

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

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



Международный  
молодежный научный форум

**“ЛОМОНОСОВ–2023”**

Секция **“ФИЗИКА”**

Подсекция  
**“МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ”**

**Сборник тезисов докладов**

МОСКВА  
Физический факультет МГУ  
2023

**XXX Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых по фундаментальным наукам «Ломоносов—2023». Секция «Физика». Сборник тезисов.** — М. Физический факультет МГУ, 2023, 1052 с.

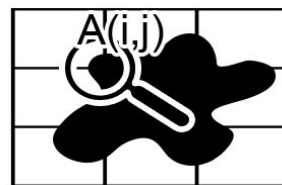
ISBN 978-5-8279-0255-3

Секция «Физика» включает следующие подсекции

1. Акустика
2. Астрофизика
3. Атомная и ядерная физика
4. Биофизика
5. Геофизика
6. Математика и Информатика
7. Математическое моделирование
8. Медицинская физика
9. Молекулярная физика
10. Нелинейная оптика
11. Оптика
12. Радиофизика
13. Сверхпроводящие и электронные свойства твердых тел
14. Твердотельная наноэлектроника
15. Теоретическая физика
16. Физика космоса
17. Физика магнитных явлений
18. Физика твердого тела
19. Школа МГУ «Фотонные и квантовые технологии. Цифровая медицина»:
  - Квантовые технологии
  - Фотонные технологии
  - Цифровая медицина

ISBN 978-5-8279-0255-3

© Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 2023 г.



Моделирование временных рядов геофизических величин с применением разработанного программного комплекса.....	251
Арзангулян М.Э. ....	251
Задача быстрогодействия обхода нескольких точек машиной Дубинса .....	252
Атуова А.М. ....	252
Решение прямой задачи механики для гармонических движений тренажера численными методами .....	254
Бадяева В.К. ....	254
Анализ полиномиальных и псевдополиномиальных разрешимых случаев NP-трудной в сильном смысле задачи минимизации максимального временного смещения .....	256
Барашов Е.Б. ....	256
Моделирование мультифрактального турбуле Математическое имитационное моделирование автономной электроэнергетической системы с ГТУ и нелинейной нагрузкой.....	257
Белкова Д.Н. ....	257
Численное решение задачи распада разрыва в случае частичного раскрытия перегородки между областями.....	258
Бирюлин Е.З., Цыбенко В.Ю., Позняк И.М., Алябьев И.А., Новоселова З.И., Федулаев Е.Д. ....	258
Геометрический анализ нелинейного уравнения теплопроводности для фотоматериалов .....	259
Блашкун М. Р. ....	259
Оптимизационный метод расчета капиллярного эффекта .....	260
Бредихин А.А. ....	261
Регрессионный и корреляционный анализ временных рядов различных параметров атмосферы .....	261
Бубнов А.С. ....	262
Моделирование геликоидальных микроструктур диоксида титана .....	263
Самышкин В.Д., Бухаров Д.Н. ....	264
Численное исследование влияния магнитного поля, создаваемого проводником с током, на магнитный скирмион .....	264
Васильев Е.В., Король А.О., Капитан Д.Ю., Рыбин А.Е., Овчинников П.А. ....	265
Исследование дифракции электромагнитных волн на зеркале со скруглёнными краями в векторном случае методами математического моделирования .....	266
Викуловская А. А. ....	266
Валидация численной модели плавления октадекана с помощью лабораторного эксперимента .....	268
Воропаев Р.А. 1,2.....	268
Разработка модели прогнозирования затопления населенных пунктов арктической территории Красноярского края.....	270
Гребнев Я. В.....	270
Определение температуры подготовки расплавов к затвердеванию с помощью методов машинного обучения.....	271
Доронина М.А., Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В. ....	271
Имитационное моделирование системы траекторного управления среднемагистрального самолета .....	273
Дружинин А.А. ....	273
Эффективная минимизация толщины поглощающей пластины в экспериментах по рассеянию электромагнитного поля методами математического моделирования .....	275
Евстафьев Е. Е. ....	275
Метод декомпозиции в задаче акустического зондирования анизотропной структуры атмосферы .....	276
Закиров М.Н.....	276
Исследование упругих свойств системы Ti–Nb–Zr методом молекулярной динамики .....	277
Зеленина А.И. <sup>1,2</sup> , Колотова Л.Н. <sup>3</sup> , Стариков С.В. <sup>4</sup> .....	277
Моделирование системы нанобъектов никеля В коллоидном растворе .....	277
Зотов А.И., Бухаров Д.Н. ....	277

Расчет пьезоэлектрического отклика представительного объема трехфазного магнитоэлектрического композита в 2D постановке .....	279
Игнатов А. А. ....	279
Моделирование и описание процесса лазерного проплавления поверхности стали .....	280
Камильянова А.А., Ладьянов В. И., Лебедев В.Г. ....	280
Электромагнитно-акустический преобразователь для бесконтактной дефектоскопии металлических конструкций .....	281
<sup>1</sup> Можайко А. А., <sup>2</sup> Королева Д.С. ....	281
Распространение терагерцового излучения в условно-свободном пространстве .....	283
Костромыкина В.В. <sup>1,2</sup> , Рогожников Г.С. <sup>2</sup> .....	283
Эффект аномального транспорта на вибрирующей поверхности и маятник Капицы .....	284
Красюков Г. А. ....	284
Численное исследование влияние вихревых структур на формирование нелинейных волн в кольцевом канале .....	286
Лапонин В. С. ....	286
Математическое моделирование кинетики накопления наночастиц серебра в организме млекопитающего .....	286
Логинова М.А. ....	286
Восстановление пропусков данных в многомерных временных рядах .....	289
Алешновский В.С., Макеев Д.А. ....	289
<b>ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАДАЧИ О ДИФРАКЦИИ ПЛОСКОЙ ВОЛНЫ НА ЭЛЛИПТИЧЕСКОМ ВКЛЮЧЕНИИ</b> .....	291
А. Аллеков, Б. Муратлиев .....	291
Колебательная конвекция слабопроводящей жидкости в переменном электрическом поле .....	293
Некрасов О. О. ....	293
Исследование механических свойств пористого никелида титана при сжатии с различной морфологией твердой матрицы .....	295
Никифоров Г.А., Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В. ....	295
Моделирование эффектов усиления локальных электромагнитных полей на наноструктурированных поверхностях .....	296
Никифоров Н.Н. ....	296
Математическое моделирование массива линз для оптических систем микроскопов .....	297
Ноговицына С.Р. ....	297
<u>Численный расчет фазовых диаграмм <math>(T, n)</math> - <math>(T, \mu)</math> системы заряженных спин-триплетных <math>S = 1</math> бозонов классическим методом Монте-Карло</u> .....	298
Нужин С.В., Улитко В.А., Панов Ю.Д., Москвин А.С. ....	298
Геометрический анализ уравнений пограничного слоя .....	300
Олейник В. Н., ....	300
Оценка параметров в модели автомобильного трафика .....	301
Погребняк М. А. ....	301
Задача быстрогодействия по остановке двузвенного физического маятника на подвижном подвесе .....	303
Потапов А.П. ....	303
Моделирование спиновых и псевдоспиновых моделей с помощью методов Монте-Карло .....	305
Пятков А.Ю., Панов Ю.Д., Улитко В.А. ....	305
Исследование роли примесей титана и циркония на сегнетоэлектрические характеристики орторомбического диоксида гафния методом теории функционала плотности .....	306
Резник А.А. ....	306
<b>МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ГИБРИДНЫХ УГЛЕРОДНЫХ ВОЛОКОН КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ</b> .....	307
Савватеева М. В. ....	307
Численное моделирование фазовой коррекции aberrаций лазерного излучения системой из двух адаптивных зеркал под управлением СПГ алгоритма .....	308
Саламатин Д.А., <sup>1,2</sup> Шнягин Р.А. <sup>2</sup> , Стариков Ф.А. <sup>2</sup> .....	308
Бифуркационная диаграмма режимов макроскопической динамики сверхпроводящих джозефсоновских контактов .....	310
Сотин А.А., <sup>1,2</sup> Голдобин Д.С. <sup>1,2</sup> .....	310



Механические свойства алюминия, усиленного сверхтонкими алмазными пленками (диаманом): <i>ab initio</i> исследование .....	311
Степанова Х.С. <sup>1,2</sup> , Ларионов К.В. <sup>3,4</sup> , Сорокин П.Б. <sup>2,3</sup> .....	311
Расчет каналов транспортировки частиц, выведенных из циклотрона .....	312
Глеуберды М. Т.1 .....	312
Идентификация функции пропускной способности социальных сетей .....	313
Толстых М.А. ....	313
Расчет магнитооптических элементов системы аксиальной инжекции циклотрона .....	315
Турар Р.Ш. ....	315
Маршрутизация траектории движения мобильных роботов в среде с препятствиями методом машинного обучения.....	316
Дудаков А.С., Турсунов Т.Р. ....	316
Автоматическое управление «умной» парковкой беспилотного автомобиля методами машинного обучения.....	318
Тюленев И. Д. ....	318
Восстановление данных во временных рядах геофизических параметров методами математического моделирования .....	319
Фадеева П.А. ....	319
Математическое моделирование процесса критической самоорганизации в эпидемиологической модели .....	320
Федоркова Д.С. ....	320
Фермионно-кубитное отображение через троичные деревья в вариационных квантовых алгоритмах поиска собственных значений .....	321
Фишер Д.Е. ....	321
Методы машинного обучения для построения потенциалов межатомного взаимодействия .....	323
Хабибуллин Р.А., Мокшин А.В. ....	323
Разработка C++ модуля на основе Geant4 для моделирования излучения при плоскостном каналировании электронов в монокристаллах .....	324
Худякова А.Д. ....	324
Структурные особенности жидкого висмута: DFT анализ .....	325
Цыганков А. А., Галимзянов Б. Н., Мокшин А. В. ....	325
Исследование зависимости характеристик потока электронов в пирозлектрическом ускорителе от поверхностного распределения заряда кристалла .....	325
Шаповалов П.Г. <sup>1</sup> , Олейник А.Н. <sup>2</sup> , Кленин А.А. <sup>3</sup> , Гильц М.Э. <sup>4</sup> .....	325
Ориентационно-индуцированные морфологические переходы в разбавленных растворах амфифильных гребнеобразных сополимеров .....	326
Шульдяков Г.А. <sup>1,2</sup> , Буглаков А.И. <sup>2</sup> , Ларин Д.Е. <sup>2</sup> .....	326
<i>Ab-initio</i> исследования диэлектрических и оптических свойств водных решеток гидратов и льдов .....	328
М.Б. Юнусов <sup>1</sup> , Р.М. Хуснутдинов <sup>1,2</sup> .....	328
Планирование траектории движения мобильного робота в среде с препятствиями на основе модифицированного алгоритма оптимизации роя частиц .....	329
Ян Шуай .....	329

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ВРЕМЕННЫХ РЯДОВ ГЕОФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН С ПРИМЕНЕНИЕМ РАЗРАБОТАННОГО ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА

Арзангулян М.Э.

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

E-mail: arzangulian.me19@physics.msu.ru

Сегодня во всем мире, как никогда, актуален вопрос изменения климата. Метеостанции по всей стране уже много лет ежедневно считывают такие параметры как температура, концентрация CO<sub>2</sub>, давление и т.п. Однако обработка этих данных является достаточно трудоемким процессом, учитывая их количество, а также разнообразие методов работы с ними.

Для решения этой проблемы была разработана программная среда, позволяющая обрабатывать временные ряды метеорологических данных различными способами. В функционал комплекса входят анализ рядов, восстановление потерянных данных и прогнозирование поведения ряда.

В первую очередь среда предназначена для эксплуатации в научных группах, изучающих временные ряды. Однако ею также могли бы пользоваться сотрудники метеорологических станций, которым необходимо здесь и сейчас обрабатывать получаемые данные, без привлечения специально обученных людей.

Среда разработана на языке *Python* с использованием открытых библиотек, в частности *pandas*, *numpy*, *streamlit*, что гарантирует ее работоспособность независимо от внешних обстоятельств, в отличие от ряда аналогичных решений от зарубежных компаний.

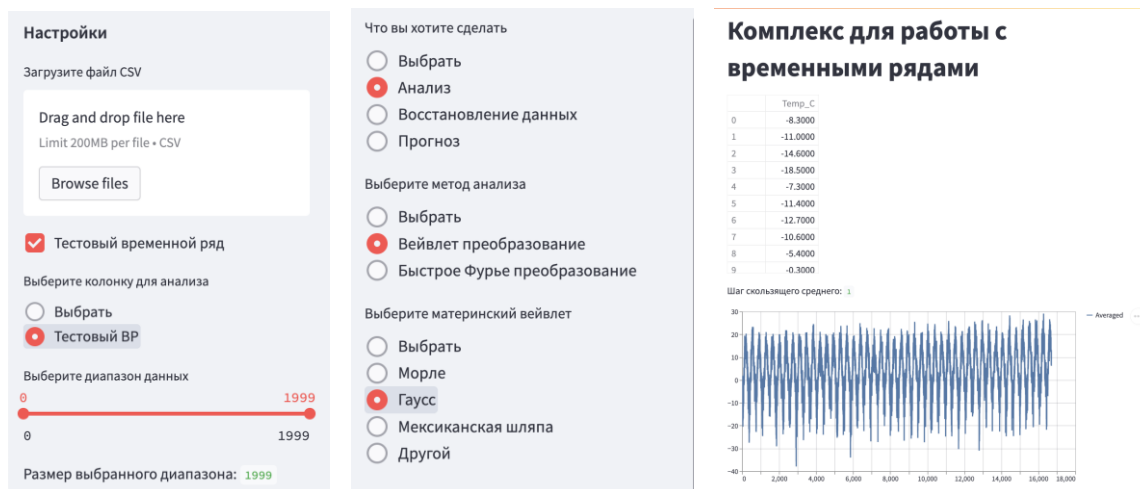


Рис. 1. Элементы интерфейса программного комплекса

### Литература

1. Газарян В. А., Курбатова Ю. А., Овсянников Т. А., Шапкина Н. Е. // ВМУ. Серия 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 2018. No 1. Статистический анализ циклических изменений в рядах динамики метеорологических показателей на юго-западе Валдайской возвышенности.
2. Kurbatova J., Tatarinov F., Molchanov A. et al. // Environ. Res. Lett. 2013. No8.045028.

## ЗАДАЧА БЫСТРОДЕЙСТВИЯ ОБХОДА НЕСКОЛЬКИХ ТОЧЕК МАШИНОЙ ДУБИНСА

Атуова А.М.

*МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*  
*E-mail: atuova.a@mail.ru*

Рассматривается задача о последовательном обходе управляемым объектом трех неподвижных целевых точек за кратчайшее время. В качестве управляемого объекта используется модель машины Дубинса, которая описывает движение объекта в горизонтальной плоскости с постоянной скоростью и ограниченной маневренностью.



Данная работа отличается от рассмотренных ранее наличием не двух целевых точек, а трех. Решение задачи с двумя неподвижными целями полностью исследовано Ю.И. Бердышевым. Сложность заключается в невозможности разбить задачу на ряд двухточечных, так как необходимо учитывать информацию о всех целях для того, чтобы оптимизировать время обхода.

Теорема 6.1. [1], выражающая необходимые условия оптимальности в форме принципа максимума и условий выравнивания, позволяет получить вид оптимального управления исследуемого управляемого объекта и сами условия выравнивания. Принцип максимума при этом применяется на каждом интервале движения между заданными точками, но учитывает информацию о последующих целях через касательный вектор траектории. Эти условия позволяют нам установить то, что и в случае трех целей оптимальная траектория состоит из дуг окружностей единичного радиуса и отрезков прямых, соединяющих их.

В работе рассмотрены всевозможные взаимные расположения целевых точек с учетом расстояния между ними, получена соответствующая классификация, состоящая из четырех основных случаев. Зная вид оптимальной траектории из теоремы 6.1. [1], получен алгоритм построения оптимальной траектории обхода трех целевых точек в так называемой дальней зоне (первый случай классификации). Алгоритм основан на условиях выравнивания, виде оптимального управления и геометрических построениях.

В ближней зоне (остальные случаи классификации) полученных ранее условий оказалось недостаточно для построения оптимальной траектории, поэтому исходная задача была переформулирована как задача минимизации функционала времени по параметрам  $\varphi_1, \varphi_2$ , то есть по углам между вектором скорости объекта и осью абсцисс в моменты встречи машины с первой и второй целевыми точками соответственно. Аналитические выражения для времени движения от одной точки к другой были получены из выражений для оптимального времени перехвата подвижной цели, которые найдены в работах [2,3], при учете независимости координат целевых точек от времени. Также был применен известный результат о том, что траекторий из классов  $CC$  и  $CS$  достаточно для осуществления оптимального перехвата [2], где  $CC$  — класс траекторий, состоящий из двух дуг разных окружностей единичного радиуса,  $CS$  — класс траекторий, состоящий из дуги окружности единичного радиуса и отрезка. Аналогичный результат получен в работе [4] для  $CCC$  и  $CSC$  траекторий.

Сначала в работе рассматривается вспомогательная двухточечная задача. Для корректной работы алгоритма необходимо было вывести уравнение для определения времени движения вдоль траекторий класса  $CC$  и  $CS$  при произвольных начальных условиях. Зная уравнение для определения времени движения вдоль траекторий класса  $CCC$  и  $CSC$  при начальных условиях  $x_0 = 0, y_0 = 0, \varphi_0 = \pi / 2$  и вдоль траекторий класса

СС и CS при произвольных начальных условиях, было построено четыре вспомогательных алгоритма для нахождения оптимального времени обхода двух целевых точек в каждом классе траекторий (CSC CS, CSC CC, CCC CS, CCC CC). Далее найдено оптимальное время обхода по всевозможным классам, и восстановлена траектория. Каждый из четырех алгоритмов представляет собой нахождение минимального времени обхода двух точек по параметру  $\varphi_1$ , далее, если такое решение существует, находится минимум времени обхода двух точек в определенном классе траекторий. Моделирование траектории в двухточечной вспомогательной задаче показало правильность работы алгоритма.

Аналогично вспомогательной задаче для корректной работы трехточечного алгоритма было получено уравнение для определения времени движения вдоль траекторий класса CCC и CSC при произвольных начальных условиях. В данном случае получено восемь вспомогательных алгоритмов, позволяющих найти оптимальное время обхода трех целевых точек в каждом классе траекторий (CSC CSC CS, CSC CSC CC, CCC CCC CS, CCC CCC CC, CSC CCC CS, CSC CCC CC, CCC CSC CS, CCC CSC CC). Далее найдено оптимальное время по всевозможным классам, и восстановлена траектория.

В итоге получено два алгоритма. Первый, основанный на теореме 6.1. [1], позволяет находить решение в дальней зоне. Второй позволяет находить решение как в дальней, так и в ближней зоне. Корректность работы второго алгоритма в дальней зоне подтверждается совпадением результата его работы с результатом работы первого алгоритма, а также моделированием траектории.

Дополнительно было получено решение задачи о построении границ областей, где меняется последовательность обхода точек.

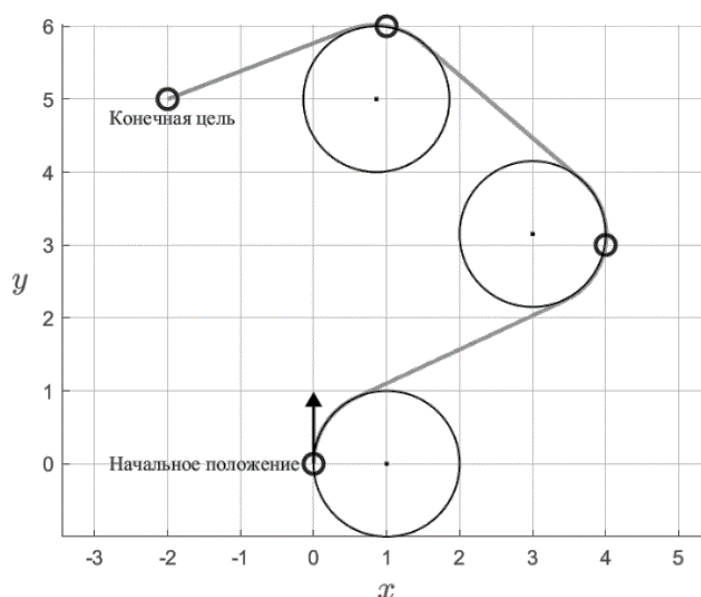


Рис. 1. Оптимальная траектория обхода машиной Дубинса трех точек в дальней зоне

### Литература

1. Бердышев Ю.И. О задаче последовательного обхода нелинейным управляемым объектом совокупности гладких многообразий // Дифференц. уравнения. 2002. Т. 38, вып. 11. С. 1451–1461.
2. Бузиков М.Э., Галяев А.А. Алгоритмы вычисления оптимальной траектории перехвата подвижной цели машиной Дубинса // Материалы XIV мультиконференции: сб.тр.конф. в 4 т. Ростов н/Д, 2021. Т. 1. С. 73–76.
3. Buzikov M.E. Minimum-time lateral interception of a moving target by a dubins car // Automatica. 2022. Vol. 135. 109968.
4. Пацко В. С., Федотов А. А. Аналитическое описание множества достижимости для машины Дубинса // Тр. ИММ УрО РАН. 2020. Т. 26. вып. 1. С. 182–197

## РЕШЕНИЕ ПРЯМОЙ ЗАДАЧИ МЕХАНИКИ ДЛЯ ГАРМОНИЧЕСКИХ ДВИЖЕНИЙ ТРЕНАЖЕРА ЧИСЛЕННЫМИ МЕТОДАМИ

Бадяева В.К.

*РУДН, Факультет физ.-мат. и естественных наук, Москва, Россия*

*E-mail: vlada\_badyaeva@mail.ru*

Задача нахождения сил по заданным координатам движения лошади важна для создания уникального тренажера верховой езды, чему посвящена моя дипломная работа.

Закон изменения положения центра масс тренажера при гармоническом движении:  $f_2(t) = A \sin(ut)$ .

Пусть нам известны несколько типов движения тренажера. Первым типом движения является «шаг», для него амплитуда колебаний  $A$  равна 0.05 м, состоит из четырех равных тактов, длительность каждого равна 0.5 с. Получим следующие графики для координаты центра масс, скорости, ускорения и результирующей силы. Результирующая сила равна произведению массы, равной 500 кг, и ускорения, полученного в результате исполнения программы. На тренажер будет дополнительно действовать сила тяжести и сила вклада всадника. Таким образом, в тренажер будет задаваться сила, равная разности результирующей силы и силы тяжести, силы вклада всадника.

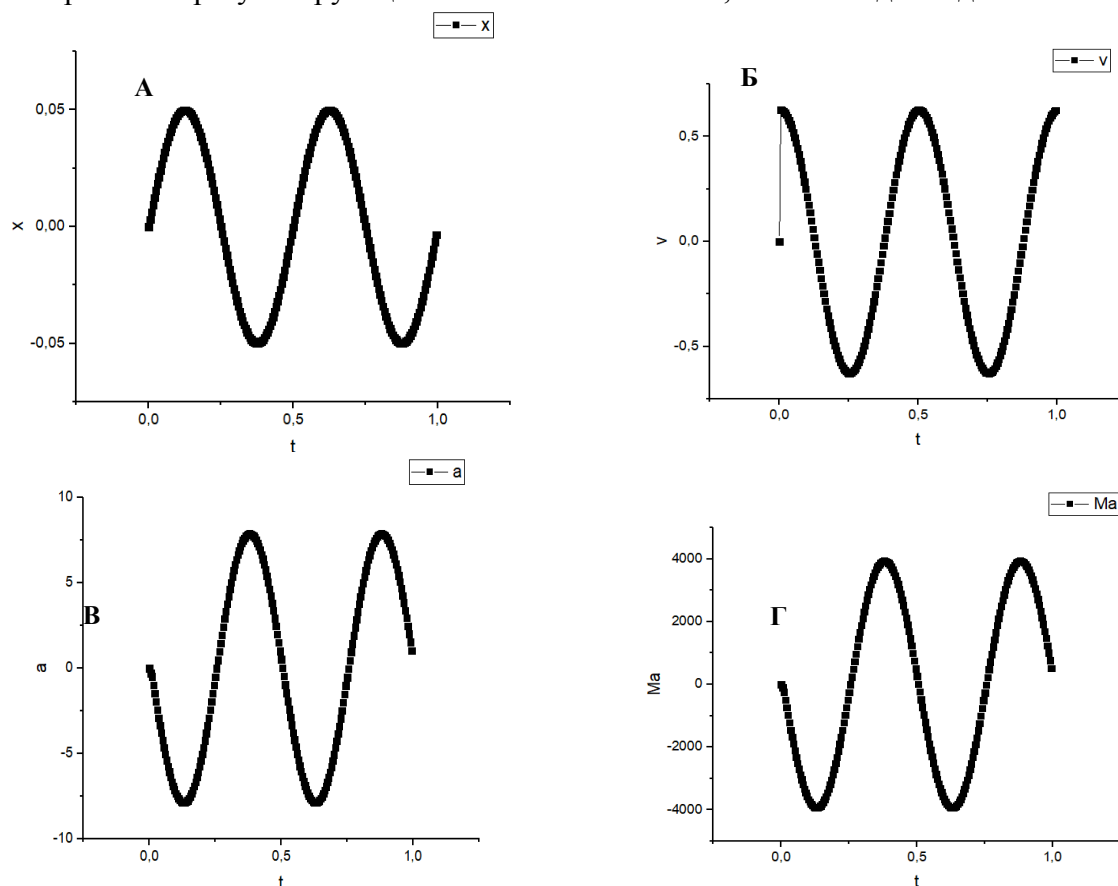


Рис. 1. Для шага. А Заданная зависимость координаты центра масс тренажера (м) от времени (с). Б Полученная зависимость скорости (м/с) от времени (с). В Зависимость ускорения (м/с<sup>2</sup>) от времени (с). Г Зависимость результирующей силы (Н) от времени (с).

Вторым типом движения является «рысь», амплитуда равна 10 см, состоит из двух одинаковых тактов [1] длительностью 0.7 с каждый. Получим аналогичные графики.

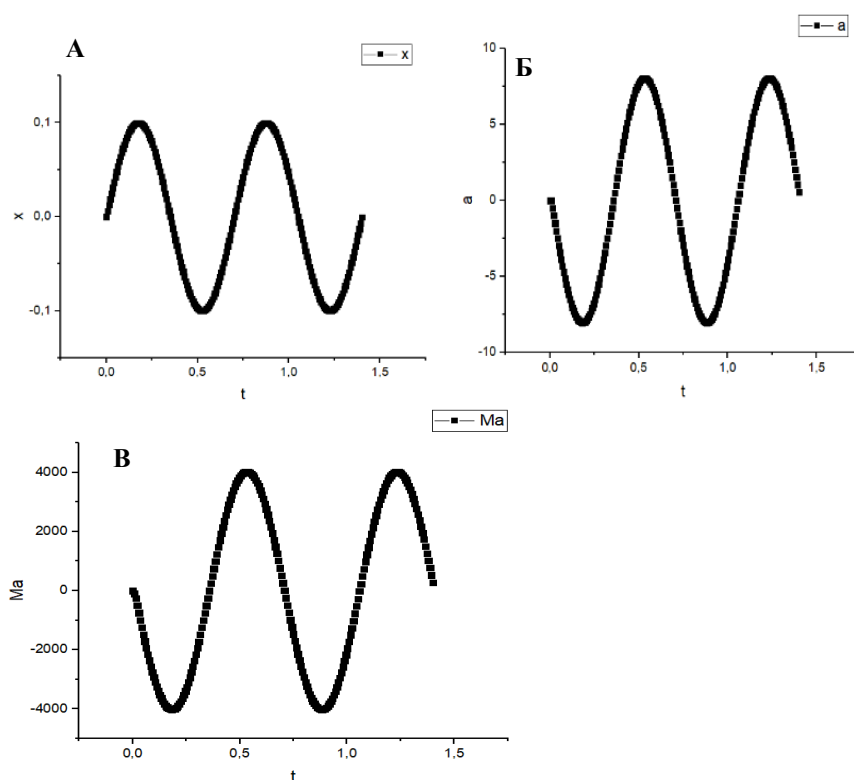


Рис. 2. Для рыси. А Заданная зависимость координаты центра масс тренажера (м) от времени (с). Б Полученная зависимость ускорения (м/с<sup>2</sup>) от времени (с). В Зависимость результирующей силы (Н) от времени (с)

Последним типом движения, рассматриваемом в этой работе, является «галоп». Он состоит из трех тактов [1]. Первый такт имеет амплитуду 15 см, время длительности равно одной трети периода  $T = 0.6$  с. Второго и третьего такты имеют характеристики рыси для амплитуды, а время длительности равно 0.4 с в сумме.

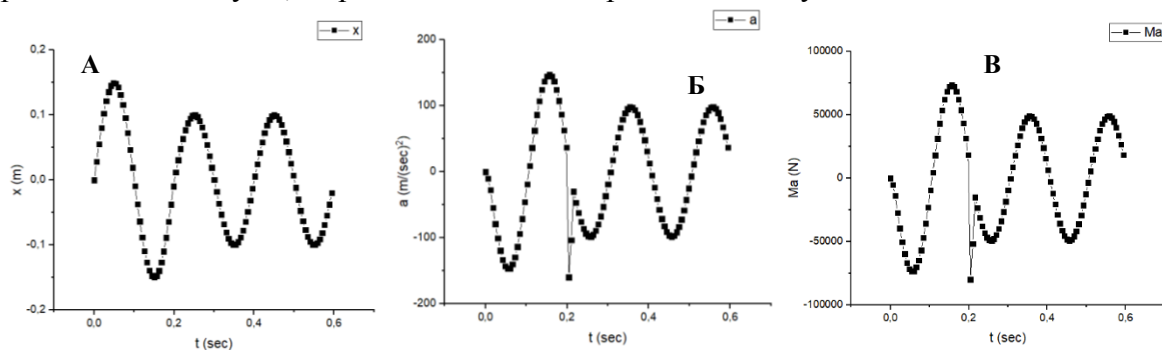


Рис. 3. Для галопа. А Заданная зависимость координаты центра масс тренажера (м) от времени (с). Б Полученная зависимость ускорения (м/с<sup>2</sup>) от времени (с). В Зависимость результирующей силы (Н) от времени (с)

Запишем основные характеристики в таблицу.

Таблица 1. Основные характеристики для результирующих сил  $F = Ma$

Тип движения	Амплитуда, Н
Шаг	3942
Рысь	4023
Галоп	5595 и 4023

Получены значения для сил. Видно, что амплитуды для рыси и шага отличаются не сильно, около 100 Н, при этом амплитуда для первого такта галопа отличается от второго и третьего тактов отличаются уже примерно на 500 Н. Это говорит о том, что нужно достаточно точно задавать значения для сил, иначе центр масс тренажера будет подниматься на высоту намного больше или намного меньше желательной.

### Литература

1. Muybridge E. Animals in motion. – Courier Corporation, 2012.

## АНАЛИЗ ПОЛИНОМИАЛЬНЫХ И ПСЕВДОПОЛИНОМИАЛЬНЫХ РАЗРЕШИМЫХ СЛУЧАЕВ NP-ТРУДНОЙ В СИЛЬНОМ СМЫСЛЕ ЗАДАЧИ МИНИМИЗАЦИИ МАКСИМАЛЬНОГО ВРЕМЕННОГО СМЕЩЕНИЯ

Барашов Е.Б.

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

*ИПУ им. В. А. Трапезникова РАН, Москва, Россия*

*E-mail: barashov.eb@gmail.com*

Рассматривается классическая задача теории расписаний  $1|r_j|L_{\max}$  для одного прибора. Общая задача является NP-трудной в сильном смысле, но при наличии определенного соотношения параметров задачи (моментов поступления, продолжительностей обслуживания и директивных сроков), задача может быть решена за полиномиальное время. Каждый пример задачи из  $n$  работ можно рассматривать как точку в  $3n$ -мерном пространстве (три параметра каждой работы однозначно определяют пример задачи). Определена метрическая функция в этом пространстве параметров, что позволяет измерить расстояние между двумя примерами задачи. Доказано, что решение одного примера задачи может быть применено к другому примеру, и абсолютная ошибка не превысит расстояния между соответствующими точками в пространстве параметров задачи. Таким образом, любой пример задачи может быть приближенно решен полиномиальным алгоритмом с использованием его проекции на точку в полиномиально разрешимых областях и известна верхняя граница абсолютной погрешности полученного решения. В данной работе реализованы алгоритмы для нескольких полиномиально разрешимых подслучаев одноприборной задачи планирования, а также алгоритм проекции любого примера задачи на каждую соответствующую полиномиально разрешимую область  $3n$ -мерного пространства. Для сравнения результатов с решением проецируемых примеров до точного решения используется алгоритм Карлье. Для сравнения приближенного решения с точным проведен вычислительный эксперимент. В ходе эксперимента каждый пример задачи проецировался на рассматриваемые полиномиально разрешимые области и решался соответствующим алгоритмом. Решения всех проекций сравнивались с точным решением алгоритма Карлье.

### Литература

1. Лазарев А. А. Теория расписаний. Методы и алгоритмы //М. ИПУ РАН. 2019. 408 с. [Lasarev, AA Schedule theory. Methods and algorithms. M. IPU RAN. 2019. 408 p. (In Russian)]. 2019.
2. Hoogeveen J. A. Minimizing maximum promptness and maximum lateness on a single machine //Mathematics of Operations Research. 1996. Т. 21. №. 1. С. 100–114.
3. Лазарев А. А. Парето-оптимальное множество NP-трудной задачи минимизации максимального временного смещения //Известия Российской академии наук. Теория и системы управления. 2006. №. 6. С. 103–110.
4. Лазарев А. А. Оценка абсолютной погрешности задач теории расписаний с критерием минимизации максимального временного смещения //Доклады Академии наук. – Фе-

деральное государственное бюджетное учреждение" Российская академия наук", 2007. Т. 415. №. 4. С. 446–449.

5. Schrage L. Solving resource-constrained network problems by implicit enumeration–nonpreemptive case //Operations Research. 1970. Т. 18. №. 2. С. 263–278.
6. Lageweg B. J., Lenstra J. K., Kan A. H. G. R. Minimizing maximum lateness on one machine: computational experience and some applications //Statistica Neerlandica. 1976. Т. 30. №. 1. С. 25–41.
7. Carlier J. The one-machine sequencing problem //European Journal of Operational Research. 1982. Т. 11. №. 1. С. 42–47.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ МУЛЬТИФРАКТАЛЬНОГО ТУРБУЛЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АВТОНОМНОЙ ЭЛЕКТРОЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ С ГТУ И НЕЛИНЕЙНОЙ НАГРУЗКОЙ

Белкова Д.Н.

Новосибирский ГТУ, Новосибирск, Россия  
belkova34diana@gmail.com

В России и в мире питание потребителей электрической энергией может осуществляться как от магистральных сетей бесконечной мощности, так и децентрализованно в автономной энергосистеме. Объекты распределенной генерации имеют особенности электрических режимов [1]. Проведение экспериментов на реальном объекте является порой непрактичной и дорогостоящей задачей. В связи с этим использование компьютерного математического моделирования является основным этапом при проектировании генерирующей установки с учётом возможных потребителей.

Имитационное моделирование необходимо для исследования гармонических составляющих тока и напряжения, вносимых полупроводниковой техникой, влияния количества нелинейных потребителей на качество электроэнергии, резонансных явлений.

Для возможности анализа установившихся и переходных режимов и разработки вспомогательного электротехнического оборудования (например, компенсаторов реактивной мощности, активных фильтров высших гармоник) была создана имитационная модель автономного энергорайона (Рис.1) в пакете прикладных программ MATLAB Simulink с помощью библиотеки Simscape.

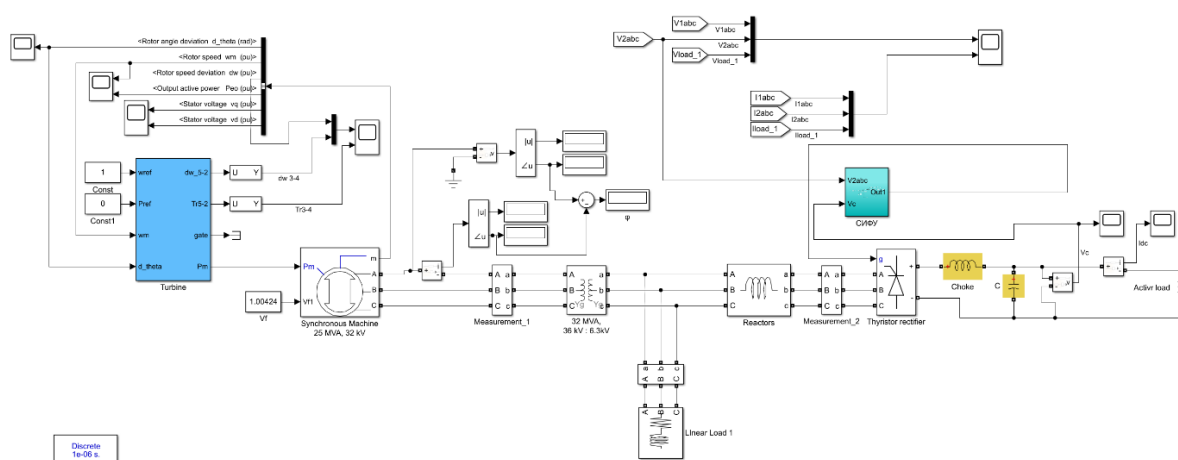


Рис. 1. Имитационная модель автономного энергорайона в MATLAB

Газотурбинная установка состоит из блоков синхронного генератора, созданного на основе уравнений Парка–Горева и турбиной [2]. Турбина содержит систему регулирования скорости и многомассовый вал, где каждая масса характеризуется инерционно-



стью, коэффициентом демпфирования и коэффициентом жесткости. Это позволяет рассчитывать не только электромагнитные, но и электромеханические процессы.

Нелинейная нагрузка моделируется как тиристорный выпрямитель активной нагрузки с LC-фильтром [3] для поддержания напряжения в цепи постоянного тока, что соответствует упрощенной версии тиристорного электропривода.

Также система содержит трёхфазный трансформатор [4] и блоки измерений.

Данная имитационная модель является частью работы по исследованию субсинхронного резонанса в автономной электроэнергетической системе [5].

#### Литература:

1. Автоматика управления нормальными и аварийными режимами энергорайонов с распределённой генерацией: монография / П.В. Илюшин, А.Л. Куликов. – Н. Новгород: НИУ РАНХиГС, 2019. – 364 с.
2. Булатов Ю.Н., Крюков А.В., Нгуен В. Моделирование газотурбинной установки с прогностическими регуляторами напряжения и скорости. Известия высших учебных заведений. ПРОБЛЕМЫ ЭНЕРГЕТИКИ. 2020;22(3):60-67. <https://doi.org/10.30724/1998-9903-2020-22-3-60-67>
3. Борисов П.А., Томасов В.С. Расчёт и моделирование выпрямителей. СПб.: СПбГУ ИТМО, 2009. 169 с.
4. Новаш И.В., Румянцев Ю.В. Расчёт параметров модели трёхфазного трансформатора из библиотеки MATLAB-SIMULINK с учётом насыщения магнитопровода. Энергетика. Известия высших учебных заведений и энергетических объединений СНГ. 2015, (1):12-24.
5. Белкова Д.Н. Подход к разработке управляемого активного фильтра для эффективного подавления торсионных колебаний в системах распределенной генерации // XVI Всероссийская открытая молодежная научно-практическая конференция «Диспетчеризация и управление в электроэнергетике»: матер. конф. (Казань 20–22 ноября 2021 г.) / редкол. Э.Ю. Абдуллазянов (отв. редактор) и др. – Казань: Казан гос. энерг. ун-т, 2021. – 8 – 10

## ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ РАСПАДА РАЗРЫВА В СЛУЧАЕ ЧАСТИЧНОГО РАСКРЫТИЯ ПЕРЕГОРОДКИ МЕЖДУ ОБЛАСТЯМИ

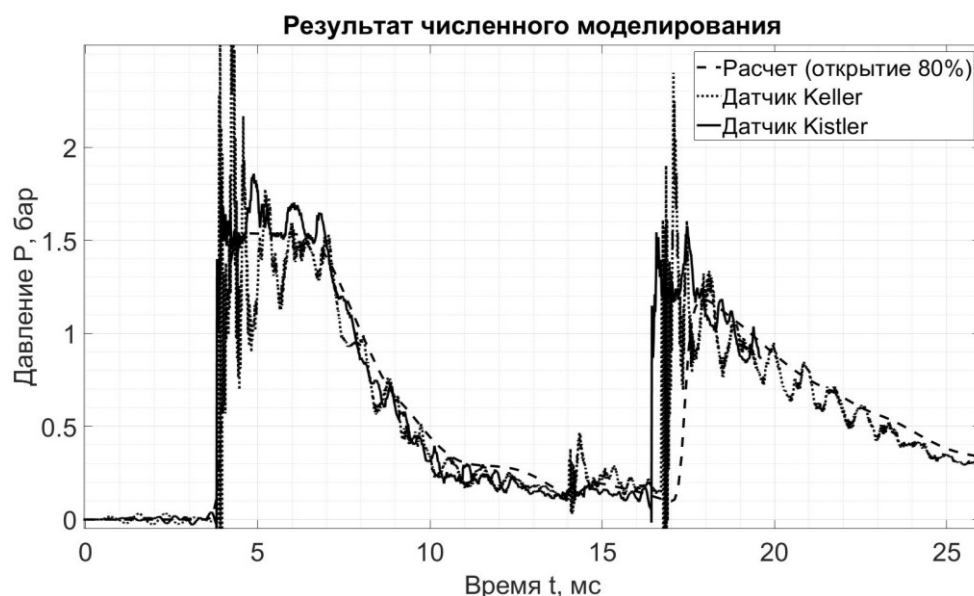
Бирюлин Е.З., Цыбенко В.Ю., Позняк И.М., Алябьев И.А.,  
Новоселова З.И., Федулаев Е.Д.

*МФТИ (Физтех), физтех-школа ЛФИ, г. Москва, г. Долгопрудный, Россия*  
*АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ», г. Москва, г. Троицк, Россия*  
*E-mail: birulin@triniti.ru*

Одним из методов калибровки датчиков давления является способ, основанный на воздействии на них импульса давления, изменяющегося во времени как функция Хевисайда — с резким фронтом нарастания и плато постоянного давления. Быстрый рост давления на датчик способен возбудить широкий спектр частот колебаний в его конструкции, что можно использовать для исследования резонансных свойств системы. Резонансная частота определяет границы применимости датчиков для измерения быстрых процессов. Чувствительность датчика можно определить по его отклику на плато постоянного давления.

На практике одним из возможных способов калибровки датчиков является воздействие на них ударной волны (УВ) в газе. Для создания УВ с резким фронтом применяются ударные трубы (УТ). УТ состоит из двух секций: высокого и низкого давления, разделенных мембраной-перегородкой. По достижению требуемых значений давлений в секциях мембрану разрывают. После чего в трубе формируется ударная волна, распространяющаяся в направлении датчиков, требующих калибровки.

В качестве мембраны в УТ может использоваться металлическая фольга или полимерная пленка. Раскрытие мембраны возможно с помощью термического нагрева, разрезания ножом, а также самопроизвольного разрыва под действием высокого давления. При этом необходимо учитывать, что раскрытие мембраны происходит не мгновенно, и ее разрыв может быть неполным. Это влияет на формирование ударной волны и ее воздействие на сенсор: изменяется форма импульса воздействия, скорость нарастания фронта, величина давления на плато. Чтобы учесть эти эффекты необходимо исследовать влияние формы и размера отверстия в мембране на параметры УВ, а также предложить оптимальный метод разрыва и раскрытия мембраны.



Целью данной работы являлось исследование движения газа при неполном разрыве перегородки между секциями высокого и низкого давления УТ. Разработана численная модель, описывающая движение газа в УТ. Проведено исследование влияния формы и размера отверстия в мембране на параметры УВ. Численная модель верифицирована на экспериментальных данных, полученных на стенде УТ в ГНЦ РФ ТРИНИТИ.

### Литература

1. А.Г. Куликовский Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений, 2012 Москва Физматлит

## ГЕОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ДЛЯ ФОТОМАТЕРИАЛОВ

Блашкун М. Р.

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

*E-mail: [blashkun.mr19@physics.msu.ru](mailto:blashkun.mr19@physics.msu.ru)*

Нелинейное уравнение теплопроводности [1] относится к классу параболических уравнений в частных производных и описывает процесс передачи тепла в различных по своей структуре материалах. По своей сути является усложненной моделью о передаче тепла, которая учитывает зависимость коэффициента теплопроводности от температуры и имеет вид:

$$u_t - \operatorname{div}(k(u)\operatorname{grad}(u)) = 0, \quad (1)$$

где  $u = u(x, y, z, t)$  — функция температуры.

В данной работе при помощи метода симметрий строятся точные решения уравнения (1) для оптических материалов с кристаллической структурой.

Симметрии — преобразования пространства 2-джетов, при которых сохраняется гиперповерхность  $E$ , заданная уравнением (1).

Рассмотрим случай оптических материалов. Как показано в статье [2] коэффициент теплопроводности имеет следующий вид:

$$k(u) = \left(\frac{A}{u} + B\right)f_d\left(\frac{u}{C}\right), \quad (2)$$

где  $A, B$  — коэффициенты, определяемые структурой материала,  $C$  — температура Дебая,  $f_d$  — функция Дебая.

Стоит отметить, что предложенная модель (3) работает в температурном диапазоне от 293 К до 493 К. На этом температурном промежутке с помощью МНК аппроксимируем зависимость следующим полиномом:

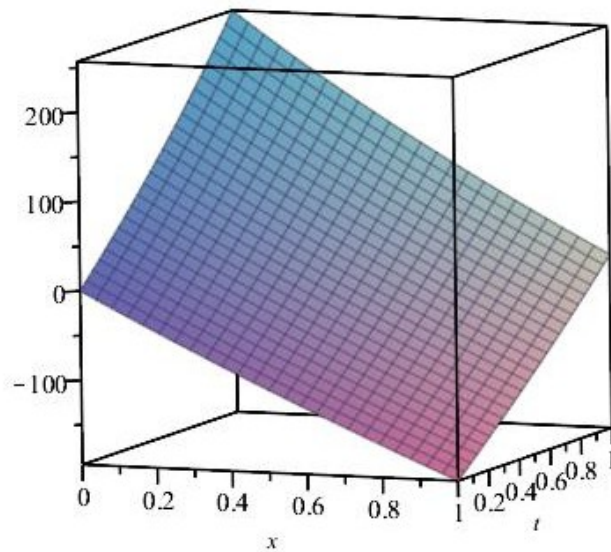
$$k(u) = A_0 + A_1 u + A_2 u^2. \quad (3)$$

С помощью геометрических методов для одномерного уравнения (1) с учетом новой зависимости (3) получаем точное решение, соответствующее векторному полю

$$W = q \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial t}, \quad \text{где } q \text{ — константа, в виде трансцендентного уравнения:}$$

$$u^2 + u + \ln(uq + 1) + qt - x = 0. \quad (4)$$

График решения для линейного приближения логарифма  $\ln(uq+1) \approx uq$  уравнения (4) имеет вид:



### Литература

1. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. – М.// МГУ, 1999, стр. 185–189
2. Yoichi Sato, Hideki Ishizuki, and Takunori Taira: Novel Model of Thermal Conductivity for Optical Materials // The Review of Laser Engineering Supplemental Volume (2008), p. 1082
3. Виноградов А.М., Красильщик И.С., Лычагин В.В., Введение в геометрию нелинейных дифференциальных уравнений // Наука, 1986, с. 336.
4. А.Г.Кушнер., Геометрические методы. Практический курс с использованием Maple. Лекции для студентов физфака МГУ. 2020
5. Овсянников Л.В., Групповой анализ дифференциальных уравнений // Наука 1978, с. 399.

Бредихин А.А.

БГНИУ, Институт инженерных и цифровых технологий, Белгород, Россия

E-mail: alek201098@gmail.com

Капиллярные явления, как объект исследования, представляют научный и практический интерес. Объективные трудности экспериментальных и аналитических подходов стимулируют развитие математического и компьютерного моделирования капиллярности. В данной работе предлагается и апробируется оптимизационный метод расчета капиллярного эффекта.

Известно, что стационарное устойчивое состояние трехфазной системы капилляр ( $S$ ) – жидкость ( $L$ ) – газ ( $G$ ) соответствует минимуму ее энергии:

$$(1) \quad E = \alpha_{SL}A_{SL} + \alpha_{SG}A_{SG} + \alpha_{LG}A_{LG} + mgh_c.$$

Здесь  $\alpha$  — коэффициент поверхностного натяжения на контактной границе с площадью  $A$  двух фаз;  $m$ ,  $h_c$  — масса и высота центра тяжести столба жидкости в капилляре;  $g$  — ускорение свободного падения.

Минимизация (1) при аппроксимации мениска сферическим сегментом с условиями механического равновесия вершины мениска (формула Лапласа) и линии соприкосновения трех фаз (формула Юнга) дает формулу Жюрена:  $h = 2\alpha_{LG} \cos \theta_Y / \rho g R$ , где  $h$  — высота вершины мениска;  $\theta_Y$  — краевой угол Юнга;  $R$  — радиус капилляра.

Предлагается минимизацию (1) рассматривать как задачу условной нелинейной оптимизации, для решения которой разработаны эффективные численные методы [1]. Нахождение осесимметричного мениска сводится к построению его образующей, доставляющей минимум энергии (1), дополненной формулой Юнга. Образующая мениска аппроксимируется ломаной с началом на оси симметрии, концом — на стенке капилляра и составленной из  $(N - 1)$  звеньев одинаковой, но априори неопределенной длины. Поэтому аргумент целевой функции (1) — это вектор длины  $(2N - 2)$ , составленный из неизвестных координат вершин ломаной, а минимизация (1) осуществляется с ограничениями: условиями равенств расстояний между вершинами и симметрии образующей мениска на оси. Численное решение задачи осуществляется в Matlab. Апробация метода иллюстрируется на рис. 1. Прогнозируется применимость предлагаемого метода для расчета равновесных форм капиллярных поверхностей.

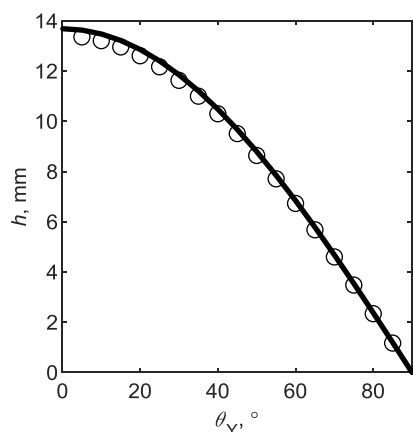


Рис. 1. Сравнение  $h(\theta_Y)$ : сплошная линия — формула Жюрена; символическая — оптимизационный расчет.

### Литература

1. Messac A. Optimization in practice with Matlab. – Cambridge University Press, 2015. – 465 p.

Бубнов А.С.

*МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*  
*E-mail: bubnov.as19@physics.msu.ru*

Одним из подходов к решению задач моделирования и прогнозирования временных рядов параметров атмосферы является исследование взаимосвязи между различными параметрами и построение моделей, которые отражают зависимость исследуемого параметра от остальных.

В данной работе проводится анализ многомерных временных рядов различных параметров атмосферы и почвы двух регионов – Тверской области РФ и Вьетнама. Для определения корреляционной взаимосвязи используются коэффициент корреляции Пирсона и его непараметрические аналоги: коэффициенты корреляции Спирмена и Кендалла [1]. Полученные результаты позволяют судить о характере и силе взаимосвязи и обосновать возможность применения регрессионного анализа, необходимого для определения основных тенденций временных рядов исследуемых атмосферных параметров и динамики их взаимосвязи с целью решения задач прогнозирования временных рядов и восстановления пропущенных данных.

Исходной моделью, которая используется в работе, является классическая линейная модель множественной регрессии:

$$y_i = \beta_1 + \beta_2 x_i^{(2)} + \beta_3 x_i^{(3)} + \dots + \beta_n x_i^{(n)} + \varepsilon_i,$$

где  $y$  — зависимая переменная, а  $x^{(2)}, \dots, x^{(n)}$  — независимые переменные (факторы),  $y_i$  и  $x_i$  — значения зависимой и независимой переменной соответственно в  $i$ -ый момент времени,  $i = 1, \dots, m$ , где  $m$  — количество наблюдений,  $\beta_1, \dots, \beta_n$  — истинные значения коэффициентов модели,  $\varepsilon_i$  — случайные ошибки. Например, в качестве зависимой переменной рассматривалась температура воздуха, в качестве факторов — атмосферное давление, влажность воздуха, солнечное излучение, скорость ветра, количество осадков, концентрация углекислого газа и температура почвы. Для определения оптимальных оценок коэффициентов  $\beta_1, \dots, \beta_n$ , минимизирующих суммы квадратов остатков, применяется метод наименьших квадратов [2].

В работе также рассматриваются нелинейные модели множественной регрессии: полиномиальная и логарифмическая, которые потенциально позволяют более точно описать взаимосвязь переменных и, следовательно, повысить качество прогноза.

С целью обоснования целесообразности применения многомерных регрессионных моделей для прогнозирования временных рядов в работе проводится сравнительный анализ полученных результатов с результатами использования модели авторегрессии и скользящего среднего ARIMA (p, d, q)(P, D, Q) [3]. В качестве основного критерия качества прогноза выбирается такая его метрика, как MSE (среднеквадратическая ошибка прогноза). В модели ARIMA (p, d, q)(P, D, Q) временной ряд  $y_t$  представляется в виде суммы  $q$  компонент скользящего среднего:

$$y_t = \mu + \varepsilon_t + a_1 \varepsilon_{t-1} + \dots + a_q \varepsilon_{t-q},$$

$p$  компонент авторегрессии:

$$y_t = c + b_1 y_{t-1} + \dots + b_p y_{t-p},$$

где  $\varepsilon_t$  — гауссов белый шум в момент времени  $t$  с постоянной дисперсией,  $cov(\varepsilon_t, \varepsilon_{t-k}) = 0 \forall k$ ,  $a_1, \dots, a_q$  — коэффициенты при соответствующих значениях  $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_q$ ,  $b_1, \dots, b_p$  — коэффициенты при соответствующих значениях  $y_{t-1}, \dots, y_{t-p}$ ,  $\mu, c$  — константы, P, Q — аналогичные параметры сезонных компонент, d, D — порядки дифференцирования, которые используются для приведения исходного ряда к стационарному.

Для исследования описанных выше моделей временной ряд разделялся на 2 последовательных фрагмента: первый использовался для нахождения неизвестных коэффициентов моделей, а второй — для построения прогноза и оценки его качества путем

сравнения прогнозируемых значений исследуемой переменной и ее фактически наблюдаемых значений. На рисунке 1 приведены результаты применения описанных моделей для прогнозирования временных рядов температуры воздуха Тверской области по данным наблюдений на метеостанции с интервалом 30 минут. Для определения коэффициентов модели использовался временной интервал с 1 по 21 августа 2014 года, для прогнозирования - с 22 по 31 августа 2014 года.

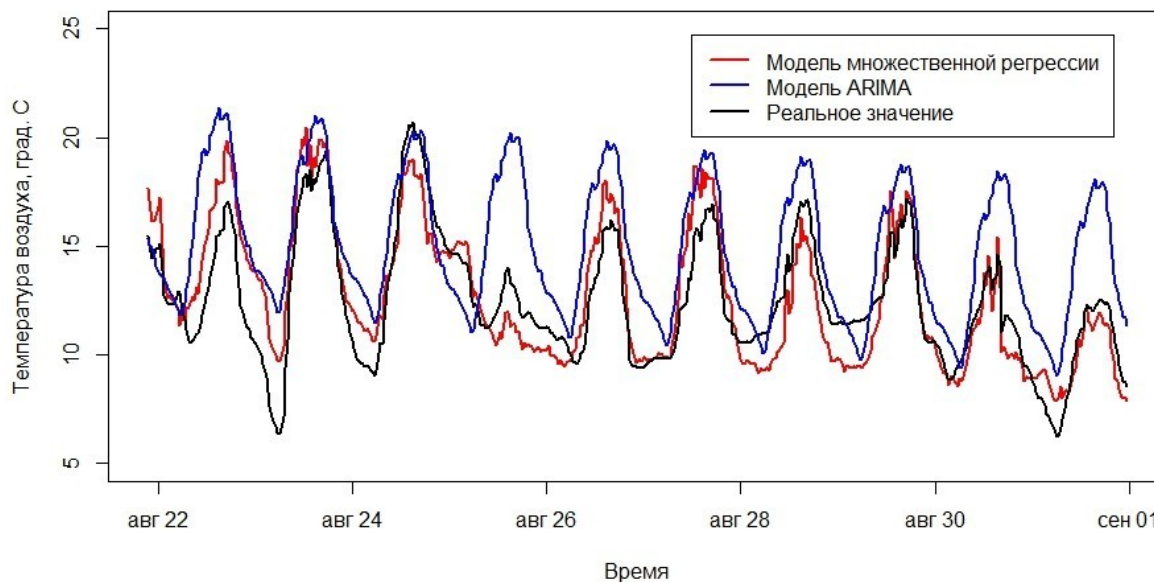


Рис. 1. Прогноз временного ряда температуры воздуха в Тверской области с 22 по 31 августа 2014 года.

Визуальное сравнение графиков двух моделей и результаты численного моделирования демонстрируют преимущества применения модели множественной регрессии для прогнозирования температуры воздуха. Среднеквадратическая ошибка прогноза, полученного с помощью модели множественной регрессии, получилась значительно меньше, чем аналогичный показатель для прогноза, полученного методом ARIMA. Отметим, что основным преимуществом метода множественной регрессии является возможность получения более корректных значений прогнозируемого параметра на тех временных участках, где наблюдаются отклонения от характерной в среднем структуры временного ряда, например, при вариации трендовой компоненты, сезонной амплитуды, при случайных выбросах. Таким образом, в рассмотренной задаче анализа зависимости динамики температуры воздуха от различных атмосферных параметров использование модели множественной регрессии позволяет строить температурный прогноз с большей точностью.

#### Литература

2. Вуколов Э.А. Основы статистического анализа. Практикум по статистическим методам и исследованию операций с использованием пакетов STATISTICA и EXCEL. М.: ФОРУМ, 2008.
3. Плохотников К.Э., Колков С.В. Статистика. М.: ФЛИНТА, 2012.
4. Hyndman R.J., Athanasopoulos G. Forecasting: Principles and Practice (2nd edition, 2018). <https://otexts.com/fpp2/>



Самышкин В.Д., Бухаров Д.Н.

*Владимирский ГУ им. А.Г. и Н.Г. Столетовых, Владимир, Россия*

*E-mail: buharovdn@gmail.com*

На сегодняшний день геликоидальные многослойные микроструктуры диоксида титана представляют интерес в области исследований материаловедения благодаря наличию у них уникальных физических и эксплуатационных свойств [1].

Рассматриваемые в работе образцы были получены самоорганизацией из лазерно-индуцированной в атмосфере при наличии неоднородного магнитного поля тонкой пленки в соответствии со схемой, приведенной в работе [2]. Исследование полученных образцов продемонстрировало их слоистую геликоидальную структуру, которая может быть соотнесена со структурой спиральных наносвитков [3].

Модель, позволяющая описать структуру таких объектов в первом приближении может быть представлена как случайная спираль [4]. Такой объект формируется из системы случайных спиралей. Такие фигуры обладают случайно расположенным центром и случайной величиной радиуса витка ( $r$ ) и формируются из точек, расположенных по спирали с учетом случайных текущих углов поворота ( $\theta$ ), координаты которых определяются как:

$$r=r(\theta); x=r\cdot\cos(\theta); y=r\cdot\sin(\theta).$$

На рис.1 приведено изображение случайной спиральной структуры, образованной системой объектов округлой формы

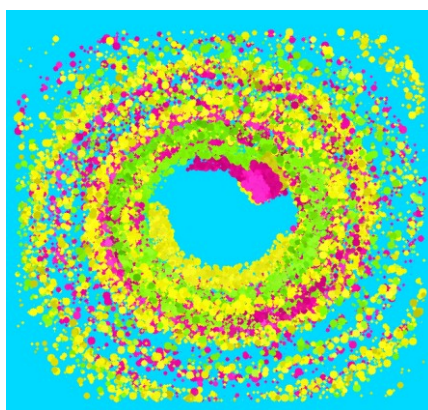


Рис. 1. Модель геликоидальной структуры.

Результаты проведенного моделирования на качественном уровне соответствуют эксперименту.

### **Литература**

1. Г. М. Кузьмичёва Наноразмерные системы с оксидами титана (IV). Получение. Характеризация. Свойства// Тонкие химические технологии. 2015. Т. 10. № 6 (4). С. 5–36.
2. Bukharov D.N. et al Model of the microscroll structure// J. Phys.: Conf. Ser. 2019. 1331. P.12–19.
3. Braga S. F., V. R. Coluci, S. B. Legoas, R. Giro, D. S. Galvão, and R. H. Baughman Structure and Dynamics of Carbon Nanoscrolls// Nano Letters. 2004. 4 (5). P. 881–884.
4. Savin A.V., R. A. Sakovich, and M. A. Mazo Using spiral chain models for study of nanoscroll structures// Phys. Rev. B. 2018. 97. 16. P.36–54.

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МАГНИТНОГО ПОЛЯ,  
СОЗДАВАЕМОГО ПРОВОДНИКОМ С ТОКОМ, НА МАГНИТНЫЙ СКРМИОН

Васильев Е.В., Король А.О., Капитан Д.Ю., Рыбин А.Е., Овчинников П.А.

Дальневосточный федеральный университет,  
Институт математики и компьютерных технологий, Владивосток, Россия  
E-mail: [vasilev.eva@dvfu.ru](mailto:vasilev.eva@dvfu.ru)

Магнитные скирмионы представляют собой топологически защищенные наноразмерные магнитные структуры, которые в последние годы являются перспективными кандидатами для хранения и обработки информации в устройствах спинтроники. Скирмионы характеризуются нетривиальной топологией, где магнитные моменты вращаются вокруг центральной оси, создавая структуру, подобную водовороту (вихрю). Динамика и стабильность скирмиона представляют большой интерес, а его поведение под воздействием внешнего магнитного поля является областью активных исследований [1,2].

В данной работе влияние внешнего магнитного поля, создаваемого несколькими проводниками с током в плоскости x-y, на магнитный скирмион было исследовано с помощью компьютерного моделирования на основе метода Монте-Карло [3]. Для моделирования магнитной спиновой системы использовалась модель Гейзенберга (1) и плоская двумерная квадратная решетка, а магнитное поле от проводников рассчитывалось в соответствии с законом Био-Савара-Лапласа.

$$\hat{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \cdot (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - \sum_{\langle i,j \rangle} D_{ij} \cdot (\vec{S}_i \times \vec{S}_j) - \mu_0 \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{B}_i \quad (1)$$

Моделирование было проведено в два этапа. На первом этапе в магнитном материале создается скирмион, и система приходит в устойчивое состояние локального минимума. На втором этапе к системе прикладывается магнитное поле, создаваемое током в проводнике, и моделируется с помощью алгоритма Метрополиса с добавленным магнитным полем.

В ходе моделирования можно наблюдать несколько интересных явлений. Например, магнитное поле, создаваемое током в проводнике, может заставить скирмион двигаться или деформироваться, в зависимости от направления и силы поля. В некоторых случаях скирмион может быть захвачен или прижат магнитным полем, что может быть полезно для спинтронных магнитно-резистивных устройств.

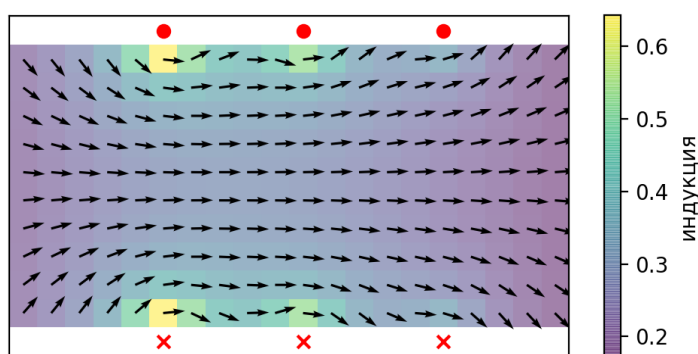


Рис. 1. Распределение магнитного поля вблизи нескольких проводников

Результаты моделирования показали, что поведение скирмиона зависит от количества проводников, силы и направления их токов, а также от расстояния между проводниками и магнитным материалом.

Исследование поведения магнитного скирмиона под воздействием внешнего магнитного поля, создаваемого несколькими проводниками с током, позволяет лучше понять фундаментальную физику скирмионов. Результаты дают представление о динамике и стабильности скирмиона под воздействием внешних магнитных полей и могут по-



мочь в разработке новых спинтронных устройств, использующих уникальные свойства магнитных скирмионов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 21-72-00058.

### Литература

1. Wang C. et al. Manipulating and trapping skyrmions by magnetic field gradients //New Journal of Physics. – 2017. – Т. 19. – №. 8. – С. 083008.
2. Casiraghi A. et al. Individual skyrmion manipulation by local magnetic field gradients //Communications Physics. – 2019. – Т. 2. – №. 1. – С. 145.
3. Perzhu A. et al. Monte Carlo simulation of magnetic skyrmions in ferromagnetic films //Solid State Phenomena. – Trans Tech Publications Ltd, 2020. – Т. 312. – С. 256-260.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ДИФРАКЦИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН НА ЗЕРКАЛЕ СО СКРУГЛЁННЫМИ КРАЯМИ В ВЕКТОРНОМ СЛУЧАЕ МЕТОДАМИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Викуловская А. А.

*МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*  
*E-mail: vikulovskaia.aal9@physics.msu.ru*

Для решения задач радиолокации необходимо изучить рассеяние плоской электромагнитной волны на различных объектах. Для этого на практике применяются компактные полигоны [1]. Так как размер безэховой камеры полигона ограничен, необходимо с помощью коллиматора преобразовать сферическую волну от антенны в плоскую волну. Коллиматор часто представляет собой параболическое зеркало. Однако дифракция на кромке зеркала может существенно исказить поле. Для уменьшения дифракции на кромке применяют зеркало с закругленными краями. Прежде чем изготовить зеркало, нужно определить его параметры (фокусное расстояние, размеры закруглений и др., [2]). Для этого нужно решить задачу синтеза формы коллиматора. Как известно, для решения таких задач необходимо иметь возможность многократно проводить численный эксперимент по дифракции сферической волны на зеркале. В настоящее время разрабатывается программный комплекс, который рассчитывает рассеянное поле на трехмерных объектах, в том числе на симметричном идеально проводящем зеркале с закругленными краями. Ранее такое зеркало имело заднюю крышку, которая на интересующих с практической точки зрения частотах по физическим соображениям не должна влиять на рассеянное вперед поле. Однако, использование такой модели приводит к чрезмерному расходу вычислительных ресурсов. Программный комплекс был модернизирован и теперь позволяет рассчитывать дифракцию на тонких экранах, поэтому появилась возможность убрать заднюю крышку.

Для расчета поля методом моментов нужно сначала приблизить поверхность треугольной сеткой. Так как задача потребляет много ресурсов, необходимо делать сетку настолько грубой, насколько это возможно. В ходе тестирования комплекса на разных объектах выяснилось, что в некоторых примерах на грубых сетках решение имеет сильное расхождение с решением, полученным с де-факто стандартным программным комплексом ФЕКО (отметим, однако, что при измельчении сетки решение сходится к правильному). Это связано с тем, что интегралы, входящие в определение матрицы системы линейных уравнений для расчета коэффициентов тока на поверхности тела методом моментов [3], аппроксимируются с недостаточной точностью. Одной из задач данной работы было улучшение аппроксимации интегралов, получаемых при определении коэффициентов матрицы СЛАУ при построении численного решения задачи дифракции.

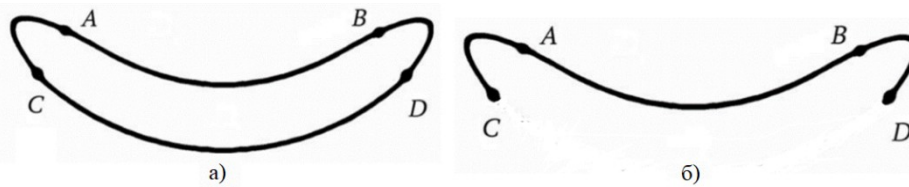


Рис 1. Образующая кривая параболического зеркала а) до модификации б) после модификации.

Зеркало образовано вращением кривой, заданной параметрически и состоящей из нескольких частей: параболы, эллиптических скруглений. Применяется прямой метод триангуляции поверхности зеркала [4]. После модификации узлы, треугольники и ребра сетки для поверхности задней крышки корректно отбрасываются.

Из граничного условия на поверхности проводника  $[(\mathbf{E}^s + \mathbf{E}^i), \mathbf{n}] = 0$  при помощи метода моментов, представив приближенное решения для токов на поверхности тела как  $\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^N I_k \mathbf{f}_k(\mathbf{r})$ , где  $\mathbf{f}_k(\mathbf{r})$  – базисные функции Рао-Вильтона-Глиссона [5], можно получить систему линейных алгебраических уравнений для коэффициентов  $I_k$ :

$$\sum_{k=1}^N \left\{ \frac{i\omega\mu}{4\pi} \int_{T_j^+ \cup T_j^-} \int_{T_k^+ \cup T_k^-} (\mathbf{f}_k(\mathbf{r}'), \mathbf{f}_j(\mathbf{r})) \frac{e^{-ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\sigma' d\sigma - \frac{i}{4\pi\omega\epsilon} \int_{T_j^+ \cup T_j^-} \int_{T_k^+ \cup T_k^-} (\nabla_{s'}, \mathbf{f}_k(\mathbf{r}')) (\nabla_s, \mathbf{f}_j(\mathbf{r})) \frac{e^{-ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\sigma' d\sigma \right\} I_k \quad (1)$$

$$= \int_{T_j^+ \cup T_j^-} \mathbf{E}_\tau^i(\mathbf{r}) \mathbf{f}_j(\mathbf{r}) d\sigma$$

где  $T_n^+$  и  $T_n^-$  — пара треугольников с общим ребром с номером n.

В данной работе для вычисления интегралов по треугольникам из формулы (1) используется метод, описанный в [6]. Интеграл по треугольнику A сводится к повторному с помощью перехода в барицентрическую систему. Затем повторные интегралы вычисляются по симметричным схемам Гаусса со степенью  $p = 2$  интерполирующего полинома

$$\int_A f(\alpha, \beta, \gamma) da = \frac{S}{2} \sum_{i=1}^m w_i (1 - \alpha_i) \sum_{j=1}^n w_j f(\alpha_i, \beta_i, \gamma_i) \quad (2)$$

где  $\alpha, \beta, \gamma$  — координаты точек треугольника в барицентрической системе координат, а  $w_i, w_j$  — соответствующие этим точкам веса для формулы Гаусса,  $f(\alpha, \beta, \gamma)$  — интегрируемая функция, S – площадь треугольника. Для  $p = 2$  веса и точки вычислены в [6]:  $w_1 = w_2 = w_3 = 0.333$ ,  $\alpha = 0.666$ ,  $\beta = 0.166$ ,  $\gamma = 0.166$ . Интеграл аппроксимируется суммой значений подынтегральной функции, умноженных на веса в трех точках, получающихся циклической перестановкой  $\alpha, \beta, \gamma$

### Литература

1. Балабуха Н.П., Зубов А.С., Солосин В.С. Компактные полигоны для измерения характеристик рассеяния объектов. М.: Наука, 2007
2. М. И. Пропой, Ф. Б. Хлебников, Д. А. Коняев и др. Оптимизация формы протяженных зеркальных коллиматоров со скругленными краями // Вестник Московского университета. Серия 3: Физика, астрономия. — 2022. — № 6. — С. 26–31
3. Хлебников Ф.Б., Боголюбов А.Н., Коняев Д.А., Шапкина Н.Е. Математическое моделирование электромагнитного поля в рабочей зоне компактного полигона
4. Pascal Jean Frey, Paul-Louis George. Mesh Generation: Application to Finite Elements// HERMES Science Europe Ltd, 2000

5. Rao S., Wilton D., Glisson A. Electromagnetic scattering by surfaces of arbitrary shape //IEEE Transactions on antennas and propagation. – 1982. – Т. 30. – №. 3. – С. 409-418
6. D.A. Dunavant High degree efficient symmetrical Gaussian quadrature rules for the triangle

## ВАЛИДАЦИЯ ЧИСЛЕННОЙ МОДЕЛИ ПЛАВЛЕНИЯ ОКТАДЕКАНА С ПОМОЩЬЮ ЛАБОРАТОРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Validation of a numerical melting model of octadecan using a laboratory experiment

Воропаев Р.А.1,2

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

*ПАО «РКК «Энергия», Королев, РФ*

*voropaeffff@yandex.ru*

**Аннотация.** В работе представлены результаты экспериментального и численного исследования процесса плавления, характерного для систем хранения скрытой тепловой энергии. Цель работы — оценить точность численных расчетов, обусловленных естественной конвекцией, с помощью эталонного эксперимента. Исследование сосредоточено на плавлении октадекана [1,2] в цилиндрической стеклянной колбе с теплоизолированными боковыми стенками, нагреваемой с одной стороны постоянной мощностью. Результаты показывают расходимость (до 30 %) численных расчетов с экспериментальными данными при больших мощностях нагрева. Однако для меньших мощностей таких ошибок не наблюдалось. Полученная расходимость может быть связана с использованием приближения Буссинеска, не учитывающем объемное расширение теплоаккумулирующего вещества (ТАВ).

### **Введение**

Процесс теплопередачи во время плавления широко исследуется в последнее время с применением расчетных, численного и экспериментальных методов. Особое внимание уделяется валидации численных моделей. Однако такие экспериментально-расчетные исследования, соответствующие трехмерным моделям, немногочисленны.

Решение задач с движущимися границами сложны, так как закон движения раздела фаз определяется конвекцией в жидком ТАВ, граничными условиями и скоростью, с которой скрытое тепло поглощается. Положение границы фазового перехода заранее неизвестно и является частью решения. Определение характеристик теплоотвода при фазовом переходе предполагает решение задачи Стефана для ТАВ. Аналитическое решение данной задачи существует только для одномерного случая [3]. Для любых других вариантов геометрии используют численные решения. Поэтому тепловой расчет производится численным методом в среде ANSYS Fluent. В работах [4,5] приведены результаты сравнения двух подходов к моделированию процесса плавления для случая нагрева ТАВ от боковой стенки при постоянной температуре. Первый подход, именуемый методом объема жидкости (VOF), основан на модели, учитывающей зависимость теплофизических свойств от температуры, в частности заполнение воздушной прослойки расплавленным веществом при его расширении. Во втором подходе используется приближение Буссинеска для плотности, в то время как остальные теплофизические свойства принимают постоянные значения. Результаты валидации метода VOF показывают незначительные отклонения расчета (до 4 %) доли жидкой фазы и суммарного теплового потока, однако для скоростей и температур различия более заметны (до 20 %). По мнению авторов работы [4], метод VOF предпочтителен для расчета систем с высоким градиентом температур, однако использование приближение Буссинеска даст достаточно точные результаты на этапе проектирования.

В работе будет использоваться приближение Буссинеска, как более быстрый способ расчетов тепловых аккумуляторов в цилиндрических корпусах. Статья содержит ре-

зультаты численных и лабораторных экспериментов, которые можно использовать для проверки модели нагрева теплоаккумулирующего вещества с постоянной мощностью.

### Описание работы

Лабораторно-исследовательский стенд показан на рисунке 1. ТАВ размещается в вертикально ориентированной колбе с внутренним диаметром и высотой 63,5 мм и 403,8 мм соответственно. Корпус колбы сделан из стекла с толщиной стенки 2,5 мм. Круглый нагреватель из нихромовой нити толщиной 2 мм и диаметром 63,5 мм закреплен на алюминиевую пластину толщиной 7,8 мм для равномерного нагрева ТАВ. Нагреватель питается от лабораторного автотрансформатора с возможностью регулировки мощности нагрева. Большая часть испытательной камеры обмотана пятью слоями теплоизоляции из вспененного полиэтилена, покрытого с одной стороны слоем фольги, и общей толщиной 13,75 мм. В качестве ТАВ используется октадекан ( $C_{18}H_{38}$ ) с температурой плавления 28,18 °С.

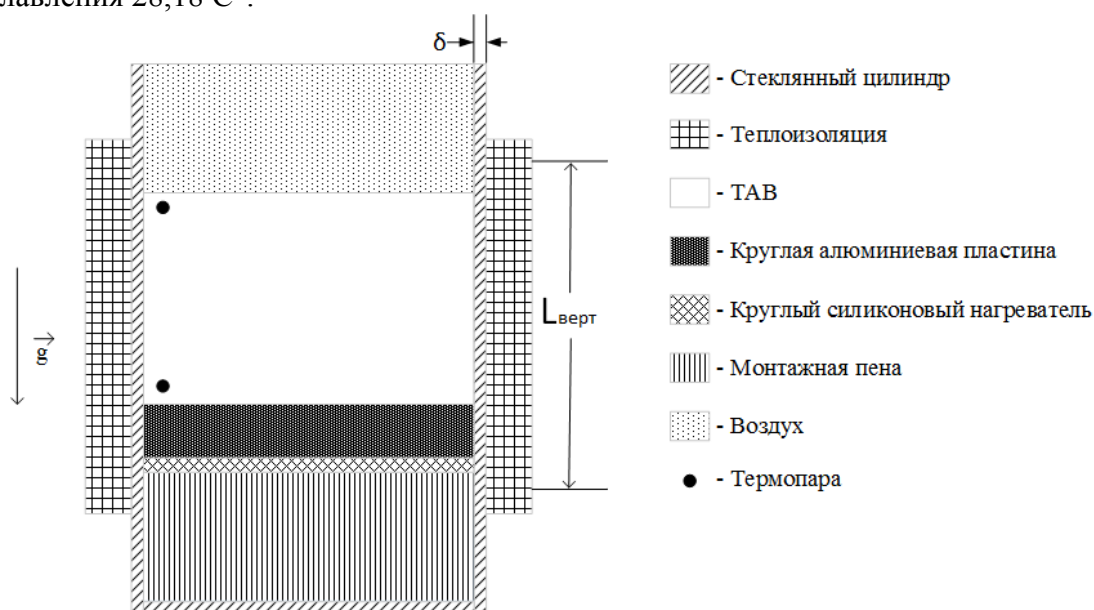


Рис. 2. Схема лабораторной модели

С помощью датчиков температуры и тепловизора оценивались тепловые потери за счет нагрева конструкции, радиационные и конвективные излучения во внешнее пространство.

Из полученных экспериментальных данных можно сделать оценки коэффициентов теплоотдачи с поверхности теплоизоляции и наружной плоскости ТАВ, и использовать их в качестве ГУ для модели Ansys Fluent.

Было разработано три численные модели с различными ГУ и размерностью. В первой модели использовался двухмерный подход к моделированию и не учитывались внешние потери тепла при нагреве и плавлении ТАВ. Вторая модель от первой отличается лишь учетом теплопотерь на нагрев конструкции и радиационного излучения. Третья модель использует трехмерный подход к моделированию и учитывает потери тепла в окружающее пространство. Для всех случаев применяется приближение Буссинеска и постоянные свойства ТАВ. Постоянная тепловая мощность подводится снизу от ТАВ. Соответствующие дискретные ее значения равны: 7,14 Вт и 34,23 Вт.

Зависимость доли расплавленного ТАВ для различных моделей при мощности нагрева 34,2 Вт представлен на рисунке 2. Характер движения границы фазового перехода имеет линейный характер за исключением начальных (до 0,1) и конечных (от 0,9) значений коэффициента расплавления - нелинейных участков. Такие нелинейности связаны с нагревом конструкции и конвективным излучением с поверхности теплоизоляции и нагретого ТАВ. Оценить среднюю скорость расплавления можно, найдя угловой коэффициент прямой для каждой зависимости. Большая расхожимость в средних скоро-

стях движения границ фазового перехода показывает, что для описания 3-х мерных случаев, модель с приближением Буссинеска дает существенную ошибку. Возможно, модель VOF, учитывающая объемные расширения ТАВ, даст лучшую верификацию с экспериментальными данными. Однако потребует больше вычислительной мощности. Для меньшей мощности нагрева – 7,1 Вт результат расчета лучше верифицируется с экспериментом. Отличие от эксперимента можно отнести к погрешности измерений.

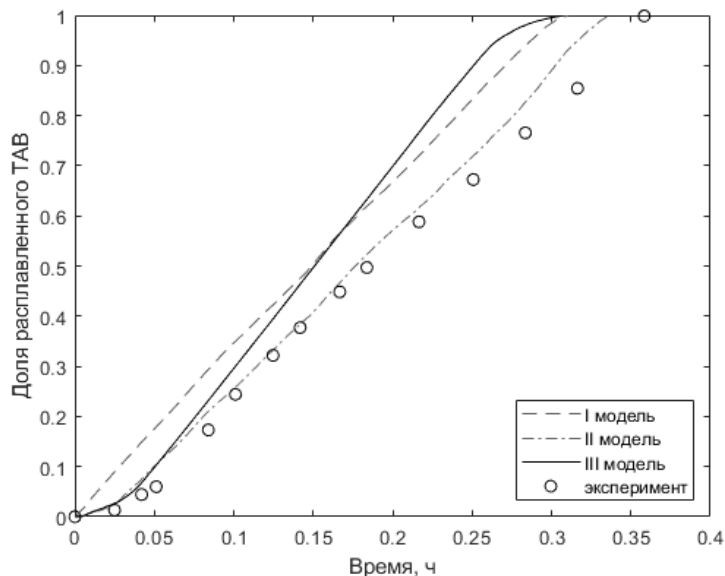


Рис. 2. Сравнение доли жидкой фазы для 3 численных моделей и эксперимента, мощность 34,2 Вт.

### Литература

1. Faden M. et al. Review of thermophysical property data of octadecane for phase-change studies //Materials. 2019. Т. 12. №. 18. С. 2974.
2. Galione PA, Lehmkuhl O, Rigola J, Oliva A. Fixed-grid numerical modeling of melting and solidification using variable thermo-physical properties – Application to the melting of n-Octadecane inside a spherical capsule. Int J Heat Mass Transf 2015; 86:721–43.
3. Faghri Amir, Zhang Yuwen. Fundamentals of Multiphase Heat Transfer and Flow. Springer, 2020.
4. Vogel, Julian, and André Thess. "Validation of a numerical model with a benchmark experiment for melting governed by natural convection in latent thermal energy storage." Applied Thermal Engineering 148 (2019): 147–159.
5. Vogel, Julian, and Dan Bauer. "Phase state and velocity measurements with high temporal and spatial resolution during melting of n-octadecane in a rectangular enclosure with two heated vertical sides." International Journal of Heat and Mass Transfer 127 (2018): 1264–127.

## РАЗРАБОТКА МОДЕЛИ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ЗАТОПЛЕНИЯ НАСЕЛЕННЫХ ПУНКТОВ АРКТИЧЕСКОЙ ТЕРРИТОРИИ КРАСНОЯРСКОГО КРАЯ

Гребнев Я. В.

ФГАОУ ВО СФУ, ИИФирЭ, Красноярск, Россия

E-mail: yaroslav.grebnev@gmail.com

С каждым годом возрастает количество природных катаклизмов вызванных влиянием паводковых вод [1]. Так на территории Красноярского края за последние 20 лет произошло более 800 случаев затопления подтопления территорий населенных пунктов, нанеших огромный экономический ущерб. Особенно данная проблематика акту-

альна в условиях активного освоения Арктики, где расположен населенный пункт Ворогово Туруханского района, подвергающийся ежегодно затоплению. В целях определения и планирования необходимых превентивных мероприятий в настоящее время широкое распространение получили методы математического моделирования по средствам применения специальных программных средств.

В целях получения детального прогноза прохождения паводковых вод в населенном пункте Ворогово была сформирована модель прохождения паводка, по средствам применения программного комплекса MODFLOW [2] и программного комплекса ArcGIS 10.5.1 [3] и Sufer14 [4].

Для выполнения работ по моделированию зон затопления бы выполнены работы по созданию цифровой модели рельефа путем проведения топографической съемки, и изучения гидрологического режима реки Енисей за период 2001–2022 гг. в районе населенного пункта Ворогово. В целях реализации моделирования движения поверхностных вод и затопления территорий были проведены расчеты выполнено общепринятым в гидрогеологии методом. На основе гидрологических расчетов были определены расходы обеспеченности необходимого стока и граничные условия моделирования. Моделирование производилось с использованием цифровой модели рельефа и карт характеристик поверхности. Расчеты зоны затопления корректировались с учетом данных Главного управления МЧС России по Красноярскому и сведений, полученных от ФГБУ «Средне Сибирское УГМС». Были установлены границы зон затопления территорий при половодьях с заторными явлениями (подпорными уровнями воды) 1% обеспеченности и их территории при половодьях с заторными явлениями 3%, 5%, 10%, 25%, 50% обеспеченности. Сформированы план противопаводковых превентивных мероприятий при прохождении паводка в 2023 году.

**Примечание:** Исследование выполнено при поддержке Красноярского краевого фонда науки в рамках реализации проекта: Применение технологий искусственного интеллекта для решения задач оценки рисков возникновения чрезвычайных ситуаций, вследствие климатических особенностей северных и арктических территорий. № КФ-915

#### Литература

1. Владимиров, А.М. Факторы определяющие возникновение экстремальных расходов и уровней воды половодья / А.М. Владимиров // Вестник Российской академии наук. 2012. №9. С. 3–6.
2. Modflow. [Электронный ресурс]: Режим доступа: <https://www.usgs.gov/software/modflow-6-usgs-modular-hydrologic-model>
3. Modflow. [Электронный ресурс]: Режим доступа: <https://www.esri.com/en-us/arcgis/about-arcgis/overview>
4. Sufer14 [Электронный ресурс]: Режим доступа: <https://www.filehorse.com/download-surfer/>

#### ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ПОДГОТОВКИ РАСПЛАВОВ К ЗАТВЕРДЕВАНИЮ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

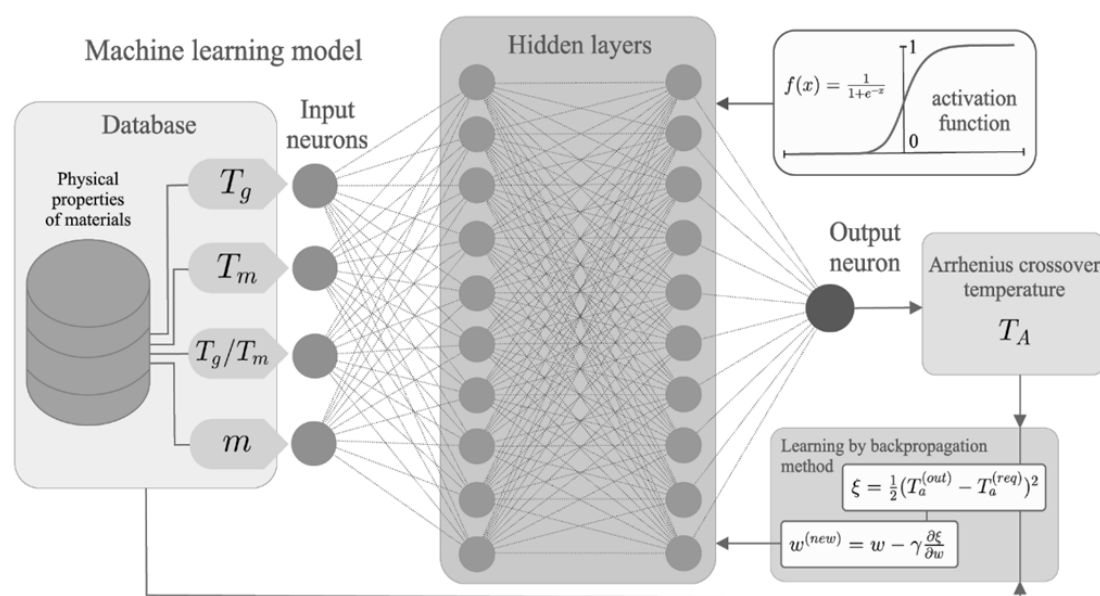
Доронина М.А., Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В.

Казанский (Приволжский) ФУ, Институт физики, Казань, Россия

E-mail: [maria.doronina.0211@gmail.com](mailto:maria.doronina.0211@gmail.com)

В последнее десятилетие значительно возрос интерес к изучению структурно-фазовых трансформаций, протекающих в стеклообразующих жидкостях [1]. Появляется все больше свидетельств того, что такие трансформации могут соотноситься со способностью жидкости формировать аморфное состояние [2]. Результаты недавних исследо-

ваний показывают, что способность жидкости формировать устойчивое аморфное состояние зависит от специфики изменений в её структуре и динамике, происходящих вблизи температуры плавления  $T_m$  [3]. Так, например, начало таких изменений в динамике атомов жидкости соотносится с температурой Аррениусовского перехода  $T_A$  [4]. Существующие эмпирические и теоретические методы оценки температуры  $T_A$  преимущественно основаны на анализе температурной зависимости вязкости жидкости (или времени структурной релаксации) и определении в этой зависимости высокотемпературного линейного режима [5], что представляет собой достаточно трудную задачу для большого класса стеклообразующих систем.



В настоящей работе с помощью модели машинного обучения выполнен расчёт температуры  $T_A$  для силикатов, боратов, органических соединений и металлических систем различного состава. В качестве входных параметров использовались эмпирические значения температуры стеклования  $T_g$ , температуры плавления  $T_m$ , отношения этих температур  $T_g/T_m$  и индекс хрупкости  $m$ . Установлено, что температуры  $T_g$  и  $T_m$  являются значимыми параметрами, в то время как их отношение  $T_g/T_m$  и индекс хрупкости  $m$  практически не коррелируют с температурой  $T_A$ . Важным результатом работы является уравнение, связывающее температуры  $T_g$ ,  $T_m$  и  $T_A$  и представляющее собой уравнение для искривленной поверхности второго порядка. Показано, что это уравнение позволяет выполнить корректную оценку температуры  $T_A$  для широкого класса материалов, независимо от их состава и аморфообразующей способности

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 19-12-00022). Теоретическая часть работы поддержана Фондом развития теоретической физики и математики «Базис» (проект № 20-1-2-38-1).

### Литература

1. C.A. Angell, M. Hemmati, Glass transitions and critical points in orientationally disordered crystals and structural glassformers: ("strong" liquids are more interesting than we thought) // AIP Conf. Proc. 2013. V. 1518. P. 9-17.
2. Y.S. Elmatad, D. Chandler, and J.P. Garrahan, Corresponding States of Structural Glass Formers // J. Phys. Chem. B. 2009. V. 113. P. 5563.
3. N.A. Mauro, M. Blodgett, M.L. Johnson, A.J. Vogt, K.F. Kelton, A structural signature of liquid fragility // Nat. Commun. 2014. V. 5. P. 4616.
4. C.A. Angell, Formation of Glasses from Liquids and Biopolymers // Science. 1995. V. 267. P. 1924.

5. G. Tarjus, D. Kivelson, and P. Viot, The viscous slowing down of supercooled liquids as a temperature- controlled super-Arrhenius activated process: a description in terms of frustration-limited domains // J. Phys.: Condens. Matter. 2000. V. 12. P. 6497.

## ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ ТРАЕКТОРНОГО УПРАВЛЕНИЯ СРЕДНЕМАГИСТРАЛЬНОГО САМОЛЁТА

Дружинин А.А.

МГТУ ГА, факультет авиационных систем и комплексов, Москва, Россия

E-mail: drusalexey@gmail.com

Из всех этапов полета управление самолетом при заходе на посадку и посадке является наиболее трудной операцией. Трудности управления особенно возрастает в условиях плохой видимости, когда зрительная ориентировка затруднена и невозможна. Для облегчения управления самолетом при посадке применяются различные системы захода на посадку, облегчающие ориентировку и позволяющие удерживать самолет на посадочной глиссаде (траектория полёта летательного аппарата, по которой он снижается). В современных самолетах эта роль выполняет система траекторного управления (СТУ). Для выполнения этой задачи информация о положение самолета по отношению к заданной глиссаде должна быть подана в СТУ. Вследствие чего СТУ в автоматическом или полуавтоматическом режиме совмещает угол заданной и текущей глиссады с помощью воздействия на элементы управления самолета.[1]

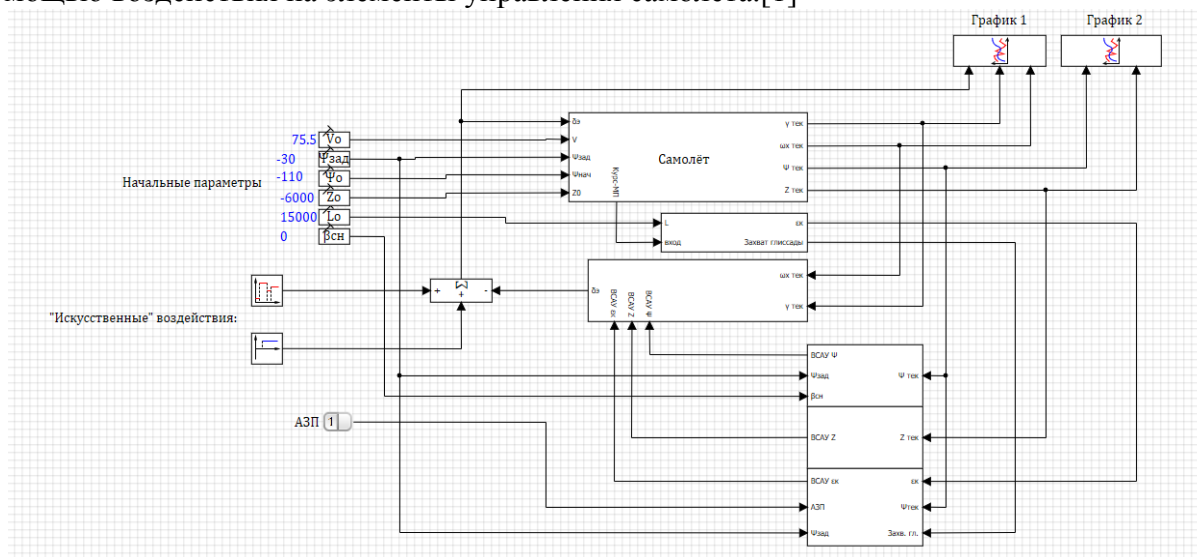


Рис. 1. Схема системы «самолёт - система траекторного управления»

В работе рассматривается математическое и имитационное моделирование системы «самолёт–система траекторного управления» в 4 режимах работы, а именно: «Заход на посадку по РЛК», «Управление и стабилизация путевого угла», «Стабилизация линейного отклонения от ЛЗП», «Управление и стабилизация углом тангажа», в ответ на управляющие воздействия и внешние возмущения, имеющие ступенчатый, импульсный и случайный характер в исправном состоянии и при имитации отказов датчика угла тангажа, датчика угловой скорости тангажа и радиотехнической системы определяющей угловое отклонение от равносигнальной линии глиссады. Определяются математическое ожидание, дисперсия и среднееквадратическое отклонение для приращения угла тангажа, крена, в ответ на внешние возмущения, имеющие случайный характер.[2]

На рис.1 изображена имитационная схема системы «самолёт–система траекторного управления».



Данная система выдает управляющие значения на элероны в зависимости от разницы между текущим и заданным углами курса. Входными сигналами является значение скорости, курса ВПП, начального курса, начального отклонения от линии заданного пути, угла сноса, расстояния до курсового радиомаяка. Внешними возмущениями являются: ступенчатое отклонение элеронов и случайный порыв ветра.

На рис. 2 показаны переходные процессы замкнутой системы «самолёт–система траекторного управления», полученные в результате имитационного моделирования при ступенчатом внешнем отклонении элеронов. Из анализа полученных переходных процессов следует, что при правильной работе системы переходные процессы имеют высокие показатели качества и устойчивости. Система «самолёт–система траекторного управления» полностью выполняет задачи автоматического управления и стабилизации в траекторном управлении самолета.

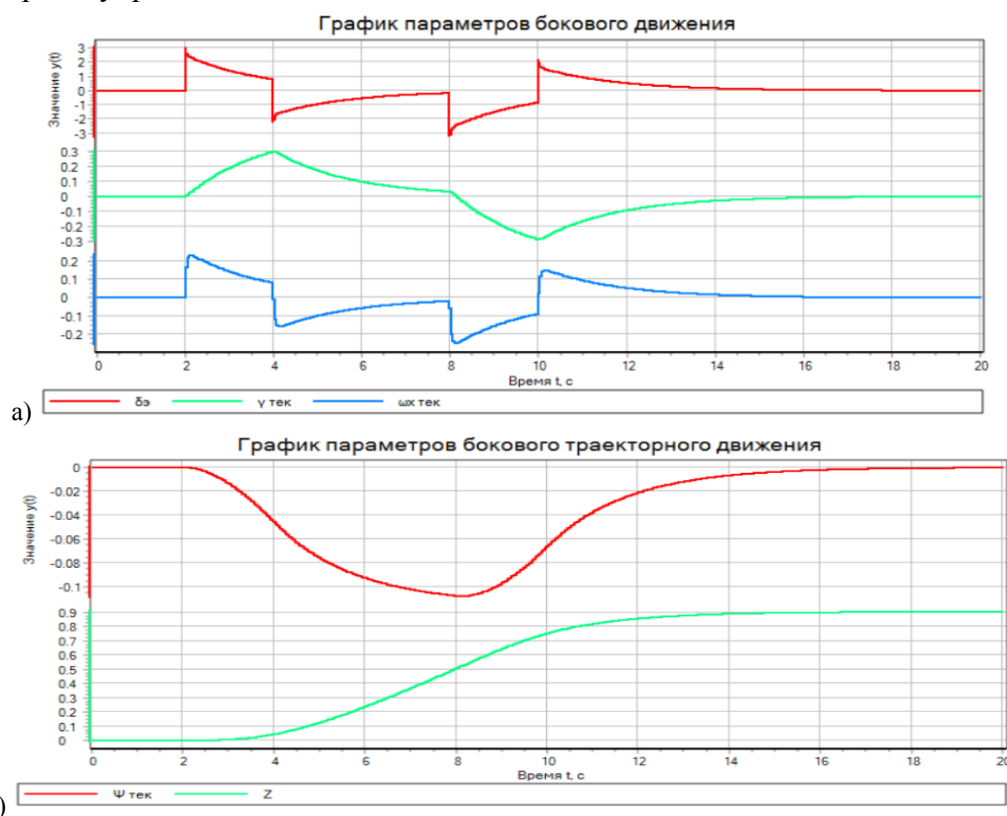


Рис. 2. Переходные процессы замкнутой системы «самолет - система траекторного управления», при ступенчатом внешнем отклонении элеронов: а) переходные процессы показывающие положение элеронов, угла крена, угловой скорости ; б) переходные показывающие значения текущего и заданного угла курса.

Имитационная модель, продемонстрированная в работе, позволяет исследовать переходные процессы, частотные, статистические характеристики траекторного управления самолета при полете и при заходе на посадку по равносигнальной линии глиссады. Таким образом работа актуальна, поскольку «самолет–система траекторного управления» позволяет исследовать и прогнозировать характер движения самолета на маршруте и заходе на посадку в различных условиях полета до летных испытательных испытаний.

### Литература

1. В.Г. Воробьев, С.В. Кузнецов. Автоматическое управление полетом самолетов: Учеб. для вузов. – М.: Транспорт. 1995. – 448 с.
2. Дружинин, А. А. Имитационная модель системы автоматического управления / А. А. Дружинин // Сборник лучших докладов студенческой научно технической конференции МГТУ ГА, посвященной 50-летию университета: Материалы конференции, Мо-

сква, 14 апреля 2021 года. – Москва: Московский государственный технический университет гражданской авиации, 2021. – С. 76- 79. – EDN ВJYKGF.

## ЭФФЕКТИВНАЯ МИНИМИЗАЦИЯ ТОЛЩИНЫ ПОГЛОЩАЮЩЕЙ ПЛАСТИНЫ В ЭКСПЕРИМЕНТАХ ПО РАССЕЯНИЮ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ МЕТОДАМИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Евстафьев Е. Е.

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

*E-mail: egorezbalka@gmail.com*

Для проведения высокоточных экспериментальных исследований рассеивающих свойств объектов необходимы соответствующие измерительные стенды. Возможности измерительного стенда характеризуются его важнейшими параметрами: размером рабочей зоны, диапазоном рабочих частот электромагнитной волны и точностью измерения эффективной площади рассеяния (ЭПР) и других параметров объектов [1]. Точность измерения характеристик зависит не только от неравномерности распределения поля в рабочей зоне измерительного стенда, но и от других факторов, в частности от влияния конструкций, находящихся вблизи объекта измерения [2].

Можно выделить две основные причины, вызывающие искажения результатов измерений, связанные с присутствием пилона в рабочей зоне БЭК. [2,3]. Первая – рассеяние падающей волны непосредственно на пилоне, и, поскольку его размеры могут быть сравнимы или же превышать размеры исследуемого объекта, влияние рассеянного на нём поля на измерения может оказаться значительным. Второй причиной является взаимодействие объекта и пилонa, а именно переотражение между ними.

Для эффективного уменьшения переотражений между исследуемым объектом и опорой (пилоном) можно разместить между ними слой радиопоглощающего материала (РПМ), который поглотит излучение, отражённое от объекта в сторону опоры. Такой слой будет работать эффективно, если подобрать его характеристики (материал, толщину) таким образом, чтобы минимизировать коэффициенты прохождения и отражения такого слоя, поскольку любой реальный РПМ как отражает, так и пропускает падающее на него излучение, пусть и меньше, чем другие материалы.

В данной работе будут рассмотрены два типа пластин: «РПМ-металл» и «РПМ-пластик». Таким образом, цель работы – для обеих конфигураций определить минимальную толщину пластины при которой коэффициент отражения будет близок к коэффициенту отражения от полупространства (модели, в которой толщина РПМ бесконечна, и поле отражается только от верхней поверхности РПМ), а коэффициент прохождения будет на достаточно низком уровне - 10Дб. Значения коэффициентов отражения будем сравнивать с коэффициентом отражения на частоте 2.5ГГц для ( $R_{lim}$ ), состоящего из РПМ, поскольку достичь более низкого значения коэффициента отражения на всём спектре частот будет невозможно.

Чтобы найти оптимальную толщину РПМ сразу на всём диапазоне частот нужно найти толщину, при которой максимальная по частотам разность между значением коэффициента отражения и  $R_{lim}$  минимальна. Для решения задачи поиска минимума толщины слоя РПМ в пластине «РПМ-металл» был выбран метод золотого сечения, поскольку он не накладывает строгих требований на исследуемую функцию. Задача поиска минимума для пластины «РПМ-пластик» является двумерной, поскольку минимизировать надо одновременно толщину РПМ и толщину пластика, для чего можно применять метод координатного спуска.

Исследования методом математического моделирования показали, что для пластины «РПМ-металл» первый минимум будет при толщине 84,4мм, но, отклонение от  $R_{lim}$  в -35Дб может быть избыточным, поскольку в качестве  $R_{lim}$  был выбран уровень в -16,8Дб, и толщина РПМ 84,4мм слишком велика. На толщинах 30-35мм уже практиче-

ски достигается уровень отражения от полупространства, что уже может дать хороший результат. В случае, если требуется сделать коэффициент отражения ниже, то следует брать толщину РПМ около 80мм, вблизи оптимума, поскольку меньшие толщины не дадут заметного выигрыша в результатах.

Теперь перейдём к пластине РПМ-пластик. Даже для сравнительно тонкой пластины РПМ в 30мм можно добиться приемлемых отклонений от  $R_{lim}$  в -29,5Дб. Использование более тонкого слоя РПМ достаточно важно, поскольку, в отличие от пластика, он достаточно дорог в изготовлении.

#### Литература

1. L. Hemming. Electromagnetic Anechoic Chambers: A Fundamental Design and Specification Guide, Wiley-Interscience, John Wiley and Sons and IEEE Press. Piscataway, New Jersey: 2002
2. N.P. Balabukha, A.S. Zubov, V.S. Solosin, Compact range for measurements of object scattering characteristics, Moscow, Nauka Publ. 2007. 266p.
3. E. F. Knott, Radar cross section measurements. – Springer Science & Business Media, 2012.

### МЕТОД ДЕКОМПОЗИЦИИ В ЗАДАЧЕ АКУСТИЧЕСКОГО ЗОНДИРОВАНИЯ АНИЗОТРОПНОЙ СТРУКТУРЫ АТМОСФЕРЫ

Закиров М.Н.

*ИФА им. А.М. Обухова РАН, радиоакустическая лабор., Москва, Россия  
e-mail: zakirov.mn16@physics.msu.ru*

Многие природные и техногенные процессы порождают инфразвуковые сигналы. Низкочастотная составляющая акустических сигналов в силу малого затухания способна распространяться на многие сотни километров в атмосферных слоях. Инфразвуковая составляющая сигналов может нести в себе информацию как о процессах большой мощности, происходящих на Земле, таких как взрывы, извержения вулканов, землетрясения, так и информацию о структуре атмосферы, от неоднородных слоев которой происходит отражение сигнала.

Обнаружение инфразвуковых сигналов на фоне шумов является достаточно сложной задачей [3]. Ее сложность связана с неопределенностью в моделях сигналов, интересующих исследователя, нелинейными эффектами прохождения волн через атмосферу, влиянием фоновых помех.

В настоящей работе предложен метод обнаружения участков сигнала, содержащий полезный сигнал заданной формы. Построена математическая модель инфразвукового сигнала как сумма составляющих его отдельных импульсов, приходящих с разными задержками, и шумовой составляющей. В качестве отдельных составляющих сигнала выбраны сигналы в виде N- и U-волн [2]. Волны с данной формой часто встречаются в реальных экспериментах. Выбран способ оценки ширины волн, алгоритм построения системы данных функций в конечномерном пространстве и показана ее линейная независимость.

Задача декомпозиции заключается в оценке амплитуд, времен задержек и количества волн, зарегистрированных акустическими микрофонами. Для решения задачи декомпозиции можно применять методы линейной регрессии или теории измерительно-вычислительных систем [1].

Исследовались сигналы различной природы, записанные в разных точках Земли. Проведена декомпозиция сигналов для представления его огибающей с помощью нескольких N- и U-волн. Получены графики зависимостей квадратов модулей волн от их сдвига. Построены графики зависимости энергии синтезированного сигнала от числа волн, используемых при его декомпозиции. Если энергия волны превышает заданный порог, сигнал в текущий момент времени считается зарегистрированным. Приведенные

результаты свидетельствуют об эффективности метода для декомпозиции сигнала на составляющие его части.

#### Литература

1. Пытьев Ю.П., Чуличков А.И. Методы морфологического анализа изображений. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010
2. Чунчузов, И. П. et al. Об отражениях акустической N-волны от слоистых неоднородностей атмосферы Известия Российской академии наук. Физика атмосферы и океана (2013),49(3): 285 URL: <https://doi.org/10.7868/S0002351513020065>
3. Чунчузов И.П., Куличков С.Н. Распространение инфразвуковых волн в анизотропной флуктуирующей атмосфере. М.: ГЕОС, 2020, 260 с.

### ИССЛЕДОВАНИЕ УПРУГИХ СВОЙСТВ СИСТЕМЫ Ti–Nb–Zr МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Зеленина А.И.<sup>1,2</sup>, Колотова Л.Н.<sup>3</sup>, Стариков С.В.<sup>4</sup>

<sup>1</sup>МФТИ, Физтех-школа электроники, фотоники и молек. физики, Долгопрудный, Россия  
<sup>2</sup>ОИВТ РАН, <sup>3</sup>НИУ ВШЭ, Москва, Россия; <sup>4</sup>ICAMS, Bochum, Germany  
*zelenina.ai@phystech.edu*

Сплавы на основе титана, имеющие ОЦК-решётку, обладают аномальными механическими свойствами: низкими для металлов упругими константами, демонстрируют инвар- и элинвар-эффекты [1]. В связи с этим данные материалы имеют перспективы в сфере медицины, автомобильной, аэрокосмической и химической промышленности, благодаря биосовместимости, коррозионной стойкости и относительно низкому модулю Юнга [2]. Для прогнозирования свойств и поведения сплавов в реальных условиях необходимо изучить температурные зависимости упругих характеристик.

В данной работе рассчитаны упругие константы чистых веществ и сплавов методом молекулярной динамики с использованием пакета LAMMPS [3]. Проведено сравнение с существующими экспериментальными данными и *ab initio* расчётами. В приближениях Войта-Рейса-Хилла получены значения модулей Юнга и модулей всестороннего сжатия в широком диапазоне температур. Для сплава Ti-22Nb-6Zr и чистого Ti наблюдаются элинварные свойства, что согласуется с экспериментами [4]. Оценены значения коэффициента термического расширения. Также рассчитаны упругие константы титана с ГПУ-решёткой. Работа выполнена с использованием потенциала формата ADP для системы Ti-Nb-Zr, разработанного в 2022 году.

#### Литература

1. Saito T. et al. Multifunctional alloys obtained via a dislocation-free plastic deformation mechanism // Science. – 2003. – Т. 300. – №. 5618. – С. 464-467.
2. Leyens C., Peters M. (ed.). Titanium and titanium alloys: fundamentals and applications. – John Wiley & Sons, 2003.
3. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // Journal of computational physics. – 1995. – Т. 117. – №. 1. – С. 1-19.
4. Brailovski V. et al. Bulk and porous metastable beta Ti–Nb–Zr (Ta) alloys for biomedical applications // Materials Science and Engineering: C. – 2011. – Т. 31. – №. 3. – С. 643–657.

### МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ НАНООБЪЕКТОВ НИКЕЛЯ В КОЛЛОИДНОМ РАСТВОРЕ

Зотов А.И., Бухаров Д.Н.

ВлГУ им. А.Г. и Н.Г. Столетовых, физический факультет, Владимир  
E-mail: *artem.zotov.2001@inbox.ru*

Системы металлических нанобъектов представляют интерес для технологических приложений, поскольку они проявляют отличные от большинства образцов полезные свойства и характеристики. Благодаря таким особенностям системы претерпевают бурное развитие в областях наноиндустрии. Одним из удобных методов получения систем металлических нанобъектов является лазерный синтез из коллоидного раствора массивной мишени [1].

Так, в ходе эксперимента применялся фемтосекундный комплекс типа Ti:Sp с энергией излучения  $E = 80$  мДж. Непрерывный лазер с длиной волны  $\lambda = 720$  нм и диаметром пучка 30–100 мкм воздействовал на твердую никелевую мишень, погруженную в глицерин. Полученные системы частиц выдерживались и образовали наноструктуры порядка 30–100 нм.

Исследования показывают [3], что наночастицы Ni формируют нетривиальные процессы, требующие объективного моделирования. В данном случае математическая модель образования нанобъектов Ni проводилась основе уравнения Смолуховского [4]. Оператор  $K$  в этом уравнении является ядром, позволяющий интерпретировать аддитивное взаимодействие частиц  $x$  и  $y$ . Значения  $(k-p, p)$  и  $(p, k-p)$  являются размерами сталкивающихся агрегатов в течение времени  $t$ . Числа  $n_{k-p}$ ,  $n_p$ ,  $n_k$  – концентрация частиц.

На скорость движения нанобъектов, проходящие по узлам решетки, влияют вязкость жидкой фазы раствора и мощность лазерного излучения. В модели влияние на скорость можно неявно учитывать путем выбора соответствующей функции  $K$ , где  $v$  – максимальная скорость, эквивалентен 10 отн. ед.  $N_i$  – величина  $i$ -го агрегата в отн. ед.

Уравнение Смолуховского, дополненное начальными условиями  $K$ , с учетом функции максимальной скорости, являлось основой моделирования кластер-кластерной агрегации на двумерной области  $50 \cdot 50$  отн. ед и решалось методом клеточного автомата [5]. В нижней части условно располагалась мишень, из которой вылетали модельные частицы с относительными размерами  $i$  от одного до пяти и более.

Случайное движение модельных объектов осуществлялось по узлам решетки и, сталкиваясь с другими агрегатами, распадались с заданной вероятностью  $p$  или объединялись. Так объект  $i$  величиной  $N_i$  в зоне воздействия лазера распадался с вероятностью 80% или объединялись друг с другом с вероятностью 20%. С другой стороны, находясь вне области лазерного воздействия при встрече они слипались с вероятностью 80% и распадались с вероятностью 20%.

Расчеты, проведенные по предоставленной модели, демонстрируют картину формирования системы нанобъектов с разветвленной структурой, когда имеется зависимость длин ветвей от времени, скорости и вероятности отсоединения частицы. Так, рисунок 1 иллюстрирует то, что с увеличением скорости  $v$  формируются достаточно однородные, хорошо заполненные агрегаты с недлинными ветвями (рисунок 1в). В случае уменьшения величины скорости структура агрегатов становится более разветвленной и неоднородной (рисунок 1а, б).

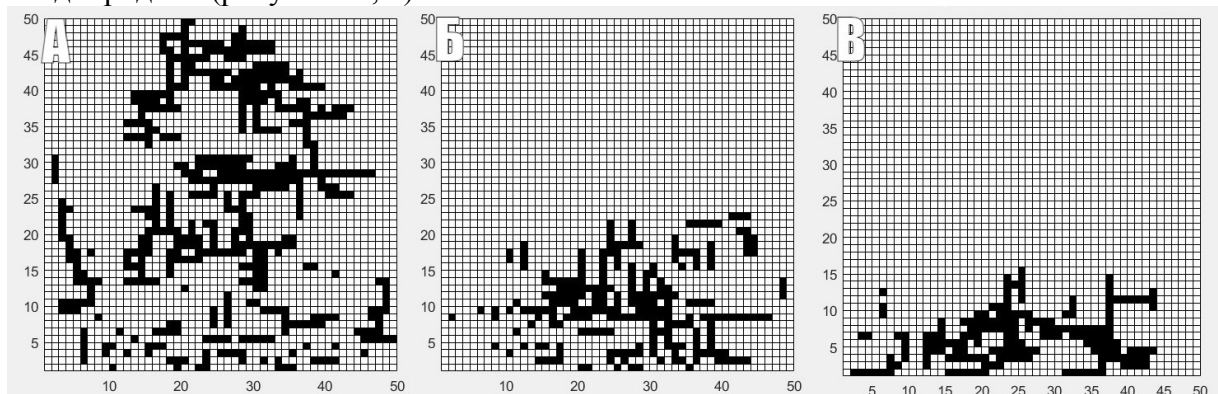


Рис. 1. Полученные агрегаты с максимальными скоростями а)  $v = 10$  отн. ед.; б)  $v = 20$  отн. ед.; в)  $v = 30$  отн. ед.

На рисунке 2 приведены системы модельных объектов при различных значениях вероятности отлипания. При величине вероятности отлипания близкий к нулю (рисунок 2в), агрегат обрастает широкими ветками, занимающий практически всю расчетную область и формирует общую поверхность. В случае увеличения вероятности отлипания процесс агрегации протекает менее интенсивно, объекты совершают большие перемещения, формируя множество несвязанных друг с другом объектов небольшого размера (рисунок 2а, б).

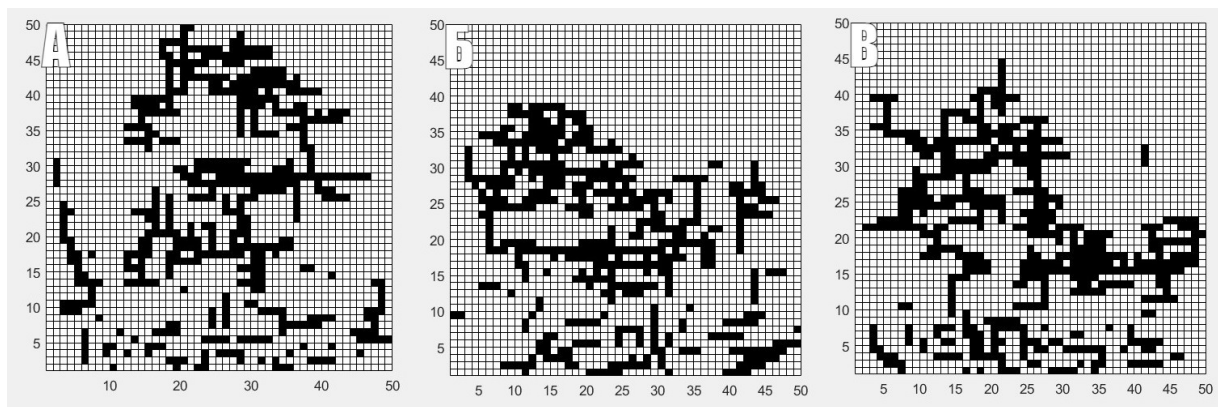


Рис. 2. Полученные агрегаты через вероятность отлипания при а)  $p = 0.8$ ; б)  $p = 0,5$ ; в)  $p = 0.2$ .

Таким образом, предложенная модель позволяет получить достаточно адекватные результаты с погрешностью в среднем не превосходящей 10%, поэтому она полезна в задачах получения металлических нанообъектов.

### Литература

1. Зырянов, Р. С. Развитие фрактальных моделей агрегации коллоидных частиц / Р. С. Зырянов. — Текст: непосредственный // Молодой ученый. 2016. № 24 (128). С. 72–76.
2. Исследование процессов получения наночастиц благородных металлов при лазерном воздействии на мишени в жидких средах // Аракелян С.М., С.В., Кучерик А.О. и др. Известия кабардино-балкарского государственного университета. 2014. Т.4. №3. С. 104–108.
3. В. А. Галкин, “Об уравнении Смолуховского кинетической теории коагуляции для пространственно неоднородных систем”, Докл. АН СССР, 285:5 (1985), 1087–1091.
4. А. И. Лобанов Модели клеточных автоматов компьютерные исследования и моделирование 2010 Т. 2 № 3 С. 273–293.

## РАСЧЕТ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ОТКЛИКА ПРЕДСТАВИТЕЛЬНОГО ОБЪЕМА ТРЕХФАЗНОГО МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО КОМПОЗИТА В 2D ПОСТАНОВКЕ

Игнатов А. А.

*БФУ имени Иммануила Канта, Калининград, Россия*  
*artem.ignatov98@gmail.com*

К магнитоэлектрическим композитам в последние несколько лет наблюдается повышенный интерес [1]. Данный факт объясняется широким спектром применения магнитоэлектрических композитов. Например, данные материалы можно использовать для изготовления сенсоров магнитного и электрического полей [1, 2], устройств для “energy harvesting” (сбор “мусорной” энергии) [2, 3], в биомедицинских приложениях [4].

При изготовлении магнитоэлектрических композитов необходимо учитывать множество факторов — тип, размер и концентрация ферромагнитных и сегнетоэлектриче-

ских частиц, механические свойства матрицы и т.д. [5]. Одним из методов исследования таких материалов является компьютерный эксперимент [6].

В данной работе методом компьютерного моделирования рассматривается зависимость от различных параметров прямого магнитоэлектрического эффекта в представительном объеме мультиферроидного композита. Мультиферроидный композит — эластомерная матрица (эластомер с модулем Юнга 1МПа) с ферромагнитными и сегнетоэлектрическими (титанат бария) включениями субмикронного размера.

При написании программного кода применялся язык Python с использованием пакета FEpiCS для реализации метода конечных элементов.

*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 РНФ 21-72-30032.*

### Литература

1. Pereira, N.; Lima, A.C.; Lanceros-Mendez, S.; Martins, P. Magnetoelctrics: Three Centuries of Research Heading Towards the 4.0 Industrial Revolution. *Materials* 2020, 13, 4033.
2. Vidal, J.V.; Turutin, A.V.; Kubasov, I.V.; Kislyuk, A.M.; Kiselev, D.A.; Malinkovich, M.D.; Parkhomenko, Y.N.; Kobeleva, S.P.; Sobolev, N.A.; Kholkin, A.L. Dual Vibration and Magnetic Energy Harvesting with Bidomain LiNbO<sub>3</sub>-Based Composite. *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control* 2020, 67, 1219–1229.
3. Makarova, L.A.; Alekhina, J.; Isaev, D.A.; Khairullin, M.F.; Perov, N.S. Tunable layered composites based on magnetoactive elastomers and piezopolymer for sensors and energy harvesting devices. *J. Phys. D Appl. Phys.* 2020
4. Murzin, D.; Mapps, D.J.; Levada, K.; Belyaev, V.; Omelyanchik, A.; Panina, L.; Rodionova, V. Ultrasensitive Magnetic Field Sensors for Biomedical Applications. *Sensors* 2020, 20, 1569
5. SKang, S.; Choi, K.; Nam, J.D.; Choi, H.J. Magnetorheological elastomers: Fabrication, characteristics, and applications. *Materials* 2020, 13, 4597
6. Makarova Liudmila A., Isaev Danil A., Omelyanchik Alexander S., Alekhina Iuliia A., Isaenko Matvey B., Rodionova Valeria V., Raikher Yuriy L., Perov Nikolai S. Multiferroic Coupling of Ferromagnetic and Ferroelectric Particles through Elastic Polymers. *Polymers* 2022, 14(1), 153

### МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПИСАНИЕ ПРОЦЕССА ЛАЗЕРНОГО ПРОПЛАВЛЕНИЯ ПОВЕРХНОСТИ СТАЛИ

Камильянова А.А., Ладьянов В. И., Лебедев В.Г.

*Удмуртский ФИЦ УрО РАН, г. Ижевск, Россия*

*E-mail: anna.kamil@mail.ru*

На сегодняшний день есть достаточно много сфер производства, где технологии лазерной обработки прочно закрепили за собой особое место, как менее энергозатратный и очень точный метод обработки. Прогресс лазерных технологий всецело зависит от продолжения работ по созданию физических моделей и совершенствованию характеристик лазерных установок, технического и компьютерного оборудования [1, 2]. Целью данного исследования было изучение моделей описания процессов структурообразования и демонстрация возможности моделирования процесса лазерной обработки на базе программного пакета с существующими моделями тепломассопереноса.

Модельное описание данного процесса представляет собой нагрев стальной пластины, находящейся в воздушной среде, высокоэнергетическим лазерным излучением. В ходе чего в стальной пластине происходит ряд физических процессов. Учет всех явлений с одной стороны помогает с особой точностью прогнозировать ход процесса, но

также и усложняет физико-математическую постановку задачи. Поэтому мы ограничимся описанием тепловых и диффузионных явлений в квазиравновесном приближении. А в качестве известной проверенной модели для процессов плавления-затвердевания может быть выбрана модель двухфазной зоны [3]. Этого вполне будет достаточно для первоначального шага к моделированию влияния лазерного излучения на свойства материала.

В ходе исследований и ряда расчетных работ по моделированию были получены графики зависимостей концентрационных и температурных полей, а также их профили.

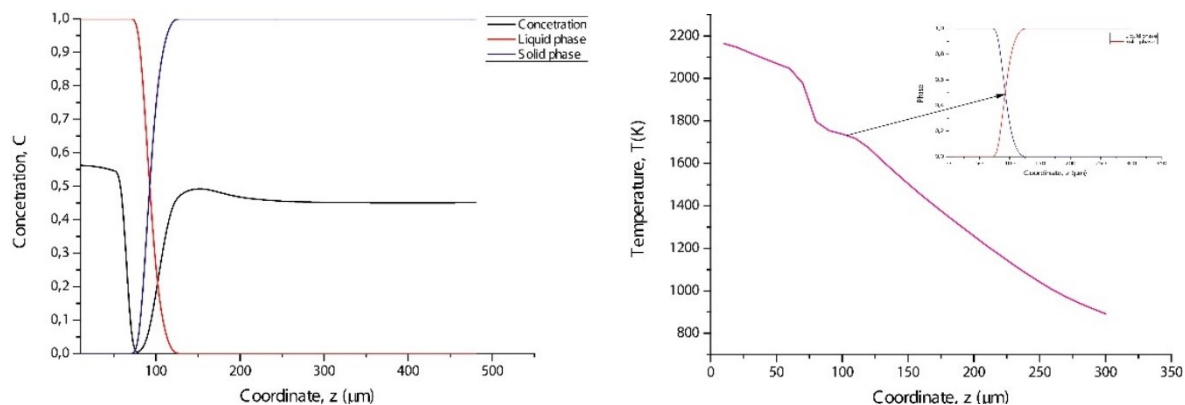


Рис.1. Графики зависимости температуры и концентрации углерода вдоль оси  $z$  в момент прекращения действия лазерного излучения  $\tau = 10$  мс.

На рис. 1. представлены графики  $T$  и  $C$  относительно центра лазерного пятна при одном режиме лазерного облучения. Моделируя процесс, мы можем явно проследить движение границы 2-фазной зоны и оценить глубину проплавленного слоя.

Полученные данные способствуют более глубокому пониманию процессов структурообразования при лазерной обработке и дальнейшему развитию используемой модели для её применения в более сложных системах.

### Литература

1. Лазерные технологии обработки материалов: современные проблемы фундаментальных исследований и прикладных разработок / Под ред. В.Я. Панченко. - М.: Физматлит, 2009. с. 664.
2. Steen W.M. Laser material processing. London: Springer, 2010. 558 p.
3. Борисов В. Т. Теория двухфазной зоны металлического слитка. М.: Metallurgia, 1987. 224 с.

## ЭЛЕКТРОМАГНИТНО-АКУСТИЧЕСКИЙ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЬ ДЛЯ БЕСКОНТАКТНОЙ ДЕФЕКТОСКОПИИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ КОНСТРУКЦИЙ

<sup>1</sup>Можайко А. А., <sup>2</sup>Королева Д.С.

С.-Пб. ПУ Петра Великого, <sup>1</sup>Институт электроники и телекоммуникаций,

<sup>2</sup>Физико-механический институт, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: annaanna-1996@mail.ru, daako@vk.com

Важной технической задачей всегда являлась своевременная диагностика повреждений труднодоступных сварных соединений и металлоконструкций опасных производственных объектов в промышленности, энергетике и жилищно-коммунальном хозяйстве. В большинстве используемых ультразвуковых дефектоскопов возбуждают звуковую волну пьезоэлектрические преобразователи, вследствие чего возникает необходимость обеспечения хорошего акустического контакта излучающей поверхности



пьезоэлектрического преобразователя с поверхностью контролируемых изделий, что не всегда бывает возможным. Решить данную проблему позволяет использование электромагнитно-акустических преобразователей, дающих возможность возбуждать и детектировать ультразвуковую волну бесконтактным методом, с зазором между поверхностью металла и датчиком до 3 мм. Применение электромагнитно-акустических преобразователей позволяет проводить измерения дефектов сварных швов и основного металла трубопроводов без применения контактной жидкости и зачистки защитного покрытия.

Главным преимуществом многоэлементных преобразователей в использовании является возможность фокусировки и углового сканирования ультразвукового луча для исследования труднодоступных областей объекта контроля. В данном проекте рассматриваются многоэлементные бесконтактные электромагнитно-акустические преобразователи в виде фазированных решеток отдельных катушек с током.

Исследование процесса образования ультразвукового пучка в электромагнитно-акустических преобразователях с помощью компьютерного моделирования является оптимальным и эффективным современным способом экономии финансовых и временных ресурсов, необходимых для изготовления большого числа прототипных образцов электромагнитно-акустических преобразователей и проведения физического моделирования. Компьютерное моделирование позволяет определить оптимальные конфигурации единичных элементов фазированной решетки электромагнитно-акустического преобразователя, которые обеспечивают наиболее равномерную диаграмму направленности при наивысшей рабочей частоте и при максимальном рабочем зазоре. В качестве основного инструмента расчета электромагнитно-акустических полей выбран конечно-элементный пакет COMSOL Multiphysics.

Расчет акустического поля проводился на стальном полусферическом образце диаметром 110 мм для волн типов SV и SH и на плоскопараллельном образце для волн типа SH Guided. Геометрия расчетной области стального полусферического образца и плоскопараллельного образца представлена на рисунке 1.

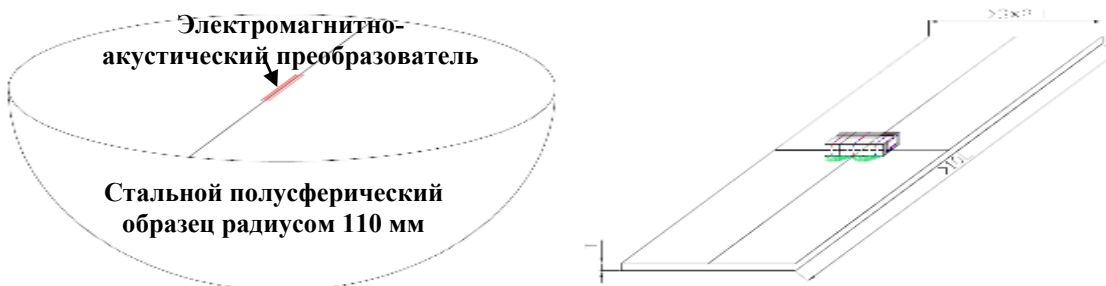


Рис. 1. Геометрия расчетной области. А) Стальной полусферический образец. Б) Плоскопараллельный образец.

На рис. 2 в качестве примера диаграмма направленности поперечной волны.

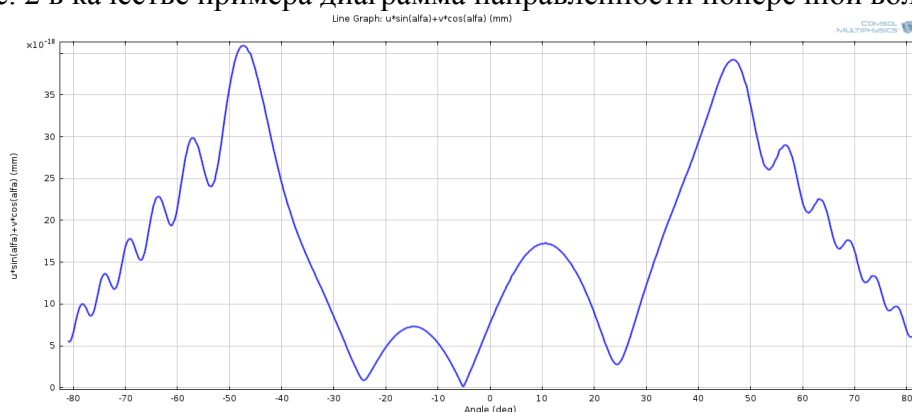


Рис. 2. Диаграмма направленности поперечной волны на расстоянии 60 мм.

На основании полученных расчетов была выбрана оптимальная конфигурация единичного элемента электромагнитно-акустической фазированной антенной решетки SV-волн, которая обеспечивает при наивысшей рабочей частоте и при максимальном рабочем зазоре, наиболее равномерную характеристику направленности.

### Литература

1. Осипов Л.В. Ультразвуковые диагностические приборы. Практическое руководство для пользователей / Л.В. Осипов. – М.: Видар, 1999. – 256 с.
2. Васильев А.Н. Электромагнитное возбуждение звука в металлах / А.Н. Васильев, В.Д. Бучельников, С.Ю. Гуревич, М.И. Каганов, Ю.П. Гайдуков; отв. ред. В.М. Березин. – Челябинск – М.: Изд-во ЮУрГУ, 2001. – 339 с.
3. Комаров В.А. Квазистационарное электромагнитно-акустическое преобразование в металлах / В.А. Комаров. – Свердловск: УНЦ АН СССР, 1986. – 235 с.
4. Воронков В.А. О применимости технологии антенных решеток в решении задач УЗК опасных производственных объектов / В.А. Воронков, И.В. Воронков, В.Н. Козлов и др. // В мире неразрушающего контроля. – 2011. – N 1(51). – С. 64–70.
5. Антенны и устройства СВЧ. Проектирование фазированных антенных решеток. Учебное пособие / Под ред. Д. И. Воскресенского. – М.: Радио и связь, 1994. – 592 с.

## РАСПРОСТРАНЕНИЕ ТЕРАГЕРЦОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В УСЛОВНО-СВОБОДНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Костромькина В.В.<sup>1,2</sup>, Рогожников Г.С.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Филиал МГУ имени М.В. Ломоносова в г. Сарове,

<sup>2</sup>Российский ФЯЦ – ВНИИЭФ, Саров, Россия

E-mail: varya\_kostr@mail.ru

Одной из важнейших задач дистанционного зондирования в терагерцовом диапазоне частот [3] является обработка и восстановление сигналов, отраженных от исследуемых объектов, и имеющих значительные искажения, связанные с распространением в атмосфере и прохождением через непрозрачные для наблюдателя диэлектрические преграды. В данных целях используются различные алгоритмы, для реализации которых необходима математическая модель, описывающая все типы взаимодействий терагерцового излучения с веществом на всем протяжении от источника до приемника. В данной работе описывается модель условно-свободного пространства, позволяющая оценить по мере распространения терагерцовых пучков в чистой атмосфере и атмосфере, содержащей туман и осадки [1], столкновительные реакции кислорода с молекулами воды (источник стороннего континуума), собственные столкновительные реакции молекул воды (собственный континуум) [4], поглощение на вращательных переходах составляющих атмосферу газов, рэлеевское рассеяние на малых частицах, и рассеяние Ми на крупных [2]. Кроме этого, в модели на пути распространения терагерцовых пучков учтены зеркально-диффузное отражение от сплошных преград (элементы строений и заграждений) и геометрическое рассеяние на разупорядоченных преградах (деревья, кустарники, сетки). Для экспериментальной верификации модели применялись стенды, использующие как непрерывное терагерцовое излучение (0.14 ТГц, 0.3 ТГц, 0.5 ТГц), так и импульсное (~1 ТГц), с помощью которых были исследованы механизмы поглощения простых и составных искусственных преград.

### Литература

1. Левин А.Д. «Спектры малоуглового рассеяния света взвесьями дисперсных частиц в поглощающих жидкостях», Письма в ЖТФ, т.33, вып.13, 2007.
2. К. Борен, Д. Хафмен «Поглощение и рассеяние света малыми частицами», М.: Мир, 1986.

3. Sethy P.K., Mishra P.R., Behera S. An Introduction to Terahertz Technology, Its History, Properties and Application // Proc. of International conference on computer and communications technologies. 2015.
4. Slocum D.M., Goyette T.M. et al. Atmospheric absorption of terahertz radiation and water vapor continuum effects // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. 2013. No. 127. P. 49–63.

## ЭФФЕКТ АНОМАЛЬНОГО ТРАНСПОРТА НА ВИБРИРУЮЩЕЙ ПОВЕРХНОСТИ И МАЯТНИК КАПИЦЫ

Красюков Г. А.

*МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*  
*E-mail: krasiukov.ga18@physics.msu.ru*

Несмотря на простоту рассматриваемой физической системы, маятник с осциллирующим подвесом был теоретически и экспериментально изучен достаточно полно лишь в 1951 году П. Л. Капицей [1,2]. Интенсивное изучение такого маятника продолжается, так как он даёт возможность проверить новые методы исследования нелинейных систем; кроме того, дифференциальное уравнение маятника встречается в различных областях современной физики и техники [3,4].

Мы установили, что движение материальной точки в поле силы тяжести по поверхности, состоящей из полуокружностей вида  $y = (-1)^{n+1} \sqrt{l^2 - (x - 2nl)^2}$  ( $n$  – целое число, номер зоны) и осциллирующей по закону  $a \cos \omega t$ , после проведения параметризации  $x = 2nl + (-1)^n l \sin \varphi$  описывается в точности уравнением маятника Капицы (второй член отвечает за трение):

$$\ddot{\varphi} + 2\gamma\dot{\varphi} + \left(\frac{g}{l} - \frac{a\omega^2}{l} \cos \omega t\right) \sin \varphi = 0. \quad (1)$$

Таким образом, изучение данного уравнения подразумевает не только задачу о движении маятника, но и задачу о движении по поверхности, аналогичную задаче о движении частицы в периодическом потенциале заданной формы.

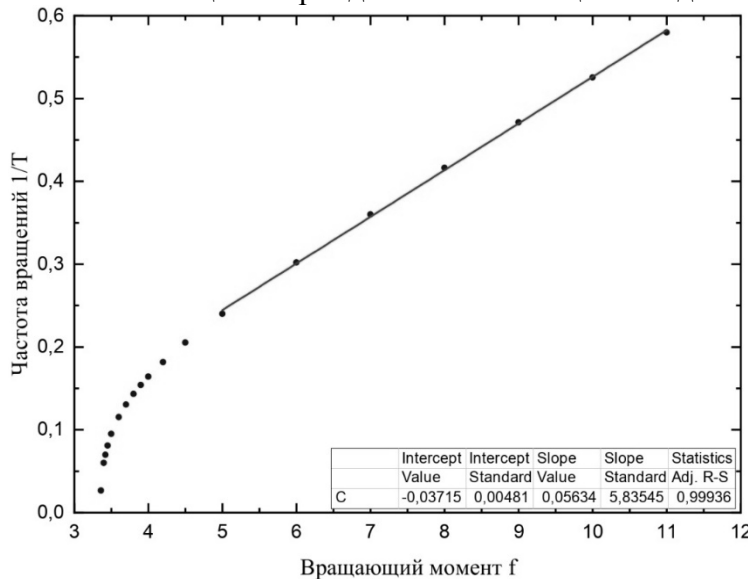


Рис. 1: График зависимости частоты вращения  $T^{-1}$  от величины вращающего момента  $f$  при  $\gamma=1,5$ . Начальное положение верхнее.

Мы добавили в систему внешний вращающий момент — в этом случае в уравнении (1) в правой части появляется постоянная  $f$ , и изучили вращательную динамику такого маятника Капицы при различных параметрах системы. Характерный вид зависимости обратного периода  $T^{-1}$  от величины вращающего момента  $f$  представлена на рис. 1. При небольшом трении зависимости линейные, при большем трении в области, близкой к критическому значению момента, возникает корневая зависимость, которая также переходит в линейную при увеличении

нии вращающего момента. Такая зависимость согласуется с аналитическими выражениями, которые можно получить в приближении сильного трения  $\gamma^2 \gg \frac{\omega^2 a^2}{16l^2}$ .

Оказывается, что значения частоты вращений  $T^{-1}$  при одинаковых моментах  $f$  для верхнего и для нижнего начальных положений совпадают. А при фиксированном  $\gamma$  отличаются только критические значения моментов  $f_{crit}$ , при которых начинается бесконечное вращение (рис. 2). Причём этот эффект тем заметнее, чем меньше коэффициент трения, а при большом трении эффект отсутствует вовсе. Это можно понять, представляя, что согласно предложенному Капицей подходу маятник находится в эффективном потенциале  $U_{eff} = \frac{g}{l}(1 - \cos \varphi) + \frac{a^2 \omega^2}{8l^2}(1 - \cos 2\varphi)$ .

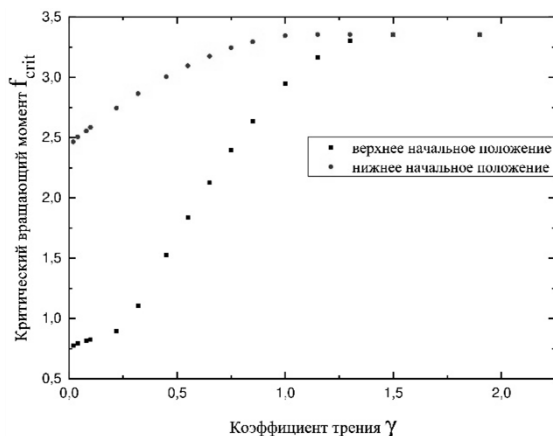


Рис. 2: График зависимости величины критического вращающего момента от коэффициента трения  $\gamma$  для двух начальных положений.

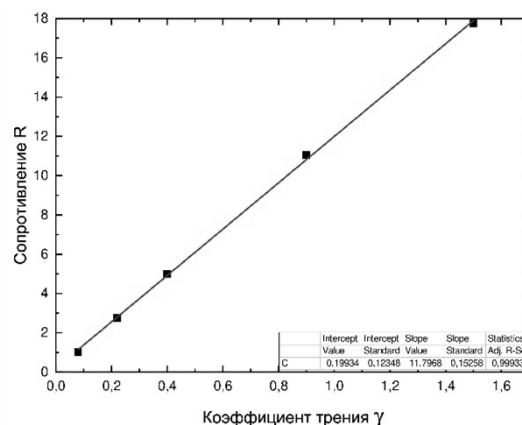


Рис. 3: График зависимости величины сопротивления  $R$  от коэффициента трения  $\gamma$ .

Потенциальная яма метастабильного положения  $\varphi = \pi$  всегда менее глубокая, чем яма состояния  $\varphi = 0$ , поэтому значение вращающего момента, позволяющее преодолеть потенциальную яму верхнего положения, всегда меньше, однако при высоком трении в процессе падения энергия гасится. В этом случае, если значение вращающего момента недостаточно для того, чтобы начать движение из нижнего положения, то маятник просто упадёт вниз и установится вблизи  $\varphi = 0$ . Таким образом, мы имеем эффект вибрационного сита - когда для начала бесконечного вращения из устойчивого верхнего положения требуется вращающий момент, меньший чем для случая нижнего начального положения.

Если думать об описанной проблеме как о задаче на движение нескольких одинаковых частиц, притом заряженных, в периодическом потенциале, то мы имеем электрический ток, величина которого пропорциональна частоте вращений  $T^{-1}$ . Вращающий момент можно соотнести с прикладываемым напряжением. Тогда, поскольку все зависимости  $T^{-1}(f)$  выходят на линейный рост (рис. 1), имеем аналог закона Ома, где коэффициент наклона прямых равен электропроводности. Получена зависимость величины, обратной электропроводности - сопротивления  $R$  от величины коэффициента трения  $\gamma$  (рис. 3), причём из аппроксимации следует, что зависимость - прямо пропорциональная.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 21-12-00237.

### Литература

1. Капица П. Л. Динамическая устойчивость маятника при колеблющейся точке подвеса // ЖЭТФ 21, 588–597 (1951)
2. Капица П. Л. Маятник с вибрирующим подвесом // УФН 44, 7–20 (1951)

3. Рождественский Ю. В., Рудый С. С. Линейная ионная ловушка с детерминированным напряжением общего вида // ЖТФ 87, 604-611 (2017)
4. Arffel, B., Novkoski, F., Eddi, A. et al. Floating under a levitating liquid // Nature 585, 48–52 (2020)

### ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЕ ВИХРЕВЫХ СТРУКТУР НА ФОРМИРОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ ВОЛН В КОЛЬЦЕВОМ КАНАЛЕ

Лапонин В. С.

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

*E-mail: lap@cs.msu.ru*

Изучению ветровых волн посвящено большое количество работ, например [1–6]. Тем не менее, многие вопросы до сих пор остались не выясненными. Так, в настоящее время недостаточно подробно изучены как экспериментально, так и теоретически условия образования устойчивых ветровых волн [5]. По этой причине данная работа посвящена изучению влияния внутренних вихревых структур на формирование ветровых волн в кольцевом канале с помощью математического моделирования [1].

Движение частиц воды в гравитационной волне складывается из интенсивного орбитального и небольшого поступательного движения в направлении распространения волны (наподобие спирали), в результате происходит перенос воды в направлении распространения волны [6]. А 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 поведения и взаимодействия волн на поверхности воды под влиянием внутренних вихревых структур. 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 газогидродинамики [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.

### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ НАКОПЛЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА В ОРГАНИЗМЕ МЛЕКОПИТАЮЩЕГО

Логинова М.А.

МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия  
E-mail: loginova.ma19@physics.msu.ru

С начала XXI в. продукция наноиндустрии начала активно использоваться в разных отраслях промышленности. Так, наночастицы серебра, благодаря своим антисептическим свойствам, активно применяются в медицине, фармацевтике, легкой, пищевой и косметической промышленности. При этом в многочисленных исследованиях *in vitro* показано, что продукция наноиндустрии и, в частности, наночастицы серебра способны оказывать токсическое действие и на здоровые клетки организма. Важной задачей является определение токсической нагрузки на конкретные ткани организма и описание биокинетики наночастиц в живом организме, что, как правило, весьма трудоемко и финансово затратно. Альтернативой экспериментам *in vivo* на животных является разработка прогностических математических моделей транспорта наночастиц в организме млекопитающих. Целями данной работы были разработка такой модели на основе ранее полученных с помощью высокопрецизионного метода нейтронно-активационного анализа экспериментальных данных по накоплению наночастиц серебра размером  $34 \pm 5$  нм во внутренних органах лабораторных мышей линии C57Bl/6 при длительном пероральном введении, а также ее численное решение.

Математическая модель строилась на основе камерной модели, суть которой состоит в том, что весь организм подразделяется на органы-камеры, между которыми происходит обмен экзогенным веществом. В данном случае использовалось допущение неметаболизируемости препарата: наночастицы серебра покидают орган-камеру за счет диффузии, то есть пропорционально количеству вещества внутри камеры с постоянными коэффициентами. Выбранная модель состоит из семи камер: окружающая среда, желудочно-кишечный тракт (ЖКТ) кровь, головной мозг, легкие, печень (Рис.1). Такой выбор набора органов связан с проведенными экспериментами, которые доказывают значительное накопление наночастиц серебра именно в головном мозге и легких [1], а печень, в силу анатомических и физиологических особенностей организма млекопитающего, является органом, через который проходят все вводимые перорально соединения, ЖКТ и кровь также неразрывно связаны с транспортом любого экзогенного вещества.



Рис. 1. Блок-схема камерной модели

Составлена система кинетических уравнений для данной модели (1), в первом приближении коэффициенты положены постоянными и переход «окружающая среда–ЖКТ–кровь» заменен переходом «окружающая среда–кровь» с заменой соответствующих коэффициентов:

$$\begin{aligned} \frac{dM_3(t)}{dt} &= -k_{32}M_3 + k_{34}M_4 + k_{35}M_5 + k_{36}M_6 + k_{43}M_4 + k_{53}M_5 + k_{63}M_6 + k_{23}M_2 - k_{32}M_3 \\ \frac{dM_4(t)}{dt} &= k_{34}M_3 - k_{43}M_4 \\ \frac{dM_5(t)}{dt} &= k_{35}M_3 - k_{53}M_5 \\ \frac{dM_6(t)}{dt} &= k_{36}M_3 - k_{63}M_6 \end{aligned} \quad (1)$$

Написана программа, которая численно решает систему дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами. Использовали функцию `integrate.odeint` из библиотеки `SciPy` для языка программирования `Python`, основанную на методе Рунге-Кутты 4 порядка. С использованием экспериментальных данных и программы получены коэффициенты  $k_{32}^*$ ,  $k_{34}$ ,  $k_{35}$ ,  $k_{36}$ ,  $k_{43}$ ,  $k_{53}$ ,  $k_{63}$ , при которых среднеквадратичное отклонение кривой от экспериментальных точек минимально. Для этого использовали функцию `optimize.minimize` из библиотеки `SciPy`. Также были определены времена выхода графиков на плато, когда изменение значения функций не превышало  $10^{-3}$  нг.

В результате получена искомая зависимость концентрации препарата во внутренних органах лабораторных мышей от времени в первом приближении. Достигается типичный вид фармакокинетической кривой, при котором функции накопления в органах выходят на насыщение. Можно проследить концентрацию стабильного равновесия для каждого органа. С помощью найденных программой коэффициентов выведения могут быть рассчитаны периоды полувыведения из каждого органа.

Выражаю благодарность моему научному руководителю Анциферовой Анне Александровне за помощь на всех этапах выполнения работы.

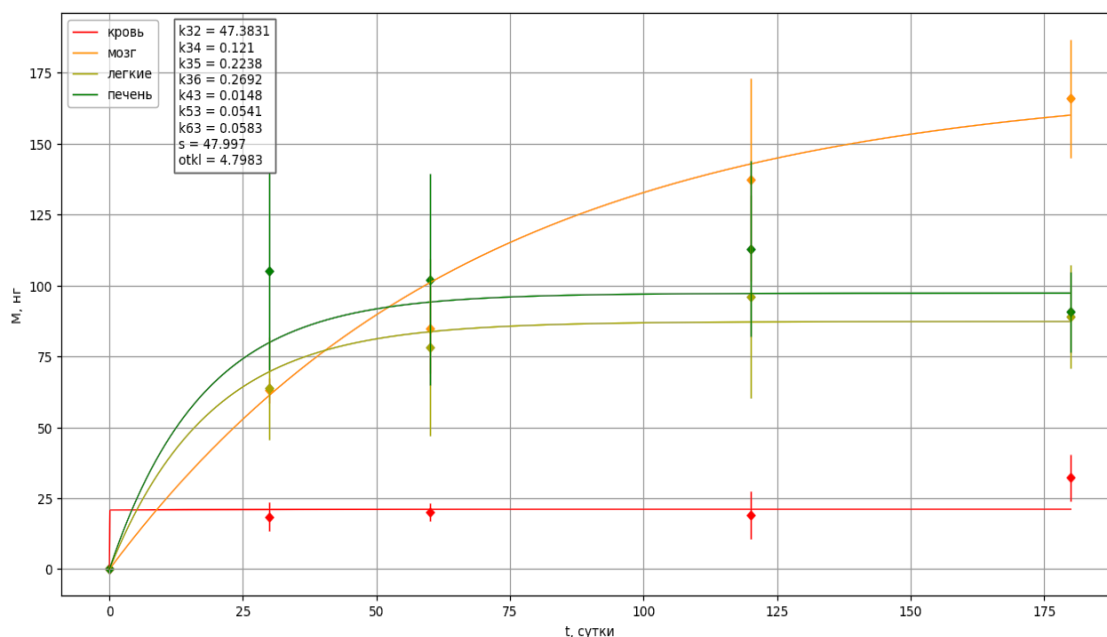


Рис. 2. Зависимость концентрации препарата от времени

### Литература

1. Anna A. Antsiferova, Marina Yu. Kopaeva, Vyacheslav N. Kochkin, Pavel K. Kashkarov. Kinetics of Silver Accumulation in Tissues of Laboratory Mice after Long-Term Oral Administration of Silver Nanoparticles // *Nanomaterials* 2021, 11, 3204.

## ВОССТАНОВЛЕНИЕ ПРОПУСКОВ ДАННЫХ В МНОГОМЕРНЫХ ВРЕМЕННЫХ РЯДАХ

Алешновский В.С., Makeev Д.А.

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

*E-mail: makeev.da21@physics.msu.ru*

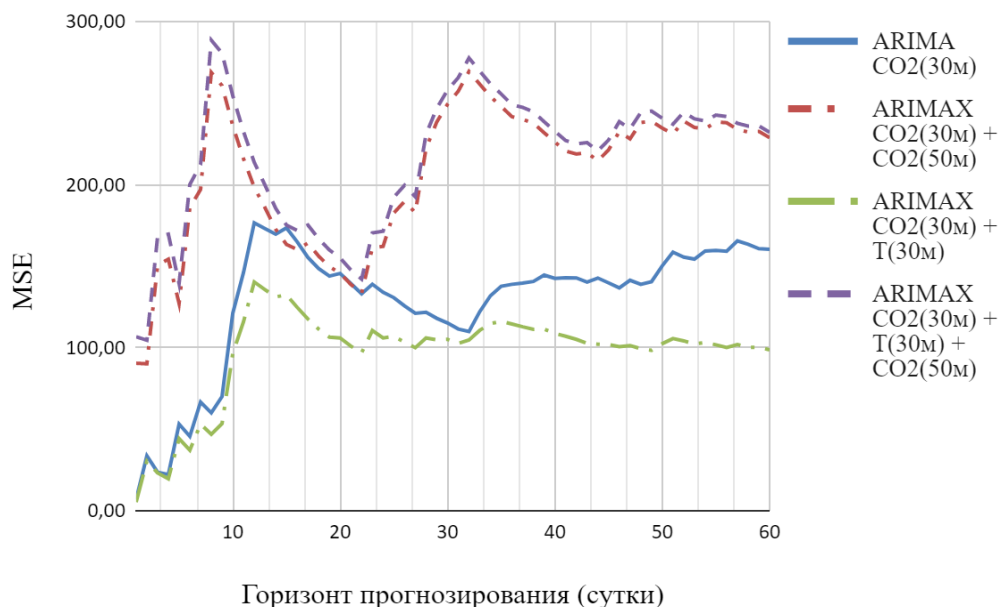
В настоящее время остро стоит вопрос контроля процесса изменения климата, порождающий множество вторичных задач: сбор данных, проверка их на валидность, дальнейшая обработка входного набора параметров [1].

Рассматриваемые ряды динамики различных значений геофизических показателей  $f_i(t)$  (в данном случае концентрации  $\text{CO}_2$  на разных высотах, а также температуры воздуха) в точках  $t_1, t_2, \dots, t_N$ , представимы в виде многомерного временного ряда. Они позволяют наблюдать всю историю изменения интересующих нас величин, что дает возможность судить о «типичном» поведении этих величин и о всякого рода отклонениях.

В силу несовершенства методов сбора, хранения и передачи информации могут отсутствовать некоторые из значений как одной, так и нескольких компонент ряда за различные промежутки времени, что приводит к ухудшению результатов дальнейшей обработки. Решением данной проблемы является восстановление утраченных данных методами математической статистики [2, 3, 4].

Рассмотрены варианты восстановления многомерных временных рядов в сравнении с одномерным случаем при использовании моделей семейства ARIMA [5]. Приведено описание и сравнительный анализ точности восстановления пропусков алгоритмами ARIMA (3, 0, 2), а также ARIMAX (3, 0, 2), с учётом дополнительных компонент ряда.





На графике представлены результаты восстановления показателя концентрации углекислого газа с помощью различных моделей.

Анализ моделей показал, что Модель ARIMAX (3, 0, 2) справилась лучше, при условии, что дополнительный параметр является экзогенным [6] (в нашем случае это температура воздуха). В случае же высоко коррелирующей с основной компонентой ряда дополнительной величиной, предсказывающая способность алгоритма ухудшается, что согласуется с теорией, так как в случае эндогенной переменной [7] алгоритм ARIMAX неприменим, и подтверждается расчётами.

Метеорологический показатель	T (30 м)	CO <sub>2</sub> (30 м)	CO <sub>2</sub> (50 м)
T (30 м)	1	0.197	0.127
CO <sub>2</sub> (30 м)	0.197	1	0.967
CO <sub>2</sub> (50 м)	0.127	0.967	1

В таблице приведена матрица корреляций исследуемых параметров. Из неё видно, что между концентрациями CO<sub>2</sub> на высотах 30 метров и 50 метров наблюдается связь с коэффициентом корреляции Пирсона  $R = 0.967$ .

Было получено, что модель ARIMAX более точно прогнозирует многомерный ряд, чем модель ARIMA, построенная по основной компоненте лишь в случае малой корреляции основной и дополнительной компонент ряда. При высокой зависимости компонент модель ARIMAX менее эффективна относительно модели ARIMA.

### Литература

- Kurbatova J., Tatarinov F., Molchanov A. et al. Partitioning of ecosystem respiration in a paludified shallow-peat spruce forest in the southern taiga of European Russia. // Environ. Res. Lett., 2013. Т. 8. №. 4. С. 045028.
- Андерсон Т. Статистический анализ временных рядов. М.: Мир. 1976.
- Vox George E.P., Jenkins Gwilym M. Time series analysis, forecasting and control. Holdenday, Inc., 1976. С.300
- Безрукова А. В., Шапкина Н. Е. Восстановление данных во временных рядах метеорологических показателей и CO<sub>2</sub> методами математического моделирования. М.:Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 2022.

6. Peter Ď., Silvia P. ARIMA vs. ARIMAX – which approach is better to analyze and forecast macroeconomic time series. // Proceedings of 30th international conference mathematical methods in economics., 2012. – Т. 2. – С. 136-140.
7. Michael Lewis-Beck., Alan Bryman, Tim Futing Liao. Exogenous Variable. // Encyclopedia of Social Science Research Methods. Sage Publications, 2004.
8. Michael Lewis-Beck., Alan Bryman, Tim Futing Liao. Endogenous Variable. // Encyclopedia of Social Science Research Methods. Sage Publications, 2004.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАДАЧИ О ДИФРАКЦИИ ПЛОСКОЙ ВОЛНЫ НА ЭЛЛИПТИЧЕСКОМ ВКЛЮЧЕНИИ

А. Аллеков, Б. Муратлиев

*Туркменский ГУ имени Махтумкули, г. Ашхабад, Туркменистан*

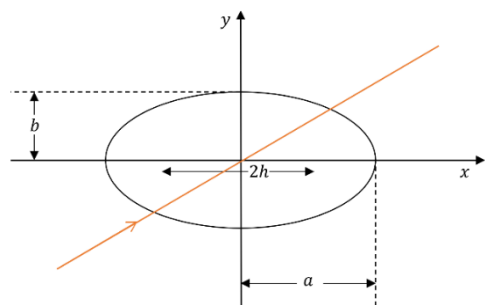
**Аннотация:** ультразвуковой метод контроля различных изделий имеет ряд преимуществ по сравнению с другими неразрушающими методами контроля. Он основан на возбуждении излучателем волнового поля в ультразвуковом диапазоне. По особенностям этого поля можно с высокой степенью достоверности судить о наличии дефекта. В настоящей работе изложен метод такого типа. Он основан на составлении краевой задачи для уравнений динамической теории упругости и ее решении с помощью разностного метода.

**Abstract:** The ultrasonic method of testing various products has a number of advantages over other non-destructive testing methods. It is based on the excitation of a wave field by an emitter in the ultrasonic range. According to the features of this field, it is possible to judge the presence of a defect with a high degree of reliability. In the present paper, a method of this type is presented. It is based on the formulation of a boundary value problem for the equations of the dynamic theory of elasticity and its solution using the difference method.

Задачи о дифракции волн в упругих телах, содержащих трещины, включения и другие дефекты, представляют значительный интерес в связи с проблемами различных областей техники. В то же время они сводятся к решению сложных краевых задач, к которым могут быть применены различные математические методы.

### Постановка задач.

Рассмотрим следующую плоскую динамическую задачу теории упругости, моделирующую некоторые динамические явления, возникающие при неразрушающем ультразвуковом контроле сварных соединений.



Пусть в плоскости  $x, y$  имеется эллиптическое отверстие, расположенное так, как указано на рисунке 1. Геометрические параметры эллипса обозначим  $a, b, h = \sqrt{a^2 - b^2}$ . Область, занимаемую эллипсом, обозначим  $\Omega_i$ :

$$\Omega_i = \left\{ (x, y): \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} < 1 \right\}$$

Дополнение  $\Omega_i$  до  $R^2$  обозначим  $\Omega_l$ :

$$\Omega_l = \left\{ (x, y): \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} > 1 \right\}$$

Границу между указанными областями обозначим  $\partial\Omega$ .

Предположим, что области  $\Omega_i$  и  $\Omega_l$  заняты упругими телами с различными, но с постоянными в соответствующих областях характеристиками. Векторы перемещений  $\vec{v}(x, t)$  удовлетворяют уравнениями Ляме:

$$\begin{aligned} \rho^{(i)} \frac{\partial^2 \vec{v}}{\partial t^2} - (\lambda^{(i)} + \mu^{(i)}) \cdot \text{grad div } \vec{v} - \mu^{(i)} \cdot \Delta \vec{v} &= 0 \\ \rho^{(l)} \frac{\partial^2 \vec{v}}{\partial t^2} - (\lambda^{(l)} + \mu^{(l)}) \cdot \text{grad div } \vec{v} - \mu^{(l)} \cdot \Delta \vec{v} &= 0 \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь  $\rho^{(i)}, \lambda^{(i)}, \mu^{(i)}$  — плотность, постоянные Ляме тела  $\Omega_i$ ;

$\rho^{(l)}, \lambda^{(l)}, \mu^{(l)}$  — аналогичные характеристики тела  $\Omega_l$ ;

На границе  $\partial\Omega$  должны выполняться следующие условия сопряжения:

$$\vec{v}^{(i)} = \vec{v}^{(l)}, \quad \vec{t}_n^{(i)} = \vec{t}_n^{(l)}$$

Здесь  $\vec{t}_n$  вектор напряжения на площадке, перпендикулярной нормали  $\vec{n}$  к кривой  $\partial\Omega$ , т.е. к эллипсу:

$$\vec{t}_n = [T_{11} \cos(\vec{n}, x) + T_{12} \cos(\vec{n}, y)]\vec{i} + [T_{12} \cos(\vec{n}, x) + T_{22} \cos(\vec{n}, y)]\vec{j}$$

Где  $\vec{i}, \vec{j}$  — середина осей X и Y, а  $T_{ik}$ - компоненты тензора напряжения в системе координат  $x_1 = x, x_2 = y$ .

Введём потенциалы вектора смещений:

$$\vec{v}^{(i)} = \text{grad}\varphi^{(i)} + \text{rot}\Psi^{(i)}\vec{k}, \quad \vec{v}^{(e)} = \text{grad}\varphi^{(e)} + \text{rot}\Psi^{(e)}\vec{k}. \quad (2)$$

Здесь  $\vec{k}$  — середина оси z, такой, что x,y,z образуя правую систему координат. Отсюда следует

$$u^{(i)} = \frac{\partial\varphi^{(i)}}{\partial x} + \frac{\partial\Psi^{(i)}}{\partial y}, \quad v^{(i)} = \frac{\partial\varphi^{(i)}}{\partial y} - \frac{\partial\Psi^{(i)}}{\partial x}$$

Аналогичные формулы имеют место для  $v^{(l)}, v^{(l)}$ .

Далее для компонент тензора деформаций в системах координат

$x_1 = x, x_2 = y$  имеем

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11}^{(i)} &= \frac{\partial u^{(i)}}{\partial x} = \frac{\partial^2\varphi^{(i)}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi^{(i)}}{\partial x\partial y}, \\ \varepsilon_{12}^{(i)} &= \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u^{(i)}}{\partial y} + \frac{\partial v^{(i)}}{\partial x} \right) = \frac{\partial^2\varphi^{(i)}}{\partial x\partial y} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2\Psi^{(i)}}{\partial y^2} - \frac{\partial^2\Psi^{(i)}}{\partial x^2} \right), \\ \varepsilon_{22}^{(i)} &= \frac{\partial v^{(i)}}{\partial y} = \frac{\partial^2\varphi^{(i)}}{\partial y^2} - \frac{\partial^2\Psi^{(i)}}{\partial x\partial y}. \end{aligned}$$

Аналогичные формулы имеют место для  $\varepsilon_{11}^{(l)}, \varepsilon_{12}^{(l)}, \varepsilon_{22}^{(l)}$ .

Для компонент тензора напряжений на основании закона Гука получаем

$$\begin{aligned} \tau^{(i)} &= \lambda^{(i)} \cdot (\varepsilon_{11}^{(i)} + \varepsilon_{22}^{(i)}) + 2\mu^{(i)} \cdot \varepsilon_{11}^{(i)}, \\ \tau_{12}^{(i)} &= 2\mu^{(i)} \cdot \varepsilon_{12}^{(i)}, \\ \tau_{22}^{(i)} &= \lambda^{(i)} \cdot (\varepsilon_{11}^{(i)} + \varepsilon_{22}^{(i)}) + 2\mu^{(i)} \cdot \varepsilon_{12}^{(i)}. \end{aligned}$$

Аналогичные соотношения имеют место для  $\tau_{11}^{(l)}, \tau_{12}^{(l)}, \tau_{22}^{(l)}$ .

Если подставлять (2) в (1), то для потенциалов  $\varphi^{(i)}, \psi^{(i)}$  получим волновые уравнения

$$\frac{\partial^2\varphi^{(i)}}{\partial t^2} - (c_1^{(i)})^2 \cdot \Delta\varphi^{(i)} = 0, \quad \frac{\partial^2\psi^{(i)}}{\partial t^2} - (c_2^{(i)})^2 \cdot \Delta\psi^{(i)} = 0.$$

Здесь величины

$$c_1^{(i)} = \sqrt{\frac{\lambda^{(i)} + 2\mu^{(i)}}{\rho^{(i)}}}, \quad c_2^{(i)} = \sqrt{\frac{\mu^{(i)}}{\rho^{(i)}}}$$

Представляют собой скорости распространения продольной и поперечной волны в тем  $\Omega_i$ . Аналогичные уравнения и соотношения имеют место для  $\varphi^{(l)}, \psi^{(l)}$ .

Задача состоит в определении функций  $\varphi^{(i)}, \psi^{(i)}, \varphi^{(l)}, \psi^{(l)}$  которые являются функциями от  $x, y, t$ .

### Литература

1. Басацкая Л.В., Вopilкин А.Х., Иванов В.И., Шилов А.П. К вопросам о распространении ультразвуковых продольных волн вблизи твердого тела // Акустический журнал. 1978. т. 24, № 1 с. 15–20.
2. Механика деформируемых твердых тел: Направления развития. Сб. статей: Пер. англ. В.В. Шлимака / Под ред. Г. С. Шапиро. -М. Мир, 1983. 346 с.
3. Разыграев Н. П., Щербински Б. Г. Способ ультразвукового контроля качества материалов: Авторское свидетельство №491092 //Бюллетень изобретений. 1975. № 4. с. 15.

## КОЛЕБАТЕЛЬНАЯ КОНВЕКЦИЯ СЛАБОПРОВОДЯЩЕЙ ЖИДКОСТИ В ПЕРЕМЕННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Некрасов О. О.

*Пермский ГНИУ, физический факультет, Пермь, Россия*

*E-mail: dakeln2@gmail.com*

Одной из возможностей управления конвекцией в слабопроводящей [1] жидкости является воздействие на нее внешним электрическим полем в том случае, когда заряды в ней распределены неоднородно. Когда электропроводность жидкости зависит от ее температуры, ее неоднородный нагрев приводит также и к возникновению неоднородностей плотности заряда. Такой механизм зарядообразования называется электрокондуктивным [2]. Он, конкурируя с термогравитационным механизмом возникновения тепловой конвекции, может привести к появлению в системе колебательных режимов движения. В ходе данного исследования изучено влияние частоты переменного электрического поля на режимы движения жидкости.

Рассматривается помещенный в гравитационное поле плоский бесконечный горизонтальный конденсатор, заполненный вязкой несжимаемой слабопроводящей жидкостью. Жидкость нагревается на верхней обкладке конденсатора, а на нижнюю обкладку подается гармонически-модулированное напряжение. Плотность и электропроводность жидкости зависят от температуры линейно. Приближениями, используемыми при построении физической модели, являются приближение Буссинеска [3] и электрогидродинамическое приближение [1], позволяющее пренебречь магнитными эффектами по сравнению с электрическими. Обкладки конденсатора считаются идеально проводящими, жидкость на них не проскальзывает.

Система уравнений для давления, скорости  $\vec{v}$ , температуры  $\theta$  и плотности заряда  $\rho_e$  обезразмеривается и ввиду возможности рассмотрения лишь двумерных возмущений в любой вертикальной плоскости, в систему вводится функция тока  $\psi$ :  $v_x = -\frac{\partial \psi}{\partial z}, v_z = \frac{\partial \psi}{\partial x}$ . Для решения системы используется аппроксимация функций системы комбинациями из восьми базисных функций, удовлетворяющих граничным условиям и сохраняющих нелинейные слагаемые первоначальной системы [2]:

$$\begin{aligned}\psi &= (A_1(t)\sin\pi z + A_2\sin 2\pi z)\sin\pi kx, \\ \theta &= (B_1(t)\sin\pi z + B_2(t)\sin 2\pi z)\sin\pi kx + C(t)\sin 2\pi z, \\ \rho_e &= (D_1(t)\cos\pi z + D_2(t)\cos 2\pi z)\sin\pi kx + E(t)\cos 2\pi z,\end{aligned}$$

где  $A_1 - E$  – зависящие от времени амплитуды. Путем ортогонализации основной системы в соответствии с методом Галеркина можно получить систему из восьми дифференциальных уравнений первого порядка для амплитуд ( $X, V$  – амплитуды функции тока,  $Y, Z$  и  $W$  – амплитуды температуры,  $S, T, U$  – амплитуды плотности заряда):

$$\begin{aligned}\dot{X} &= \text{Pr}(-X + rY - eT\cos\omega t), \dot{Y} = -Y + X + XZ, \dot{Z} = -bZ - XY, \\ \dot{V} &= \text{Pr}\left(-dV + \frac{rW + eS\cos\omega t}{d}\right), \dot{W} = -dW + V, \dot{S} = -gS + XU - gY\cos\omega t, \\ \dot{T} &= -gT - gW\cos\omega t, \dot{U} = -gU - XS - 2gZ\cos\omega t,\end{aligned}$$

здесь точкой обозначается производная по времени,  $\text{Pr}$  – число Прандтля,  $r$  и  $e$  – нормированные тепловые и электрические числа Рэлея,  $b, g, d$  – геометрические параметры, зависящие от волнового числа  $k$ . Система для амплитуд интегрируется численно при помощи метода Рунге-Кутты четвертого порядка точности.

Путем применения теории Флоке для анализа линейной устойчивости системы были определены критические волновые числа, соответствующие различным частотам внешнего поля [4].

Для численного моделирования использовались следующие значения безразмерных параметров:  $\text{Pr} = 400$ , электрическое число Прандтля  $\text{Pr}_e = 30$  [5], нормированное тепловое число Рэлея  $r = -1$ , соответствующее порогу возникновения тепловой конвекции при подогреве снизу в отсутствие электрических взаимодействий. Для анализа высчитывался усредненный по времени безразмерный теплопоток (число Нуссельта  $\text{Nu}$ ). Пример эволюции системы при частоте внешнего воздействия 0,625 представлен на Рис. 1:

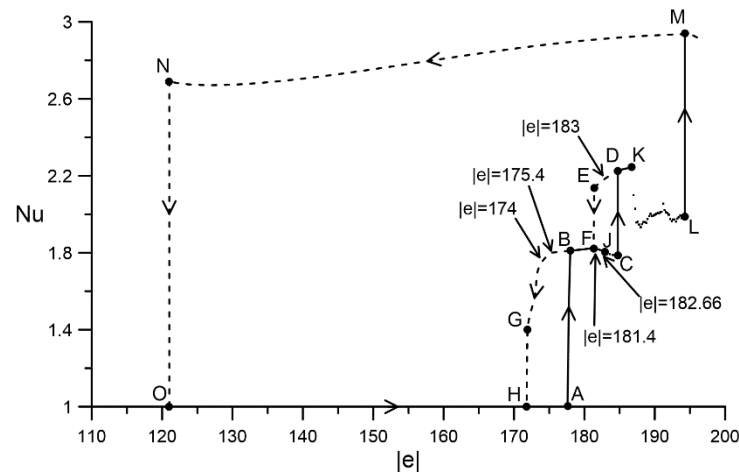


Рис. 3. Зависимость числа Нуссельта  $\text{Nu}$  от абсолютного значения безразмерного электрического параметра  $|e|$  при частоте внешнего поля 0,625, сплошная линия – движение в сторону увеличения  $|e|$ , пунктирная – в сторону уменьшения  $|e|$

При такой частоте поля в системе присутствуют квазипериодический отклик (BF), синхронный отклик (NM), динамический хаос (JC и KL), переход к которому осуществляется через удвоение периодов, а также множество гистерезисов. Для других частот внешнего воздействия система демонстрирует иные сценарии эволюции. Как итог, была построена карта режимов движения жидкости на плоскости период внешнего воздействия – амплитуда электрического поля.

## Литература

1. Болога М.К., Гросу Ф.П., Кожухарь И.А. Электроконвекция и теплообмен. Кишнев, Штиинца. 1977.
2. Картавых Н.Н., Смородин Б.Л., Ильин В.А. Параметрическая электроконвекция слабопроводящей жидкости в горизонтальном плоском конденсаторе // ЖЭТФ. 2013, Т. 83, № 1. С. 64–73.
3. Ландау, Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. VI Гидродинамика. М.: Наука, 1986.
4. Nekrasov O.O., Kartavykh N.N. Electroconvection instability of poorly conducting fluid in alternating electric field // Interfacial Phenomena and Heat Transfer, Vol. 7, Issue 3, 2019. pp. 217–225.
5. Zhdanov, S.A., Kosvintsev, S.R. & Makarikhin, I.Y. Influence of an electric field on the stability of thermogravitational flow in a vertical capacitor // J. Exp. Theor. Phys. 2000, 90, pp. 352–359.

## ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОРИСТОГО НИКЕЛИДА ТИТАНА ПРИ СЖАТИИ С РАЗЛИЧНОЙ МОРФОЛОГИЕЙ ТВЕРДОЙ МАТРИЦЫ

Никифоров Г.А., Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В.

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

*E-mail: [nikiforov121998@mail.ru](mailto:nikiforov121998@mail.ru)*

Никелид титана (NiTi) один из часто используемых материалов для изготовления имплантов, обладающий превосходной биосовместимостью и выраженными упруго-пластическими свойствами [1]. Особый интерес представляет пористый никелид титана, так как живые ткани лучше интегрируются с пористыми материалами [2]. Однако у пористых материалов есть очевидная проблема ухудшения механических характеристик. В данной работе на примере никелида титана рассмотрен способ повышения прочностных свойств пористых материалов с помощью достижения равномерного распределения твердой матрицы пористого материала вдоль направления прилагаемого напряжения. Этот способ может помочь улучшить механические характеристики, не используя легирование и другие методы повышения прочности, которые могут негативно повлиять на другие эксплуатационные характеристики.

Для получения пористых образцов был разработан оригинальный алгоритм генерации пористой структуры с заданными пористостью и размерами пор. Этот алгоритм обладает возможностью получения пористой системы с равномерным распределением пор. Такому распределению соответствует равномерный профиль плотности. Были получены образцы с равномерным и неравномерным профилем плотности для следующих значений пористости  $\varphi$ : 22.5 %, 38.5 % и 58 %. Подготовленные образцы были сжаты до 30 %. На основе проведенного моделирования получены графики напряжения-деформации для образцов с разным профилем плотности для каждого значения пористости. Из полученных графиков были рассчитаны следующие механические характеристики: модуль Юнга  $E$ , предел упругости  $\sigma_{el}$  и максимальное напряжение на участке деформации  $\sigma_{max}$ . На основе анализа полученных результатов был сделан вывод, что при сжатии характер распределения твердой матрицы в пористом материале не влияет на рассматриваемые механические характеристики.

*Работа выполнена при поддержке РФФ (проект № 19-12-00022). АВМ выражает признательность Фонду развития теоретической физики и математики «Базис».*

### Литература

1. Duerig T., Pelton A., Stöckel D. An overview of nitinol medical applications// Materials Science and Engineering. 1999. V. 273. P. 149–160.

2. Волчков С.Е., Шишковский И.В., Байриков И.М. Влияние пористых трехмерных имплантов из нитинола на культуру мультипотентных мезенхимальных стромальных клеток // Клеточная трансплантология и тканевая инженерия. 2013. Т. 8. С.52.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТОВ УСИЛЕНИЯ ЛОКАЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ НА НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОВЕРХНОСТЯХ

Никифоров Н.Н.

*МГУ имени М.В. Ломоносова, факультет фундаментальной физико-химической инженерии, Москва, Россия  
E-mail: nik.nikiforoff2015@gmail.com*

Плазмонные наночастицы (НЧ) благородных металлов, обладающие уникальными физическими свойствами и способностью генерации локализованного плазмонного резонанса (ПР) на поверхности частицы, в последнее время представляют повышенный интерес, в том числе в области нанобиотехнологии (геномика, доставка лекарственных средств, биосенсорика и т.д.) [1]. Чрезвычайно большое усиление электромагнитного поля, обусловленное ПР, играет ключевую роль в усилении комбинационного рассеяния (КР) исследуемых молекул, адсорбированных в областях с высокой рассеивающей способностью, в так называемых «горячих точках».

Существующие в настоящее время различные методики синтеза позволяют получить металлические НЧ различных форм и размеров. Исследования показали, что наноструктуры, имеющие сложное строение, демонстрируют более уникальные оптические свойства, чем частицы простой формы [2]. Это обусловлено наиболее сложным спектром резонанса для таких структур ввиду зависимости величины и частоты ПР от направления излучения и взаимного расположения частиц. Для изучения эффекта усиления локальных электромагнитных полей вблизи поверхности наноструктур применяются численные методы.

В данной работе исследования проводились с помощью электродинамического PIC-кода KARAT [3], основанного на методе «частиц в ячейке» (Particle-in-Cell, PIC). Было смоделировано усиление локальных электромагнитных полей вблизи серебряных наноструктур типа «крест», представляющих собой скрещенные под некоторым углом стержни с длиной 390 нм и толщиной от 5 до 80 нм. Расчетная область представляла собой квадрат 400 на 400 нм, в центре которого находилась исследуемая структура, для описания электромагнитных свойств которой была использована модель Друде с параметрами для серебра. Лазерное излучение с плоской поляризацией ( $E_x$ ,  $B_y$ ) и длиной волны 535 нм распространялось в положительном направлении оси  $Z$ .

На рис. 1 в качестве примера показано распределение коэффициента усиления электрического поля ( $E/E_0$ ) вблизи креста с углом  $45^\circ$  в планарной геометрии  $X-Z$ , где  $E_0$  – амплитуда электрического поля падающего излучения. Как видно по распределению, вблизи места соединения стержней происходит существенное усиление локального поля.

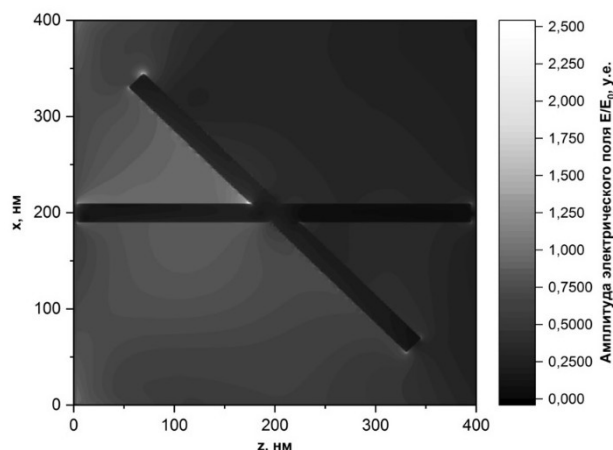


Рис. 1. Распределение коэффициента усиления электрического поля ( $E/E_0$ ) вблизи креста. Из полученных в данной работе графиков зависимостей были определены оптимальные параметры исследуемой наноструктуры (угол между стержнями креста, толщина, ориентация структуры относительно направления вектора напряженности электрического поля падающего излучения) для получения наибольшего усиления КР сигнала. Полученные данные могут быть полезны при исследовании различных молекул, адсорбированных на наноструктурированных поверхностях.

### Литература

1. Cheng M.M., Cuda G., Bunimovich Y. L., et al. Nanotechnologies for biomolecular detection and medical diagnostics // *Curr. Opin. Chem. Biol.* 2006. V. 10. P. 11–19.
2. Hu J., Wang Z., Li J. Gold nanoparticles with special shapes: controlled synthesis, surface-enhanced raman scattering, and the application in biodetection // *Sensors*. 2007. V. 7 (12). P. 3299–3311.
3. Tarakanov V.P. Code KARAT in simulations of power microwave sources including Cherenkov plasma devices, vircators, orotron, E-field sensor, calorimeter etc // *EPJ Web Conf.* 2017. V. 149 (04024).

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАССИВА ЛИНЗ ДЛЯ ОПТИЧЕСКИХ СИСТЕМ МИКРОСКОПОВ

Ноговицына С.Р.

*Северо-восточный федеральный университет им. М. К. Аммосова, Физико-технический институт, г. Якутск, Россия*  
E-mail: *nogovitsyna\_s\_r@mail.ru*

Для любых оптических систем одной из главных проблем являются аберрации, возникающие в следствие не идеальности самих оптических систем, так и за счет внешних факторов. Наиболее значимые результаты в данной области были получены в телескопах, в частности для улучшения разрешающей способности. Суть подхода заключается в применении массива линз компенсирующие аберрации. В настоящее время данный подход известен, как один из методов адаптивной оптики. Стоит отметить и важный недостаток массива линз – это их стоимость и сложность изготовления. В последнее время массив линз активно начали внедрять в оптическую микроскопию [1,2], такой массив линз называют – массив микролинз. Также одной из наиболее актуальных направлений – это применение массива линз в электронной микроскопии.

Стоит отметить и важный недостаток массива линз – это их стоимость и сложность изготовления. Поэтому целесообразным является, сначала разработка математических моделей и решение модельных задач для оценки качества массива линз.



В данной работе рассматриваются способы оценки aberrаций, возникающие в методе осевой голографии Габора для исследования структур объектов. Суть метода осевой голографии Габора состоит в том, что волна от источника проходя через объект исследования, регистрируется на некотором расстоянии детектором. Из литературных данных известно [3], что разрешение такого метода ограничено только геометрическими данными, а именно расстоянием источник-объект. Также, к наиболее значимым проблемам, препятствующих лучшему разрешению, можно отнести – aberrации комплексной волны, оценка которой является целью данной работы. В рамках данной работы предлагается применить массив микролинз для оценки aberrаций волнового фронта.

В рамках данной работы рассмотрены три модели массива микролинз:

$$T_1 = e^{-i\frac{\pi}{f*\lambda}(x^2+y^2)} * \text{rect}\left(\frac{x}{d}\right) * \text{rect}\left(\frac{y}{d}\right), \quad (1)$$

где  $f$  – фокусное расстояние линзы,  $\lambda$  – длина волны,  $d$  – сторона квадратной линзы.

$$T_2 = \frac{2\pi}{\lambda} \sum_{m=-M}^{+M} \sum_{n=-M}^{+M} S_p(x - mp, y - np) [mp(x - mp) + np(y - np)], \quad (2)$$

где  $S_p(x, y)$  – квадратная функция,  $p$  – шаг дискретизации микролинзы.

$$T_3 = e^{-i\frac{\pi}{f*\lambda}(x^2+y^2)} * \text{circ}(x, y, d) \quad (3)$$

где  $f$  – фокусное расстояние линзы,  $\lambda$  – длина волны,  $d$  – сторона круглой линзы. Также рассматривается модель шестиугольной линзы в одномерном случае:

$$t_{exp}(x) = 2 \cos\left(\frac{N\delta}{2}\right) \left\{ \frac{\sin\left[\frac{(N+1)\delta}{2}\right]}{\sin\left(\frac{\delta}{2}\right)} \right\} - 1, \quad (4)$$

где  $N$  – разрешение микролинзы,  $\delta = 2\pi xd/\lambda f$ ,  $d$  – период массива линз,  $f$  – фокусное расстояние микролинзы.

Получены численные результаты в виде распределения интенсивности для случая одной линзы и массива микролинз.

Результаты полученных данных в последующем будут применены для распределения волнового фронта в осевой голографии Габора.

#### Литература:

1. Norbert L. Simulation of micro-optical systems including microlens arrays // J. Opt. A: Pure Appl. Opt. 4 (2002) S1–S9.
2. Xiaodong Zh., Daniel P. P., Kai Yu L., etc. Design of MEMS devices with optical apertures for the detection of transparent biological cells // Biomed Microdevices (2008) 10 pp. 639–652.
3. N.V. Egorov, A.G. Karpov, A.G. Fedorov etc. Technique for Investigating the Spatial Structure of Thin Films at a Nanolevel // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2011, Vol. 5, No. 5, pp. 992-995.

#### ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ ФАЗОВЫХ ДИАГРАММ $(T, n)$ $(T, \mu)$ СИСТЕМЫ ЗАРЯЖЕННЫХ СПИН-ТРИПЛЕТНЫХ $S = 1$ БОЗОНОВ КЛАССИЧЕСКИМ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Нужин С.В., Улитко В.А., Панов Ю.Д., Москвин А.С.

Уральский ФУ, институт естественных наук и математики,  
Екатеринбург, Россия  
E-mail: nuzhin.stepan@urfu.ru

Мы рассматриваем решеточный газ заряженных спин-триплетных бозонов, модель которого в последние годы популярна благодаря описанию димерных антиферромагнитных систем и ультрахолодных атомных газов в оптических решетках [2]. К системам, которые естественным образом описываются моделями решеточных бозонов, относятся материалы с зарядовым диспропорционированием [3]. Так как соединение AgO изоструктурно к CuO [1, 3]; AgF<sub>2</sub> — купратам [3], то возникает предположение, что механизм зарядового диспропорционирования в купратах [4], реализуется в соединениях серебра.

Введем в рассмотрение систему заряженных бозонов со спином  $S = 1$ , движущихся по узлам квадратной решетки. На каждом узле решетки базис  $|n\sigma\rangle$ , где  $n$  — число бозонов,  $\sigma$  — проекция спина, включает 4 состояния:  $|0\ 0\rangle$ ,  $|1\ 1\rangle$ ,  $|1\ 0\rangle$ ,  $|1\ -1\rangle$ . Гамильтониан такой модели

$$\hat{\mathcal{H}} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (B_{i\sigma}^\dagger B_{j\sigma} + B_{j\sigma}^\dagger B_{i\sigma}) + V \sum_{\langle ij \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j + J \sum_{\langle ij \rangle} (\vec{S}_i, \vec{S}_j) - \sum_i (\vec{h}, \vec{S}_i),$$

описывает перенос ( $t$ ) бозона на ближайший узел с сохранением проекции спина, заряд-зарядовые корреляции ( $V$ ), одинаковые для разных проекций спина бозона, антиферромагнитный изотропный обмен ( $J$ ) для бозонов на соседних узлах и взаимодействие бозонов с магнитным полем  $\vec{h}$ .

Мы рассчитываем фазовые диаграммы классическим методом Монте-Карло в рамках канонического и большого канонического ансамблей для поиска возможностей реализаций особых фазовых состояний таких, как сверхтекучее твердое тело, сверхтекучая жидкость, шахматное зарядовое упорядочение. Характерной особенностью моделей решеточных бозонов является фазовое расслоение, возникающее при определенных параметрах и фиксированной плотности бозонов. Численное моделирование этих ситуаций в рамках большого канонического ансамбля осложняется тенденцией системы к попаданию в метастабильные состояния вблизи тех значений химического потенциала, которым в основном состоянии соответствует скачок плотности бозонов между ее значениями для сосуществующих фаз. В связи с этим, нами реализован классический алгоритм Монте-Карло, в котором плотность бозонов сохраняется на каждом элементарном шаге, и получена фазовая диаграмма в рамках канонического ансамбля.

В работе обсуждаются особенности алгоритма, связанные с необходимостью организации однородной выборки состояний из фазового пространства, возможность организации параллельных вычислений. Полученные результаты сравниваются с результатами численного моделирования в рамках большого канонического ансамбля и с предельными случаями для системы локальных (hard-core) бозонов и двумерной антиферромагнитной модели Гейзенберга.

Работа выполнена при поддержке проекта FEUZ-2023-0017 Министерства Образования и Науки Российской Федерации.

### Литература

1. Allen J. P., Scanlon D. O., Watson G. W. Electronic structures of silver oxides //Physical Review B. 2011, №11(84). p. 115141.
2. Giamarchi T., Rüegg C., Tchernyshyov O. Bose–Einstein condensation in magnetic insulators // Nature Physics. 2008, №4(3). p. 198–204.
3. Grzelak A. et al. Epitaxial engineering of flat silver fluoride cuprate analogs //Physical Review Materials. 2020, №8(4). p. 084405.
4. Moskvin A. S. Perspectives of disproportionation driven superconductivity in strongly correlated 3d compounds // Journal of Physics: Condensed Matter. 2013, №25(8). p. 085601.

## ГЕОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ УРАВНЕНИЙ ПОГРАНИЧНОГО СЛОЯ

Олейник В. Н.,

МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет

E-mail: Oleinik.vn19@physics.msu.ru

В данной работе проводится исследование уравнений пограничного слоя при помощи метода симметрий. Уравнение Кармана, имеющее следующий вид

$$F = \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = 0, \quad (1)$$

описывает в гидромеханике пограничный слой — тонкий слой жидкости, непосредственно прилегающий к обтекаемому телу.

Здесь функция  $u(x, y, z)$  — описывает скорость движущихся частиц, а  $E$  — гиперповерхность, заданная уравнением  $E: \{F=0\}$ .

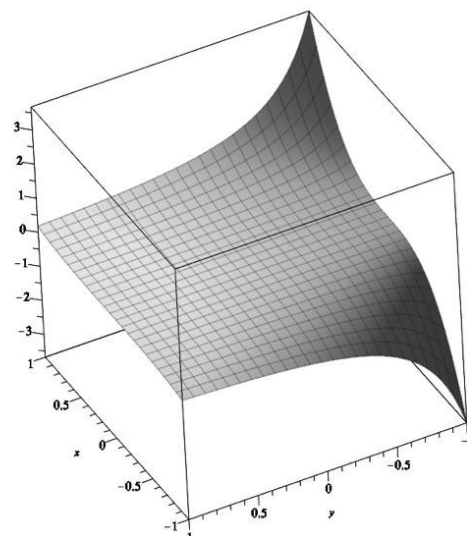
Преобразование пространства 2-джетов  $\Phi^2: J^2(R^3) \rightarrow J^2(R^3)$  называется *симметрией* уравнения  $F$ , если выполняется следующее условие:

$$\Phi^{(2)}(E) = E, \quad (2)$$

то есть данное преобразование сохраняет гиперповерхность. В данном докладе представлены симметрии и точные решения уравнения Кармана для стационарного потока. Полученные точные решения относительно найденных симметрий имеют следующий вид:

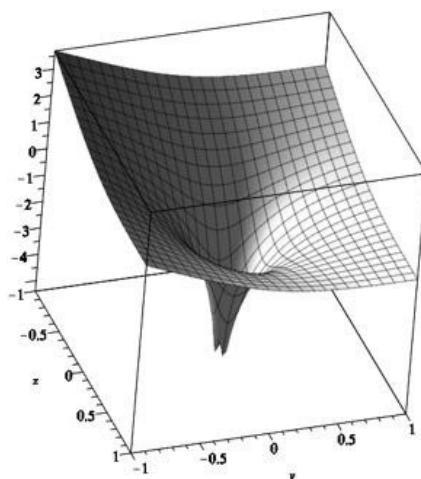
$$u(x, y, z) = \frac{x^3}{3(y^2+1) \cos(\arctan \arctan(\frac{1}{y}) - 1)^2},$$

Графическая визуализация решения приводится для  $z = 1$ .

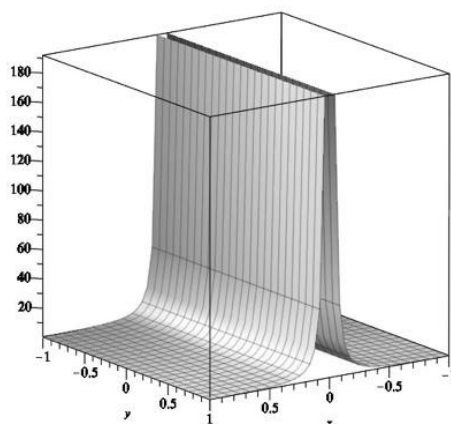


Точное решение, соответствующее векторному полю  $Q = (y^2 - z^2) \frac{\partial}{\partial u}$  имеет вид:

$$u(x, y, z) = \ln(y^2 + z^2) - y - z - 1,$$



Кроме вышеперечисленных точных решений найдено решение, выражающееся через специальную функцию Вейерштрасса, график которого представлен на рисунке



### Литература

1. Кушнер А. Г. Геометрические методы. Практический курс с использованием Maple. Лекции для студентов физфака МГУ. 2020
2. Ибрагимов Н.Х. Азбука группового анализа, М. 1989.
3. Кудряшов Н.А. Аналитическая теория нелинейных дифференциальных уравнений // МИФИ, 2002. с. 304.
4. Виноградов А.М., Красильщик И.С., Лычагин В.В. Введение в геометрию нелинейных дифференциальных уравнений // Наука, 1986, с. 336.

### ОЦЕНКА ПАРАМЕТРОВ В МОДЕЛИ АВТОМОБИЛЬНОГО ТРАФИКА

Погребняк М. А.

*ЯГУ им. П. Г. Демидова, математический факультет, Ярославль, Россия*

*E-mail: pogrebnyakmaksim@mail.ru*

Работа посвящена оценке параметров в математической модели следования за лидером, которая описывает движение  $N \in \mathbb{N}$  автомобилей. Она является улучшенной версией модели, предложенной в [1], и имеет следующий вид:

$$\begin{cases} \ddot{x}_1(t) = R_1 \left[ a_n (v_{max,1} - \dot{x}_n(t)) \right] + (1 - R_n) \left[ -H_1 \left( \frac{\dot{x}_1^2(t)}{\Delta x_1 - l_1} \right) \right], \\ \ddot{x}_n(t) = R_n \left[ a_n \left( \frac{v_{max,n} - V_n}{1 + \exp[k_n(-\Delta x_n + S_n)]} + V_n - \dot{x}_n(t) \right) \right] + \\ + (1 - R_n) \left[ H_n \left( \frac{\dot{x}_n(t)[V_n - \dot{x}_n(t)]}{\Delta x_n - l_n} \right) \right], \\ x_n(t) = \lambda_n, \quad \dot{x}_n(t) = v_n, \quad \text{при } t \in [-\tau, 0], \end{cases} \quad (1)$$

где  $\tau$  — время реакции водителя;  $\Delta x_n(t, \tau) = x_{n-1}(t - \tau) - x_n(t)$  — расстояние между соседними автомобилями, а  $x_0(t - \tau) = L$ , где  $L$  — расстояние, которое должен проехать первый автомобиль до полной остановки;  $a_n > 0$  — коэффициент чувствительности, характеризующий обратное время согласования скоростей двух соседних автомобилей;  $v_{max,n} > 0$  — максимальная желаемая скорость;  $l_n$  — сумма безопасного расстояния между двумя соседними автомобилями и длины впереди идущей машины  $l_n = l_{safe} + l_{vehicle,n-1}$  ( $l_{vehicle,0} = 0$ );  $H_n$  — функция Хевисайда, вида:

$$H_n = \begin{cases} q_n, & \text{если } \Delta x_n(t, \tau) - l_n > \varepsilon, \\ 0, & \text{если } \Delta x_n(t, \tau) - l_n \leq \varepsilon, \end{cases} \quad \text{при } 0 < \varepsilon \ll 1,$$

служащая для прекращения движения автомобиля при  $\Delta x_n(t, \tau)$  достаточно близком к  $l_n$ , коэффициент  $q_n > 0$  при этом описывает интенсивность торможения автомобиля;  $k_n > 0$  — скорость логистического роста, которая показывает насколько плавно водитель преследующего автомобиля подстраивается под впереди идущий;  $S_n$  — параметр логистической кривой вида:

$$S_n = \dot{x}_n(t)(\tau + t_b) + \dot{x}_n^2(t) / 2\mu g + 2\exp[1/\sqrt{k_n}] + l_n,$$

который отражает расстояние, начиная с которого влияние впереди идущего автомобиля перестаёт превалировать над преследующим;  $t_b$  — время срабатывания тормозной системы;  $V_n$  — функция вида:

$$V_n = \min(\dot{x}_{n-1}(t), v_{max,n}),$$

которая не позволяет автомобилю разогнаться быстрее, чем  $v_{max,n}$ ;  $\lambda_n$  — начальное положение автомобиля;  $v_n$  — начальная скорость автомобиля,  $\mu$  — коэффициент трения скольжения,  $g$  — ускорение свободного падения, а  $R_n$  — релейная функция вида:

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

которая описывает переключение «разгон–торможение».

Опишем для примера определение диапазона значений параметра  $a_n$ , который характеризует обратное время согласования скоростей. Для этого достаточно рассмотреть разгон только одного транспортного средства, так как этот параметр не зависит от количества автомобилей и расположения их в потоке. Рассмотрим фазу разгона ( $R = 1$ ) одного транспортного средства модели (1).

$$\begin{cases} \ddot{x}(t) = a(v_{max} - \dot{x}(t)), \\ x(0) = 0, \quad \dot{x}(0) = 0, \end{cases} \quad (2)$$

Для моделирования разгона автомобиля была написана компьютерная программа, которая, используя метод Рунге-Кутты [2], решает уравнение (2) при разных значениях коэффициента  $a$  и замеряет время разгона автомобиля до скорости  $v_{max}$ . В среднем время разгона легкового автомобиля до скорости  $v_{max}=100\text{км/ч}$  находится в промежутке от 5 до 15 секунд [3]. Значения коэффициента  $a$  при этом находится в следующем диапазоне  $a \in [0.31, 0.92]$ , что видно на рисунке 1. При среднем времени разгона 10 секунд  $a$  среднее будет равняться 0.46.

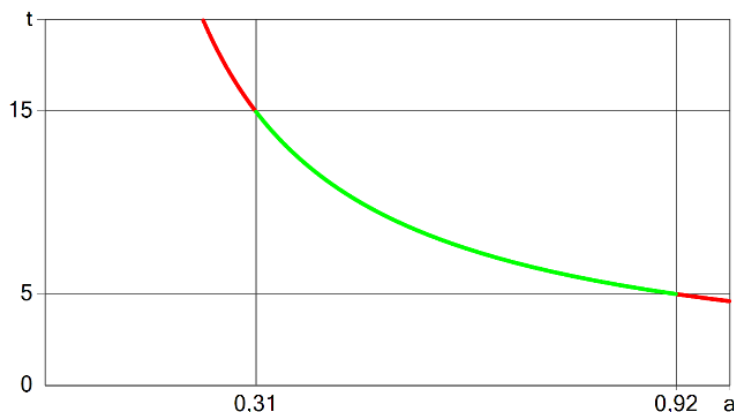


Рис. 3 График времени разгона до  $v_{max}=100$  км/ч при различных значениях параметра  $a$ .

Аналогично определяются и другие параметры

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-71-30011).

#### Литература

1. Погребняк М. А. Моделирование движения транспортного потока //Математическое моделирование. – 2022. – Т. 34. – №. 10. – С. 95–109.
2. Бахвалов Н.С. Численные методы. – М.: Наука, 1975
3. Пожидаев С. П. Оценка времени разгона автомобилей //Известия Оренбургского государственного аграрного университета. – 2014. – №. 5 (49). – С. 74–76.

### ЗАДАЧА БЫСТРОДЕЙСТВИЯ ПО ОСТАНОВКЕ ДВУЗВЕННОГО ФИЗИЧЕСКОГО МАЯТНИКА НА ПОДВИЖНОМ ПОДВЕСЕ

Потапов А.П.

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

*E-mail: anton-1191@mail.ru*

В настоящее время на множестве различных производств распространено использование роботов и манипуляторов. С некоторой точностью для описания подобных механизмов можно использовать модели  $n$ -звенного маятника, находящегося на подвижной тележке. При решении задачи позиционирования всей динамической системы возникают различные задачи управления подвижной тележкой.

Одной из таких задач является задача погашения колебаний рассмотренная в [1]. Авторами был исследован однозвенный двухмассовый маятник, получено оптимальное управление для выбранного кинематически-динамического критерия при помощи метода динамического программирования Беллмана. Если же говорить о временном критерии оптимальности, то можно выделить работу [2]. В ней был исследован однозвенный маятник на колесе, и синтезировано оптимальное по быстродействию управление для стабилизации такого маятника в неустойчивом положении равновесия. Следующим шагом в исследовании маятников на подвижном подвесе стал переход к большему чис-

лу звеньев. Для этого в работе [3] был рассмотрен  $n$ -звенный маятник в линейном приближении, найдены особые управления для квадратичного критерия. Однако точного решения для общего случая найти не удалось. Очевидно также, что движения, как манипулятора, так и других механизмов, являются трехмерными. В связи с этим имеет смысл исследовать пространственные движения маятника. Работы в этом направлении были проделаны в [4]. К базовым исследованиям в области колебательных систем можно отнести исследования осцилляторов. Одним из примеров таких работ является [5], к основным результатам которой можно отнести доказанное свойство изохронности рассмотренной системы.

В общем случае задача быстродействия, поставленная для  $n$ -звенного маятника на подвижном подвесе, достаточно сложна, и ее решение до сих пор не найдено. Поэтому, как логическое продолжение приведенных выше исследований, в настоящей работе рассмотрен двухзвенный маятник на подвижном подвесе.

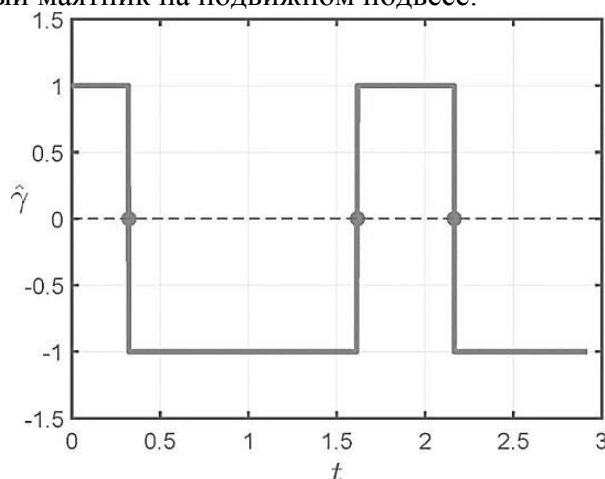


Рис. 1: Зависимость управления от времени.

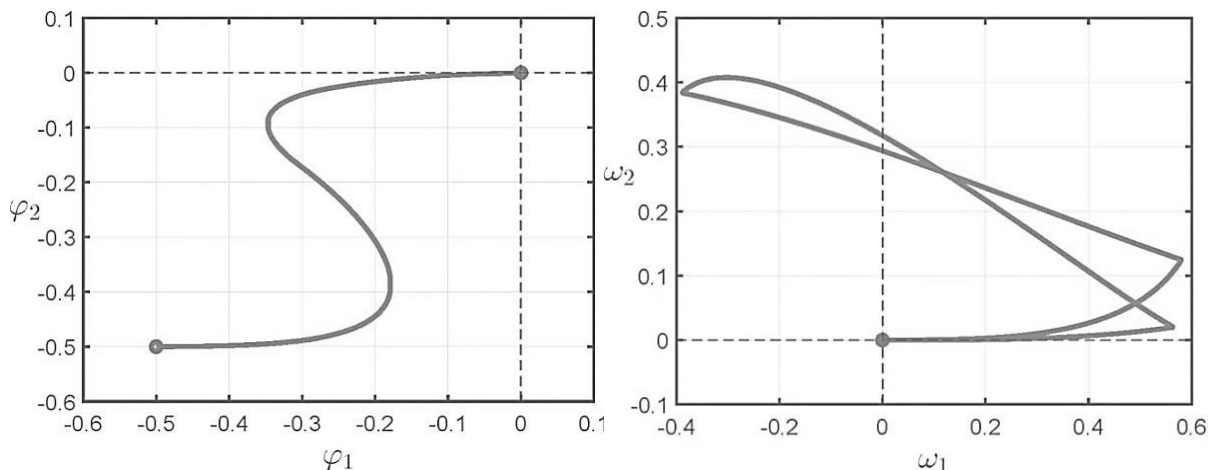


Рис. 2: Движение линеаризованной системы в фазовой плоскости углов (слева) и угловых скоростей (справа).

В работе предложено несколько различных способов описания нелинейных систем, установлены их преимущества и недостатки. Опираясь на [6], удалось доказать локальную управляемость системы в окрестности положения равновесия. Решить задачу в нелинейном случае не удалось в силу отсутствия граничных условий на сопряженные переменные системы принципа максимума Понтрягина. Для лучшего понимания проблемы система была линеаризована в окрестности устойчивого положения равновесия. С помощью принципа максимума Понтрягина получен вид оптимального по быстродействию управления.

Получено, что вид оптимального управления совпадает с видом управления системой, рассмотренной в [7]. При помощи метода, описанного в публикации [7], составлена система нелинейных алгебраических уравнений для определения длительностей

промежутков постоянства управления. Из длительностей промежутков постоянства управления получены времена моментов переключения и коэффициенты в законе оптимального управления.

Для проверки результатов работы проведено численное моделирование системы при выбранных параметрах системы. На графиках приводятся вид программного управления и фазовые плоскости.

### Литература

1. Овцов С.А., Сарока В.В. Разработка оптимальной системы управления роботоманипулятором гальванической линии для погашения колебаний подвески в переходных режимах // Труды БГТУ. 2014. Серия 3. № 1. С. 63–68.
2. Мартыненко Ю.Г, Формальский А.М. Управляемый маятник на подвижном основании // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. 2013. № 1. С. 9–23.
3. Манита Л.А., Ронжина М.И. Оптимальный синтез в задаче управления  $n$ -звенным перевернутым маятником на движущемся основании // Оптимальное управление, СМФН, 56, РУДН, М., 2015, 129–144
4. Ананьевский И.М., Анохин Н.В. Управление пространственным движением многозвенного перевернутого маятника с помощью момента, приложенного к первому звену // Прикладная математика и механика. 2014. Т. 78. № 6. С. 24–33.
5. Галяев А.А. Задача оптимального управления осциллятором с целью обнуления его энергии при ограничении на управляющее воздействие // Автоматика и телемеханика. 2009. № 78. С. 24–33.
6. Сачков Ю.Л. Введение в геометрическую теорию управления. М.: ЛЕНАНД, 2021.
7. Берлин Л.М., Галяев А.А., Лысенко П.В. Геометрический подход к задаче оптимального скалярного управления двумя несинхронными осцилляторами // Алгебра, геометрия и комбинаторика, Итоги науки и техн. Сер. Современ. мат. и ее прил. Темат. обз., 215, ВИНТИ РАН, М., 2022, 40–51.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ СПИНОВЫХ И ПСЕВДОСПИНОВЫХ МОДЕЛЕЙ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ МОНТЕ-КАРЛО

Пятков А.Ю., Панов Ю.Д., Улитко В.А.

*УФУ имени Первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург*

*E-mail: alekseypyatkov@yandex.ru*

В современной физике конденсированного состояния важное место занимают исследования фазовых переходов и критических явлений в спиновых системах с фрустрацией. Фрустрированные спиновые системы имеют богатый набор фаз и фазовых переходов, обладают необычными магнитными свойствами [1]. Такие системы крайне чувствительны к различным типам взаимодействий и демонстрируют различные типы фазовых переходов при конечных температурах. При моделировании классический метод Монте-Карло (МК) сталкивается с известной проблемой “критического замедления” вблизи точки фазового перехода. Популярным решением здесь является использование репличного обменного алгоритма МК [2] при моделировании “проблемного” региона.

Мы рассматриваем модель Блюм-Капеля на квадратной решётке. Гамильтониан модели [3]:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_j S_i - D \sum_{k=1}^N S_k^2 - h \sum_{k=1}^N S_k, \quad (1)$$

где  $S_i = \pm 1, 0$ , первая сумма учитывает взаимодействие между ближайшими соседями, вторая сумму одноосную одноионную магнитную анизотропию и третья сумма учитывает зеемановскую энергию в продольном магнитном поле



Модель Блюм-Копеля позволяет моделировать свойства некоторых купратов. Исследование проводилось с помощью репличного обменного алгоритма на больших решётках. Для ускорения расчетов была реализована параллельная версия алгоритма средствами языка CUDA. Были получены температурные фазовые диаграммы для модели Блюм-Капеля и определён тип фазового перехода с помощью метода гистограмм. Для области трикритической точки [3] были получены гистограммы энергий.

*Работа была выполнена в Уральском Федеральном Университете в рамках проекта FEUZ-2023–0017.*

#### Литература

1. Diep H. T. et al. (ed.). Frustrated spin systems. – World scientific, 2013.
2. Mitsutake A., Sugita Y., Okamoto Y. Generalized-ensemble algorithms for molecular simulations of biopolymers //Peptide Science: Original Research on Biomolecules. – 2001. – Т. 60. – №. 2. – С. 96-12
3. Strecka J., Jascur M. A brief account of the Ising and Ising-like models: Mean-field, effective-field and exact results //arXiv preprint arXiv:1511.03031. – 2015.

### ИССЛЕДОВАНИЕ РОЛИ ПРИМЕСЕЙ ТИТАНА И ЦИРКОНИЯ НА СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ОРТОРОМБИЧЕСКОГО ДИОКСИДА ГАФНИЯ МЕТОДОМ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

Резник А.А.

*МФТИ, НИИ молекулярной электроники, АО «Микрон», Зеленоград, Россия  
E-mail: reznik.aa@phystech.edu*

Экспериментальное подтверждение в 2011 г. у диоксида гафния сегнетоэлектрических свойств [1] открыло гигантские перспективы его применения в различных приложениях микроэлектроники, в том числе в запоминающих устройствах [2]. Сегнетоэлектрическая энергонезависимая память (FeRAM) обладает высоким ресурсом переключений, длительным временем хранения, стойкостью к внешним факторам и высоким быстродействием [3]. Тройные соединения типа  $Hf_xA_{1-x}O_2$  используются для создания нового поколения FeRAM не использующих перовскитные структуры. Преимущества таких соединений состоит в совместимости с КМОП-технологией, отсутствию в химическом составе свинца и стабильностью сегнетоэлектрических свойств в тонких, вплоть до 7 нм и ниже, сегнетоэлектрических плёнках. Одной из важнейших характеристик энергонезависимой сегнетоэлектрической памяти является величина остаточной поляризации  $P_r$ , которая определяет уровни логических «0» и «1». Достижение более высоких значений  $P_r$  является одной из приоритетных задач на данный момент.

Предметом теоретического исследования является квантово-химическое моделирование остаточной поляризации соединений  $Hf_xZr_{1-x}O_2$  и  $Hf_xTi_{1-x}O_2$  в орторомбической структурной модификации  $Pca2_1$ . Моделирование всех соединений выполнялось в программном пакете Quantum ESPRESSO [4]. При описании электронной плотности атомов гафния, титана и кислорода использовались обменно-корреляционный функционал GGA (PBE) и соответствующие ему различные типы псевдопотенциалов: PAW, ultrasoft и NC [5,6]. Для описания волновых функций и дискретизации импульсного пространства применялась сетка Монкруста-Пака размера  $8 \times 8 \times 8$  и базис плоских волн с энергиями до 600 Ридберг =  $600 \cdot 13,6$  эВ = 8160 эВ. Расчет энергии основного состояния завершался, если разница энергий основного состояния последовательных итераций оказывалась меньше  $10^{-9}$  Ридберг =  $10^{-9} \cdot 13,6$  эВ =  $1,36 \cdot 10^{-8}$  эВ. Расчет положения атомов в ячейке проводился до тех пор, пока в процессе релаксации ячеек межатомные силы не становились меньше  $10^{-3}$  Ридберг/Бор =  $10^{-3} \cdot 2,18 \cdot 10^{-11} / 5,29 \cdot 10^{-9} = 4,12 \cdot 10^{-6}$  (эрг/см) =  $2,57 \cdot 10^6$  (эВ/см) и разница энергий основных состояний между последова-

тельными итерациями не становилась меньше  $10^{-4}$  Ридберг =  $10^{-4} \cdot 13,6$  эВ =  $1,36 \cdot 10^{-3}$  эВ. В работе использовалась как прямая замена атомов, так и виртуальная аппроксимация кристалла (VCA) [7], которая является хорошим приближением при описании систем, легированных химически сходными элементами. Чтобы аппроксимировать смешивание двух элементов А и В с соотношениями  $x$  и  $1-x$ , путём линейной интерполяции, создается результирующий псевдопотенциал:

$$V = xV_A + (1 - x)V_B$$

Работа выполнялась с использованием инфраструктуры Центра коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» ФИЦ ИУ РАН (Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской Академии Наук).

В результате моделирования были получены данные о значениях энергии когезии, длинах базовых векторов, длинах связи между атомами, углах между атомами для элементарных ячеек  $\text{HfO}_2$  с добавлением Zr и Ti в различных концентрациях. Была проведена структурная релаксация, а также построены зонные диаграммы и фононные спектры для оценки влияния легирования на электрофизические параметры соединения. Исследована зависимость величины остаточной поляризации  $P_r$  от концентрации титана и циркония в диоксиде гафния.

### Литература

1. Böske T.S. et al. Ferroelectricity in hafnium oxide thin films //Applied Physics Letters. 2011, № 99 (10). p. 102903.
2. Красников Г.Я. и др. Современное состояние разработок в области энергонезависимой памяти типа РСМ //Электронная техника. Серия 3: Микроэлектроника. 2015, № 2. с. 38–44.
3. Salahuddin S., Ni K., Datta S. The era of hyper-scaling in electronics //Nature Electronics. 2018, № 1(8). p. 442–450.
4. Giannozzi P. et al. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO //Journal of physics: Condensed matter. 2017, № 29 (46). p. 465901.
5. Dal Corso A. Pseudopotentials periodic table: From H to Pu //Computational Materials Science. 2014, № 95. p. 337–350.
6. van Setten M.J. et al. The PseudoDojo: Training and grading a 85 element optimized norm-conserving pseudopotential table //Computer Physics Communications. 2018, № 226. p. 39–54.
7. Bellaiche L., Vanderbilt D. Virtual crystal approximation revisited: Application to dielectric and piezoelectric properties of perovskites //Physical Review B. 2000, № 61 (12). p. 7877.

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ГИБРИДНЫХ УГЛЕРОДНЫХ ВОЛОКОН КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Савватеева М. В.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия  
E-mail: [mashanyasav@mail.ru](mailto:mashanyasav@mail.ru)

Одной из сложных проблем при разработке высокоскоростных летательных аппаратов является обеспечение эффективной защиты конструкции от воздействия высоких температур и кислорода атмосферы. Обеспечение теплового режима летательного аппарата реализуется рациональным выбором используемых теплозащитных и теплоизоляционных материалов и структуры композита, что невозможно без комплексного исследования процессов тепло- и массообмена [1,2]. Проектирование систем тепловой защиты требует сравнения большого числа вариантов применяемых материалов для разных условий эксплуатации. Поэтому опора на экспериментальные методы исследования приводит к значительному росту затрат и длительности разработки реальных конструкций летательных аппаратов [1,2]. Одним из стратегических направлений развития материалов на период до 2030 года являются компьютерные методы моделирования структуры и свойств материалов при их создании и работе в конструкции [1–3].

Рассматривается модель высокопрочного, термостойкого и гораздо более лёгкого (по сравнению с тугоплавкими металлами) композиционного материала, изначально состоящего из углеродных С волокон, покрытых слоем карбида кремния SiC. Методы математического моделирования тепло- и массопереноса в композиционных материалах позволяют значительно сократить стоимость и сроки разработки материалов, их испытаний, отработки и внедрения в конструкцию летательного аппарата. Если физические и геометрические свойства гетерогенной системы повторяются в пространстве с определенной периодичностью, и структура композиционного материала обладает дальним порядком, то можно описывать перенос тепловой энергии в элементарной ячейке — части объема, повторяя которую специальным образом, можно моделировать весь объем композиционного материала [3]. При воздействии высоких температур в атмосфере происходит поэтапное окисление углеродных волокон и оболочки из карбида кремния с образованием конденсированного диоксида кремния, диффузия газообразных продуктов через пленку конденсированного диоксида кремния [2].

### Литература

1. Каблов Е.Н., генеральный директор ФГУП «ВИАМ», академик РАН: Лекция «Материалы и производственные технологии нового поколения», г. Казань, (дата обращения 10.11.2015).
2. Баринов Д.Я. Определение характеристик деструкции теплозащитных покрытий летательных аппаратов из пористых углерод-керамических композиционных материалов: дисс. кандидататехнич. наук: 05.07.03 / Баринов Дмитрий Яковлевич – ФГБОУ ВО «МГТУ им. Н.Э. Баумана», Москва, 2020 – 200 с.
3. Г.Н. Дульнев, Ю.П. Заричняк. Теплопроводность смесей и композиционных материалов. Справочная книга. Л., «Энергия», 1974.

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВОЙ КОРРЕКЦИИ АБЕРРАЦИЙ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ СИСТЕМОЙ ИЗ ДВУХ АДАПТИВНЫХ ЗЕРКАЛ ПОД УПРАВЛЕНИЕМ СПГ АЛГОРИТМА

Саламатин Д.А.,<sup>1,2</sup> Шнягин Р.А.<sup>2</sup>, Стариков Ф.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Филиал МГУ имени М.В. Ломоносова, в городе Сарове <sup>2</sup>РФЯЦ-ВНИИЭФ,  
Институт лазерно-физических исследований, г. Саров, Россия  
E-mail: SarovSaint@yandex.ru

В работе исследована эффективность коррекции фазовых aberrаций излучения современной лазерной установки с помощью адаптивной оптической системы (АОС) [1] с двумя одинаковыми последовательно расположенными 18-элементными адаптивными зеркалами размером  $46 \times 56 \text{ мм}^2$  под управлением СПГ алгоритма [2]. Принципиальные схемы работы АОС представлены на рисунке 1. Рассмотрено три варианта работы АОС: первый — используется только одно адаптивное зеркало А32 для компенсации aberrаций от двух фазовых экранов, А31 считается плоским; второй — у А31 и А32 общий блок управления БУ и используется один датчик интенсивности — рисунок 1(а); третий – независимая работа А31 и А32, у каждого зеркала есть свой блок управления БУ1 и БУ2 соответственно и свой датчик интенсивности — рисунок 1(б). На рисунке 2 показано расположение толкателей адаптивного зеркала. Для повышения эффективности коррекции адаптивные зеркала сдвигались друг относительно друга в поперечном направлении так, чтобы их толкатели чередовались.

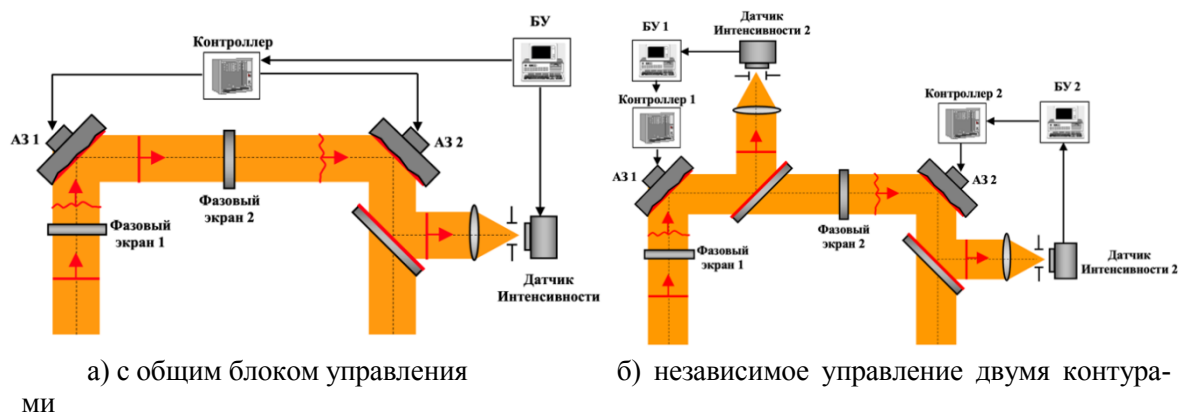


Рис. 1. Схемы работы АОС с двумя адаптивными зеркалами. а) с общим блоком управления, б) независимое управление двумя контурами.

Пучок задавался прямоугольным размером  $15 \times 22 \text{ мм}^2$ . Фазовый экран соответствует экспериментальным абберациям, которые приобретает пучок, проходя через усилитель, он представлен на рисунке 3(а). В численном моделировании фазовые экраны брались одинаковыми. На рисунках 3(б) и 3(в) показаны полученные в численном моделировании дальние зоны излучения на датчике интенсивности до и после коррекции аббераций соответственно.

На рисунке 2 приведено изменение целевой функции  $dP$  в процессе выполнения итераций  $N$  СПГ алгоритма. Результаты приведены для статистического усреднения 10 реализаций коррекции. Видно, что коррекция аббераций наиболее эффективна, когда АОС состоит из двух независимых адаптивных зеркал (два датчика интенсивности), целевая функция достигает значения  $dP = 0,37$ . Использовать конфигурацию АОС с одним общим блоком управления нецелесообразно — в этом случае эффективность коррекции аббераций практически такая же, как и при использовании АОС с единственным адаптивным зеркалом А32,  $dP < 0,26$ . При использовании одного адаптивного зеркала наблюдается самая низкая скорость сходимости СПГ алгоритма.

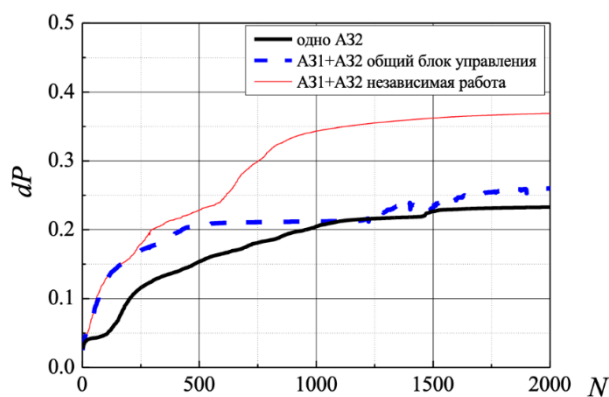


Рис. 2. Динамика работы СПГ алгоритма в АОС различных конфигураций

### Литература

1. Garanin S.G., Manachinsky A.N., Starikov F.A., Khokhlov S.V. Phase correction of laser radiation with the use of adaptive optical systems at the Russian Federal Nuclear Center – Institute of Experimental Physics // Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing. 2012. Vol. 48. P. 134–141.
2. Vorontsov M.A., Sivokon V.P. Stochastic parallel-gradient-descent technique for high-resolution wave-front phase-distortion correction // J. Opt. Soc. Amer. Vol. 15. P. 2745–2758.

## БИФУРКАЦИОННАЯ ДИАГРАММА РЕЖИМОВ МАКРОСКОПИЧЕСКОЙ ДИНАМИКИ СВЕРХПРОВОДЯЩИХ ДЖОЗЕФСОНОВСКИХ КОНТАКТОВ

Сотин А.А.,<sup>1,2</sup> Голдобин Д.С.<sup>1,2</sup><sup>1</sup>Пермский ГНИУ, физический факультет, Пермь, Россия<sup>2</sup>Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермь, РоссияE-mail: [4629807@mail.ru](mailto:4629807@mail.ru)

В связи с результатами, достигнутыми в экспериментальной работе [1], в рамках которой была получена вольт-амперная характеристика для цепи из последовательно соединённых джозефсоновских элементов SNS типа, источника э.д.с. и конденсатора, собственные частоты которого имеют порядок собственных частот осцилляций эффективного омического тока в цепи, возникла необходимость аналитического исследования коллективной динамики ансамбля переходов данного типа. Цикл статей, посвящённых решению данной задачи, содержит работу [2] по анализу поведения одного элемента в рамках резистивной модели (RSJ - model). При этом используется разложение по базису временных гармоник, не являющееся равномерным в околоскритической области. В дальнейшем был рассмотрен ансамбль указанного типа в пренебрежении индуктивной компонентой тока на контактах. Построенная в рамках такого приближения теория не описала наблюдаемых в эксперименте эффектов. В связи с этим, актуальной проблемой является получение результатов для ансамбля указанного вида в контексте резистивной модели. Данная работа представляет собой шаг в этом направлении, суть которого заключается в проведении анализа глобальных бифуркаций для уединённого контакта в той же модели.

Качественное решение поставленной задачи было получено ранее в работе [3] при рассмотрении динамики электромотора. Наиболее полный анализ системы производился при рассмотрении влияния периодического возмущения на систему [4], приводящего к хаотизации его поведения.

В настоящей работе была исследована динамика джозефсоновского элемента под действием внешнего источника постоянного тока в приближении резистивной модели. Показано, что в системе реализуется бифуркация разрушения гетероклинической петли с образованием устойчивого предельного цикла. Получен ряд асимптотических разложений для решений, соответствующих предельному циклу. Установлен факт неравномерности приближений по временным гармоникам, обусловленный наличием логарифмической особенности периода собственных осцилляций в околоскритической области. Получена аппроксимация околоскритической области бифуркационной кривой зависимости величины эффективного омического тока на элементе от прикладываемого внешнего тока.

Полученные результаты могут быть использованы при анализе поведения ансамблей джозефсоновских элементов, а также аналогично описываемых (с математической точки зрения) систем.

### Литература

1. P. Barbara, A. B. Cawthorne, S. V. Shitov, and C. J. Lobb, Stimulated Emission and Amplification in Josephson Junction Arrays, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1963 (1999).
2. Denis S. Goldobin, Ludmila S. Klimenko, Resonances and multistability in a Josephson junction connected to a resonator, *Physical Review E* **97**, 022203 (2018).
3. J. Stoker, *Nonlinear Vibrations in Mechanical and Electrical systems* (Interscience, New York, 1950), p. 68-86.
4. B. A. Huberman, J.P. Crutchfield, N.H. Packard, Noise phenomena in Josephson junctions. *Appl. Phys. Lett.* **37**, 750 (1980).

## МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АЛЮМИНИЯ, УСИЛЕННОГО СВЕРХТОНКИМИ АЛМАЗНЫМИ ПЛЕНКАМИ (ДИАМАНОМ): АВ ИНИТЮ ИССЛЕДОВАНИЕ

Степанова Х.С.<sup>1,2</sup>, Ларионов К.В.<sup>3,4</sup>, Сорокин П.Б.<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва; <sup>2</sup>НИТУ «МИСиС», Москва; <sup>3</sup>ФГБНУ Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов, Троицк; <sup>4</sup>МФТИ, Долгопрудный  
*khris\_peace@yahoo.com*

Изучение стабильности и механических характеристик композиционных материалов на основе ряда лёгких металлов (напр. Al, Mg) и сверхтонких алмазных плёнок (диаманов) актуально как в научном, так и в техническом плане. Высокие значения констант упругости диамана делают его перспективным кандидатом для использования в качестве наполнителя в композиционных материалах на основе металлов.

В настоящей работе исследовались механические свойства нанокompозита, полученного путем армирования алюминиевой матрицы алмазными нанолентами. Рассмотрен случай равномерного распределения нанолент в матрице Al в предположении, что такая конфигурация приведет к максимальному повышению механических характеристик.

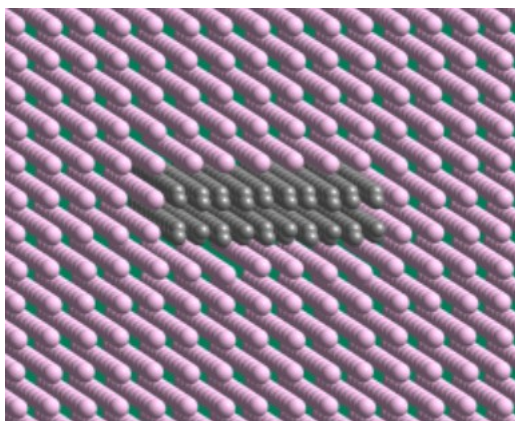


Рис. 1. Атомная структура композита алюминий/алмазная нанолента. Атомы алюминия и углерода показаны розовым и серым цветами, соответственно.

Нами была изучена стабильность алмазных нанолент и получены для них значения констант упругости в зависимости от их обратных ширин методом функционала плотности (density functional theory, DFT). После мы поместили алмазные ленты, убрав при этом все атомы водорода, в металлическую матрицу, изучили стабильность полученного композита, оценили энергии связей и упругие константы тонких алмазных пленок в зависимости от их обратных ширин, а также оценили критическое значение сдвигового напряжения углеродной наноструктуры внутри матрицы. Все расчеты проводились с использованием программы VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package).

Полученные данные позволят в дальнейшем проводить целенаправленные эксперименты для получения нанокompозитов нового поколения, обладающих превосходящими физико-химическими характеристиками, которые могут быть использованы в широкой области деятельности в том числе в космической и оборонной промышленности.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФИ №21–12–00399. Расчеты проведены с использованием ресурсов вычислительного кластера НИТУ «МИСиС».

### Литература



1. D. G. Kvashnin, M. Ghorbani-Asl, D. V. Shtansky, D. Golberg, A. V. Krashennnikov and P. B. Sorokin. Mechanical properties and current-carrying capacity of Al reinforced with graphene/BN nanoribbons: a computational study // *Nanoscale*, 2016, 8, 20080.
2. Л. А. Чернозатонский, П. Б. Сорокин, А. Г. Квашнин, Д. Г. Квашнин, Алмазоподобный нанослой C2N – диамант: моделирование структуры и свойств, Письма в ЖЭТФ, 2009, том 90, выпуск 2, 144–148.

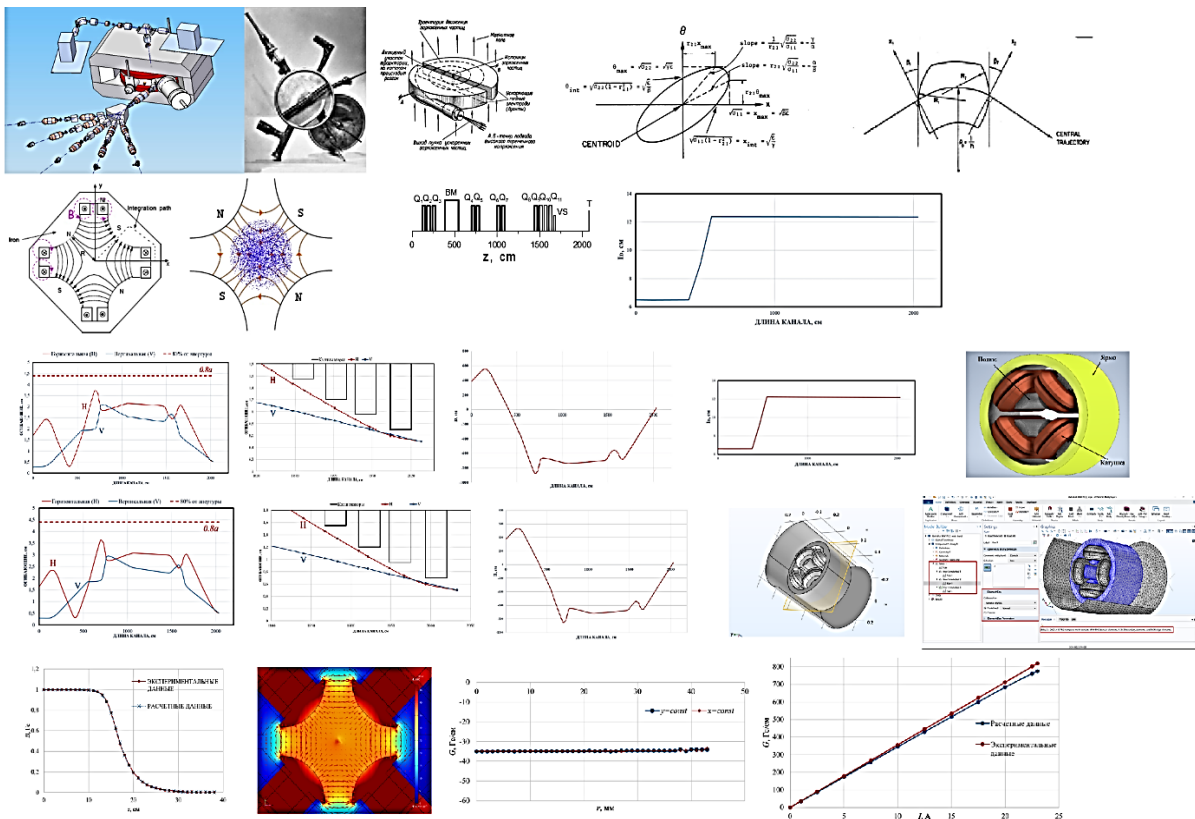
## РАСЧЕТ КАНАЛОВ ТРАНСПОРТИРОВКИ ЧАСТИЦ, ВЫВЕДЕННЫХ ИЗ ЦИКЛОТРОНА

Глеуберды М. Т.1

*Университет «Дубна», инженерно-физический институт, Дубна, Россия*  
E-mail: [tmm20149906@gmail.com](mailto:tmm20149906@gmail.com)

Данная работа посвящена расчету канала транспортировки заряженных частиц, выведенных из изохронного циклотрона ДЦ-280. Работа выполнена под руководством начальника сектора СФУ Н. Ю. Казаринова в секторе физики ускорителей (СФУ) Лаборатории ядерных реакции (ЛЯР) имени Г. Н. Флерова, Объединенного института ядерных исследований.

В работе приведены теоретическое представление физики ускорителей, основные понятия и описаны принципы работ программ TRANSPORT и COMSOL. Также приведены результаты расчетов канала транспортировки №5 циклотрона ДЦ-280 для пучков ионов  $^{48}\text{Ca}^{9+}$  и  $^{50}\text{Tl}^{8+}$ . Описан этап обработки полученных данных и приведены результаты в виде таблиц и графиков. Выполнено сравнение результатов расчета с экспериментальными данными для модели квадрупольной линзы 11К30-770 в программе COMSOL. Подведены итоги расчетов и полученных данных.



**Литература:**

1. Дж. Ливингуд «Принципы работы циклических ускорителей». 1961.
2. Лебедев А. Н., Шальнов А. В. «Основы физики и техники ускорителей: В 3-х т.». Учеб. Пособие для вузов. Т. 1. Ускорители заряженных частиц. –М.: Энергоиздат, 1981.– 192 с., ил.
3. М. Стэнли Ливингстон. Ускорители – установки для получения заряженных частиц больших энергий / Под ред. М. С. Рабинова. - М.: Издательство иностранной литературы, 1956. – 144с.
4. Смирнов В. Л. Циклотрон и его моделирование // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2021. Т. 52. ВЫП. 5. С. 1158–1304.
5. [uspas.fnal.gov/materials/09VU/Lecture2.pdf Magnetic Fields and Magnet Design] // Jeff Holmes, Stuart Henderson, Yan Zhang, USPAS, January 2009.
6. Дружинин Б. Л., Кац М. М. «Расчет канала для транспортировки интенсивного протонного пучка от линейного ускорителя к трансмутационной мишени».
7. Н. А. Винокуров, Лекции по электронной оптике и физике пучков, ИЯФ СО РАН.
8. K.L. Brown, D.C. Carey, Ch. Iselin, and F. Rothacker: Transport, a Computer Program for Designing Charged Particle Beam Transport Systems. See yellow reports CERN 73- 16 (1973) & CERN 80-04 (1980).
9. Н. Ю. Казаринов. Расчет канала №5 циклотрона ДЦ-280. ТОТ-СФУ-800
10. О. Н. Борисов, “Расчет огибающих и эмиттансов выведенных пучков из циклотрона ДЦ-280. В канале №4 (Еремин А. В.)”, Отчет ЛЯР ТО-ДЦ280-07–36\_756, Дубна, 2018.
11. О. Н. Борисов. Расчет эмиттансов выведенных пучков ионов  $^{48}\text{Ca}^{7+}$  и  $^{48}\text{Ca}^{9+}$  с энергией 5.8 МэВ/нукл. из циклотрона ДЦ -280, ТО-ДЦ280-07 -35\_697
12. K.L. Brown “A First and Second Order Matrix Theory for the Design of Beam Transport Systems and Charged Particle Spectrometers”, SLAC-R-075, SLAC-75, 1968. – 134.
13. Программные продукты COMSOL Multiphysics: [www.comsol.ru/products](http://www.comsol.ru/products)
14. Красников, Г.Е. Моделирование физических процессов с использованием пакета COMSOL Multiphysics: учебное пособие / Г. Е. Красников, О.В. Нагорнов, Н. В. Старостин. – М.: НИЯУ МИФИ, 2012. – 184 с.

## ИДЕНТИФИКАЦИЯ ФУНКЦИИ ПРОПУСКНОЙ СПОСОБНОСТИ СОЦИАЛЬНЫХ СЕТЕЙ

Толстых М.А.

*Донецкий НУ, физико-технический факультет, Донецк, ДНР, Россия*  
*E-mail: physicisto@yandex.ru*

Распространение информации в больших социальных сетях подчиняется законам диффузии.

Пусть  $x$  — это расстояние в графе сети, измеряемое минимальным набором рёбер, по которым может быть передана информация  $v(x, t)$  от узла-источника информации в виде репостов какой-либо новости. Считаем, что источник информации находится в узле  $x_a$  и в момент времени  $t = t_0$  генерирует информацию  $v(x_a, t_0)$  в виде одной новости (публикации). Тогда модель распространения информации в социальной сети представляет собой одномерное параболическое уравнение следующего вида [4]:

$$\frac{\partial v}{\partial t} - p \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - ruv = 0, \quad x, t \in \Omega = (x_a, x_b) \times (t_0, t_1),$$

$$v = 1 \text{ на } \Gamma_a = x_a \times (t_0, t_1), \quad \frac{\partial v}{\partial x} = 0 \text{ на } \Gamma_b = x_b \times (t_0, t_1).$$

Здесь информация  $v(x, t) \in L_2(\Omega)$ , где  $L_2$  — евклидово пространство функций с интегрируемым квадратом;  $p(x) \in L_2(x_a, x_b)$  — коэффициент популярности информации,



который влияет на степень диффузии информации извне социальной сети;  $r(t) \in L_2(t_0, t_1)$  — скорость роста информации за счёт пользователей, поделившихся новостью внутри сети;  $u(x) \in L_2(x_a, x_b)$  — пропускная способность, т.е. максимально возможное количество поделившихся новостью пользователей на расстоянии  $x$ . Все функции  $p(x)$ ,  $r(t)$  и  $u(x)$  определены на  $\Omega$ , но зависят только от времени или пространства.

Идентификацию начнём с функции  $u(x)$ .

Для нахождения оптимального значения  $u(x)$  запишем целевой функционал:

$$J(u) = \iint_{\Omega} (v - v_e)^2 dx dt \in E,$$

где  $v_e$  — экспериментально наблюдаемое состояние в реальной сети,  $E$  — это евклидово пространство действительных чисел.

Экстремальная задача параметрической идентификации будет выглядеть следующим образом [2]:

$$u_*(x) = \arg \min_{u \in L_2(S)} J(u),$$

где область  $S = (x_a, x_b) \subset \Omega$ . Ограничения на управление  $u(x)$  отсутствуют.

В данной работе мы будем использовать формально обобщенный на бесконечномерные пространства метод наискорейшего спуска и метод с регулируемым направлением спуска [1], алгоритм которых можно записать как:

$$u^{k+1}(x) = u^k(x) - b^k \alpha(x) \nabla J(u^k; x), \quad x \in (x_a, x_b), \quad k = 0, 1, \dots,$$

где  $k$  — номер итерации,  $b^k$  — шаговой множитель,  $\alpha(x)$  — параметр регулирования направления спуска, который для метода наискорейшего спуска равен единице,  $\nabla J(u^k; x)$  — градиент функционала, найденный в работе [3].

Для выбора параметра-функции  $\alpha(x)$  воспользуемся соответствующим выражением из [1]:

$$\alpha(x) = \frac{u^0(x)}{|\nabla J(u^0; x)|}.$$

Для оценки работоспособности данных алгоритмов была решена тестовая задача, в которой значения параметров  $p(x)$  и  $r(t)$  считались известными, и взяты из работы [4]:

Для метода наискорейшего спуска и метода с регулируемым направлением спуска результаты идентификации показаны на рисунке 1.

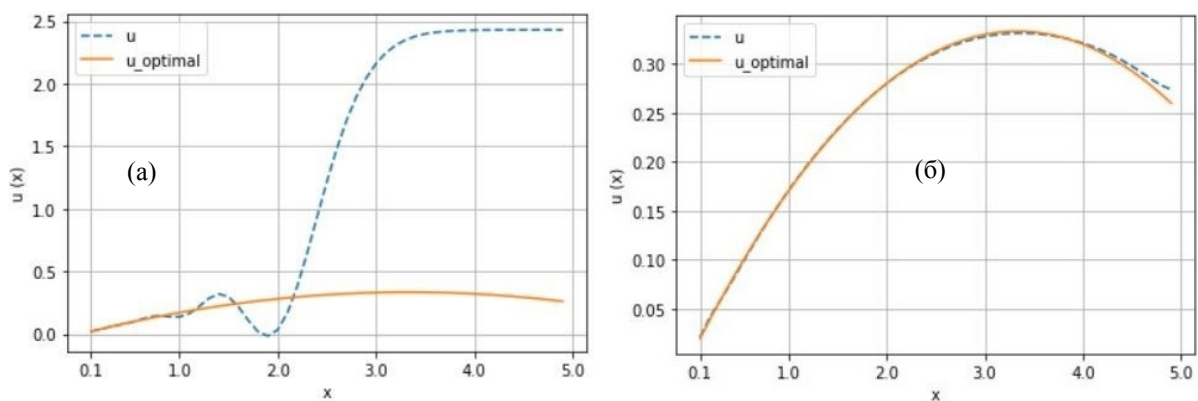


Рис. 1. Результаты идентификации: (а) — для метода наискорейшего спуска; (б) — для метода с регулируемым направлением спуска.

Как видно на рисунке 1 (б), метод с регулируемым направлением спуска дает равномерную сходимость  $u(x)$  к оптимальной заранее заданной функции  $u_*(x)$  (сплошная и штриховая линии почти совпадают), в отличие от метода наискорейшего спуска, решение которым значительно расходится с оптимумом (штриховая линия значительно отклоняется от сплошной оптимальной). Это объясняется существенно разной чувствительностью функционала к управлению в разных точках.

Полученные результаты говорят о возможности применения прямого экстремального подхода для идентификации функции пропускной способности социальной сети. Экстремальный метод с регулируемым направлением спуска может обеспечить быструю равномерную сходимость к точному решению.

### Литература

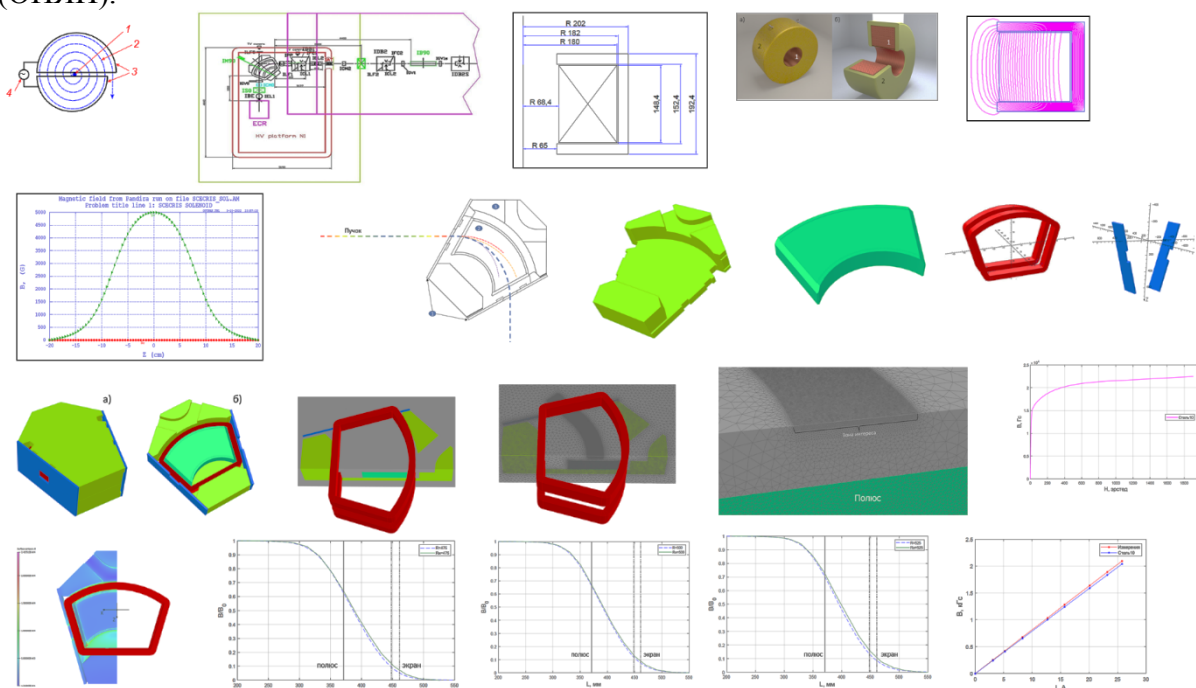
1. Толстых В.К. Прямой экстремальный подход для оптимизации систем с распределенными параметрами. Донецк, 1997.
2. Толстых, В.К. Необходимое условие оптимальности параметрической идентификации для распределённой модели социальных сетей / В.К. Толстых, М.А. Толстых // Вестник Донецкого национального университета. Серия Г: Технические науки. – Донецк: ДонНУ, 2021. – С. 63–68.
3. Tolstykh V.K. Optimization for Systems Governed by Partial Differential Equations // Advanced Modeling and Optimization, Vol. 14, N 3. 2012, pp. 703-716.
4. Wang, H., Wang, F., Xu K. Modeling information diffusion in online social networks with partial differential equations // arXiv preprint arXiv:1310.0505, 2013. 34 p.

## РАСЧЕТ МАГНИТООПТИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ СИСТЕМЫ АКСИАЛЬНОЙ ИНЖЕКЦИИ ЦИКЛОТРОНА

Турап Р.Ш.

Университет «Дубна», Лаб. ядерных реакций им. Г. Н. Флерова (ОИЯИ)

В данной работе проведены расчеты магнитооптических элементов системы аксиальной инжекции на примере элементов циклотрона ДЦ-280 в Лаборатории ядерных реакций им. Г. Н. Флерова (ЛЯР) Объединенного института ядерных исследований (ОИЯИ).



Работа содержит двумерный расчет фокусирующего соленоида-линзы IS0 и трёхмерный расчет поворотно-анализирующего магнита IM90.

Содержит краткие теоретические сведения по тематике исследования, описание основных систем циклотрона и расчет магнитооптических элементов. В качестве примера рассчитываемых магнитооптических элементов были приняты элементы системы аксиальной инжекции циклотрона ДЦ280.

### Литература

1. Дж. Ливингуд «Принципы работы циклических ускорителей». 1961.
2. Смирнов В.Л. Циклотрон и его моделирование // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2021. Т. 52. ВЫП. 5. С. 1158 – 1304.
3. М.Стэнли Ливингстон. Ускорители – установки для получения заряженных частиц больших энергий / Под ред. М.С.Рабинова. - М.: Издательство иностранной литературы, 1956. – 144с.
4. Черняев А.П., Варзарь С.М., Борщеговская П.Ю., Белоусов А.В., Близнюка У.А. Ускорители в мировом хозяйстве // Физика и Техника Ускорителей: Письма в ЭЧАЯ. 2016. Т. 13. №7(205). С. 1541–1545.
5. Wolfgang K.H. Panofsky. The Evolution of Particle Accelerators & Colliders, 1997.
6. Комар Е.Г. Основы ускорительной техники. М., Атомиздат, 1975, с. 368.
7. S. Zarembo Magnets for cyclotrons // IBA S.A., B-1348 Louvain-la-Neuve, Belgium
8. Гикал Б.Н. Новое поколение циклотронов тяжелых ионов для прикладных исследований и промышленного применения. Дубна, 2014. 35 с.
9. <https://pandia.ru/text/82/001/12193.php> - Совершенствование фазотрона ляп и разработка циклотронов для физических и прикладных исследований
10. Naik D. et al. Design of a @Two-Ion Source Charge Breeder Using ECR Ion Source in Two Frequency Mode // Nucl. Instr. Meth. A. 2005. V. 547. P. 270Ä278.
11. Онищенко Л.М. Циклотроны // Физика элементарных частиц и атомного ядра 2008. Т. 39. ВЫП, 6
12. Лебедев А. Н., Шальнов А. В. Основы физики и техники ускорителей: В 3-х т. Учеб. пособие для вузов. Т. 1. Ускорители заряженных частиц. М.: Энергоиздат, 1981. - 192 с., ил.
13. G.G. Gulbekian, S.N. Dmitriev, Yu.Ts. Oganessian, B.N. Gikal, I.V. Kalagin†, S.L. Bogomolov, I.A. Ivanenko, N.Yu.Kazarinov, G.N. Ivanov, N.F.Osipov, STATUS OF THE DC-280 CYCLOTRON PROJECT. Joint Institute for Nuclear Research, FLNR, Dubna, Moscow Region, Russia
14. Гикал Б.Н. Новое поколение циклотронов тяжелых ионов для прикладных исследований и промышленного применения: дис. ...канд.тех.наук. – Дубна, 2013.
15. Герасимова В.Г., Грудинского П.Г. и др. Электротехнический справочник: в 3-х т. Т. 1. М.: Энергия, 1980. – 410 с.
16. Opera-3d User Guide, Oxford OX5 1 JE, England, May 2016

## МАРШРУТИЗАЦИЯ ТРАЕКТОРИИ ДВИЖЕНИЯ МОБИЛЬНЫХ РОБОТОВ В СРЕДЕ С ПРЕПЯТСТВИЯМИ МЕТОДОМ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Дудаков А.С., Турсунов Т.Р.

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

*E-mail: dudakov.as19@physics.msu.ru, tursunov.tr19@physics.msu.ru*

Маршрутизация траектории мобильных роботов (МР), включая БПЛА, является одной из ключевых проблем современной робототехники. Задача маршрутизации траектории движения МР заключается в построении маршрута движения из произвольно заданного начального состояния в заданное целевое состояние с обходом препятствий в процессе движения.

В задачах маршрутизации движения МР широкое распространение имеют классические, традиционные методы, среди которых следует выделить методы: на основе графов, на основе клеточной декомпозиции, потенциальных полей и др (см. например, [1]). Однако, в настоящее время в данных задачах все большую популярность находят современные интеллектуальные методы, такие как: метод муравьиных колоний, метод роя частиц, нейросетевые методы, реактивные методы и др. (см., например, [2]). Настоящая работа посвящена исследованию задачи маршрутизации МР с использованием как классических, так и современных методов. При этом основной фокус делается на методе, основанном на алгоритмах машинного обучения, в частности глубокого обучения с подкреплением (Deep Reinforcement Learning, DRL). Эти алгоритмы лишены недостатков, присущих классическим методам, поскольку гарантируют высокую надежность и способны автоматически обучаться и в дальнейшем принимать решения.

Концепцию обучения с подкреплением принято излагать в терминах обучаемого поведения агента, взаимодействующего с внешней средой. Цель агента — максимизировать накапливаемую награду, получаемую как сигнал обратной связи от среды в рамках обучения. Модель процесса взаимодействия между агентом и средой может быть описана как марковский процесс принятия решений (MDP) через кортеж  $(S, A, R, P)$ , где  $S$  — конечное множество состояний среды,  $A$  — конечное множество действий агента,  $R$  — значение приобретенного вознаграждения,  $P$  — вероятность перехода между состояниями (см., например, [3]).

Решение задачи маршрутизации траектории движения МР с помощью алгоритмов глубокого обучения с подкреплением содержит три ключевых элемента, которые определяют сценарии применения DRL:

- Пространство состояний параметризуется начальной и конечной точкой траектории, а также координатами и скоростями препятствий.
- Пространство действий агента определяется как дискретные команды перемещения (движение вперед/назад) или непрерывные команды скорости (линейная и угловая скорости МР), а также как параметры физической модели МР (скорости двигателей МР)
- Значение приобретаемого вознаграждения задается следующим образом:
  - Положительное значение при достижении цели
  - Отрицательное значение при столкновении с препятствием или при движении слишком близко к нему
  - Отрицательное за каждый временной шаг для побуждения робота двигаться как можно быстрее к цели

Совокупность этих элементов позволяет реализовать применение алгоритма DRL для задачи маршрутизации МР.

В работе проведена компьютерная апробация в среде Python алгоритмов маршрутизации траектории МР на основе технологии глубокого обучения с подкреплением.

### Литература

1. Филимонов А.Б., Филимонов Н.Б. Концепция “фарватера” в задачах потенциального наведения мобильных роботов // Автометрия. 2022. Т. 58, № 4. – С. 59–66.
2. Akka K, Khaber F. Mobile robot path planning using an improved ant colony optimization. *International Journal of Advanced Robotic Systems*. 2018. 15(3). – P. 1–7.
3. J. Xin, H. Zhao, D. Liu and M. Li, "Application of deep reinforcement learning in mobile robot path planning," 2017 Chinese Automation Congress (CAC), Jinan, China, 2017. - P. 7112–7116.

## АВТОМАТИЧЕСКОЕ УПРАВЛЕНИЕ «УМНОЙ» ПАРКОВКОЙ БЕСПИЛОТНОГО АВТОМОБИЛЯ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Тюленев И. Д.

*МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*  
*E-mail: tiulenev.id19@physics.msu.ru*

В настоящее время все большую популярность имеют различные разработки беспилотных транспортных средств, включая беспилотный автомобиль (англ. Unmanned Ground Vehicles, БПА), оборудованный автопилотом – автоматической системой, обеспечивающей управление движением автомобиля без участия водителя [1]. Одно из ключевых направлений разработки и создания БПА связано с автоматизацией отдельных режимов его движения: парковка, движение в пробках, перемещение по автомагистрали и др. Настоящий доклад посвящен исследованию алгоритмического обеспечения автопилота БПА, реализующего как классические, так и современные методы управления парковкой, которая заключается в приведении БПА, как объекта управления, из произвольного начального состояния в целевое конечное состояние за минимальное время с учетом пространственных ограничений, обеспечивающих безопасную парковку автомобиля.

В работе рассмотрена кинематическая модель движения автомобиля, механические ограничения накладываемые на параметры системы, вводятся начальные и конечные условия. Рассматриваются пространственно-геометрические ограничения, позволяющие формально обезопасить автомобиль при движении от столкновения.

Ставится задача быстродействия – нахождения допустимого управления, переводящего БПА из начального положения в конечное за минимальное время.

Изначально к проблеме управления парковкой подходили с использованием классических методов управления, основанных на геометрическом построении опорных траекторий маневра автомобиля, результатом которых является уравнение кривой на плоскости. Среди них успешно зарекомендовала себя модель Дубинса (Lester Dubins), а также её модификации [2]. Дубинс показал, что самый быстрый перевод объекта из одного состояния в другое при заданных начальных и конечных условиях, возможен с помощью кусочно-постоянного управления. При этом существует не более двух промежуточных точек переключения управления, являющихся точками сопряжения дуг окружностей. На основе принципа Понтрягина было показано, что такой перевод из начального положения в конечное будет наибо́льшим. Однако, в отличие от компьютерной симуляции, БПА будет следовать рассчитанной траектории лишь с погрешностью, которая может оказаться существенной для безопасности маневра.

В связи с этим, наиболее перспективными являются методы интеллектуализации управления парковкой БПА, включающие в себя методы машинного обучения, в том числе и методы интеллектуальных вычислений, использующих эволюционный подход, нечеткую логику и нейронные сети. БПА, повторяя многократно процесс парковки и взаимодействуя со с окружающей средой, получает вознаграждение, согласно введенной функции пригодности. За счёт этого БПА обучается выполнять маневр парковки быстро, точно и безопасно.

Компьютерная апробация предложенных методов показала их высокую эффективность, а также позволила сделать выводы об их дальнейших перспективах.

### **Литература**

1. Кобылинский А.Ю. Опасности и перспективы развития беспилотного автомобильного транспорта // Наука, техника и образование. 2022. № 3 (86). С. 40–44.
2. Маштаков А.П. Задача быстродействия на группе движений плоскости с управлением в полукруге // Математический сборник. 2022. № 4 (213). С. 100–122.

## ВОССТАНОВЛЕНИЕ ДАННЫХ ВО ВРЕМЕННЫХ РЯДАХ ГЕОФИЗИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ МЕТОДАМИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Фадеева П.А.

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

Одной из актуальных задач современных экологических и климатических исследований является задача по получению качественных данных метеорологических показателей и их изменений, которые, в свою очередь, имеют большое влияние на развитие экономической деятельности человека и окружающую среду.

Таким образом, изучение временных особенностей колебаний температуры, концентрации углекислого газа воздуха и других параметров атмосферы применяется для решения многих практических задач, которые связаны с рациональным использованием природных ресурсов, а также имеет большое значение для прогнозирования будущих изменений климата [1].

Данные представляют собой упорядоченную последовательность значений метеорологического показателя  $f(t)$ , называемую временным рядом. Временной ряд — совокупность величин, представляющая собой значение какого-либо параметра, измеряемого через строго постоянный промежуток времени.

Однако измерительные приборы иногда работают со сбоями, что чаще всего связано с техническими неисправностями, из-за чего во временных рядах полученных данных существуют пропуски. В этой ситуации восстановление значений возможно осуществить на основе математического моделирования.

Рассмотрены варианты восстановления временных рядов, основанных на статистических методах и методах машинного обучения, позволяющих восстанавливать ряды динамики.

В случае вариантов восстановления на основе методов глубокого обучения были использованы сети прямого распространения сигнала, сверточная нейронная сеть (convolutional neural network; CNN), нейронная сеть долгой краткосрочной памяти (long short-term memory; LSTM) [2]. На графике представлен пример полученной LSTM-модели (рис. 1). Сравнение с существующими данными показало эффективную работу модели.

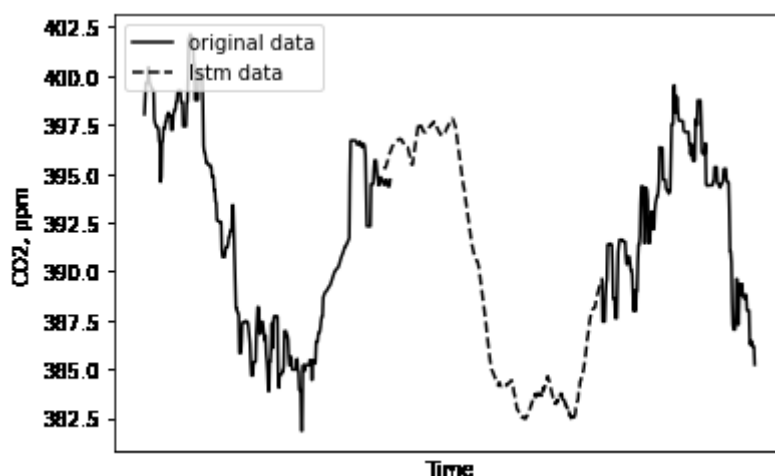


Рис. 1. Пример полученной LSTM-модели; сплошная линия — начальные данные, пунктирная линия — данные модели

Статистический метод берет в основу модель  $ARIMA(p,d,q)$  — интегрированную модель авторегрессии — скользящего среднего, которая используется для прогнозирования и работы с нестационарными временными рядами и приводит их к стационарно-

му виду путем взятия разности  $d$ -го порядка. Модель представлена следующим образом [3]:

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

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).

Результаты, полученные в работе с помощью методов машинного обучения, оказались сравнимы по качеству с классическими методами прогнозирования, а некоторые из моделей способствовали улучшению.

### Литература

1. Газарян В.А., Курбатова Ю.А., Овсянников Т.А., Шапкина Н.Е. // ВМУ. Серия 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 2015. № 5.
2. Makridakis, S., Spiliotis, E., Assimakopoulos, V. (2018). Statistical and Machine Learning forecasting methods: concerns and ways forward. PLoS ONE, 13(3)
3. Bianchi Marco. X-12 - ARIMA (Beta Version 1.1a) // The Economic Journal. Vol. 107. №. 444. Sep. 1997. p. 1613–620

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА КРИТИЧЕСКОЙ САМООРГАНИЗАЦИИ В ЭПИДЕМИОЛОГИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Федоркова Д.С.

*МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*  
*E-mail: fedorkova2000@bk.ru*

Целью работы является создание и исследование системы, основанной на случайном клеточном автомате. В основу заложена микроскопическая модель развития эпидемии внутри популяции.

Распространение эпидемии можно рассматривать как сложный процесс, протекающий непрерывно во времени и пространстве. Сложность отражается в способности систем, состоящих из большого количества элементов, эволюционировать в далёкое от статистического равновесия, но при этом динамически уравновешенное критическое состояние. Таким критическим состоянием в эпидемиологическом процессе является существование пандемии. В этом состоянии даже незначительное возмущение может привести к событиям любых масштабов, возникающим исключительно благодаря динамическому взаимодействию составляющих систему элементов. Наличие этих механизмов наталкивает на мысль, что модель эпидемии — это система, обладающая свойствами самоорганизованной критичности.

Модель представляет из себя клеточный автомат, каждая клетка которого представляет единичного члена популяции. Клетка характеризуется тремя режимами: здоровым, больным и иммунным. В режиме «больного» она может заражать соседние ячейки и приобретать иммунитет, в «здоровом» состоянии она может быть подвержена заражению, а в «иммунном» ячейка не сразу становится здоровой, некоторое время она будет находиться в состоянии иммунитета, в это время повторно заразиться она не может. Случайный характер автомата проявляется в вероятностном заражении одной клетки соседних к ней —  $G$ . В зависимости от величины этого параметра модель реализует три характерных паттерна поведения: при малых значениях  $G \approx 0.1-0.45$  эпидемия не возникает, при больших  $G \approx 0.65-0.1$  она протекает одной волной. Значения  $G \approx 0.45-0.65$



наиболее благоприятны для возникновения пандемии, и переводят модель эпидемии в критическое состояние (Рис. 1.А; Б).

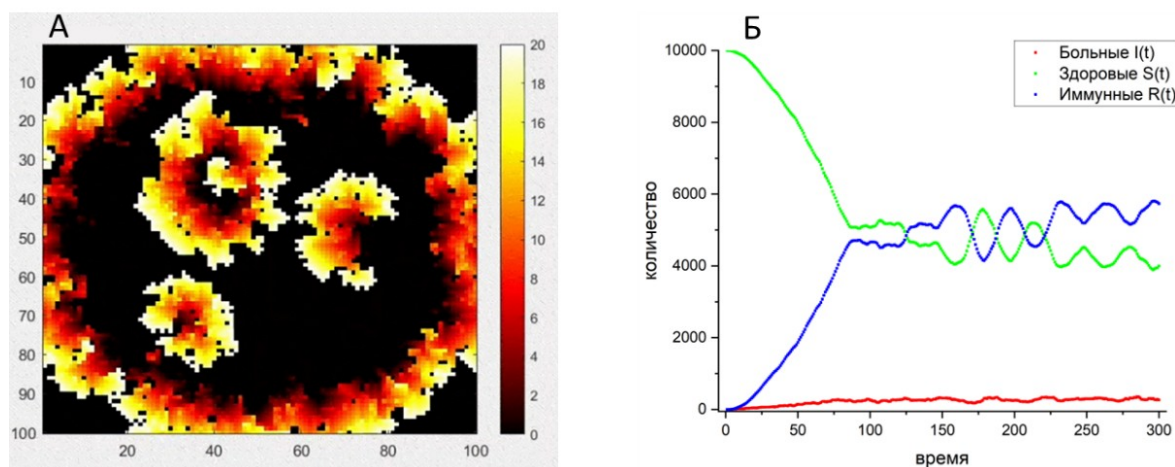


Рис. 1. А Иллюстрация эволюции модели в критической точке; Б График зависимости количества больных, здоровых и иммунных членов популяции от времени в критической точке.

Критическое состояние определяется образованием волн заражения, которые, налетая друг на друга, гасятся до тех пор, пока не образуются новые. При попадании в критическую область модель демонстрирует способность к самоорганизации. Наблюдаются степенные законы в распределении времени жизни образующихся лавин заражений. Лавины имеют дробную метрическую размерность, что говорит об их фрактальной структуре. На основе этих результатов можно прийти к выводу, что эпидемиологическая модель обладает свойствами самоорганизованной критичности.

### Литература

1. Тоффоли Т. Машины клеточных автоматов / Т. Тоффоли; ред. Б. В. Баталов, пер. П. А. Власов, Н.В. Барабанов - М.: Мир, 1991. — 283 с. ISBN 5-03-001619-8.
2. Bak P., Tang C. Self-Organized Criticality // Physical review A, Atomic, molecular, and optical physics. 1988. vol. 38, number 1. p. 364–374.
3. Bak P., Tang C. Wiesenfeld K. Self-organized criticality: An explanation of  $1/f$  noise // Physical Review Letters. 1987. vol. 59. number 4. p. 381–384.
4. Bak P., Creutz M. Fractals and Self-Organized Criticality. 1994.
5. Creutz M. Self-Organized Criticality and Cellular Automata // Encyclopedia of Complexity and Systems Science. 2015. p. 1–15.
6. Jánosi I. M., Czirók A. Fractal clusters and self-organized criticality //Fractals. – 1994. – Т. 2. – №. 01. – С. 153–168.
7. Kroc J., Sloot P. M. A., Hoekstra A. G. Simulating Complex Systems by Cellular Automata // Springer Heidelberg Dordrecht London New York. 2010. ISBN 978-3-642-12202-6

## ФЕРМИОННО-КУБИТНОЕ ОТОБРАЖЕНИЕ ЧЕРЕЗ ТРОИЧНЫЕ ДЕРЕВЬЯ В ВАРИАЦИОННЫХ КВАНТОВЫХ АЛГОРИТМАХ ПОИСКА СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ

Фишер Д.Е.

*МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*  
*E-mail: fisher.de19@physics.msu.ru*

Несмотря на бурное развитие мощностей квантовых устройств, уже давно известные теоретические квантовые алгоритмы, превосходящие их классические аналоги, на-



пример алгоритм поиска Гровера, факторизация Шора, до сих пор не осуществимы из-за огромного числа требуемых кубитов: миллионы по сравнению с максимально доступными на сегодняшний день сотнями. Поэтому в нынешнюю эпоху NISQ устройств активно разрабатываются не чисто квантовые алгоритмы, а так называемые вариационные квантовые алгоритмы (ВКА), которые являются квазиклассическими квантовыми алгоритмами, использующие в ходе вычислений классический компьютер наряду с квантовым вычислительным устройством.

Квантовое вычислительное устройство представляет собой набор 2-уровневых квантовомеханических систем, называемых кубитами, состояниями которых можно манипулировать. Такие операции называются гейтами, а их последовательности квантовой схемой. ВКА решает задачу минимизации целевой функции:

$$f(\theta) = \langle \psi_0 | U^\dagger(\theta) H U(\theta) | \psi_0 \rangle$$

при  $\theta \in T$ , к которой можно свести достаточно широкий круг задач. В квантовом устройстве осуществляется унитарное преобразование  $U(\theta)$ , и с помощью дальнейшей томографии состояния классический компьютер меняет параметры цепи, в соответствии с алгоритмом оптимизации. Множество  $T$  с определенными на нем операторами  $U(\theta)$  принято называть анзацем.

В ВКА при выборе анзаца необходимо находить компромисс между его способностью аппроксимировать точное решение и эффективностью решения задачи оптимизации. В данной работе для исследования сильно коррелированных квантовохимических задач используются Unitary Coupled Cluster (UCC) анзацы. Алгоритмы основанные на UCC анзацах связаны с представлением квантовомеханической системы во вторичном квантовании, что требует отображения операторов рождения и аннигиляции на язык понятный квантовому устройству. Такое отображение получается с помощью последовательности гейтов Паули и может быть достаточно произвольным (кодировка Джордана-Вигнера, Бравого-Китаева) [1]. В 2019 году в работе [2] была предложена кодировка через троичные деревья с наименьшим весом Паули (средним количеством гейтов Паули необходимым для кодирования одного оператора рождения или аннигиляции). Но дальнейшего распространения и полноценного исследования она не получила, хотя кажется весьма перспективной. Даже в популярных пакетах для квантовых вычислений этот алгоритм не реализован.

В работе проведены исследования и тестирование этой кодировки в задачах поиска основного состояния  $H_2$ ,  $LiH$  и др., с написанием соответствующего модуля для библиотеки qiskit, реализующего троичные деревья.

## Литература

1. Jules Tilly, Hongxiang Chen, Shuxiang Cao, Dario Picozzi, Kanav Setia, Ying Li, Edward Grant, Leonard Wossnig, Ivan Rungger, George H. Booth, and Jonathan Tennyson. The variational quantum eigensolver: a review of methods and best practices, 2021
2. Zhang Jiang, Amir Kalev, Wojciech Mroczkiewicz, and Hartmut Neven. Optimal fermion-to-qubit mapping via ternary trees with applications to reduced quantum states learning. Quantum, 4:276, 06 2020.

МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ ПОТЕНЦИАЛОВ  
МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Хабибуллин Р.А., Мокшин А.В.

*Казанский (Приволжский) ФУ, Институт физики, Казань, Россия**E-mail: px@kpfu.ru*

С развитием методов машинного обучения за последние два десятка лет было сформулировано и решено множество совершенно новых задач в различных областях физики, химии и биологии. Кроме того, данные методы позволили по-новому взглянуть на такие естественнонаучные задачи, которые до этого долгое время считались нерешаемыми. Одной из таких задач является разработка новых потенциалов межато́много/межмолекулярного взаимодействия  $u(\mathbf{r})$ . Как известно, межчастичные потенциалы являются одной из важнейших величин в статистической физике. Зная энергию взаимодействия частиц, мы можем записать гамильтониан, найти уравнение состояния для исследуемой системы или воспользоваться методами численного моделирования. Далее, на основе результатов моделирования возможно получить исчерпывающую информацию о структуре вещества, рассчитать его транспортные свойства (коэффициент самодиффузии, вязкость и т. д.), выполнить исследование микроскопической коллективной динамики частиц.

К настоящему времени предложен целый ряд подходов для решения задачи построения потенциалов. Все эти методы можно разделить на две группы. Так, методы первой группы предполагают восстановление потенциала из наблюдаемых на эксперименте характеристик вещества [1]. В качестве таких характеристик как правило используют структурные данные: статический структурный фактор  $S(\mathbf{k})$ , непосредственно измеряемый на экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов или рентгеновских лучей, и функцию радиального распределения частиц  $g(\mathbf{r})$ . Основопологающая идея второй группы методов — конструирование потенциалов на основе результатов квантово-механических расчетов [2].

Таким образом, задача разработки потенциала межчастичного взаимодействия представляет большой интерес для исследователей. Она также непосредственно связана с другой актуальной задачей поиска перспективных материалов. Нами предложены три оригинальных подхода для восстановления потенциалов межчастичного взаимодействия из экспериментальных структурных данных: два из них основаны на эволюционных алгоритмах [3], а третий предполагает использование нейронных сетей. Эффективность методов продемонстрирована на примере следующих систем: леннард-джонсовский флюид, вода в жидкой фазе вблизи кривой плавления, жидкие щелочные металлы.

*Работа выполнена при поддержке РФФ (проект № 19–12–00022). Теоретическая часть работы поддержана Фондом развития теоретической физики и математики «Базис».*

**Литература**

1. Mokshin A.V., Khabibullin R.A. Is there a one-to-one correspondence between interparticle interactions and physical properties of liquid? // *Physica A*. 2022. Vol. 608. P. 128297.
2. Mueller T., Hernandez A., Wang C. Machine learning for interatomic potential models // *J. Chem. Phys.* 2020. Vol. 152. P. 050902.
3. Storn R., Price K. Differential Evolution – A Simple and Efficient Heuristic for global Optimization over Continuous Spaces // *J. Glob. Optim.* 1997. Vol. 11. P. 341–359.

РАЗРАБОТКА C++ МОДУЛЯ НА ОСНОВЕ GEANT4 ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ  
ИЗЛУЧЕНИЯ ПРИ ПЛОСКОСТНОМ КАНАЛИРОВАНИИ ЭЛЕКТРОНОВ В  
МОНОКРИСТАЛЛАХ

Худякова А.Д.

НИЯУ «МИФИ», (ИНТЭЛ), Москва, Россия

E-mail: [anna\\_2001k@mail.ru](mailto:anna_2001k@mail.ru)

Каналированием заряженных частиц в монокристаллах называют движение этих частиц между рядами атомов, в каналах, образованных параллельными друг другу кристаллографическими плоскостями или осями [7]. При этом частицы испытывают скользящие столкновения с рядами атомов и их импульс почти не меняется, что позволяет такому движению оставаться устойчивым. Заряженные частицы в каналах двигаются по криволинейным траекториям и могут порождать электромагнитное излучение [5,6]. Излучение при каналировании является интенсивным источником рентгеновских или гамма фотонов [8], что делает его перспективным для множества приложений.

В настоящее время в физике взаимодействия излучения и частиц с веществом для описания явлений масштабно начинают использоваться комплексы программ – мощные инструменты компьютерного моделирования. Наиболее проработанным и подходящим для моделирования физических процессов в этой области является программный комплекс Geant4 [1-3]. Однако в нем отсутствует возможность моделирования излучения при каналировании. В данной работе представлены результаты разработки C++ модуля для моделирования в Geant4 излучения электронов при каналировании, которое рассматривается в классическом приближении. Созданный код позволяет рассчитывать траектории и скорости движения электронов, а также спектральное распределение фотонов излучения при каналировании в монокристаллах кремния, германия, углерода и вольфрама для различных углов входа электронов в кристалл. Также имеется возможность выбора кристаллографической плоскости, вдоль которой происходит каналирование. Результаты работы модуля совпадают с существующими сторонними программами [4].

#### Литература

1. Agostinelli S., Allison J., Amako K. et al. Geant4 - A Simulation Toolkit // Nucl. Instrum. Meth. A. 2003. V. 506. P. 250.
2. Allison J., Amako K., Apostolakis J. et al. Recent Developments in Geant4 // Nucl. Instr. Meth. A. 2016. V. 835. P. 186.
3. Allison J., Amako K., Apostolakis J. et al. Geant4 Developments and Applications // IEEE Trans. Nucl. Sci. 2006. V. 53. P. 270.
4. Azadegan B., Wagner W. Simulation of Planar Channeling-Radiation Spectra of Relativistic Electrons and Positrons Channeled in a Diamond-Structure or Tungsten Single Crystal (Classical Approach) // Nucl. Instrum. Meth. B. 2015. V 342. P. 144.
5. Bird D. M. and Buxton B. F. The Theory of the Emission of Planar Channelling Radiation by Fast Electrons // Proc. R. Soc. Lond. A. 1982. V. 379. P. 459–479.
6. Kumakhov M.A. On the theory of electromagnetic radiation of charged particles in a crystal // Phys. Lett. A. 1976. V. 57. P. 17.
7. Lindhard J. Motion of swift charged particles, as influenced by strings of atoms in crystals // Phys. Lett. 1964. V. 12 (2). P. 126.
8. Wagner W. et al. An intense channeling radiation source // Nucl. Instrum. Meth. B. 2008. V. 266. P. 327–334.

## СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ЖИДКОГО ВИСМУТА: DFT АНАЛИЗ

Цыганков А. А., Галимзянов Б. Н., Мокшин А. В.

*Казанский (Приволжский) ФУ, Институт физики, Казань, Россия**E-mail: tsigankov.artiom@yandex.ru*

Жидкости часто характеризуются наличием однородного распределения атомов на больших расстояниях и ближним порядком на малых расстояниях. Однако, жидкий висмут занимает особое место, поскольку в его структуре имеются аномалии в виде плеч в радиальной функции распределения и статическом структурном факторе [1, 2]. Поскольку радиальная функция распределения является вероятностной характеристикой найти частицу на определенном расстоянии от другой частицы, то можно сделать вывод, что данная особенность может возникнуть только в том случае, если атомы образуют структуры [3]. Для воспроизведения структурных особенностей жидкого висмута было проведено ab-initio моделирование молекулярной динамики в пакете VASP [4], использующем методы теории функционала плотности (DFT).

Для определения возможности существования стабильных структур в жидком висмуте было рассчитано распределение частиц по временам соседства из полученных результатов моделирования ab-initio молекулярной динамики. В рамках модели Вильямса-Ланделя-Ферри было показано, что в областях, ограниченных сферой радиуса 5 Å, имеются устойчивые образования со временем жизни более чем 0.2 пс [5]. Для идентификации таких структур были оценены параметры порядка  $q_4$  и  $q_6$ , а также была проведена характеристика структур. Результаты показали, что в жидком висмуте образуются структуры в виде прямоугольных треугольников с длинами  $a = 3.25$  Å,  $b = 4.7$  Å. Также было установлено, что структуры непосредственно влияют на наличие плеча в радиальной функции распределения и статическом структурном факторе.

Работа выполнена при поддержке РФФ (проект №19-12-00022).

**Литература**

1. Waseda Y., Suzuki K. Structure Factor and Atomic Distribution in Liquid Metals by X-Ray Diffraction // Phys. Stat. Sol. (b). 1972, №49(339). p. 339–347.
2. Greenberg Y. et al. Evidence for a temperature-driven structural transformation in liquid bismuth // Europh. Let. 2009, №86(1). p. 36004-p1–36004-p6.
3. Akola J. et al. Structure and dynamics in liquid bismuth and  $Bi_n$  clusters: A density functional study // J. Chem. Phys. 2014. №141(19), p. 194503-1–194503-10.
4. Kresse G., Hafner J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals // Phys. Rev. B, 1993, №47(1). p. 558–561.
5. Williams M. L., Landel R. F., Ferry J. D. The Temperature Dependence of Relaxation Mechanisms in Amorphous Polymers and Other Glass-Forming Liquids // Jour. Am. Chem. Soc., 1955, №77(14). p. 3701–3707.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ХАРАКТЕРИСТИК ПОТОКА ЭЛЕКТРОНОВ В ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСКОМ УСКОРИТЕЛЕ ОТ ПОВЕРХНОСТНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЗАРЯДА КРИСТАЛЛА

Шаповалов П.Г.<sup>1</sup>, Олейник А.Н.<sup>2</sup>, Кленин А.А.<sup>3</sup>, Гильц М.Э.<sup>4</sup><sup>1</sup>НИЯУ «МИФИ», МНИЛ №423 «Излучение заряженных частиц», Москва,<sup>2,3,4</sup>НИУ «БелГУ», международная научно-образовательная лаборатория «Радиационной физики», Белгород, Россия.*E-mail: p\_shapovalov@list.ru*

При изменении температуры пьезоэлектрического кристалла в вакууме генерируется моноэнергетический поток электронов, энергетические и фокальные свойства которого напрямую зависят от распределения заряда на поверхности. Ранее предполагалось, что распределение плотности заряда имеет только экспоненциальную зависимость от радиуса [1]. Моделирование такого распределения заряда показало, что поток электронов должен иметь вид окружности с центром на оси кристалла и радиусом зависящем от высоты, так как поток имеет фокус. Но серия экспериментов по наблюдению потока электронов, генерируемого ускорителем на основе танталата лития, показала, что вместо ожидаемого вида поток электронов имеет три центра фокусировки (рис. 1).

Предполагается, что такой вид потока электронов обусловлен угловой зависимостью распределения заряда. Был предложен модельный вид угловой зависимости распределения и проведено численное моделирование пьезоэлектрического ускорителя для различных вариантов угловой зависимости.

Обсуждается зависимость пространственного и энергетического распределения потока электронов от функции распределения плотности заряда, в аксиально-симметричном случае и в случае наличия угловой зависимости. Приводится сравнение результатов моделирования с экспериментом.

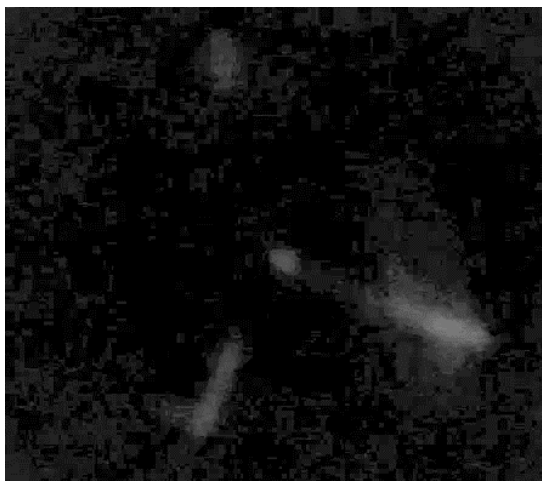


Рис. 1. Экспериментальное изображение потоков электронов пьезоэлектрического ускорителя.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-72-00006.

#### Литература

1. Ghaderi R., Davani F. A. Determination of surface electric charge profile in pyroelectric crystals // *Applied Physics Letters*. – 2014. – Т. 105. – №. 23. – С. 232906.

### ОРИЕНТАЦИОННО-ИНДУЦИРОВАННЫЕ МОРФОЛОГИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ В РАЗБАВЛЕННЫХ РАСТВОРАХ АМФИФИЛЬНЫХ ГРЕБНЕОБРАЗНЫХ СОПОЛИМЕРОВ

Шульдяков Г.А.,<sup>1,2</sup> Буглаков А.И.,<sup>2</sup> Ларин Д.Е.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>МФТИ, факультет электроники, фотоники и молекулярной физики,

<sup>2</sup>Институт элементоорганических соед. им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия

E-mail: shuldyakov.ga@phystech.edu

Амфифильные молекулы содержат в своем составе лиофильные и лиофобные группы и способны к образованию растворимых агрегатов различной формы. Теоретически изучена самосборка в разбавленных растворах амфифильных гребнеобразных сополи-

меров с растворимой (Р) основной цепью и боковыми гидрофобными (Н) группами-подвесками (Рис. 1а). Было рассмотрено влияние ориентационной подвижности (Рис. 1б, в) и частоты  $f$  регулярной пришивки (Рис. 2а, б) боковых Н групп-подвесок на вид диаграмм состояний разбавленного раствора. Показано, что одним из возможных механизмов образования сложных надмолекулярных структур является слияние отдельных агрегатов из-за ориентационно-индуцированного притяжения [1]. Результаты теоретических исследований согласуются с данными компьютерного моделирования аналогичных систем (Рис. 2в).

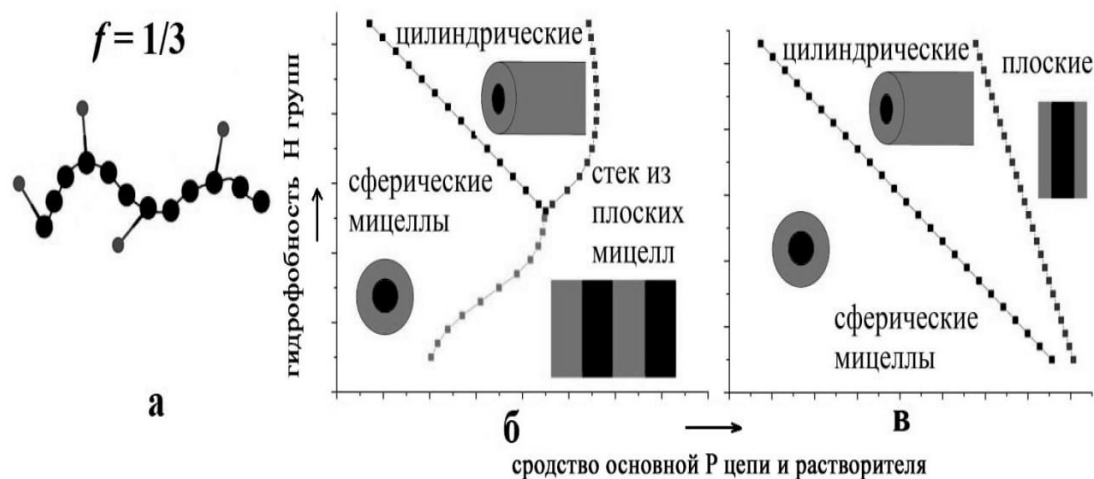


Рис. 1. Модель амфифильного гребнеобразного сополимера (а). Диаграммы состояния с учетом (б) и без учета (в) влияния ориентационной подвижности боковых групп.

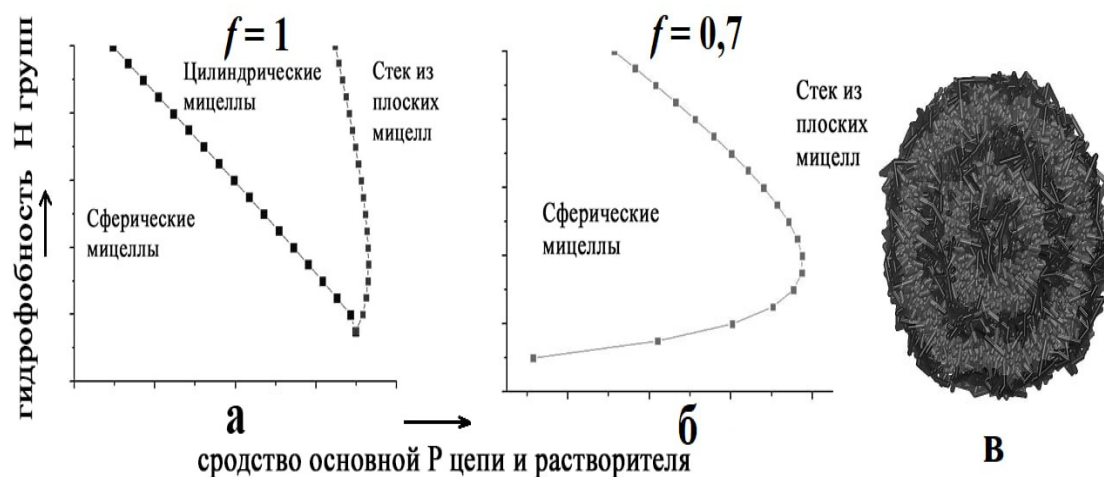


Рис. 2. Влияние частоты пришивки боковых групп на вид диаграммы состояния. Слоистая структура (в), полученная в компьютерном моделировании.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 22-73-00323.

### Литература

1. Buglakov, A.I.; Larin, D.E.; Vasilevskaya, V.V. Orientation- and cosolvent-induced self-assembly of amphiphilic homopolymers in selective solvents // Polymer, 2021. Vol. 232, P. 124160.

## AB-Initio ИССЛЕДОВАНИЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВОДНЫХ РЕШЕТОК ГИДРАТОВ И ЛЬДОВ

М.Б. Юнусов<sup>1</sup>, Р.М. Хуснутдинов<sup>1,2</sup><sup>1</sup>Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия<sup>2</sup>Удмуртский федеральный научный центр УрО РАН, Ижевск, Россия

E-mail: mukhammadbek@mail.ru

В настоящей работе представлены результаты исследования полиморфных кристаллических фаз воды — решеток газовых гидратов со структурой sI и sH, льдов I<sub>h</sub> и I<sub>II</sub> из первых принципов. Для исследуемых систем с высокой точностью рассчитаны диэлектрические тензоры  $\epsilon_{ik}(\omega)$ , оптические спектры поглощения  $R(\omega)$ , отражения  $a(\omega)$ , показатели преломления  $n(\omega)$  и  $k(\omega)$ , функции потерь  $L(\omega)$ . Рассмотрено изменение диэлектрической проницаемости  $\epsilon_{ik}(\omega)$  и плотности электронных состояний  $N(E)$  гидрата sI при включении газов Xe, H<sub>2</sub>S, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> и C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> в молекулярные полости кристалла.

Электронные, диэлектрические и оптические свойства газовых гидратов и их кристаллических решеток, близких по свойствам к решеткам льдов, представляют большой интерес как в плане фундаментальных исследований, так и в экономическом плане. Земные недра богаты запасами метана (до 10<sup>18</sup> м<sup>3</sup>), которые находятся в форме клатратных кристаллов на океанических шельфах и зонах вечной мерзлоты [1]. В этом отношении, дополнение и уточнение данных о диэлектрическом отклике гидратов в широком диапазоне электромагнитного излучения, позволит усовершенствовать технологии разведки и анализа месторождений. Так, например, методом электромагнитной съемки с контролируемым источником можно получить данные по объемным диэлектрическим характеристикам пласта породы глубиной до 4 км и судить о наличии гидратных отложений [2].

Для расчета диэлектрических функций гидратов sI, sH и льдов I<sub>h</sub> и I<sub>II</sub> в вычислительном пакете VASP произведено моделирование из первых принципов в рамках метода возмущения функционала плотности с использованием метода спроецированных плоских волн (PAW) [3] и обменно-корреляционным функционалом в приближении GGAPBE [4]. Минимизация энергии производилась до достижения сходимости 10<sup>-4</sup> эВ. Использовано разбиение  $k$ -пространства сеткой размером 2×2×2. На ячейки моделирования наложены периодические граничные условия. Моделируемые системы представляют собой элементарные ячейки кристаллов с содержанием 34 (sH), 46 (sI), 48 (I<sub>h</sub>) и 36 (I<sub>II</sub>) молекул воды соответственно. Для гидрата sI рассмотрены случаи заполнения всех полостей молекулами Xe, H<sub>2</sub>S, CH<sub>4</sub> и заполнения только крупных  $T$ -полостей молекулами Xe, H<sub>2</sub>S, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> и C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>.

Для всех рассматриваемых систем рассчитаны статические диэлектрические тензоры  $\epsilon_{ik}$ , характеризующие отклик системы на статическое электрическое поле. Для решеток I<sub>h</sub>, I<sub>II</sub> и sH наблюдается анизотропия диэлектрического тензора и выделенная оптическая ось. Тензоры незаполненного каркаса sI и гидрата sI с включением Xe и CH<sub>4</sub> являются изотропными, чего нельзя сказать про тензоры гидрата sI с включением H<sub>2</sub>S, CO<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> и C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>, что является следствием несферичности  $T$ -полостей и фиксированных ориентаций протяженных молекул H<sub>2</sub>S, CO<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> и C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> в этих полостях. Для водных решеток I<sub>h</sub>, I<sub>II</sub>, sH и sI рассчитаны комплексные диэлектрические функции  $\epsilon(\omega)$  в широком диапазоне энергий электромагнитно излучения (0 ÷ 37 эВ), которые представлены на рисунке 1. На основе диэлектрических функций рассчитаны спектры поглощения  $R(\omega)$ , отражения  $a(\omega)$ , показателей преломления  $n(\omega)$  и  $k(\omega)$ , функций потерь  $L(\omega)$ . Показано, что данные кристаллы активнее всего реагируют на электромагнитное излучение в диапазоне энергий 5 ÷ 20 эВ, что соответствует ближней ультрафиолетовой области. Главные пики поглощения находятся на уровне 11.8 эВ и вызваны переходами  $2p$ -электронов молекул H<sub>2</sub>O кристаллической решетки.

Анализ плотности электронных состояний  $N(E)$  решеток sI, sH, I<sub>h</sub> и I<sub>II</sub> показал, что данные полиморфные модификации воды имеют идентичный характер зонной структуры. Ненулевая электронная плотность наблюдается в диапазоне  $-19 \div -17$  эВ ( $s$ -электроны кислорода), в диапазоне  $-6.6 \div 0$  эВ (валентная зона,  $s$ -электроны водорода и  $p$ -электроны кислорода) а также в зоне проводимости ( $5.4 \div 12$  эВ), а ширины запрещенной зоны составляет  $\sim 5.4$  эВ. Сравнение со спектрами  $N(E)$  гидрата sI с включением молекул газа демонстрирует, что наличие гостевой молекулы приводит к незначительному смещению электронной плотности в сторону меньших энергий. Данное наблюдение свидетельствует об энергетически выгодном состоянии молекулярного кристалла по типу «гость–хозяин».

Полученные в настоящей работе данные по электронным, диэлектрическим и оптическим свойствам гидратов sI, sH и льдов I<sub>h</sub>, I<sub>II</sub> могут иметь важное практическое значение для развития технологий электромагнитного анализа месторождений.

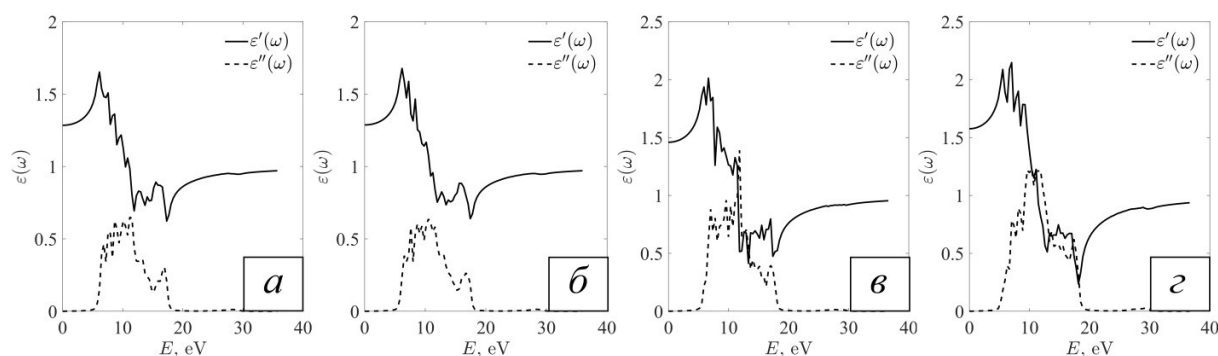


Рис. 1. Действительные  $\varepsilon'(\omega)$  и мнимые  $\varepsilon''(\omega)$  части диэлектрических функций гидрата sH (а), гидрата sI (б), льда I<sub>h</sub> (в), льда I<sub>II</sub> (г).

Крупномасштабные квантовомеханические расчеты выполнялись на вычислительном кластере Казанского (Приволжского) федерального университета. Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект № 22–22–00508).

### Литература

1. Makogon, Y. F. Natural gas hydrates – a promising source of energy // Journal of natural gas science and engineering. 2010, V. 2, № 1, P. 49.
2. Jing, J. et al. A marine controlled-source electromagnetic survey to detect gas hydrates in the Qiongdongnan Basin, South China Sea // Journal of Asian Earth Sciences. 2019, V. 171, P. 201.
3. Kresse, G., Furthmuller, J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // Phys. Rev. B. 1999, V. 54. P. 11169.
4. Perdew, J.P., Burke, K., Ernzerhof, M. Generalized gradient approximation made simple // Phys. Rev. Lett. 1996, V. 77, P. 3865.

### ПЛАНИРОВАНИЕ ТРАЕКТОРИИ ДВИЖЕНИЯ МОБИЛЬНОГО РОБОТА В СРЕДЕ С ПРЕПЯТСТВИЯМИ НА ОСНОВЕ МОДИФИЦИРОВАННОГО АЛГОРИТМА ОПТИМИЗАЦИИ РОЯ ЧАСТИЦ

Ян Шуай

МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия  
E-mail: shuai.yang21@physics.msu.ru

В последние годы использование мобильных роботов в различных отраслях становится все более распространенным, и они постепенно становятся частью нашей жизни. Планирование траектории является важной частью технологии мобильных роботов.



Цель планирования траектории заключается в создании маршрута или группы точек, чтобы робот мог перемещаться от начальной позиции к конечной позиции в среде с препятствиями, соответствуя некоторым критериям оптимизации, таким как минимальное расстояние, минимальное время, минимальное энергопотребление и максимальная безопасность.

Алгоритма оптимизации роя частиц — это популярный метод оптимизации, который применяется для решения различных задач, включая планирование траектории движения робота. В этом алгоритме каждое реализуемое решение в пространстве поиска рассматривается как частица. Сначала создается начальный рой, т.е. случайным образом инициализированные частицы в пространстве решений. Изменение положения частиц в пространстве поиска основано на социально-психологической тенденции особей подражать успеху других особей. Рой состоит из набора частиц, где каждая частица представляет собой потенциальное решение. Положение каждой частицы изменяется в соответствии с ее собственным опытом и опытом ее соседей.

В данной статье авторы представляют метод планирования траектории мобильного робота с использованием алгоритмов роя частиц и предлагают три модификации классического алгоритма роя частиц.

Вводит два новых параметра в PSO: глобальный определитель оптимума для глобального лучшего LODgBest и локальный определитель оптимума для персонального лучшего LODpBest. Цель параметров - подсчитать количество последовательных итераций, в течение которых персональный лучший и глобальный лучший не дают улучшения. Поскольку эти частицы не могут улучшить свой gBest или pBest, они больше не вносят вклад в поиск глобального оптимального решения. Это указывает на то, что частицы насыщены и нуждаются во внешней тяге для увеличения своей мощности.

Во время работы алгоритма скорость частиц может быть слишком большой, поэтому на скорость частиц накладывается ограничение. Пусть верхний предел скорости равен  $V_{max}$ . Но если мы сделаем это, то ограничим возможность выскочить из локального оптимума. Чтобы увеличить разнообразие популяции, скорость устанавливается на некоторое случайное значение, когда скорость частицы превышает максимальную скорость.

В данной работе функция коэффициента инерции построена таким образом, что она начинает оставаться максимальной, затем уменьшается от большого к малому и, наконец, остается около нуля в качестве минимального значения. Этот метод обеспечивает хороший баланс между возможностью глобального поиска и возможностью локального поиска.

### **Литература**

1. Yang M., Li C. Path planing and tracking for multi-robot system based on improved PSO algorithm//2011 International Conference on Mechatronic Science, Electric Engineering and Computer (MEC). – IEEE, 2011. С. 1667–1670.
2. Guangshun Li, Particle swarm algorithm-based path planning for mobile robots, 2008.
3. Biswas S., Anavatti S. G., Garratt M. A. Obstacle avoidance for multi-agent path planning based on vectorized particle swarm optimization //Intelligent and Evolutionary Systems. – Springer, Cham, 2017. С. 61–74.