТРОННЫЕ И ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГАЗОГИДРАТОВ: РЕЗУЛЬТАТЫ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

Юнусов М.Б.<sup>1</sup>, Хуснутдинов Р.М.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Казанский (Приволжский) ФУ, Институт физики, Казань, Россия

<sup>2</sup>УФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия

E-mail: mukhammadbek@mail.ru

Для энергетической отрасли большой интерес представляют кристаллические соединения, называемые гидратами. Это вещества переменного состава, клатратная решетка которых образована молекулами воды. В полостях решетки могут быть заключены молекулы низкомолекулярных газов. Содержание огромных запасов природного газа в составе гидратов ( $10^{14} - 10^{18} \text{ м}^3$ ) делает их привлекательным энергетическим источником. К тому же, при разработке традиционных месторождений газа возникает проблема гидратообразования – газ в газопроводах отлагается на стенках труб в виде гидратов и закупоривает их. Это приводит к необходимости исследований физических, химических, термодинамических и электронных свойств гидратов.

В настоящей работе из первых принципов исследуются электронные и теплофизические свойства гидрата метана при кристаллических конфигурациях sI и sH. Моделирование выполнялось в изотермически-изохорическом (NVT)-ансамбле для температурной области  $T=[180; 260]\text{K}$  с шагом по температуре  $\Delta T=20 \text{ K}$ . Для установления состояния термодинамического равновесия был применен термостат Нозе-Гувера. Во избежание нежелательных поверхностных явлений и эффекта конечномерной системы, на моделируемую систему по всем направлениям были наложены периодические граничные условия. Базисный набор состоял из плоских волн, электрон-ионное взаимодействие осуществлялось с помощью ультрамягких сглаженных псевдопотенциалов, обменно-корреляционная энергия была рассчитана в рамках обобщенно-градиентного приближения [1,2]. Впервые были рассчитаны средние значения теплоемкости для незаполненных водных каркасов с конфигурациями sI и sH, которые составили  $3007 \pm 152 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{K})$  и  $3093 \pm 12 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{K})$  соответственно. Установлено хорошее согласие с экспериментальными данными [3,4], которые оказались ожидаемо близки к теплоемкости льда. Расчетные значения теплоемкости для гидрата метана с конфигурациями sI и sH составили  $2362 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{K})$  и  $2569 \pm 77 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{K})$  соответственно. Экспериментальное значение теплоемкости природных гидратов метана составляет  $2200 \pm 100 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{K})$ , что хорошо согласуется с расчетным значением для ячейки sI. Этот факт подтверждает информацию о том, что большинство газогидратов в природе находятся в состоянии sI. На основе равновесных параметров решетки оценены плотности систем sI+метан ( $912 \text{ кг}/\text{м}^3$ ) и sH+метан ( $898 \text{ кг}/\text{м}^3$ ), которые хорошо согласуются с экспериментальными данными [4].

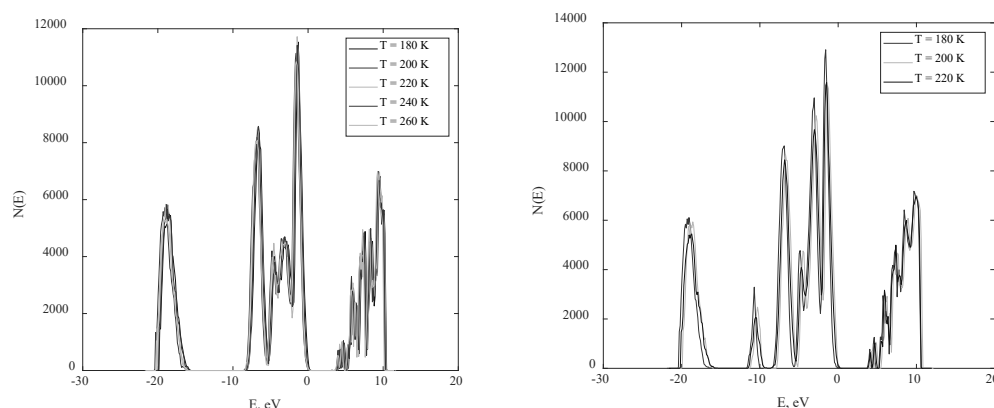


Рис. 1. Плотность электронных состояний пустого каркаса sH (слева) и заполненного метаном каркаса sH (справа).

Детальное исследование электронных свойств гидрата метана выполнено на основе расчета плотности электронных состояний  $N(E)$  и зонной структуры  $E(\mathbf{k})$ . Установлено повышение уровня Ферми, а также верхней и нижней границы запрещенной зоны с ростом температуры. При сравнении плотности электронных состояний  $N(E)$  для пустого и заполненного каркасов sH (рис.1), во втором случае обнаруживается пик электронной плотности при энергии  $-10\text{eV}$ . Наблюдаемое смещение электронной плотности в область низких энергий при включении молекул газа в полости, указывает на снижение энергии ячейки, что приводит к стабилизации каркаса газогидрата.

Крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета. Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект № 22-22-00508).

### Литература

1. Kresse G, Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys Rev B Condens Matter*. 1996 Oct 15;54(16):11169–11186.
2. Takeuchi F, Hiratsuka M, Ohmura R, Alavi S, Sum AK, Yasuoka K. Water proton configurations in structures I, II, and H clathrate hydrate unit cells. *J Chem Phys*. 2013 Mar 28;138(12):124504.
3. W. F. Waite, L. A. Stern, S. H. Kirby, W. J. Winters, D. H. Mason, Simultaneous determination of thermal conductivity, thermal diffusivity and specific heat in sI methane hydrate, *Geophysical Journal International*, Volume 169, Issue 2, May 2007, Pages 767–774.
4. Истомин В.А., Якушев В.С. Газовые гидраты в природных условиях. М: Недра. 1992.