УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

2022, ТОМ 22, НОМЕР 5 (СЕНТЯБРЬ–ОКТЯБРЬ)

ISSN 2226-1494 (PRINT), 2500-0373 (ONLINE)

ИЗБРАННЫЕ МАТЕРИАЛЫ XXXII ШКОЛЫ ПО ГОЛОГРАФИИ Часть I

Влияние размерности, геометрии и ориентации наноструктур на распределение электрического поля в вопросах усиления комбинационного рассеяния света Оптические свойства планарных плазмон-активных поверхностей, модифицированных золотыми нанозвездами

Применение метода цифровой голографической интерферометрии для исследования низкотемпературной импульсной плазмы

Применение методов биорадиофотоники для обработки биоэлектрических сигналов

Полихромный источник света для реализации многоспектрального метода обработки изображений кожных новообразований

Автоматическое распознавание структур в полупрозрачных движущихся объектах на основе голографической муаровой интерферометрии (краткое сообщение) Применение технологий нейронных сетей и компьютерного зрения для анализа изображений кожных новообразований

ОПТИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ И ТЕХНОЛОГИИ

Уменьшение влияния амплитудных искажений LiNbO₃ фазового модулятора на сигнал волоконно-оптического гироскопа за счет применения дополнительной модуляции

Расчет и оптимизация оптической схемы фотоприемного модуля спектрального диапазона 1,3–1,6 мкм

Анализ остаточных признаков с декомпозицией по эмпирическим модам для извлечения пространственных последовательных шаблонов из серийных изображений дистанционного зондирования (на англ. яз.)

АВТОМАТИЧЕСКОЕ УПРАВЛЕНИЕ И РОБОТОТЕХНИКА

Формирование траектории цифрового двойника многозвенного механизма с использованием адаптивного алгоритма оценки параметров нелинейного движения

НОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ И НАНОТЕХНОЛОГИИ

Исследование спектрально-люминесцентных свойств квантовых точек CsPb(BrCl) ₃ во фторфосфатных стеклах	Мс
Исследование оптических явлений в мультиспектральном матричном фотоприемнике на основе кремния	Ж
Исследование влияния отклонения от стехиометрии иттрий-алюминиевого граната на эффективность конверсии ионов хрома в четырехвалентное состояние	Mc Ba
Влияние низких температур и термического отжига на оптические свойства квантовых точек InGaPAs	ме Ан На

Контроль динамики экструзии при трехмерной печати изделий

КОМПЬЮТЕРНЫЕ СИСТЕМЫ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Подход к обнаружению сообщества в динамических сетях, основанный на принудительной неотрицательной матричной факторизации (на англ. яз.) Система визуального отображения изменения физиологического состояния пациентов с хроническим нарушением сознания и передачи данных по беспроводной оптической связи

Обработка данных ледовой разведки при условии низкого качества исходных изображений (на англ. яз.)

Прогнозирование летального исхода у пациентов с установленным диагнозом COVID-19

Генерация слабейших предусловий программ с динамической памятью в символьном исполнении

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

О возможности расширения исследуемых динамических диапазонов в термоанемометрии

Эффект биений в одноосноориентированных полимерных материалах Численное моделирование характеристик высоконесущих профилей

с энергетическими методами увеличения подъемной силы

Численная методика расчета тяги сопла широкодиапазонного ракетного двигателя

Матвеева К.И., Зюбин А.Ю., Кон И.И., Самусев И.Г.	818
Зюбин А.Ю., Кон И.И., Кундалевич А.А., Демишкевич Е.А., Матвеева К.И., Зозуля А.С., Евтифеев Д.О., Полторабатько Д.А., Самусев И.Г.	824
Кожевникова А.М., Иванков А.С., Шитц Д.В., Алексеенко И.В.	832
Зайченко К.В., Гуревич Б.С., Рогов С.А., Кордюкова А.А., Кузьмин М.С.	839
Зайченко К.В., Гуревич Б.С., Святкина В.И.	846
Ляхов К.А., Григорьев В.А., Циплакова Е.Г.	854
Милантьев С.А., Кордюкова А.А., Шевяков Д.О., Логачев Е.П.	859
Востриков Е.В., Умнова А.В., Алейник А.С., Погудин Г.К., Стригалев В.Е., Мешковский И.К.	866
Ковач Я.Н., Андрюшкин В.В., Колодезный Е.С., Новиков И.И., Петренко А.А., Камарчук А.В., Рочас С.С., Бауман Д.А.	873
Анджелин Прити Р., Анандхарадж Г.	881
Мешков А.В., Громов В.С.	889
Макурин А.А., Колобкова Е.В.	896
Жбанова В.Л., Парвулюсов Ю.Б.	903
Малявин Ф.Ф., Кравцов А.А., Тарала В.А., Чикулина И.С., Вакалов Д.С., Лапин В.А., Никова М.С., Хорошилова С.Э., Медяник Е.В., Кулешов Д.С.	912
Андрюшкин В.В., Драгунова А.С., Комаров С.Д., Надточий А.М., Гладышев А.Г., Бабичев А.В., Уваров А.В., Новиков И.И., Колодезный Е.С., Карачинский Л.Я., Крыжановская Н.В., Неведомский В.Н., Егоров А.Ю., Бугров В.Е.	921
Зименко К.В., Афанасьев М.Я., Колесников М.В.	929
Башир Ш., Чачу М.А.	941
Promising $C \downarrow $. The properties $V \cap U$ in the set $U \cap U$	051

 Тимофеев А.В., Грознов Д.И.
 962

 Корсаков И.Н., Каронова Т.Л., Конради А.О., Рубин А.Д.,
 970

 Курапеев Д.И., Черникова А.Т., Михайлова А.А.,
 970

 Шляхтю Е.В.
 982

 Мисонижник А.В., Костюков Ю.О., Костицын М.П.,
 982

 Мордвинов Д.А., Кознов Д.В.
 982

Ткачева Е.В., Беляков Ĥ.А., Ковач Я.Н., Андреев Ю.С.,

Смирнова И.Г., Кондратьева Е.А.

Ходунков В.П.	99	2

Головина В.В., Рымкевич П.П., Рымкевич О.В.	999
Булат П.В., Курнухин А.А., Продан Н.В.	1007
Киршина А.А., Левихин А.А., Киршин А.Ю.	1016

Главный редактор — В.О. Никифоров, д.т.н., профессор

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Беззатеев С.В. — д.ф.-м.н., доцент (Россия) Беликов А.В. — д.ф.-м.н., профессор (Россия) Бессмертный И.А. — д.т.н., профессор (Россия) Бобцов А.А. — д.т.н., профессор (Россия) Бухановский А.В. — д.т.н. (Россия) Волков К. Н. — д.ф.-м.н. (Великобритания) **Дукельский К.В.** — к.т.н., доцент (Россия) **Ефимов Д.В.** — PhD (Франция) Заколдаев Д.А. — к.т.н., доцент (Россия) **Иорш И.В.** — д.ф.-м.н. (Россия) Кармановский Н.С. (заместитель главного редактора) — к.т.н. доцент (Россия) Комаров И.И. — к.ф.-м.н., доцент (Россия) Никоноров Н.В. — д.т.н., профессор (Россия) Полищук Г.С. — к.т.н. (Россия) Романов А.Е. — д.ф.-м.н., профессор (Россия) Сидоркина И.Г. — д.т.н., профессор (Россия) Степанов О.А. — д.т.н., профессор (Россия) Татарникова Т.М. — д.т.н., доцент (Россия) Тимофеев А. В. — д.т.н. (Казахстан) Успенская М.В. — д.т.н., профессор (Россия) Цыпкин А. Н. — д.ф.-м.н. (Россия)

Ответственный секретарь — И.В. Малькова

Учредитель: Унивеситет ИТМО

Издание зарегистрировано в Федеральной службе по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций (свидетельство ПИ №ФС77-67990 от 6 декабря 2016 г.). Языки журнала: русский, английский.

ISSN 2226-1494 (print version), ISSN 2500-0373 (online version) Англоязычное название: «Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics». Транслитерированное название: «Nauchno-Tekhnicheskii Vestnik Informatsionnykh Tekhnologii, Mekhaniki i Optiki». Сокращенное название: «Sci.Tech.

J. Inf. Technol. Mech. Opt.» Журнал включен в каталог периодических изданий Ulrich's

Periodical Directory.

Журнал входит в крупнейшие международные реферативные и наукометрические базы Scopus, EBSCO, ProQuest, EastView, ИВИС и другие.

Журнал входит в утвержденный Высшей аттестационной комиссией «Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, выпускаемых в Российской Федерации, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени доктора и кандидата наук».

Периодичность издания — 6 выпусков в год.

Плата за публикации и редактирование не взимается.

Редакторы: Ю.В. Михайлова, Л.Н. Точилина, Т.В. Точилина Перевод — Н.А. Корнев Компьютерная верстка — Е.С. Егорова

Оф. 2136, Университет ИТМО, ул. Ломоносова., д. 9, Санкт-Петербург, Российская Федерация, 191002

> Телефон (812) 480 02 75 http://ntv.ifmo.ru E-mail: ntvitmo@itmo.ru

Статьи Журнала доступны по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» 4.0 Всемирная.

Подписано к печати 01.10.2022

Editor-in-Chief - Vladimir O. Nikiforov, D.Sc, Professor

EDITORIAL BOARD

Sergey V. Bezzateev — D.Sc, Associate Professor (Russia) Andrey V. Belikov — D.Sc, Professor (Russia) Igor A. Bessmertny – D.Sc, Professor (Russia) Alexey A. Bobtsov – D.Sc, Professor (Russia) Alexandr V. Boukhanovsky – D.Sc (Russia) Konstantin N. Volkov – D.Sc (Great Britain) Konstantin V. Dukelskii - PhD, Associate Professor (Russia) **Denis V. Efimov** — PhD (France) Danil A. Zakoldaev - PhD, Associate Professor (Russia) Ivan V. Iorsh — D.Sc (Russia) Nikolai S. Karmanovskiy (Deputy Chief Editor) — PhD, Associate Professor (Russia) Igor I. Komarov – PhD, Associate Professor (Russia) Nikolay V. Nikonorov - D.Sc, Professor (Russia) Grigorii S. Polishchuk — PhD (Russia) Alexey E. Romanov – D.Sc, Professor (Russia) Irina G. Sidorkina — D.Sc, Professor (Russia) Oleg A. Stepanov — D.Sc, Professor (Russia) Tatiana M. Tatarnikova — D.Sc, Associate Professor (Russia) Andrey V. Timofeev — PhD (Kazakhstan) Mayya V. Uspenskaya — D.Sc, Professor (Russia) Anton N. Tcypkin - D.Sc, Professor (Russia)

Executive secretary - Irina V. Malkova

Founder: ITMO University

Publication is registered by the Federal Inspectorate Service for Communication, Information Technologies and Communication Media, certificate PI FS77-67 990 dated December, 6th, 2016.

Languages of the journal: Russian, English

ISSN 2226-1494 (print version), ISSN 2500-0373 (online version) The English title is "Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics".

"Nauchno-Tekhnicheskii Transliterated title is Vestnik Informatsionnykh Tekhnologii, Mekhaniki i Optiki".

Abbreviated parallel title: "Sci.Tech. J. Inf. Technol. Mech. Opt."

The journal is catalogued in Ulrich's Periodical Directory.

The journal is included in the largest international abstract and scientometric databases Scopus, EBSCO, ProQuest, East View, EVIS and others.

The journal is included in the "List of leading scientific journals and periodicals under review in the Russian Federation, where the main scientific results of theses for the PhD and doctor of sciences degree must be published" approved by the Higher Attestation Commission.

Publication frequency is 6 times a year.

Publication and editing are free of charge.

Editors: Yulia V. Mikhailova, Lyubov N. Tochilina, Tatiana V. Tochilina English Language Technical Editor — Nikolay A. Kornev Computer layout — Ekaterina S. Egorova

> of. 2136, ITMO University, Lomonosova Street, 9, St.Petersburg, 191002, Russia

> > Phone (812) 480 02 75 http://ntv.ifmo.ru/en F-mail: ntvitmo@itmo.ru



Тираж 350 экз. Заказ № 89 (141)

Издание Унивеситета ИТМО

Отпечатано в ООО «Университетские телекоммуникации» Адрес: 199034, Санкт-Петербург, Биржевая линия, д. 16

© Унивеситет ИТМО

Ι/ΪΤΜΟ

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 No 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИЗБРАННЫЕ МАТЕРИАЛЫ XXXII ШКОЛЫ ПО ГОЛОГРАФИИ. ЧАСТЬ I PROCEEDINGS OF THE XXXII SCHOOL ON HOLOGRAPHY. PART I

Редакторы раздела: Николай Владимирович Петров, доктор физико-математических наук Николай Сергеевич Балбекин, кандидат физико-математических наук

Аннотация раздела

Сегодня крайне актуально развитие не только современных технологий, но и кадровое пополнение науки. Число молодых российских исследователей в возрасте до 40 лет увеличилось за последние годы на треть. Существует острая потребность в мерах, направленных на поддержку и развитие молодых талантов. Данный раздел нашего журнала подготовлен по материалам XXXII международной Школы-симпозиума по голографии, когерентной оптике и фотонике, которая состоялась в период с 30 мая по 3 июня 2022 года в Университете ИТМО. Организаторами Школы выступил научный коллектив лаборатории Цифровой и изобразительной голографии Физико-технического мегафакультета Университета ИТМО. Участников и гостей симпозиума приветствовали известные ученые, председатели программного комитета: профессор Гарвардского Университета Юрий Николаевич Захаров (Бостон, США); первый проректор Томского государственного университета Виктор Валентинович Демин (Томск, Россия); ведущий профессор Университета ИТМО Николай Владимирович Петров. На Школе были представлены доклады по таким важнейшим научным направлениям, как сингулярная оптика и структурированный свет, материалы для голографии и фотоники, цифровая голография, методы фотоники и голографии в биологии и медицине, когерентная и нелинейная оптика, голографическая и спеклинтерферометрия. XXXII международная Школа-симпозиум по голографии, когерентной оптики и фотоники позволила выдающимся ученым поделиться своими достижениями, знаниями и опытом в различных областях науки, ознакомить обучающихся и молодых ученых с современными голографическими принципами, методами и подходами для решения различных узкоспециализированных и междисциплинарных задач в области голографии, когерентной оптики и фотоники. Мероприятия Школы сформировали у студентов, аспирантов и молодых ученых понимание необходимости применения данных принципов, методов и подходов.

Section editors: Nikolay V. Petrov, D. Sc. (Physics & Mathematics) Nikolay S. Balbekin, PhD (Physics & Mathematics)

Abstract

Today, not only the development of technology but also the manpower replenishment of science is relevant. Over the past decade, the number of Russian researchers under the age of 40 has increased by a third. But there is a requirement for measures aimed at supporting and developing young talents. This rubric of the Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics is based on the materials of the XXXII International School-Symposium on Holography, Coherent Optics and Photonics, which took place May 30-June 3, 2022 at ITMO University. The School was organized by the research team of the Digital and Display Holography Laboratory (Physics and Engineering megafaculty of ITMO University). The program committee chairs made welcome speech: Yuri N. Zakharov, Professor at Harvard University (Boston, USA); Viktor V. Demin, First Vice-Rector of Tomsk State University (Tomsk, Russia); Nikolai V. Petrov, Leading Professor at ITMO University. The School presented lectures and reports in the following areas: - Singular optics and structured light; - Materials for holography and photonics; - Digital holography; — Photonics and holography methods in biology and medicine; — Coherent and nonlinear optics; — Holographic and speckle interferometry. The XXXII International School-Symposium on Holography, Coherent Optics and Photonics was an event that allowed outstanding scientists to share their achievements, knowledge and experience in various fields of science, to acquaint students and young scientists with modern holographic principles, methods and approaches to solve various highly specialized and interdisciplinary problems in holography, coherent optics and photonics, and to influence the formation of students, graduate students, and young scientists' understanding of the need to apply these principles, methods, and approaches.

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2022, том 22, № 5 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no 5

I/İTMO

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 No 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

университет итмо

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-818-823 УДК 517.9

Влияние размерности, геометрии и ориентации наноструктур на распределение электрического поля в вопросах усиления комбинационного рассеяния света Карина Игоревна Матвеева^{1⊠}, Андрей Юрьевич Зюбин², Игорь Игоревич Кон³, Илья Геннадьевич Самусев⁴

1,2,3,4 Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация

¹ matveeva.k.i@inbox.ru^{\top}, https://orcid.org/0000-0003-2585-163X

2 azubin@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-9766-1408

³ IKon@kantiana.ru, https://orcid.org/0000-0003-3271-1635

⁴ ISamusev@kantiana.ru, https://orcid.org/0000-0001-5026-7510

Аннотация

Предмет исследования. Выполнен анализ результатов численного моделирования зависимости напряженности электрического поля от размерности и геометрии золотых наноструктур и их ориентации относительно поляризации падающего излучения. Метод. Моделирование напряженности электрического поля вблизи единичной наноструктуры осуществлено с применением метода конечных разностей во временной области (Finite-Difference Time-Domain, FDTD). FDTD-метод — эффективный теоретический способ исследования взаимодействия электромагнитной волны и плазмонных нанообъектов. Исследованы объекты — единичные золотые наностержни, имеющие различную геометрию (цилиндр, сфероцилиндр, вытянутый эллипсоид) и варьируемую полудлину (L = 10-120 нм). Источник излучения — плоскополяризованная волна ($\lambda = 632$ нм). Основные результаты. В результате проведенного моделирования определена локализация электрического поля вблизи наноструктур, а также получены максимальные теоретические значения напряженности ближнего электрического поля. Показано, что зависимость максимумов напряженности электрического поля от полудлины золотых наноструктур при их продольной ориентации имеет нелинейный характер. Практическая значимость. Полученные теоретические расчеты напряженности электрического поля вблизи исследуемых плазмонных нанообъектов позволят в дальнейшем определить оптимальные параметры наночастиц и условия возбуждения плазмонного резонанса. В результате возможно создание оптических структур с высоким сигналом усиления комбинационного рассеяния света, детектируемого от исследуемых веществ, находящихся вблизи такой структуры.

Ключевые слова

FDTD-моделирование, плазмонный резонанс, наночастицы, наностержни, ГКРС

Благодарности

Работа выполнена в рамках Соглашения с Минобрнауки России № 75-02-2022-872.

Ссылка для цитирования: Матвеева К.И., Зюбин А.Ю., Кон И.И., Самусев И.Г. Влияние размерности, геометрии и ориентации наноструктур на распределение электрического поля в вопросах усиления комбинационного рассеяния света // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 818–823. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-818-823

© Матвеева К.И., Зюбин А.Ю., Кон И.И., Самусев И.Г., 2022

Influence of the dimension, geometry, and orientation of nanostructures on the distribution of the electric field in matters of enhancing of Raman scattering Karina I. Matveeva^{1⊠}, Andrey Yu. Zyubin², Igor I. Kon³, Ilia G. Samusev⁴

Karma I. Matveeva¹, Anurey 10, Zyubin², Igor I. Kon², Ina G. Samu

1,2,3,4 Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation

 1 matveeva.k.i@inbox.ru $^{\boxtimes},$ https://orcid.org/0000-0003-2585-163X

² azubin@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-9766-1408

³ IKon@kantiana.ru, https://orcid.org/0000-0003-3271-1635

⁴ ISamusev@kantiana.ru, https://orcid.org/0000-0001-5026-7510

Abstract

The presented work reflects and analyzes the results of numerical simulation of the electric field strength dependence on the dimensionality and geometry of gold nanostructures as well as their orientation relative to the polarization of the incident radiation. The simulation of the electric field strength near a single nanostructure was performed using the Finite-Difference Time-Domain (FDTD) method. FDTD modeling is an effective theoretical way to study the interaction between electromagnetic waves and plasmonic nanoobjects represented by single gold nanorods with different geometry (cylinder, spherical cylinder, elongated ellipsoid) and variable half-length (L = 10-120 nm). The radiation source was a plane-polarized wave ($\lambda = 632$ nm). As a result of the simulation, the localization of the electric field near the nanostructures has been determined and the maximum theoretical values of the near-field strength have been obtained. The dependence of the electric field strength maxima has been demonstrated to be nonlinear on the half-length of gold nanostructures in case of their longitudinal orientation to E-vector. The obtained theoretical calculations of the electric field strength near the plasmonic nanoparticles, including gold nanorods, allow us to determine the optimal nanoparticle parameters and excitation conditions for the plasmon resonance occurrence which in turn provides an opportunity to create SERS-structures with a high Raman scattering enhancement.

Keywords

FDTD simulation, plasmon resonance, nanoparticles, nanorods, SERS

Aknowledgements

The research was carried out within the state assignment of Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation No. 75-02-2022-872.

For citation: Matveeva K.I., Zyubin A.Yu., Kon I.I., Samusev I.G. Influence of the dimension, geometry, and orientation of nanostructures on the distribution of the electric field in matters of enhancing of Raman scattering. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 818–823 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-818-823

Введение

Идентификация и определение низкоконцентрированных веществ — одно из быстро развивающихся направлений в спектроскопическом анализе. Данный анализ успешно применяется в биологии, геологии, химии [1], медицине [2], мониторинге атмосферы [3], в междисциплинарных областях, а также в промышленной сфере [4]. В последнее двадцатилетие наиболее востребованным методом спектроскопии является метод гигантского комбинационного рассеяния света (ГКРС). Благодаря возникновению поверхностного плазмонного резонанса в планарных структурах и локализованного поверхностного плазмонного резонанса в наноструктурах [5], данный метод позволяет проводить высокоточный структурный анализ соединений [6-8]. При разработке активных оптических сенсоров широко используются металлы: золото, серебро, платина, медь, а также их композиты [9, 10]. Одним из важных аспектов метода ГКРС — совершенствование и создание новых конфигураций структур, усиливающих интенсивность сигнала комбинационного рассеяния света. В настоящее время диапазон значений усиления сигнала комбинационного рассеяния света составляет от 105 до 10¹⁴ [11]. Варьируя параметры планарных сенсоров, основанных на эффекте ГКРС, а также оптические свойства металлических наночастиц, адсорбированных на поверхности, можно контролировать генерацию плазмонного резонанса, тем самым достигая бльших

значений коэффициента усиления ГКРС и увеличивая предел обнаружения объектов [12, 13]. Возможность создания различных ГКРС-структур требует в первую очередь теоретической оценки их эффективности. В данном вопросе помогают методы математического расчета оптических свойств наноструктур [14]. Один из применяемых вычислительных методов, в частности для целей плазмоники и нанооптики — метод конечных разностей во временной области (Finite-Difference Time-Domain, FDTD) [15].

В основе численного FDTD-метода лежит дискретизация уравнений Максвелла, имеющих дифференциальную форму [16]. Метод конечных разностей во временной области мощный и эффективный численный инструмент для исследования взаимодействия электромагнитной волны с плазмонными нанообъектами. Варьируя параметры нанообъектов и источника падающего излучения, можно рассчитать сечения экстинкции, максимальные значения напряженности электрического поля, отследить его локализацию вблизи исследуемых структур, а также оценить усиления электромагнитного излучения наноструктурами. Обзор научных работ, в частности [17-19], показал, что при сравнении экспериментальных и теоретических данных, рассчитанных FDTD-методом, наблюдаются отклонения между ними. Тем не менее общую тенденцию экспериментальных значений теоретические расчеты могут прогнозировать. К возможным факторам, приводящим к разногласию в данных, стоит отнести основные недостатки данного

метода — ступенчатую аппроксимацию [20], а также накопление численной ошибки дисперсии со временем моделирования [21].

Перспектива численного анализа напряженности электрического поля, генерируемого вблизи анизотропных наночастиц, в частности золотых наностержней варьируемой морфологии, связано с возможностью контроля зависимости длины волны продольной моды плазмонного резонанса [22]. Получение пика продольной моды плазмонного резонанса в области длинноволновых значений (800-1300 нм) позволяет усилить очень слабую интенсивность сигнала комбинационного рассеяния света в данной области. Кроме того, важность данного диапазона заключается в том, что лазерное возбуждение с длинами волн 785, 1064 и 1280 нм дает меньшую деградацию и фотообесцвечивание образца, уменьшенный фон флуоресценции и существенно большую глубину проникновения в биологические ткани по сравнению с коротковолновыми источниками [23].

В настоящей работе определены максимальные значения напряженности электрического поля вблизи единичных наностержней варьируемой геометрии, а также приведены основные 2D-картины распределения ближнего Е-поля.

Используемые методы и подходы

Для реализации численного моделирования FDTDметодом применено программное обеспечение ANSYS Lumerical. В качестве базового алгоритма выбрана методика, описанная в работе [24], с внесенными корректировками. В качестве источника возбуждения использована плоско-поляризованная волна ($\lambda = 632$ нм), вектор напряженности электрического поля колеблется вдоль оси *х*. Амплитуда падающего поля установлена в программе со значением 1 В/м. Источник плоской волны расположен на расстоянии 5 нм от исследуемого объекта — золотых (Au) наностержней, которые имеют различную геометрию (цилиндр, сфероцилиндр, вытянутый эллипсоид) и варьируемую полудлину (L = 10-120 нм) при постоянном радиусе r = 8 нм. Положение исследуемых наночастиц в расчетной области имеет продольную и поперечную ориентацию относительно поляризации падающего излучения. Время симуляции составляло T = 1000 фс. Шаг сетки принимал значения dx, dy, dz = 0,5 нм для полудлин наностержней 10-80 нм, и 1 нм для полудлин 100-120 нм. Картины распределения ближнего **Е**-поля получены с помощью 2D-монитора, расположенного в начальных координатах (x = 0; y = 0; z = 0) в плоскости x-y.

Результаты исследования

В результате исследования установлено, что при продольной ориентации золотых наностержней относительно вектора колебания напряженности электрического поля наблюдается нелинейная зависимость значений максимумов напряженности ближнего электрического поля (рис. 1). На представленных графиках видны по два пиковых значения напряженности поля. Первое пиковое значение напряженности электрического поля для всех форм исследуемых единичных наностержней (цилиндр, сфероцилиндр, вытянутый эллипсоид) получено при полудлине наностержней, равной L = 20 нм.

Второе пиковое значение напряженности электрического поля наблюдается для наностержней цилиндрической и сфероцилиндрической форм при L = 80 нм, а для эллипсоидальной — при L = 100 нм. Исследование локализации электрического поля вблизи единичных наностержней показало, что пиковые значения локального электрического поля в плоскости х-у преимущественно локализованы на элементах наностержней с максимальной кривизной (рис. 2). Данное явление обусловлено быстрой миграцией заряда вдоль ориентированных структур [25]. Также на картинах распределения электрического поля для случаев цилиндрической и сфероцилиндрической форм наблюдалось явление стоячей волны, формирование которой было зафиксировано при полудлине наностержней, равной L = 40 нм (рис. 2, *a*, *b*). Данный эффект обусловлен возникновением плазмонной продольной моды высо-



Рис. 1. Зависимость максимальных значений напряженности (*E*) электрического поля от полудлины для цилиндрической (*a*), сфероцилиндрической (*b*) и эллипсоидальной (*c*) форм наностержней при его продольной ориентации относительно вектора колебания напряженности электрического поля

Fig. 1. Dependence of the maximum values of the electric field (*E*) strength vs. the half-length for cylindrical (*a*), spherocylindrical (*b*) and ellipsoidal (*c*) shapes of nanorods with its longitudinal orientation relative to the electric field strength oscillation vector



Рис. 2. Распределения напряженности (*E*) электрического поля вблизи единичных наностержней цилиндрической (*a*), сфероцилиндрической (*b*) и эллипсоидальной (*c*) форм

Fig. 2. Near-field distributions (*E*) of electric field near single nanorods of cylindrical (*a*), spherocylindrical (*b*) and ellipsoidal (*c*) shapes





Fig. 3. Dependence of the maximum values of the strength (*E*) of the electric field (*a*) vs. the half-length for cylindrical (*b*), spherocylindrical (*c*) and ellipsoidal (*d*) shapes of nanorods with its transverse orientation relative to the electric field strength oscillation vector

кого порядка с локальными узлами вдоль длинной оси наностержней, где фаза осцилляции электронов зависит от места дислокации на наночастицах [26]. Отметим, что формирование стоячей волны сопровождается падением напряженности электрического поля вблизи единичных наностержней.

При поперечной ориентации единичных наностержней относительно вектора колебания напряженности электрического поля видно монотонное увеличение максимального значения напряженности электрического поля при увеличении размера наночастиц. Максимум значения напряженности электрического поля установлен для наностержней эллипсоидальной геометрии при L = 120 нм (рис. 3, *a*).

Электрическое поле на длине волны 632 нм при поперечной ориентации наностержней относитель-

но вектора колебания напряженности электрического поля имеет слабую интенсивность и в основном распределено на боковых гранях наностержней вдоль оси y (рис. 3, b-d). Заметим, что при цилиндрической и сфероцилиндрической геометриях, по мере увеличения полудлины наностержней, локализация максимальных значений электрического поля смещена к торцевым углам структуры.

Заключение

В результате проведенного моделирования определен характер локализации электрического поля вблизи рассматриваемых наноструктур, а также получены максимальные теоретические значения напряженности ближнего электрического поля. Показано, что зависимость максимумов напряженности электрического поля от полудлины золотых наноструктур при их продольной ориентации относительно вектора напряженности электрического поля имеет нелинейный характер. Полученные результаты могут быть использованы при создании высокочувствительных оптических сенсоров для целей прикладной фотоники и анализа низкоконцентрированных веществ.

Литература

- 1. Brode W.R. Chemical Spectroscopy. John Wiley & Sons, 1939.
- Sahu R.K., Mordechai S. Spectroscopic techniques in medicine: The future of diagnostics // Applied Spectroscopy Reviews. 2016. V. 51. N 6. P. 484–499. https://doi.org/10.1080/05704928.2016.1157809
- Xia J., Zhu F., Bounds J., Aluauee E., Kolomenskii A., Dong Q., He J., Meadows C., Zhang S., Schuessler H. Spectroscopic trace gas detection in air-based gas mixtures: Some methods and applications for breath analysis and environmental monitoring // Journal of Applied Physics. 2022. V. 131. N 22. P. 220901. https://doi. org/10.1063/5.0091263
- De Bleye C., Chavez P.-F., Mantanus J., Marini R., Hubert Ph., Rozet E., Ziemons E. Critical review of near-infrared spectroscopic methods validations in pharmaceutical applications // Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis. 2012. V. 69. P. 125–132. https://doi.org/10.1016/j.jpba.2012.02.003
- Хлебцов Н.Г. Оптика и биофотоника наночастиц с плазмонным резонансом // Квантовая электроника. 2008. Т. 38. № 6. С. 504– 529.
- Boginskaya I., Gainutdinova A., Gusev A., Mailyan K., Mikhailitsyn A., Sedova M., Vdovichenko A., Ryzhikov I., Chvalun S., Lagarkov A. Detection of organic substances by a sers method using a special ag-poly(chloro-p-xylylene)-ag sandwich substrate // Coatings. 2020. V. 10. N 8. P. 799. https://doi.org/10.3390/ coatings10080799
- Aitekenov S., Sultangaziyev A., Abdirova P., Yussupova L., Gaipov A., Utegulov Z., Bukasov R. Raman, Infrared and Brillouin spectroscopies of biofluids for medical diagnostics and for detection of biomarkers // Critical Reviews in Analytical Chemistry. 2022. in press. https://doi.org/10.1080/10408347.2022.2036941
- Mandal P., Tewari B.S. Progress in surface enhanced Raman scattering molecular sensing: A review // Surfaces and Interfaces. 2022. V. 28. P. 101655. https://doi.org/10.1016/j.surfin.2021.101655
- Mosier-Boss P.A. Review of SERS substrates for chemical sensing // Nanomaterials. 2017. V. 7. N 6. P. 142. https://doi.org/10.3390/ nano7060142
- Goncharov V.K., Kozadaev K.V., Mel'nikov K.A., Mikitchuk E.P., Novikov A.G. Atmospheric laser deposition of sers-active colloids of noble metals (Ag, Au, and Pt) // Journal of Engineering Physics and Thermophysics. 2018. V. 91. N 5. P. 1291–1295. https://doi. org/10.1007/s10891-018-1860-6
- Cao Y., Zhang J., Yang Y., Huang Z., Long N.V., Fu C. Engineering of SERS substrates based on noble metal nanomaterials for chemical and biomedical applications // Applied Spectroscopy Reviews. 2015. V. 50. N 6. P. 499–525. https://doi.org/10.1080/05704928.2014.923901
- Procházka M. Surface-Enhanced Raman Spectroscopy // Biological and Medical Physics, Biomedical Engineering. Springer, 2016. 221 p. https://doi.org/10.1007/978-3-319-23992-7
- Zeng Z., Liu Y., Wei J. Recent advances in surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS): Finite-difference time-domain (FDTD) method for SERS and sensing applications // TrAC Trends in Analytical Chemistry. 2016. V. 75. P. 162–173. https://doi.org/10.1016/j. trac.2015.06.009
- Hao F., Nordlander P. Efficient dielectric function for FDTD simulation of the optical properties of silver and gold nanoparticles // Chemical Physics Letters. 2007. V. 446. N 1-3. P. 115–118. https:// doi.org/10.1016/j.cplett.2007.08.027
- Yang Z.L., Li Q., Ruan X., Li Z., Ren B., Xu H., Tian Z. FDTD for plasmonics: Applications in enhanced Raman spectroscopy // Chinese Science Bulletin. 2010. V. 55. N 24. P. 2635–2642. https://doi. org/10.1007/s11434-010-4044-0
- Schneider J.B. Understanding the Finite-Difference Time-Domain Method. School of electrical engineering and computer science Washington State University, 2010.
- 17. Rafiee M., Chandra S., Ahmed H., McCormack S.J. Optimized 3D finite-difference-time-domain algorithm to model the plasmonic

References

- 1. Brode W.R. Chemical Spectroscopy. John Wiley & Sons, 1939.
- Sahu R.K., Mordechai S. Spectroscopic techniques in medicine: The future of diagnostics. *Applied Spectroscopy Reviews*, 2016, vol. 51, no. 6, pp. 484–499. https://doi.org/10.1080/05704928.2016.1157809
- Xia J., Zhu F., Bounds J., Aluauee E., Kolomenskii A., Dong Q., He J., Meadows C., Zhang S., Schuessler H. Spectroscopic trace gas detection in air-based gas mixtures: Some methods and applications for breath analysis and environmental monitoring. *Journal of Applied Physics*, 2022, vol. 131, no. 22, pp. 220901. https://doi. org/10.1063/5.0091263
- De Bleye C., Chavez P.-F., Mantanus J., Marini R., Hubert Ph., Rozet E., Ziemons E. Critical review of near-infrared spectroscopic methods validations in pharmaceutical applications. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 2012, vol. 69, pp. 125–132. https://doi.org/10.1016/j.jpba.2012.02.003
- Khlebtsov N.G. Optics and biophotonics of nanoparticles with a plasmon resonance. *Quantum Electronics*, 2008, vol. 38, no. 6, pp. 504–529. https://doi.org/10.1070/QE2008v038n06ABEH013829
- 6. Boginskaya I., Gainutdinova A., Gusev A., Mailyan K., Mikhailitsyn A., Sedova M., Vdovichenko A., Ryzhikov I., Chvalun S., Lagarkov A. Detection of organic substances by a sers method using a special ag-poly(chloro-p-xylylene)-ag sandwich substrate. *Coatings*, 2020, vol. 10, no. 8, pp. 799. https://doi. org/10.3390/coatings10080799
- Aitekenov S., Sultangaziyev A., Abdirova P., Yussupova L., Gaipov A., Utegulov Z., Bukasov R. Raman, Infrared and Brillouin spectroscopies of biofluids for medical diagnostics and for detection of biomarkers. *Critical Reviews in Analytical Chemistry*, 2022, in press. https://doi.org/10.1080/10408347.2022.2036941
- Mandal P., Tewari B.S. Progress in surface enhanced Raman scattering molecular sensing: A review. *Surfaces and Interfaces*, 2022, vol. 28, pp. 101655. https://doi.org/10.1016/j.surfin.2021.101655
- Mosier-Boss P.A. Review of SERS substrates for chemical sensing. *Nanomaterials*, 2017, vol. 7, no. 6, pp. 142. https://doi.org/10.3390/ nano7060142
- Goncharov V.K., Kozadaev K.V., Mel'nikov K.A., Mikitchuk E.P., Novikov A.G. Atmospheric laser deposition of sers-active colloids of noble metals (Ag, Au, and Pt). *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 2018, vol. 91, no. 5, pp. 1291–1295. https://doi. org/10.1007/s10891-018-1860-6
- Cao Y., Zhang J., Yang Y., Huang Z., Long N.V., Fu C. Engineering of SERS substrates based on noble metal nanomaterials for chemical and biomedical applications. *Applied Spectroscopy Reviews*, 2015, vol. 50, no. 6, pp. 499–525. https://doi.org/10.1080/05704928.2014.923901
- Procházka M. Surface-Enhanced Raman Spectroscopy. *Biological* and Medical Physics, Biomedical Engineering, Springer, 2016, 221 p. https://doi.org/10.1007/978-3-319-23992-7
- Zeng Z., Liu Y., Wei J. Recent advances in surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS): Finite-difference time-domain (FDTD) method for SERS and sensing applications. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 2016, vol. 75, pp. 162–173. https://doi.org/10.1016/j. trac.2015.06.009
- Hao F., Nordlander P. Efficient dielectric function for FDTD simulation of the optical properties of silver and gold nanoparticles. *Chemical Physics Letters*, 2007, vol. 446, no. 1-3, pp. 115–118. https://doi.org/10.1016/j.cplett.2007.08.027
- Yang Z.L., Li Q., Ruan X., Li Z., Ren B., Xu H., Tian Z. FDTD for plasmonics: Applications in enhanced Raman spectroscopy. *Chinese Science Bulletin*, 2010, vol. 55, no. 24, pp. 2635–2642. https://doi. org/10.1007/s11434-010-4044-0
- Schneider J.B. Understanding the Finite-Difference Time-Domain Method. School of electrical engineering and computer science Washington State University, 2010.
- 17. Rafiee M., Chandra S., Ahmed H., McCormack S.J. Optimized 3D finite-difference-time-domain algorithm to model the plasmonic

properties of metal nanoparticles with near-unity accuracy // Chemosensors. 2021. V. 9. N 5. P. 114. https://doi.org/10.3390/ chemosensors9050114

- Grand J., Adam P.-M., Grimault A.-S., Vial A., Lamy de la Chapelle M., Bijeon J.-L., Kostcheev S., Royer P. Optical extinction spectroscopy of oblate, prolate and ellipsoid shaped gold nanoparticles: experiments and theory // Plasmonics. 2006. V. 1. N 2-4. P. 135–140. https://doi.org/10.1007/s11468-006-9014-7
- Xu J., Kvasnička P., Idso M., Jordan R.W., Gong H., Homola J., Yu Q. Understanding the effects of dielectric medium, substrate, and depth on electric fields and SERS of quasi-3D plasmonic nanostructures // Optics express. 2011. V. 19. N 21. P. 20493–20505. https://doi. org/10.1364/OE.19.020493
- Ладутенко К.С., Белов П.А. Моделирование интегральных схем нанофотоники: метод FDTD // Наносистемы: физика, химия, математика. 2012. Т. 3. № 5. С. 44–64.
- Cheng Y., Chen G., Wang X.-H., Yang S. Analytical investigations on FDTD numerical dispersion // Proc. of the IEEE MTT-S International Conference on Numerical Electromagnetic and Multiphysics Modeling and Optimization (NEMO). 2020. P. 9343614. https://doi. org/10.1109/NEMO49486.2020.9343614
- Ross M.B., Blaber M.G., Schatz G.C. Using nanoscale and mesoscale anisotropy to engineer the optical response of three-dimensional plasmonic metamaterials // Nature Communications. 2014. V. 5. P. 4090. https://doi.org/10.1038/ncomms5090
- Bedics M.A., Kearns H., Cox J.M., Mabbott S., Ali F., Shand N.C., Faulds K., Benedict J.B., Graham D., Detty M.R. Extreme red shifted SERS nanotags // Chemical Science. 2015. V. 6. N 4. P. 2302–2306. https://doi.org/10.1039/C4SC03917C
- Kon I.I., Zyubin A.Y., Seteikin A.Y., Samusev I.G. FDTD simulations field on gold nanoparticles and silver nanorods // Proceedings of SPIE. 2021. V. 11904. P. 119041I. https://doi.org/10.1117/12.2602518
- Zeng Z., Quan X., Yu X., Chen S., Zhang S. Nanoscale lightning rod effect in 3D carbon nitride nanoneedle: Enhanced charge collection and separation for efficient photocatalysis // Journal of Catalysis. 2019. V. 375. P. 361–370. https://doi.org/10.1016/j.jcat.2019.06.019
- Nicoletti O., Wubs M., Mortensen N.A., Sigle W., van Aken P.A., Midgley P.A. Surface plasmon modes of a single silver nanorod: an electron energy loss study // Optics Express. 2011. V. 19. N 16. P. 15371–15379. https://doi.org/10.1364/OE.19.015371

Авторы

Матвеева Карина Игоревна — младший научный сотрудник, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, 557200305996, https:// orcid.org/0000-0003-2585-163X, matveeva.k.i@inbox.ru

Зюбин Андрей Юрьевич — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, 57193159520, https://orcid.org/0000-0002-9766-1408, azubin@mail.ru

Кон Игорь Игоревич — младший научный сотрудник, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, 557218930458, https://orcid.org/0000-0003-3271-1635, IKon@kantiana.ru

Самусев Илья Геннадьевич — кандидат физико-математических наук, директор Научно-образовательного центра «Фундаментальная и прикладная фотоника. Нанофотоника», Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, <u>50</u> 12779220200, https://orcid.org/0000-0001-5026-7510, ISamusev@kantiana.ru

Статья поступила в редакцию 28.06.2022 Одобрена после рецензирования 22.08.2022 Принята к печати 26.09.2022 properties of metal nanoparticles with near-unity accuracy. *Chemosensors*, 2021, vol. 9, no. 5, pp. 114. https://doi.org/10.3390/chemosensors9050114

- Grand J., Adam P.-M., Grimault A.-S., Vial A., Lamy de la Chapelle M., Bijeon J.-L., Kostcheev S., Royer P. Optical extinction spectroscopy of oblate, prolate and ellipsoid shaped gold nanoparticles: experiments and theory. *Plasmonics*, 2006, vol. 1, no. 2-4, pp. 135–140. https://doi.org/10.1007/s11468-006-9014-7
- Xu J., Kvasnička P., Idso M., Jordan R.W., Gong H., Homola J., Yu Q. Understanding the effects of dielectric medium, substrate, and depth on electric fields and SERS of quasi-3D plasmonic nanostructures. *Optics express*, 2011, vol. 19, no. 21, pp. 20493–20505. https://doi. org/10.1364/OE.19.020493
- Ladutenko K.S., Belov P.A. Nanophotonics integrated circuits simulation: FDTD method. *Nanosystems: Physics, Chemistry*, Mathematics, 2012, vol. 3, no. 5, pp. 44–64. (in Russian)
- Cheng Y., Chen G., Wang X.-H., Yang S. Analytical investigations on FDTD numerical dispersion. *Proc. of the IEEE MTT-S International Conference on Numerical Electromagnetic and Multiphysics Modeling and Optimization (NEMO)*, 2020, pp. 9343614. https://doi. org/10.1109/NEMO49486.2020.9343614
- Ross M.B., Blaber M.G., Schatz G.C. Using nanoscale and mesoscale anisotropy to engineer the optical response of three-dimensional plasmonic metamaterials. *Nature Communications*, 2014, vol. 5, pp. 4090. https://doi.org/10.1038/ncomms5090
- Bedics M.A., Kearns H., Cox J.M., Mabbott S., Ali F., Shand N.C., Faulds K., Benedict J.B., Graham D., Detty M.R. Extreme red shifted SERS nanotags. *Chemical Science*, 2015, vol. 6, no. 4, pp. 2302– 2306. https://doi.org/10.1039/C4SC03917C
- Kon I.I., Zyubin A.Y., Seteikin A.Y., Samusev I.G. FDTD simulations field on gold nanoparticles and silver nanorods. *Proceedings of SPIE*, 2021, vol. 11904, pp. 119041I. https://doi.org/10.1117/12.2602518
- Zeng Z., Quan X., Yu X., Chen S., Zhang S. Nanoscale lightning rod effect in 3D carbon nitride nanoneedle: Enhanced charge collection and separation for efficient photocatalysis. *Journal of Catalysis*, 2019, vol. 375, pp. 361–370. https://doi.org/10.1016/j.jcat.2019.06.019
- Nicoletti O., Wubs M., Mortensen N.A., Sigle W., van Aken P.A., Midgley P.A. Surface plasmon modes of a single silver nanorod: an electron energy loss study. *Optics Express*, 2011, vol. 19, no. 16, pp. 15371–15379. https://doi.org/10.1364/OE.19.015371

Authors

Karina I. Matveeva — Junior Researcher, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, <u>57200305996</u>, https://orcid.org/0000-0003-2585-163X, matveeva.k.i@inbox.ru

Andrey Yu. Zyubin — PhD (Physics & Mathematics), Senior Researcher, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, S 57193159520, https://orcid.org/0000-0002-9766-1408, azubin@mail.ru

Igor I. Kon — Junior Researcher, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, **56** 57218930458, https://orcid.org/0000-0003-3271-1635, IKon@kantiana.ru

Ilia G. Samusev — PhD (Physics & Mathematics), REC Head of the "Fundamental and Applied Photonics, Nanophotonics", Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, 12779220200, https://orcid.org/0000-0001-5026-7510, ISamusev@ kantiana.ru

Received 28.06.2022 Approved after reviewing 22.08.2022 Accepted 26.09.2022



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» **I/İTMO**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 No 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

университет итмо

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-824-831 УДК 535.8

Оптические свойства планарных плазмон-активных поверхностей, модифицированных золотыми нанозвездами

Андрей Юрьевич Зюбин¹[∞], Игорь Игоревич Кон², Анна Анатольевна Кундалевич³, Елизавета Александровна Демишкевич⁴, Карина Игоревна Матвеева⁵, Александр Сергеевич Зозуля⁶, Денис Олегович Евтифеев⁷, Дарья Алексеевна Полторабатько⁸, Илья Геннадьевич Самусев⁹

1,2,3,4,5,6,7,8,9 Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация

¹ azubin@mail.ru^{\equiv}, https://orcid.org/0000-0002-9766-1408

² IKon@kantiana.ru, https://orcid.org/0000-0003-3271-1635

³ kundalevich3@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-7428-6441

⁴ LDemishkevich@kantiana.ru, https://orcid.org/0000-0001-9481-1549

⁵ matveeva.k.i@inbox.ru, https://orcid.org/0000-0003-2585-163X

⁶ zozul97@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-5717-8625

7 d.o.eftifeev@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-6984-172X

⁸ pdarenok@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-0059-9151

9 ISamusev@kantiana.ru, https://orcid.org/0000-0001-5026-7510

Аннотация

Предмет исследования. Рассмотрены экспериментальные и теоретические результаты изучения оптических свойств планарных, модифицированных золотыми нанозвездами кварцевых поверхностей, полученных с применением спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния света. Созданы функционализированные нанозвезды поверхности — прототипы оптических сенсоров. Приведены результаты моделирования, химического синтеза и исследования оптических и морфологических свойств исследованных структур. Метод. Предложен комплексный метод создания и оценки оптических свойств планарных наноструктур. Моделирование реализовано с использованием метода конечных разностей во временной области (FDTD, Finite-Difference Time-Domain) напряженности электрического поля вблизи поверхностей нанозвезд золота в коллоидных растворах и на кремниевой поверхности. При проведении моделирования учтены такие параметры, как размер частиц и зависимость эффективного усиления электромагнитного поля от морфологических параметров нанозвезд. Представлена перспективность теоретического подхода к расчетам рассмотренных структур, их химического синтеза и исследования оптических свойств. Основные результаты. Выполнен расчет параметров электрического поля и оптических свойств вблизи нанозвезд разных размеров. Параметры рассчитаны методом конечных разностей во временной области. Определены оптимальные размеры нанозвезд при изменении толщины поверхностных слоев для получения максимальных значений рассеяния и дальнейшего использования исследованных структур гигантского комбинационного рассеяния света в экспериментах. Выполнен синтез нанозвезд, исследованы их оптические и морфологические свойства, а также проведена функционализация кварцевых поверхностей и созданы прототипы сенсоров с целью дальнейшей оценки усиления сигнала (комбинационного рассеяния света). По результатам математического моделирования определены оптимальные размеры для синтеза нанозвезд, который осуществлен двухступенчатым химическим методом с использованием зародышевых частиц. Для проведения экспериментальной части по получению спектров гигантского комбинационного рассеяния применен спектрометр Centaur U (ООО «НаноСканТехнология», Россия). Спектрометр оснащен тремя источниками: He-Ne лазером ($\lambda = 632,8$ нм, 17 мBт) и двумя DPSS лазерами (λ = 532 нм и λ = 473 нм, 50 мВт). В процессе проведения эксперимента использованы He-Ne лазер и DPSS лазер с длиной волны $\lambda = 532$ нм. В оптическую схему спектрометра включен микроскоп Olympus ВХ41 (Olympus, Япония) с объективом 100[×] (NA 0,9) для позиционирования луча и сбора рассеянных фотонов. Монохроматор спектрометра имеет фокусное расстояние 800 мм, голографическую дифракционную решетку 300 шт/мм и снабжен термоэлектрическим охлаждаемым ПЗС-детектором 1024 × 256 пикселов (Andor Tech.,

[©] Зюбин А.Ю., Кон И.И., Кундалевич А.А., Демишкевич Е.А., Матвеева К.И., Зозуля А.С., Евтифеев Д.О., Полторабатько Д.А., Самусев И.Г., 2022

Великобритания). **Практическая значимость.** В результате работы получены функционализированные наночастицы поверхности — прототипы оптических сенсоров. Показано, что экспериментальный коэффициент усиления сигнала комбинационного рассеяния света может составлять не менее чем 10⁴ раз. Полученные результаты могут служить основой для получения необходимых размеров нанозвезд в методах контролируемого химического синтеза коллоидных наночастиц. Результаты могут быть применены для разработки биосовместимых и высокочувствительных оптических сенсоров на базе эффекта комбинационного рассеяния света.

Ключевые слова

спектроскопия комбинационного рассеяния света, нанозвезда, плазмон, оптический сенсор, моделирование оптических свойств

Благодарности

Работа выполнена в рамках Соглашения с Минобрнауки Российской Федерации № 75-02-2022-872.

Ссылка для цитирования: Зюбин А.Ю., Кон И.И., Кундалевич А.А., Демишкевич Е.А., Матвеева К.И., Зозуля А.С., Евтифеев Д.О., Полторабатько Д.А., Самусев И.Г. Оптические свойства планарных плазмон-активных поверхностей, модифицированных золотыми нанозвездами // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 824–831. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-824-831

Optical properties of planar plasmon active surfaces modified with gold nanostars Andrey Yu. Zyubin^{1⊠}, Igor I. Kon², Anna A. Kundalevich³, Elizaveta A. Demishkevich⁴, Karina I. Matveeva⁵, Alexander S. Zozulya⁶, Denis O. Evtifeev⁷, Darya A. Poltorabatko⁸, Ilia G. Samusev⁹

1,2,3,4,5,6,7,8,9 Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation

¹ azubin@mail.ru^{\equiv}, https://orcid.org/0000-0002-9766-1408

² IKon@kantiana.ru, https://orcid.org/0000-0003-3271-1635

³ kundalevich3@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-7428-6441

⁴ LDemishkevich@kantiana.ru, https://orcid.org/0000-0001-9481-1549

⁵ matveeva.k.i@inbox.ru, https://orcid.org/0000-0003-2585-163X

⁶ zozul97@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-5717-8625

⁷ d.o.eftifeev@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-6984-172X

⁸ pdarenok@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-0059-9151

⁹ ISamusev@kantiana.ru, https://orcid.org/0000-0001-5026-7510

Abstract

The article discusses the experimental and theoretical results of studying the optical properties for planar quartz surfaces modified with gold nanostars using Surface-Enhanced Raman Spectroscopy (SERS). Surfaces functionalized with nanoparticles, prototypes of optical sensors, have been obtained. It is shown that the obtained experimental Raman signal enhancement from the dye rhodamine 6G (R6G) can be at least order 10⁴. The paper presents the results of calculation, synthesis and study of the optical and morphological properties of such structures. A complex method for creating and evaluating the optical properties of planar nanostructures and evaluating their optical properties is proposed. The method includes the approaches based on mathematical modeling using finite differences in the time domain (FDTD - Finite-Difference Time-Domain) evaluating electromagnetic field strengths near the surfaces of star-shaped gold nanoparticles in colloidal solutions and on a silicon surface. During the simulation, we studied such parameters as the particle size, the wavelength of the exciting radiation, and the dependence of the effective amplification of the electromagnetic field on the morphological parameters of the star. The theoretical approach to the calculation of such structures is shown to be promising for the subsequent chemical synthesis described in the article and the study of optical properties. In this paper, a theoretical calculation of the parameters of the electric field and optical properties is carried out near star-shaped nanoparticles of varying sizes. These parameters were calculated by the finite difference method in the time domain. The task included finding the optimal sizes of nanoparticles as well as varying the thickness of the surface layers in order to obtain the maximum scattering values and further use of similar structures in SERS experiments. Also, within the framework of this work, syntheses of star-shaped nanoparticles was carried out, their optical and morphological properties were studied, quartz surfaces were functionalized with nanoparticles, and sensor prototypes were created in order to further assess the Raman signal amplification. Based on the results of mathematical modeling, the optimal sizes for the synthesis of star-shaped NPs were determined. Synthesis of NPs was carried out by a chemical method using seeds. To carry out the experimental part, SERS spectra were obtained using Centaur U spectrometer (OOO NanoScanTechnology, Russia). The spectrometer was equipped with three different laser sources: 632.8 nm He-Ne laser (17 mW), 532 nm and 473 nm DPSS lasers (45 mW). During the experiment, a He-Ne laser with $\lambda = 632$ nm and DPSS laser with $\lambda = 532$ nm were used to match the excitation of the plasmon maximum for the nanostars. The optical scheme of the spectrometer included an Olympus BX41 microscope (Olympus, Japan) with a 100[×] objective (NA 0.9) for positioning the beam and collecting scattered photons. The monochromator of the spectrometer had a focal length of 800 mm. A holographic diffraction grating of 300 gr/mm, and was equipped with a 1024×256 pixel thermoelectric cooled CCD detector (Andor Tech., UK). As a result of the paper, surfaces functionalized by nanoparticles were obtained prototypes of optical sensors. It is shown that the experimental gain of the Raman signal can be no less than 10⁴ times. The presented data will serve as the basis for obtaining the required sizes of nanostars in the methods of the controlled chemical synthesis of colloidal nanoparticles. The results presented in the article can be applied to the development of biocompatible and highly sensitive optical sensors based on the effect of Raman scattering of light.

Keywords

Raman spectroscopy, nanostar, plasmon, optical sensor, modeling of optical properties

Aknowledgements

The study was supported by the Project of the state assign of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation No. 75-02-2022-872.

For citation: Zyubin A.Yu., Kon I.I., Kundalevich A.A., Demishkevich E.A., Matveeva K.I., Zozulya A.S., Evtifeev D.O., Poltorabatko D.A., Samusev I.G. Optical properties of planar plasmon active surfaces modified with gold nanostars. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 824–831 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-824-831

Введение

В настоящее время существует значительный интерес к разработке и использованию плазмонных сенсоров на базе поверхностно-функционализированных наночастиц золота в коллоидных растворах и на поверхностях. Коллоидные системы применяются в качестве адресной доставки лекарственных средств в опухолевые ткани, которые известны своим разрастанием сосудов, высокими метаболизмом [1] и потреблением питательных веществ. В связи с этим наночастицы при адресном введении накапливаются в раковых клетках-мишенях, оказывая на них воздействие. Золотые наночастицы обладают хорошей биосовместимостью, не являются цитотоксичными [2] и способны выводиться организмом [3]. Настраиваемые оптические свойства наночастиц золота для использования в методах оптической сенсорики и легкость модификации их поверхности сделали золото одним из широко используемых металлов в данной области. Оптические свойства золотых наночастиц, вблизи которых может индуцироваться эффект плазмонного резонанса, позволяют эффективно применять такие частицы в методах флуоресцентной и колебательной спектроскопии [4]. Теоретические модели и расчеты позволяют моделировать экспериментальные результаты, предоставляя информацию: об оптимальной форме наночастиц, определяющей необходимые оптические свойства; о подходящих оптических источниках возбуждения; об оптимальных экспериментальных условиях и др.

Численные решения этих задач можно получить методом конечных разностей во временной области (FDTD, Finite-Difference Time-Domain), заключающимся в дискретизации уравнений Максвелла в дифференциальной форме с помощью конечно-разностной схемы [5–8].

Одна из разрабатываемых в настоящее время проблем — определение оптимальной формы и размеров наночастиц, у которых параметры усиления комбинационного рассеяния вблизи поверхности будут иметь наибольшие значения. В результате можно реализовывать сенсорные функции наночастиц в процессах адресной доставки лекарственных препаратов и фотосенсибилизаторов, а также регистрации изменений в клетках при их действии. Отметим, что в большинстве экспериментальных работ не уделено особого внимания вопросам детального моделирования многослойных коллоидных наночастиц и их поверхностей [9]. Однако существуют работы, связанные с системами доставки наночастиц [10], в которых рассмотрены конкретные или возможные изменения параметров многослойных наночастиц [11]. Расчет оптических свойств является важным для осуществления последующего синтеза таких частиц [12].

В настоящей работе приведены результаты теоретического расчета параметров электрического поля структур, составленных из золотых нанозвезд. Реализован синтез нанозвезд, исследованы их оптические и морфологические свойства, проведена функционализация поверхностей и созданы прототипы сенсоров. Выполнена оценка усиления комбинационного рассеяния света от поверхности структуры.

FDTD-моделирование оптических свойств нанозвезд

Для проведения моделирования использован пакет FDTD Lumercal Solutions и разработанная авторская методика, которая состоит в следующем.

- 1. Установка счетной области, разрешения сетки и граничных условий. Для счетной области применена прямоугольная сетка базового алгоритма Yee [13] в декартовой системе координат. Электрические и магнитные поля в данной сетке рассчитаны в каждой отдельной точке рабочей области. Геометрия объектов и их свойства заданы с использованием программного обеспечения FDTD Lumerical Solutions. Размеры счетной области по осям изменялись в пределах в зависимости от размера объектов. Для поддержания точности алгоритма сгенерирована сетка наименьшего размера, чтобы точность измерений соответствовала условию сходимости Куранта. При этом минимальный шаг сетки составил 0,25 нм. Показатель преломления равен единице (показателю преломления воздуха). Для выполнения моделирования проведена установка дополнительной уточняющей сетки. Размер счетной области дополнительной сетки равен величинам ее шага: dx, dy, dz = 2,5 нм. Выбор стандартных поглощающих граничных условий идеально согласованных слоев (Perfectly Matched Layer, PML) соответствует поглощению падающего света с минимальными отражениями. Условия имеют следующие параметры:
 - КАППА, СИГМА, АЛЬФА (абсорбционные свойства областей РМL Каппа, сигма и альфа оцениваются внутри областей РМL с использованием полиномиальных функций)

Kappa = 2, sigma = 1, alpha = 0;

— Polinom (определяет порядок полинома, используемого для оценки каппа и сигма) = 3;

- Alpha-polinomial (определяет порядок полинома, используемого для оценки альфа-канала) = 1;
- Минимальные, максимальные слои (они обеспечивают приемлемый диапазон значений для количества слоев PML). Минимальные слои = 8, максимальные = 64.

Также заданы физические параметры моделирования рабочей области: время пробега плоскополяризованной волны через рабочую зону (1 пс) и стандартная температура окружающей среды (T = 27 °C).

- 2. Размещение тела внутри счетной области с заданными оптическими и геометрическими параметрами. Задание оптических и геометрических параметров образцов. Применение материалов из цифровой базы данных программного обеспечения Ansys Lumerical FDTD, параметры (размер, форма, геометрия) которых изменялись при моделировании. Учет значений параметров: действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости, зависящей частоты излучения.
- 3. Установка параметров источника излучения для трех длин волн. В настоящей работе использован источник полного рассеянного поля (TFSF), который часто применяется для изучения рассеяния на небольших частицах, освещенных плоской волной. Источник TFSF разделяет вычислительную область на две отдельные области: общую область поля, включающую падающую и рассеянную волны; область рассеянного поля, включает только рассеянное поле. Источник TFSF — протяженный. Для анализа данных учтены максимальные значения напряженностей электрического поля из всей полученной области распространения локализованного плазмонного резонанса.
- 4. Определены значения величин электрического поля Е как функции положения в пространстве в виде 2D-среза, установлена плоскость монитора параллельно оси XZ. Использование мониторов поля в частотной области позволило определить профиль поля в этой области и представить результаты моделирования в некоторой пространственной области для FDTD-моделирования. Возбуждение осуществлено р-поляризованной волной, перпендикулярно плоскости XZ с SiO₂ поверхностью, в которой находились нанозвезды (рис. 1). Параметры исследуемой поверхности с нанозвездами: высота 10 нм, внутренний радиус 20 нм, полный внешний радиус 60 нм. Расстояния между звездами 1 нм, объект возбужден плоскополяризованной монохроматической волной 632,8 нм.
- 5. Пересчет значения *E*, полученного в среде, в значение сигнала интенсивности гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) и теоретический коэффициент эффективного усиления |*E*/*E*₀|⁴ или фактор усиления (ЕF) для ГКР (значения рассчитаны совместно с помощью FDTD Lumerical и находятся в прямой зависимости). Для расчета использован источник TFSF, и проведено моделирование области структуры для нахождения максимальных значений EF. В результате моделирования получены рассчи-





Fig. 1. An example of the distribution of electric field strengths on SiO_2 surfaces with stars. The surface is located in the *XZ* plane

танные следующие характеристики для золотых нанозвезд: максимум интенсивности электрического поля (field) *E* составило 24,3 В/м; интенсивность сигнала гигантского комбинационного рассеяния света (ГКРС) — $1,17\cdot10^4$ отн. ед.; коэффициент усиления $|E/E_0|^4$ — $1,36\cdot10^8$.

Синтез золотых нанозвезд (AuNSs)

Для химического синтеза золотых нанозвезд за основу выбран протокол [14] с незначительными модификациями. В качестве зародышевого раствора использован коллоид, приготовленный по цитратному методу [15]. Для синтеза зародышей взято 20 мл раствора, содержащего $HAuCl_4 \cdot 3H_2O$ и Na_3Cit с концентрациями 2,5.10-4 моль/л и 1,0.10-4 моль/л соответственно. При умеренном перемешивании быстро добавлен свежеприготовленный раствор NaBH₄ (0,1 моль/л, 60 мкл). Раствор сразу же приобретал коричнево-розовый цвет и постепенно, в течение суток, приобретал окончательный красный. Для синтеза нанозвезд использован раствор цетилтриметиламмония бромида (15 мл. 7,33 моль/л), к которому добавлены 640 мкл HAuCl₄ (0,01 моль/л) и 96 мкл AgNO₃ (0,01 моль/л). При интенсивном перемешивании введено 110 мкл аскорбиновой кислоты (0,1 моль/л). Сразу после обесцвечивания раствора добавлено 12 мкл «зародышевых частиц» и выполнено его перемешивание еще в течение 2 мин, при этом раствор постепенно приобрел синий цвет. Синтезированный коллоид представлен на рис. 2.

Модифицирование поверхности кварцевых стекол

Для создания структур использованы прозрачные в ультрафиолетовом диапазоне кварцевые стекла марки КУ-1, которые модифицировали нанозвездами. Очистка стекол осуществлена многостадийным спосо-



Рис. 2. Фотография синтезированного золя золотых нанозвезд

Fig. 2. Photograph of the synthesized sol of gold nanostars

бом. На первом этапе стекла промывались в ультразвуковой ванне в течение 30 мин, в которой каждые 10 мин происходила замена жидкости по следующей схеме: Milli-Q — изопропиловый спирт — Milli-Q. Далее пластины сушили при 90 °С до полного высыхания, после чего стекла помещали вертикально в термостойкую посуду с раствор пираньи (30 % H₂O₂ и 96 % H₂SO₄, 1:3) и подогревали до 70 °С. Через 30 мин пластину промывали три раза по 10 мин в ультразвуковой ванне с Milli-Q и сушили при 90 °С до полного высыхания. После завершения данного этапа одно стекло бралось для выполнения контрольного эксперимента с красителем без нанозвезд. Остальные очищенные стекла вертикально помещались в 5 %-ный раствор APTES и безводного толуола на 24 ч. Далее для очистки от излишек APTES-образцы последовательно погружали в ультразвуковую ванну с безводным этанолом (два раза по 10 мин) и деонизированной водой (три раза по 10 мин). После высыхания на поверхность APTESмодифицированных стекол адсорбировали нанозвезды. Для этого пластины горизонтально погружали в коллоидные растворы и оставляли в покое на 24 ч. Через сутки стекла промывали водой и использовали по назначению.

Исследование оптических и морфологических свойств золотых нанозвезд

Спектры поглощения нанозвезд снимали в кварцевой кювете с длиной оптического пути 10 мм с использованием двухлучевого спектрофотометра Shimadzu UV-2600 со спектральным диапазоном 200–800 нм. На рис. 3 представлены спектры поглощения золотых нанозвезд (Au NSs) и золотых нанозвезд с оболочкой (Au@SiO_2 NSs) (рис. 3, a), а также спектры экстинкции (α) для стекол с нанесенными нанозвездами (рис. 3, b).

Для подтверждения морфологии наночастиц применен метод сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). Исследование осуществлено с помощью двулучевой электронно-ионной системы сверхвысокого разрешения Zeiss Cross Beam XB 540. На рис. 4 показаны полученные в результате синтеза нанозвезды, осажденные для съемки на поверхность кремния.

Эксперименты гигантского комбинационного рассеяния света

В рамках проведения экспериментальной части по получению спектров ГКРС с помощью нанозвезд на APTES-модифицированных стеклах использован спектрометр Centaur U (ООО «НаноСканТехнология»,



Рис. 3. Спектры поглощения золотых нанозвезд без (Au NSs) и с кремнеземной оболочкой (Au@SiO₂ NSs) (*a*) и спектр экстинкции модифицированной Au NSs стеклянной поверхности (*b*)

Fig. 3. Absorption spectra of gold nanostars without (Au NSs) and with a silica shell (Au@SiO₂ NSs) (*a*) and extinction spectrum of the glass surface modified with Au NSs (*b*)



Рис. 4. СЭМ-изображение нанозвезд, полученных в результате химического синтеза *Fig. 4.* SEM image of nanostars produced by chemical reaction

Россия). Так как полученные нанозвезды имеют широкий максимум плазмонного поглощения, начинающийся в районе 500 нм и заканчивающийся в ближнем инфракрасном диапазоне, в ходе эксперимента использованы лазеры с длинами волн $\lambda = 632$ нм и $\lambda = 532$ нм, соотносящиеся с максимумами плазмонного поглощения модифицированных стекол. В качестве экспериментального детектируемого вещества выбран краситель родамин 6Ж (Р6Ж). Свежеприготовленные водные растворы Р6Ж с концентрацией С = 10-4 моль/л добавлены по несколько капель объемом V = 2 мкл на разные участки подготовленной поверхности: высокой плотности, варьируемой плотности и монослой. Участки были просушены при стандартных условиях и помещены на предметный столик, после чего выполнена съемка. При всех экспериментах (в том числе контрольных) использованы одинаковые концентрация и объем красителя Р6Ж, а также условия съемки. На рис. 5 показаны фотографии модифицированных стекол.

На рис. 6 представлены спектры ГКРС Р6Ж концентрацией $C = 10^{-4}$ моль/л, полученные на разных участках анализируемого стекла нанозвезд: высокой плотности, варьируемой плотности и монослое (без явных разводов и пятен). В течение эксперимента проведена съемка 14 образцов варьируемых концентраций при длинах волн излучения $\lambda = 632$ нм и $\lambda = 532$ нм (мощность излучения лазера в ходе эксперимента не изменялась и оставалась максимальной, равной 50 мВт для DPSS-лазера и 17 мВт для Не-Ne лазера). Съемка длилась в течение 30 с, количество повторов оставалось постоянным (три раза). Регистрация спектров произведена в нескольких точках для одного из участков (внутри каждой анализируемой капли Р6Ж спектры ГКРС снимались в пяти разных точках). Контрольный эксперимент без нанозвезд выполнен на химически очищенном кварцевом стекле при аналогичных условиях спектральной съемки. В этом случае Р6Ж $(C = 10^{-4} \text{ моль/л})$ наносился на такое стекло, после чего снимались его спектры КРС. Регистрируемая интенсивность контрольных спектров КРС составила 2,13-1,98 отн. ед. (таблица).

Для оценки усиления сигнала ГКР Р6Ж, полученного на исследуемых поверхностях, покрытых нанозвезд





Рис. 5. Фотографии исследуемых АРТЕSмодифицированных стекол: монослой и участок варьируемой плотности (*a*), стекло с участками высокой плотности (*b*)

Fig. 5. Photographs of the studied APTES-modified glasses: monolayer and region of variable density (a), glass with regions of high density (b)





Fig. 6. Surface-enhanced Raman spectra R6G (10⁻⁴ mole/L) obtained on three areas of the analyzed glass

Длина волны излучения, нм	Место регистрации	Участок регистрации, см ⁻¹	Интенсивность КР, отн. ед.	Интенсивность ГКР, отн. ед.	Коэффициент усиления
632	монослой	1512	2,13	23 817	1,12.104
632	монослой	1359	2,11	19 527	9,20·10 ³
532	варьируемая плотность	1355	2,14	11 145	5,16·10 ³
532	высокая плотность	1512	2,20	1797	5,40·10 ³
532	высокая плотность	1359	1,98	53 247	2,69.104
532	монослой	1358	1,98	1287	6,50·10 ²

Таблица. Полученные результаты для разных условий эксперимента *Table*. Obtained results for different experimental conditions

методом APTES, рассчитаны коэффициенты усиления ГКР по формуле:

$$EF = \frac{I_{\Gamma KP}C_{KP}}{I_{KP}C_{\Gamma KP}},$$

где $I_{\Gamma KP}$ и I_{KP} — интенсивности сигналов ГКР и КР на выбранной частоте; $C_{\Gamma KP}$ и C_{KP} — концентрации веществ в эксперименте с ГКР и КР.

Полученные результаты для разных условий эксперимента представлены в таблице.

Заключение

С учетом результатов теоретического моделирования успешно разработана методика синтеза нанозвезд (в том числе с оболочкой), исследованы их оптические и морфологические свойства. Приведены экспериментальные результаты методом спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния с использованием нанозвезд. Получены функционализированные поверхности нанозвезд — прототипы оптических сенсоров. Показано, что экспериментальный коэффициент усиления сигнала комбинационного рассеяния может составлять не менее чем 10⁴ раз. Полученные результаты однозначно обладают потенциалом практического внедрения для задач сенсорики, биофизики и медицины.

Литература

- Israël M., Schwartz L. The metabolic advantage of tumor cells // Molecular Cancer. 2011. V. 10. N 1. P. 1–12. https://doi. org/10.1186/1476-4598-10-70
- Pan Y., Neuss S., Leifert A., Fischler M., Wen F., Simon U., Schmid G., Brandau W., Jahnen-Dechent W. Size-dependent cytotoxicity of gold nanoparticles // Small. 2007. V. 3. N 11. P. 1941– 1949. https://doi.org/10.1002/smll.200700378
- Takeuchi I., Nobata S., Oiri N., Tomoda K., Makino K. Biodistribution and excretion of colloidal gold nanoparticles after intravenous injection: effects of particle size // Bio-Medical Materials and Engineering. 2017. V. 28. N 3. P. 315–323. https://doi.org/10.3233/ BME-171677
- Fleischmann M., Hendra P.J., McQuillan A.J. Raman spectra of pyridine adsorbed at a silver electrode // Chemical Physics Letters. 1974. V. 26. N 2. P. 163–166. https://doi.org/10.1016/0009-2614(74)85388-1
- Yee K. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media // IEEE Transactions on Antennas and Propagation. 1966. V. 14. N 3. P. 302– 307. https://doi.org/10.1109/TAP.1966.1138693
- Umashankar K., Taflove A. A novel method to analyze electromagnetic scattering of complex objects // IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility. 1982. V. EMC-24. N 4. P. 397– 405. https://doi.org/10.1109/TEMC.1982.304054
- Taflove A., Hagness S.C., Piket-May M. Computational electromagnetics: the finite-difference time-domain method // The Electrical Engineering Handbook. Academic Press, 2005. P. 629–670. https://doi.org/10.1016/B978-012170960-0/50046-3
- Gedney S.D. Introduction to the Finite-Difference Time-Domain (FDTD) Method for Electromagnetics. Springer Cham, 2011. 250 p. https://doi.org/10.1007/978-3-031-01712-4
- Sikdar D., Rukhlenko I.D., Cheng W., Premaratne M. Optimized gold nanoshell ensembles for biomedical applications // Nanoscale Research Letters. 2013. V. 8. N 1. P. 142. https://doi.org/10.1186/1556-276X-8-142

References

- Israël M., Schwartz L. The metabolic advantage of tumor cells. *Molecular Cancer*, 2011, vol. 10, no. 1, pp. 1–12. https://doi. org/10.1186/1476-4598-10-70
- Pan Y., Neuss S., Leifert A., Fischler M., Wen F., Simon U., Schmid G., Brandau W., Jahnen-Dechent W. Size-dependent cytotoxicity of gold nanoparticles. *Small*, 2007, vol. 3, no. 11, pp. 1941–1949. https://doi.org/10.1002/smll.200700378
- Takeuchi I., Nobata S., Oiri N., Tomoda K., Makino K. Biodistribution and excretion of colloidal gold nanoparticles after intravenous injection: effects of particle size. *Bio-Medical Materials and Engineering*, 2017, vol. 28, no. 3, pp. 315–323. https://doi. org/10.3233/BME-171677
- Fleischmann M., Hendra P.J., McQuillan A.J. Raman spectra of pyridine adsorbed at a silver electrode. *Chemical Physics Letters*, 1974, vol. 26, no. 2, pp. 163–166. https://doi.org/10.1016/0009-2614(74)85388-1
- Yee K. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media. *IEEE Transactions* on Antennas and Propagation, 1966, vol. 14, no. 3, pp. 302–307. https://doi.org/10.1109/TAP.1966.1138693
- Umashankar K., Taflove A. A novel method to analyze electromagnetic scattering of complex objects. *IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility*, 1982, vol. EMC-24, no. 4, pp. 397– 405. https://doi.org/10.1109/TEMC.1982.304054
- Taflove A., Hagness S.C., Piket-May M. Computational electromagnetics: the finite-difference time-domain method. *The Electrical Engineering Handbook*. Academic Press, 2005, pp. 629– 670. https://doi.org/10.1016/B978-012170960-0/50046-3
- Gedney S.D. Introduction to the Finite-Difference Time-Domain (FDTD) Method for Electromagnetics. Springer Cham, 2011, 250 p. https://doi.org/10.1007/978-3-031-01712-4
- Sikdar D., Rukhlenko I.D., Cheng W., Premaratne M. Optimized gold nanoshell ensembles for biomedical applications. *Nanoscale Research Letters*, 2013, vol. 8, no. 1, pp. 142. https://doi.org/10.1186/1556-276X-8-142

- Cheng J., Gu Y.-J., Cheng S.H., Wong W.-T. Surface functionalized gold nanoparticles for drug delivery // Journal of Biomedical Nanotechnology. 2013. V. 9. N 8. P. 1362–1369. https://doi. org/10.1166/jbn.2013.1536
- Mehrdel B., Aziz A.A., Yoon T.L. Resonance position and extinction efficiency of a single silica coated gold nanoshell when size effects of core is matter // AIP Conference Proceedings. 2017. V. 1838. N 1. P. 020012. https://doi.org/10.1063/1.4982184
- Nikoobakht B., El-Sayed M.A. Preparation and growth mechanism of gold nanorods (NRs) using seed-mediated growth method // Chemistry of Materials. 2003. V. 15. N 10. P. 1957–1962. https://doi. org/10.1021/cm0207321
- Yee K.S., Chen J.S. The finite-difference time-domain (FDTD) and the finite-volume time-domain (FVTD) methods in solving Maxwell's equations // IEEE Transactions on Antennas and Propagation. 1997. V. 45. N 3. P. 354–363. https://doi.org/10.1109/8.558651
- Liebig F., Henning R., Sarhan R.M., Prietzel C., Schmitt C.N.Z., Bargheerb M., Koetz J. A simple one-step procedure to synthesise gold nanostars in concentrated aqueous surfactant solutions // RSC Advances. 2019. V. 9. N 41. P. 23633–23641. https://doi.org/10.1039/ C9RA02384D
- Polte J., Ahner T.T., Delissen F., Sokolov S., Emmerling F., Thünemann A.F., Kraehnert R. Mechanism of gold nanoparticle formation in the classical citrate synthesis method derived from coupled in situ XANES and SAXS evaluation // Journal of the American Chemical Society. 2010. V. 132. N 4. P. 1296–1301. https:// doi.org/10.1021/ja906506j

Авторы

Зюбин Андрей Юрьевич — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, 57200305996, https://orcid.org/0000-0002-9766-1408, azubin@mail.ru

Кон Игорь Игоревич — младший научный сотрудник, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, 557218930458, https://orcid.org/0000-0003-3271-1635, IKon@kantiana.ru

Кундалевич Анна Анатольевна — инженер-исследователь, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, 557200305996, https:// orcid.org/0000-0001-7428-6441, kundalevich3@mail.ru

Демишевич Елизавета Александровна — инженер-исследователь, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, 557219605515, https:// orcid.org/0000-0001-9481-1549, LDemishkevich@kantiana.ru

Матвеева Карина Игоревна — младший научный сотрудник, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, № 57200305996, https:// orcid.org/0000-0003-2585-163X, matveeva.k.i@inbox.ru

Зозуля Александр Сергеевич — техник, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0001-5717-8625, zozul97@mail.ru

Евтифеев Денис Олегович — студент, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0001-6984-172X, d.o.eftifeev@mail.ru

Полторабатько Дарья Алексеевна — студент, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0002-0059-9151, pdarenok@mail.ru

Самусев Илья Геннадьевич — кандидат физико-математических наук, директор Научно-образовательного центра «Фундаментальная и прикладная фотоника. Нанофотоника», Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, 5 12779220200, https://orcid.org/0000-0001-5026-7510, ISamusev@kantiana.ru

Статья поступила в редакцию 01.07.2022 Одобрена после рецензирования 22.08.2022 Принята к печати 29.09.2022

- Cheng J., Gu Y.-J., Cheng S.H., Wong W.-T. Surface functionalized gold nanoparticles for drug delivery. *Journal of Biomedical Nanotechnology*, 2013, vol. 9, no. 8, pp. 1362–1369. https://doi. org/10.1166/jbn.2013.1536
- Mehrdel B., Aziz A.A., Yoon T.L. Resonance position and extinction efficiency of a single silica coated gold nanoshell when size effects of core is matter. *AIP Conference Proceedings*, 2017, vol. 1838, no. 1, pp. 020012. https://doi.org/10.1063/1.4982184
- Nikoobakht B., El-Sayed M.A. Preparation and growth mechanism of gold nanorods (NRs) using seed-mediated growth method. *Chemistry of Materials*, 2003, vol. 15, no. 10, pp. 1957–1962. https:// doi.org/10.1021/cm0207321
- Yee K.S., Chen J.S. The finite-difference time-domain (FDTD) and the finite-volume time-domain (FVTD) methods in solving Maxwell's equations. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 1997, vol. 45, no. 3, pp. 354–363. https://doi.org/10.1109/8.558651
- Liebig F., Henning R., Sarhan R.M., Prietzel C., Schmitt C.N.Z., Bargheerb M., Koetz J. A simple one-step procedure to synthesise gold nanostars in concentrated aqueous surfactant solutions. *RSC Advances*, 2019, vol. 9, no. 41, pp. 23633–23641. https://doi. org/10.1039/C9RA02384D
- Polte J., Ahner T.T., Delissen F., Sokolov S., Emmerling F., Thünemann A.F., Kraehnert R. Mechanism of gold nanoparticle formation in the classical citrate synthesis method derived from coupled in situ XANES and SAXS evaluation. *Journal of the American Chemical Society*, 2010, vol. 132, no. 4, pp. 1296–1301. https://doi.org/10.1021/ja906506j

Authors

Andrey Yu. Zyubin — PhD (Physics & Mathematics), Senior Reseacher, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, S 57200305996, https://orcid.org/0000-0002-9766-1408, azubin@mail.ru

Igor I. Kon — Junior Researcher, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, **5**7218930458, https://orcid.org/0000-0003-3271-1635, IKon@kantiana.ru

Anna A. Kundalevich — Research Engineer, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, 57200305996, https://orcid.org/0000-0001-7428-6441, kundalevich3@ mail.ru

Elizaveta A. Demishkevich — Research Engineer, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, S 57219605515, https://orcid.org/0000-0001-9481-1549, LDemishkevich@kantiana.ru

Karina I. Matveeva — Junior Researcher, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, se 57200305996, https://orcid.org/0000-0003-2585-163X, matveeva.k.i@inbox.ru

Alexander S. Zozulya — Tecnician, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, https://orcid. org/0000-0001-5717-8625, zozul97@mail.ru

Denis O. Evtifeev — Student, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0001-6984-172X, d.o.eftifeev@mail.ru

Darya A. Poltorabatko — Student, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, https://orcid. org/0000-0002-0059-9151, pdarenok@mail.ru

Ilia G. Samusev — PhD (Physics & Mathematics), REC Head "Fundamental and Applied Photonics. Nanophotonics", Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, 12779220200, https://orcid.org/0000-0001-5026-7510, ISamusev@ kantiana.ru

Received 01.07.2022 Approved after reviewing 22.08.2022 Accepted 29.09.2022



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» **I/İTMO**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 No 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

университет итмо

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-832-838 УДК 53.082.54

Применение метода цифровой голографической интерферометрии для исследования низкотемпературной импульсной плазмы Анастасия Михайловна Кожевникова^{1⊠}, Антон Сергеевич Иванков², Дмитрий Владимирович Шитц³, Игорь Вячеславович Алексеенко⁴

1.2.3.4 Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация

¹ AKozhevnikova1@kantiana.ru^{\Box}, https://orcid.org/0000-0002-6642-5226

² AIvankov@kantiana.ru, https://orcid.org/0000-0002-1689-1974

³ DSCHitz@kantiana.ru, https://orcid.org/0000-0002-0477-8456

⁴ IAlekseenko@kantiana.ru, https://orcid.org/0000-0001-8463-3304

Аннотация

Предмет исследования. Представлен метод цифровой голографической интерферометрии для регистрации и оценки параметров низкотемпературной плазмы, генерируемой при атмосферном давлении в импульсном режиме. Подобный вид плазмы в настоящее время находит свое применение в медицине и биологии. Существует потребность контроля дозы воздействия и режимов формирования плазменной среды. В качестве контролируемых параметров плазмы рассмотрена концентрация электронов, которая может быть определена путем оценки изменения показателя преломления плазмы в импульсе относительно невозмущенного состояния. Метод. Рабочей средой формирования импульсов плазмы служил гелий. Частота следования импульсов плазмы составляла 5 кГц, а их длительность — 750 нс. Исследования выполнены на специально разработанном лабораторном комплексе регистрации голографических изображений импульсов плазмы. Голограммы зарегистрированы с использованием цифровой камеры. В качестве источника когерентного излучения выбран импульсный лазер INNOLAS SpitLight Hybrid II с длиной волны 532 нм и длительностью импульса излучения 10 нс. Для точной регистрации импульсов плазмы работа лазера, генератора плазмы и цифровой камеры были синхронизированы между собой. В ходе эксперимента получена серия из 500 голограмм с последующей реконструкцией фазы объектного поля. Анализ последовательности голограмм позволил определить разности фаз, связанных с показателем преломления низкотемпературной импульсной плазмы в гелии. Однако такая плазма создает малую фазовую задержку, что приводит к низкому фазовому контрасту рассчитываемых интерферограмм. С другой стороны, низкий контраст может быть вызван и недостатками системы регистрации. Для доказательства возможности системы записи голограмм проведены предварительные эксперименты с регистрацией плазменной дуги с аналогичными временными параметрами генерации, но с более высоким фазовым контрастом реконструированных изображений. Основные результаты. Представлены экспериментальные результаты исследования фазового контраста показателя преломления чистого гелия, плазменной дуги и импульсов плазмы в гелии. Доказана работоспособность разработанного экспериментального комплекса и метода получения интерферограмм, основанного на определении показателя преломления в импульсе плазмы. Практическая значимость. Полученные результаты могут быть использованы для оценки электронной концентрации плазмы. В дальнейшем планируется увеличение чувствительности метода с целью повышения фазового контраста за счет расширения спектрального диапазона лазерного излучения при регистрации голограмм путем перехода в другую спектральную область, например, инфракрасную.

Ключевые слова

цифровая голографическая интерферометрия, голографическая интерферометрия, нетермальная плазма, концентрация электронов в плазме, автоматизация эксперимента

Благодарности

Работа выполнена при поддержке проекта государственного задания Минобрнауки Российской Федерации № FZWM-2020-0003 «Исследование новых материалов и методов плазмо- и фототерапии онкологических заболеваний, дерматитов и септических осложнений» 2020–2023 гг.

[©] Кожевникова А.М., Иванков А.С., Шитц Д.В., Алексеенко И.В., 2022

Ссылка для цитирования: Кожевникова А.М., Иванков А.С., Шитц Д.В., Алексеенко И.В. Применение метода цифровой голографической интерферометрии для исследования низкотемпературной импульсной плазмы // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 832–838. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-832-838

Implementation of digital holographic interferometry for pulsed plasma studies Anastasiia M. Kozhevnikova¹, Anton S. Ivankov², Dmitry V. Schitz³, Igor V. Alekseenko⁴

1,2,3,4 Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation

¹ AKozhevnikova1@kantiana.ru^{\Box}, https://orcid.org/0000-0002-6642-5226

- ² AIvankov@kantiana.ru, https://orcid.org/0000-0002-1689-1974
- ³ DSCHitz@kantiana.ru, https://orcid.org/0000-0002-0477-8456
- ⁴ IAlekseenko@kantiana.ru, https://orcid.org/0000-0001-8463-3304

Abstract

The study of low-temperature plasma generated in pulsed mode at atmospheric pressure was carried out. The purpose of the presented research is to develop a method of digital holographic interferometry for registration and evaluation of parameters of low-temperature plasma at atmospheric pressure in pulsed mode. This type of plasma is currently applied in medicine and biology. Thus, there is a need to control the exposure dose and plasma environment formation regimes. As plasma parameters, it can be considered its electron concentration which can be calculated through the estimation of the refractive index of plasma pulse in relation to unperturbed state. The plasma pulses were activated in Helium. The plasma pulse frequency was 5 kHz and its duration was 750 ns. During an investigation a laboratory set-up for recording holographic images of plasma pulses was developed. Holograms are acquired on a digital camera and a pulsed laser INNOLAS SpitLight Hybrid II at a wavelength of 532 nm with pulse duration of 10 ns is used as a source of coherent radiation. In order to record plasma pulses, the laser, plasma generator and digital camera were strictly synchronized to each other. During the experiment, a series of about 500 holograms were acquired, and the reconstruction of the phase of the object field was calculated. Analysis of the sequence of holograms allowed calculations of phase difference (interferograms) related to the refractive index of low-temperature pulsed plasma in Helium. It is known that lowtemperature plasma leads to low phase delay which forms low phase contrast of the evaluated interferograms. For this purpose, we carried out preliminary experiments with plasma-arc that has similar temporary parameters, however, with a higher phase contrast of the interferograms. The paper presents experimental results obtained by studying the phase contrast of the refractive index of pure Helium, plasma-arc and plasma pulses in Helium. Thus, the effectiveness of both the experimental set-up and the method to evaluate the interferograms related to the refractive index of the plasma pulse was verified. The data obtained can then be used to estimate the electron concentration of the plasma. However, it needs to increase the sensitivity of the method in order to enhance phase contrast. Increase of sensitivity can be done by means of extension of the spectral range, for example, toward to infra-red.

Keywords

digital holographic interferometry, holographic interferometry, nonthermal plasma, plasma electron concentration, experiment automation

Aknowledgements

This study was performed in accordance with the Government Assignment supported by the RF Ministry of education and science, Project No. FZWM-2020-0003 "Investigation of advanced materials and methods for plasma and photo-therapy of oncological and skin diseases and septic complications" for the years 2020–2023.

For citation: Kozhevnikova A.M., Ivankov A.S., Schitz D.V., Alekseenko I.V. Implementation of digital holographic interferometry for pulsed plasma studies. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 832–838 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-832-838

Введение

Низкотемпературная плазма успешно используется для лечения кожных заболеваний [1]. Это связано с тем, что поток такой плазмы содержит заряженные частицы (электроны и ионы), образует радикалы озона, азота и кислорода и создает ультрафиолетовое излучение (в диапазоне 20–300 нм), что позволяет разрушать мембраны патогенных микроорганизмов [2]. Для терапии кожных покровов низкотемпературная плазма применяется в импульсно-периодическом режиме, и существует проблема дозы ее воздействия, которая определяется величиной концентрации электронов. Известно, что для определения электронной концентрации используют зондовые методы, однако для импульсной плазмы использовать такие методы достаточно трудно, а реализация спектральных методов требует дорогостоящего оборудования [3]. С другой стороны, возможно применение более доступных и простых методов, таких как цифровая голографическая интерферометрия [4–6].

В видимом спектральном диапазоне регистрации голографические методы позволяют определять концентрацию электронов от 10¹⁶ см⁻³. Однако возможно увеличение чувствительности таких методов [7, 8], в том числе и за счет расширения динамического диапазона цифровых детекторов, используемых для записи голограмм.

Следует отметить, что исследование нетермальной медицинской плазмы методами цифровой голографической интерферометрии связано с рядом особенностей, которые необходимо учитывать в работе. Во-первых, поток плазмы представляет собой импульс с частотой от 5 кГц, а время генерации одной плазменной струи — 750 нс. Таким образом, все приборы должны быть точно синхронизированы с учетом времени срабатывания каждого из них. Во-вторых, генерация плазмы происходит в газовом потоке, который имеет большую плотность, а возникающие в момент ее генерации тепловые процессы искажают требуемую информацию о плазме и должны быть скомпенсированы.

Используемые методы и подходы

В голографической интерферометрии поток плазмы рассматривается как фазовый (прозрачный) объект, а результирующие интерференционные полосы формируются относительно начальной газовой среды в результате изменения показателя преломления, вносимого плазмой [4]. Также полученные значения показателя преломления плазмы позволяют рассчитать ее электронную концентрацию [9].

Связь разности фаз с показателем преломления описывается соотношением:

$$\Delta \varphi(x, y) = \frac{2\pi}{\lambda} \int_{l_1}^{l_2} [n(x, y, z) - n_0] dz,$$

где λ — длина волны излучения лазера; n_0 — показатель преломления наблюдаемой среды в ее начальном состоянии; n(x, y, z) — конечное распределение показателя преломления. Излучение проходит через среду в направлении *z*, и интегрирование производится вдоль этого направления.

При анализе показателя преломления плазмы исходят из известного соотношения для расчета ее рефракции [7, 8]

$$a - 1 = \sum_{i=1}^{k} \left(A_i + \frac{B_i}{\lambda^2} \right) N_{a_i} - 4.5 \cdot 10^{-14} \lambda^2 N_e,$$

ŀ

где N_e и N_{a_i} — электронная и атомная концентрации; A и B — константы Коши. В работе [8] отмечено, что в спектральном диапазоне, далеком от линий поглощения атомов, показатель преломления атомов слабо зависит от длины волны. В связи с этим используем длину волны 532 нм, и в первом приближении не будем учитывать влияние концентрации атомов на показатель преломления. Таким образом, получим следующее приближение для разности фаз [8]:

$$\Delta \varphi(x, y) = \frac{2\pi}{\lambda} l \Delta n,$$
$$\Delta n = 4.5 \cdot 10^{-14} \lambda^2 N_e,$$

где l — длина пути света в исследуемой среде; Δn — разность показателей преломления.

В [7] показано, что для определения концентрации электронов можно воспользоваться соотношением:

$$N_e = 2, 2 \cdot 10^{13} \frac{\Delta \varphi}{2\pi l \lambda}$$

В настоящей работе формирование плазменной струи осуществлено на выходе стеклянной трубки в гелии под давлением 1,01 атм. Диаметр трубки равен 5 мм. Таким образом, для дальнейших оценок можно исходить из условия, что вблизи трубки газовая струя и плазма имеют приблизительно одинаковые пространственные размеры и цилиндрический профиль, а длина оптического пути излучения поперек газовой струи также составляет 5 мм.

Опишем метод стробоскопической голографической интерферометрии [10], позволяющий проводить наблюдение и анализ плазмы, генерируемой с частотой 5 кГц и длительностью 750 нс. Для регистрации импульсов плазмы разработана система синхронизации и управления устройствами комплекса с использованием программно-аппаратных средств National Instruments. Регистрация изображений осуществлена по схеме записи голограмм сфокусированного изображения. В качестве источника когерентного излучения использован Nd:YAG лазер компании INNOLAS с длиной волны 532 нм, длительностью импульса 10 нс и частотой следования импульсов 50 Гц. Расчет разности фаз между двумя состояниями объекта выполнен методом фурьеанализа [11]. На рис. 1 представлена схема исследовательского комплекса.

При создании схемы регистрации быстропротекающих процессов, особое место занимает разработка системы синхронизации всех оптоэлектронных устройств между собой (цифровой камеры, лазера, блока генерации плазмы) для обеспечения автоматизации эксперимента. При этом необходимо учесть, что каждое электронное устройство комплекса обладает собственным временем отклика и рабочей частотой. Управление устройствами и их синхронизация организована через программно-аппаратную среду LabView, формирующую триггер-сигналы с заданными начальными задержками. Таким образом, по синхронизирующим триггер-сигналам на камеру, импульсный лазер и на плату управления генерацией плазмы осуществлена согласованная работа всех электронных устройств. В проведенном эксперименте частота следования импульсов плазмы составила 5 кГц для плазмы, а частота следования импульсов лазера и частота регистрации камеры — 50 Гц. Следовательно, зарегистрирован каждый сотый импульс плазмы. Для длительности плазменного импульса 750 нс и импульса лазера в 10 нс время экспозиции камеры не имело принципиального значения, так как регистрация информации на матрицу камеры происходит за время генерации лазерного импульса.

Основные результаты и обсуждение

В работе представлены результаты регистрации плазмы двух видов: плазменных дуги и струи, которые сгенерированы в импульсном режиме. Отметим, что сначала необходимо выполнить верификацию метода и разработанной техники на предмет получения достоверных данных о показателе преломления по реконструированным фазовым распределениям. Проверка метода включала следующие процедуры. Проведение регистрации и реконструкции фазы проходящей световой волны через камеру наблюдения, содержащую воздух (ϕ_0), а затем и при включенном потоке гелия (ϕ_{0+he}),



Рис. 1. Комплекс цифровой голографической интерферометрии для исследования потока плазмы в импульсном режиме генерации: 1 — импульсный лазер; 2 — ПЗС-камера; 3 — генератор плазмы; 4 — баллон с газом; 5 — коллиматор; 6, 7 — светоделители; 8–11 — зеркала; 12, 13 — собирающие линзы; 14 — струя холодной плазмы; 15 — система синхронизации; 16 — компьютер

Fig. 1. Digital holographic interferometry set-up to investigate a plasma flow in the pulsed generation mode. *1* — pulse laser; *2* — CCD-camera; *3* — pulse-plasma generator; *4* — helium container; *5* — collimator; *6*, *7* — beamsplitter; *8–11* — mirrors; *12, 13* — lenses; *14* — plasma jet; *15* — synchronization unit; *16* — PC

где ϕ_{he} — фазовые изменения, связанные с наличием потока гелия. Полученная разность фаз ($\phi_{0+he} - \phi_0$) содержала информацию о разности показателей преломления двух газов. Зная их табличные значения, выполнена оценка достоверности определения показателя преломления с помощью предложенной системы регистрации. На рис. 2 показана развертка разности фаз при прохождении зондирующего излучения через поток гелия. В результате получено, что для воздуха показатель преломления $n_a = 1,000292$, для гелия — $n_{he} = 1,0000350$. Разность показателей преломления составляет 2,57·10⁻⁴, а разность фаз — 15,17 рад или 2,4 интерференционных полосы для длины волны 532 нм и толщины среды 5 мм.

Заметим, что относительная разность фаз для нижних точек поверхности фаз и точек за пределами трубки лежит в пределах 15 рад, что соответствует оценкам. Таким образом, можно сделать вывод, что измерительный комплекс регистрации голограмм фазовых объектов и метод их оценки, позволяют получить достоверные и надежные результаты. Далее выполним экспериментальную работу по регистрации импульсов плазмы (рис. 3), а также анализ полученных интерферограмм, связанных с изменением ее показателя преломления.

Низкотемпературная плазма обладает небольшой концентрацией электронов, и ее вклад в фазовое распределение на голограммах невелик. Для верификации



Рис. 2. Фазовая развертка интерферограммы струи гелия *Fig.* 2. Phase unwrapped distribution of the helium jet



Рис. 3. Изображения плазмы, исследуемой в работе: плазменные дуга (*a*) и струя в потоке газа гелия (*b*) *Fig. 3.* Images of plasma: plasma arc (*a*), plasma jet in the helium flow (*b*)

метода в аспекте возможности регистрации фазового набега, связанного с существованием плазмы, проведем эксперимент с регистрацией плазменной дуги, которая обладает большей плотностью и может существовать без подачи газа. Отсутствие рабочего газа позволило сократить количество источников возмущений, которые затрудняют регистрацию фазовых изменений, связанных исключительно с наличием плазмы в зоне наблюдения. При проведении эксперимента по регистрации плазменной дуги замечено, что в области существования плазмы возникают температурные возмущения, связанные с увеличением температуры среды (рис. 4, а). Для вычисления изменения показателя преломления плазмы выполним дополнительный эксперимент, в котором комплекс работает в асинхронизированном режиме. Это было необходимо, чтобы произвести вычисление разности фаз голограмм с температурной наводкой без плазмы и с плазмой. При сравнении полученных голограмм видно, где распределение разности фаз отображает изменение показателя преломления, связанного исключительно с существованием плазмы (рис. 4, *b*, *c*). Зафиксировано, что при возникновении плазменной дуги, появляются возмущения внешней среды, которые предположительно можно охарактеризовать как «ударную волну» от короткого разряда.

Результаты регистрации плазменной дуги показали возможность использования предложенной методики и комплекса для регистрации плазмы. Выполним регистрацию нетермальной (медицинской) плазмы, которая обладает меньшей плотностью и существует в потоке газа гелия. Эксперимент проведен со следующими техническими параметрами: камера и лазер имеют частоту 50 Гц, частота импульсов плазмы 5 кГц, длительность существования плазмы 750 нс. Отметим, что эксперимент осложнен тем, что поток газа, в котором существует плазма, не может быть стабилизирован и изменяет направление потока в зависимости от внешних условий, так как, в соответствии с исходными требованиями, исследование плазмы должно было проводиться при нормальных условиях, т. е. при атмосферном давлении.

Эксперимент осуществлен в следующей последовательности: по внешнему триггер-сигналу направлены сигналы на все электронные элементы с параметрами, обеспечивающими синхронизированную работу комплекса; далее начиналась подача газа и произведен «поджиг» плазмы; после появления плазменного факела была запущена регистрация данных на камере. Через несколько секунд прекращалась подача напряжения на плазму, перекрывалась подача газа, после чего заканчивалась регистрация данных. Таким образом, обеспечивалась регистрация плазменной струи, потока газа без плазмы, с параметрами, близкими к параметрам газа во время существования плазмы, а также регистрация среды без объекта, когда подача газа прекращена.

На рис. 5, *а* представлена интерференционная картина зарегистрированного потока газа с плазмой ($\varphi_{0+he+plasma}$) относительно среды без объекта (φ_0). Заметим, что поток газа дает больший вклад в распределение разности фаз, чем плазма, так как обладает большей плотностью. Для выделения данных о фазовом распределении, связанном с существованием плазмы, произведем вычисления двух интерферограмм ($\varphi_{0+he+plasma} - \varphi_{0+he}$), где на первой зарегистрирован поток газа с плазмой $\varphi_{0+he+plasma}$, а на второй — поток газа после выключения плазмы φ_{0+he} . Результаты вычисления в монохроматическом и цветном представлениях показаны на рис. 5, *b*, *c*.

На представленных изображениях видно, что конусообразный профиль, связанный с изменением показателя преломления в среде, совпадает с формой профиля плазмы. Можно заключить, что предложенная методика регистрации импульсной плазмы подходит для регистрации таких процессов и, в дальнейшем, должна позволить проводить оценку концентрации электронов в плазме через определение ее показателя преломления.



Рис. 4. Интерферограммы фазовых изменений, связанных с наличием плазменной дуги относительно неподвижного воздуха (*a*) и воздуха между импульсами дуги для монохромного (*b*) и цветного (*c*) представлений

Fig. 4. Interferograms of plasma arc in relation to the air (a), to the air and between the plasma pulses (monochrome image) (b), to the air and between the plasma pulses (color image) (c)



Рис. 5. Интерферограммы фазовых изменений, связанных с наличием плазменной струи в потоке газа относительно неподвижного воздуха (*a*), и потока гелия между импульсами плазмы при монохромном (*b*) и цветном (*c*) представлениях
 Fig. 5. Phase difference distribution of plasma jet in the gas flow in relation: to the stationary air (*a*), to the helium flow and between plasma pulses (monochrome image) (*b*), to the helium flow and between plasma pulses (color image) (*c*)

Заключение

Разработана методика регистрации фазовых изменений, связанных с показателем преломления плазмы, которая генерируется в импульсно-периодическом режиме при атмосферном давлении. В результате проведенных экспериментов получены сведения о фазовом контрасте показателя преломления чистого гелия, плазменной дуги и импульсов плазмы, которые генерируются в потоке рабочего газа — гелия. Доказана работоспособность разработанного эксперименталь-

Литература

- Weltmann K.D., Kindel E., von Woedtke T., Hähnel M., Stieber M., Brandenburg R. Atmospheric-pressure plasma sources: Prospective tools for plasma medicine // Pure and Applied Chemistry. 2010. V. 82. N 6. P. 1223–1237. https://doi.org/10.1351/PAC-CON-09-10-35
- Sosnin E.A., Stoffels E., Erofeev M.V., Kieft I.E., Kunts S.E. The effects of UV irradiation and gas plasma treatment on living mammalian cells and bacteria: a comparative approach // IEEE Transactions on Plasma Science. 2004. V. 32. N 4. P. 1544–1550. https://doi.org/10.1109/TPS.2004.833401
- Zhou Q., Cheng C., Meng Y. Electron density and temperature measurement by stark broadening in a cold argon arc-plasma jet at atmospheric pressure // Plasma Science and Technology. 2009. V. 11. N 5. P. 560–563. https://doi.org/10.1088/1009-0630/11/5/09
- Vest C.M. Holographic Interferometry. John Wiley&Sons, 1979. P. 387–396.
- Schnars U., Juptner W. Digital holography. Springer-Verlag and Heidelberg GmbH & Company K, 2005, 164 p. https://doi. org/10.1007/b138284
- Kreis T. Handbook of Holographic Interferometry: Optical and Digital Methods. John Wiley & Sons, 2006. P. 379.
- Ostrovskaya G.V., Ostrovsky Y.I. IV Holographic methods of plasma diagnostics // Progress in Optics. 1985. V. 22. P. 197–270. https://doi. org/10.1016/S0079-6638(08)70150-1
- Зайдель А.Н. Применение голографической интерферометрии для диагностики плазмы // Успехи физических наук. 1986. Т. 149. № 1. С. 105–138. https://doi.org/10.3367/UFNr.0149.198605d.0105
- Khanzadeh M., Jamal F., Shariat M. Experimental investigation of gas flow rate and electric field effect on refractive index and electron density distribution of cold atmospheric pressure-plasma by optical method, Moiré deflectometry // Physics of Plasmas. 2018. V. 25. N 4. P. 043516. https://doi.org/10.1063/1.5018054

ного комплекса и метода получения интерферограмм, основанного на определении показателя преломления в импульсе плазмы. Полученные результаты могут быть использованы для оценки электронной концентрации плазмы. Стоит отметить необходимость увеличения чувствительности метода с целью повышения фазового контраста за счет расширения спектрального диапазона лазерного излучения при регистрации голограмм путем перехода в другую спектральную область, например инфракрасную.

References

- Weltmann K.D., Kindel E., von Woedtke T., Hähnel M., Stieber M., Brandenburg R. Atmospheric-pressure plasma sources: Prospective tools for plasma medicine. *Pure and Applied Chemistry*, 2010, vol. 82, no. 6, pp. 1223–1237. https://doi.org/10.1351/PAC-CON-09-10-35
- Sosnin E.A., Stoffels E., Erofeev M.V., Kieft I.E., Kunts S.E. The effects of UV irradiation and gas plasma treatment on living mammalian cells and bacteria: a comparative approach. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 2004, vol. 32, no. 4, pp. 1544–1550. https://doi.org/10.1109/TPS.2004.833401
- Zhou Q., Cheng C., Meng Y. Electron density and temperature measurement by stark broadening in a cold argon arc-plasma jet at atmospheric pressure. *Plasma Science and Technology*, 2009, vol. 11, no. 5, pp. 560–563. https://doi.org/10.1088/1009-0630/11/5/09
- Vest C.M. Holographic Interferometry. John Wiley&Sons, 1979, pp. 387–396.
- Schnars U., Juptner W. Digital Holography. Springer-Verlag and Heidelberg GmbH & Company K, 2005, 164 p. https://doi. org/10.1007/b138284
- 6. Kreis T. Handbook of holographic interferometry: optical and digital methods. John Wiley & Sons, 2006, pp. 379.
- Ostrovskaya G.V., Ostrovsky Y.I. IV Holographic methods of plasma diagnostics. *Progress in Optics*, 1985, vol. 22, pp. 197–270. https:// doi.org/10.1016/S0079-6638(08)70150-1
- Zaidel' A.N. Application of holographic interferometry for plasma diagnostics. *Soviet Physics — Uspekhi*, 1986, vol. 29, no. 5, pp. 447– 466. https://doi.org/10.1070/PU1986v029n05ABEH003381
- Khanzadeh M., Jamal F., Shariat M. Experimental investigation of gas flow rate and electric field effect on refractive index and electron density distribution of cold atmospheric pressure-plasma by optical method, Moiré deflectometry. *Physics of Plasmas*, 2018, vol. 25, no. 4, pp. 043516. https://doi.org/10.1063/1.5018054

- Гусев М.Е., Алексеенко И.В. Методы цифровой стробоголографической интерферометрии в исследованиях механических колебаний // Известия высших учебных заведений. Физика. 2015. Т. 58. № 11-3. С. 10–17.
- Takeda M., Ina H., Kobayashi S. Fourier-transform method of fringepattern analysis for computer-based topography and interferometry // Journal of the Optical Society of America. 1982. V. 72. N 1. P. 156– 160. https://doi.org/10.1364/JOSA.72.000156

Авторы

Кожевникова Анастасия Михайловна — младший научный сотрудник, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, 557284792900, https://orcid.org/0000-0002-6642-5226, AKozhevnikova1@kantiana.ru Иванков Антон Сергеевич — младший научный сотрудник, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, 557208472768, https:// orcid.org/0000-0002-1689-1974, Alvankov@kantiana.ru

Шитц Дмитрий Владимирович — кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, 557415437400, https://orcid.org/0000-0002-0477-8456, DSCHitz@kantiana.ru

Алексеенко Игорь Вячеславович — кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, 557207816753, https://orcid.org/0000-0001-8463-3304, IAlekseenko@kantiana.ru

Статья поступила в редакцию 07.07.2022 Одобрена после рецензирования 26.08.2022 Принята к печати 30.09.2022 Received 07.07.2022 Approved after reviewing 26.08.2022 Accepted 30.09.2022



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial»

- Gusev M.E., Alexeenko I.V. Methods of digital stroboholographic interferometry in investigation of mechanical vibrations. *Izvestija vysshih uchebnyh zavedenij. Fizika*, 2015, vol. 58, no. 11-3, pp. 10– 17. (in Russian)
- Takeda M., Ina H., Kobayashi S. Fourier-transform method of fringepattern analysis for computer-based topography and interferometry. *Journal of the Optical Society of America*, 1982, vol. 72, no. 1, pp. 156–160. https://doi.org/10.1364/JOSA.72.000156

Authors

Anastasiia M. Kozhevnikova — Junior Researcher, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, s 57284792900, https://orcid.org/0000-0002-6642-5226, AKozhevnikoval@kantiana.ru

Anton S. Ivankov — Junior Researcher, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, c 57208472768, https://orcid.org/0000-0002-1689-1974, Alvankov@kantiana.ru

Dmitry V. Schitz — PhD (Physics & Mathematics), Head of Laboratory, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, S 57415437400, https://orcid.org/0000-0002-0477-8456, DSCHitz@kantiana.ru

Igor V. Alekseenko — PhD (Physics & Mathematics), Head of Laboratory, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, S 57207816753, https://orcid.org/0000-0001-8463-3304, IAlekseenko@kantiana.ru

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2022, том 22, № 5 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no 5 Ι/ΙΤΜΟ

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКІ

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-839-845 УДК 681.784.8

Применение методов биорадиофотоники для обработки биоэлектрических сигналов

Кирилл Вадимович Зайченко¹, Борис Симхович Гуревич^{2⊠}, Сергей Александрович Рогов³, Анна Алексеевна Кордюкова⁴, Михаил Сергеевич Кузьмин⁵

1.2.4 Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, 198095, Российская Федерация 3.5 Санкт-Петербургский государственный университет телекоммуникаций им. проф. М.А. Бонч-Бруевича, Санкт-Петербург, 193232, Российская Федерация

¹ kvz235@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-2881-4386

² bgurevich48@gmail.com[™], https://orcid.org/0000-0002-7520-7087

³ sarogov@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-4251-1197

⁴ annygm00@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-6099-4276

⁵ ranlitik@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-6044-2423

Аннотация

Предмет исследования. В работе рассмотрено применение современных и перспективных методов биорадиофотоники для обработки биоэлектрических сигналов на базе оптических и акустооптических устройств. Основные трудности применения этих методов связаны с тем, что исследуемые сигналы являются низкочастотными, и требуется разработка специальных мер адаптации рассматриваемых устройств для их обработки. Метод. Предложено вводить информационный биоэлектрический сигнал в акустооптическую систему обработки с временным интегрированием, используя модуляцию высокочастотной несущей с линейной частотной модуляцией низкочастотным информационным сигналом. Такая система должна обеспечить реализацию операции свертки с помощью ячеек Брэгга, которые ориентированы навстречу друг к другу. Предложенный подход обеспечил возможность вычисления спектра мощности биоэлектрического сигнала и его вейвлетпреобразования, причем наличие несущей с линейной частотной модуляцией обязательно для обоих видов обработки. Впервые использован метод предварительного сжатия биоэлектрического сигнала для его переноса в высокочастотную область. Это позволило вводить низкочастотный информационный сигнал в высокочастотную акустооптическую систему обработки с пространственным интегрированием. В простом акустооптическом корреляторе с опорным транспарантом на выходе фотоприемника сформирована огибающая корреляционной функции. Применен набор опорных транспарантов в многоканальном корреляторе для реализации вейвлетанализа протяженного биоэлектрического сигнала с использованием материнского вейвлета. Предварительная оптическая обработка исследуемого сигнала осуществлена на жидкокристаллических матрицах. Основные результаты. Выполнен анализ обработки электрокардиосигналов, снятых с подопытных животных (крыс) с использованием жидкокристаллической матрицы для ввода этих сигналов в оптическую систему. Показано, что спектральная и вейвлет-обработка могут быть реализованы без использования модуляции высокочастотной несущей низкочастотным информационным сигналом. Практическая значимость. Использование полученных результатов позволит создать новое семейство устройств вейвлет-обработки биоэлектрических сигналов, реализуемой в реальном масштабе времени, что внесет важный вклад в совершенствование диагностики заболеваний сердечно-сосудистой системы, головного мозга и центральной нервной системы.

Ключевые слова

биоэлектрические сигналы, оптическая обработка, акустооптические спектроанализаторы, конвольверы и корреляторы, жидкокристаллические матрицы, сжатие информационных сигналов

Благодарности

Работа поддержана Минобрнауки Российской Федерации, госзадание № 075-00761-22-00, тема № FZZM-2022-0011.

Ссылка для цитирования: Зайченко К.В., Гуревич Б.С., Рогов С.А., Кордюкова А.А., Кузьмин М.С. Применение методов биорадиофотоники для обработки биоэлектрических сигналов // Научнотехнический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 839–845. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-839-845

© Зайченко К.В., Гуревич Б.С., Рогов С.А., Кордюкова А.А., Кузьмин М.С., 2022

Application of bioradiophotonics methods for the processing of bioelectric signals Kirill V. Zaichenko¹, Boris S. Gurevich^{2⊠}, Sergey A. Rogov³, Anna A. Kordyukova⁴, Mikhail S. Kuzmin⁵

^{1,2,4} Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, 198095, Russian Federation,

^{3,5} The Bonch-Bruevich Saint Petersburg State University of Telecommunications, Saint Petersburg, 193232, Russian Federation

² bgurevich48@gmail.com^{\Box}, https://orcid.org/0000-0002-7520-7087

- ⁴ annygm00@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-6099-4276
- ⁵ ranlitik@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-6044-2423

Abstract

The application of modern and perspective bioradiophotonics methods on the basis of optical and acousto-optic devices for the processing of bioelectric signals (BES) have been considered. The basic application difficulties of these methods are connected with the fact that the studied signals are of low frequencies, and development of special actions are required for the processing devices adapting. It has been proposed to introduce into acousto-optic processing system with time integration the bioelectric signals using method of high frequency carrier with linear frequency modulation which is modulated by low frequency signal. The system configuration has to provide the realization of convolution procedure; hence, the used Bragg cells must be oriented oppositely to each other. The performed analysis has shown that it is possible to realize both signal power spectrum calculation and its wavelet transform; the presence of carrier is obligatory for both kinds of processing. Also, the method of the preliminary BES compression has been proposed for its transmission into the high frequency area. In this case, the possibility occurs to introduce the signal into the acoustooptic processing system with spatial integration. In the simple acousto-optic correlator with the reference transparency the envelope of the correlation function is formed depending on time. Using the set of the reference transparencies in the multichannel correlator, it is possible to realize the prolonged BES wavelet analysis using the mother wavelet. The optical preliminary BES processing can be also performed using liquid crystal arrays. The analysis of the processing of electrocardiac signals obtained from the experimental animals (rats) has been listed using the liquid crystal array for the signal introduction into optical processing system. It has been shown that both spectral and wavelet processing can be realized in this case without using of the high frequency carrier by the low frequency signal. The use of the obtained results will make it possible to create a new family of devices for wavelet processing of bioelectrical signals implemented in real time which will make an important contribution to improving the diagnosis of diseases of the cardiovascular system, the cortex, and the central nervous system.

Keywords

bioelectric signals, optical processing, liquid crystal arrays, acousto-optic spectrum analyzers, convolvers and correlators, liquid crystal arrays, information signals compression

Aknowledgements

The work has been supported by Education and Science Ministry of the Russian Federation, State task No. 075-00761-22-00, project No. FZZM-2022-0011.

For citation: Zaichenko K.V., Gurevich B.S., Rogov S.A., Kordyukova A.A., Kuzmin M.S. Application of bioradiophotonics methods for the processing of bioelectric signals. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 839–845 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-839-845

Введение

Выявление новых диагностически значимых маркеров и признаков различных патологий живых систем — одна из основных задач как для медиков, так и для технических специалистов, разрабатывающих системы извлечения информации из биоэлектрических сигналов (БЭС). В частности обработка БЭС должна обеспечивать надежную диагностику сердечно-сосудистых заболеваний, а также патологий головного мозга и центральной нервной системы. Эта задача может быть решена на основе использования инструментальной электрофизиологии сверхвысокого разрешения (СВР) — нового авторского метода изучения электрической активности клеток, тканей и органов живых систем [1]. Метод основан на извлечении максимально возможного объема полезной информации о состоянии исследуемого объекта и включает в себя две основные составные части СВР: метод электрокардиографии (ЭКГ), обеспечивающий изучение тонкой структуры электрокардиосигналов (ЭКС) [2], а также метод электроэнцефалографии для детальных исследований электроэнцефалографических сигналов [3]. Одна из главных идей метода инструментальной электрофизиологии СВР и его составных частей заключается в расширении амплитудного и частотного диапазонов съема, регистрации и обработки БЭС СВР за счет применения новейших информационных технологий и самой современной радиоэлектронной элементной базы. Данные методы предложены и разрабатываются одной из ведущих научных школ Российской Федерации (РФ) «Радиоэлектронные и информационные средства оценки физиологических параметров живых систем» (РЭИС ЖС) во главе с профессором, доктором технических наук К.В. Зайченко. Советом по грантам Президента Российской Федерации коллектив научной школы

¹ kvz235@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-2881-4386

³ sarogov@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-4251-1197

РЭИС ЖС был признан победителем конкурса ведущих научных школ РФ — Свидетельство НШ-3455.2012.8. В научную школу входят ученые различных научных организаций и университетов РФ, а базой для ее работы является Институт аналитического приборостроения РАН.

К современным и перспективным методам фотоники обработки БЭС, для которых сегодня применяется термин «биорадиофотоника», следует отнести такие методы как оптическую и акустооптическую обработки этих сигналов. Их основные достоинства — простота и малые габариты реализующих устройств, низкое энергопотребление и высокое быстродействие. При обработке низкочастотных (НЧ) сигналов, одни из которых — БЭС, быстродействия цифрового процессора достаточно. Однако в некоторых специфических случаях, как, например, когда необходимо обойтись без электронно-вычислительных машин для уменьшения веса и габаритов устройства спектральной обработки БЭС [4], актуально применение оптических и акустооптических средств. В ранних работах, посвященных оптической обработке НЧ сигналов, предложено использовать устройства ввода в виде записи сигналов на фотопленке или на трубке «Титус» [5]. Также рекомендованы акустооптические устройства с пространственным и временным интегрированием, в которых НЧ сигнал модулирует высокочастотную (ВЧ) несущую [6].

Важнейший источник информации о свойствах сигнала — его вейвлет-преобразование, в том числе реализуемое с помощью оптического процессора. Оно полезно для исследования нестационарности сигнала, определения его специфических особенностей и характерных элементов, а также для поиска их локализации [7]. Основой системы оптической обработки в этом случае обычно является оптический коррелятор, снабженный набором вейвлет-фильтров. Процедуры оптической обработки в таких процессорах обычно предусматривают либо голографическую запись, преимущественно методами динамической голографии [8], либо регистрацию изображения с помощью различных пространственных модуляторов света [9, 10]. Эти виды процессоров обеспечивают получение данных о частотно-временном распределении изучаемого сигнала. Благодаря этому достигается высокоточная локализация неоднородностей и характерных элементов исследуемого сигнала.

Для обеспечения спектральной и вейвлет-обработки БЭС, необходимо добиться возможности разрешения очень низких частот, характерных для БЭС. Как ЭКС, так и электроэнцефалографические сигналы даже для режима СВР имеют полосу частот, расположенную между несколькими герцами и несколькими килогерцами. Это обстоятельство создает дополнительное требование к системе обработки и ряд трудностей, поскольку акустооптические устройства работают с сигналами, частота которых составляет десятки и сотни мегагерц. Следовательно: акустооптический прибор должен осуществлять спектральную и вейвлет-обработку БЭС; частотные диапазоны исследуемых информационных сигналов и акустооптических устройств должны быть согласованы.

Обработка БЭС акустооптическими устройствами с временным интегрированием

Обозначенные задачи могут быть решены с использованием акустооптических процессоров с временны́м интегрированием. Принцип временно́го интегрирования для акустооптических устройств спектрального анализа предложен в работах [11, 12]. Схема простейшего спектроанализатора с временным интегрированием показан на рис. 1, где L — полуширина апертуры входного светового пучка, F — фокусное расстояние линз, а $s_{\rm вых}(t)$ — выходной сигнал, снимаемый с фотодетектора.

Принципы работы данного устройства и конвольвера Монтгомери [13] идентичны. В случае, если предложенная оптическая схема применяется для спектрального анализа БЭС [14], то в ней один из сигналов $s_1(t)$ представляет собой колебание с линейной частотной модуляцией (ЛЧМ), модулированное по амплитуде анализируемым информационным сигналом $s_a(t)$, а другой сигнал $s_2(t)$ — ЛЧМ-колебание с прямоугольной огибающей.

Оптическая схема включает в себя две одинаковые встречно ориентированные ячейки Брэгга. Две линзы обеспечивают оптическое преобразование Фурье по двум координатам, а режекторный фильтр (бленда) вырезает нулевой дифракционный порядок. Многоэлементный линейный фотодетектор обеспечивает накопление заряда и формирует выходной сигнал. Выполненный анализ, на основе рис. 1, показал [14], что если принять время накопления заряда на фотодетекторе равным длительности периода модуляции ЛЧМ-колебания, то накопленные заряды будут пропорциональны спектру мощности анализируемого сигнала. При этом время накопления в современных линейках или матрицах фотодетекторов достигло единиц секунд. Разрешимый частотный интервал для акустооптических процессоров такого типа определяется временем накопления фотоприемника, поэтому он может составить величину порядка десятков-сотен герц. Отметим, что общая разрешающая способность такого устройства не превышает ее значения для акустооптических спектроанализаторов с пространственным интегрированием, поэтому полоса анализируемых частот может оказаться крайне невысокой и всего на 2-3 порядка превышать разрешимый частотный интервал (доли





герц — единицы герц). Таких значений может быть достаточно для анализа стандартных БЭС, исследуемых в ЭКГ и электроэнцефалографии.

В схеме конвольвера Монтгомери (рис. 1), согласно [15], на ячейках фотоприемника формируется заряд, который пропорционален энергии падающего света за время засветки и ограничивается допустимым временем интегрирования линейки. Расчет энергии [6] имеет вид:

$$E(x) = \frac{1}{4} \int_{T} \left[\operatorname{Re}\tilde{s}_{1}^{*} \left(\frac{x}{v} - t \right) \right]^{2} dt + \frac{1}{4} \int_{T} \left[\operatorname{Re}\tilde{s}_{2} \left(t + \frac{x}{v} - T_{a} \right) \right]^{2} dt + \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left\{ \int_{T} \tilde{s}_{1}^{*} \left(\frac{x}{v} - t \right) \tilde{s}_{2} \left(t + \frac{x}{v} - T_{a} \right) dt \right\},$$
(1)

где \tilde{s} — комплексный сигнал; x и v — координата и скорость звука в среде звукопровода вдоль ячеек Брэгга и фотодетектора; t — текущее время; T_a — временна́я апертура ячейки Брэгга; знак (*) — комплексное со-пряжение. Первые два члена правой части уравнения (1) — постоянные величины при достаточно большом времени интегрирования T, а третий член представляет собой свертку функций $s_1(t)$ и $s_2(t)$.

Приведенные выше соображения позволили впервые использовать схему конвольвера с временным интегрированием (конвольвер Монтгомери) для реализации вейвлет-преобразования информационного сигнала $s_1(t)$, состоящего в свертке этого сигнала с его материнским вейвлетом $s_2(t)$ [15].

В конвольвере Монтгомери [13] предусмотрен ввод радиочастотных сигналов $s_1(t)$ в соответствующие две ячейки Брэгга, для формирования их свертки в соответствии с формулой (1). Это дало возможность [15] предложить авторскую реализацию вейвлет-преобразования биоэлектрического сигнала, заключающуюся в амплитудной модуляции двух радиочастотных несущих в ячейках Брэгга (рис. 1) информационным БЭС и его материнским вейвлетом.

В этом случае выходной сигнал акустооптического вейвлет-процессора — конвольвера с временным интегрированием может быть представлен в виде [15]:

$$Q(x) = \operatorname{Re}\left\{A \exp(i2K_0 x) \int_{L/\nu}^{L/\nu+T} s_1\left(t + \frac{x}{\nu}\right) s_2\left(\frac{x}{\nu} - t\right) dt\right\} + C,$$

где $K_0 = \Omega_0 / v$, Ω_0 — начальная частота сигнала ЛЧМнесущей; L — размер линейной апертуры акустооптической ячейки; C — пьедестал с переменной амплитудой.

Следовательно, при использовании несущего радиочастотного ЛЧМ-сигнала накопленный заряд на фотоприемнике (ПЗС-линейке) несет информацию о вейвлет-преобразовании сигнала $s_1(t)$ по материнскому вейвлету $s_2(t)$ с параметром времени накопления T. Таким образом, существует возможность на одном акустооптическом процессоре с временным интегрированием на базе конвольвера Монтгомери при подаче на его входы различных соответствующих сигналов производить вычисление не только спектра мощности информационного БЭС $s_1(t)$, но и его вейвлет-преобразования.

Обработка БЭС акустооптическими устройствами с пространственным интегрированием

Более простыми являются акустооптические корреляторы и анализаторы спектра с пространственным интегрированием. Их недостаток — невозможность обработки сигналов, длительность которых превышает временную апертуру ячейки Брэгга — не более нескольких десятков микросекунд. Эту трудность можно обойти, подавая в систему НЧ сигнал, сжатый во времени [16, 17]. При этом полоса сигнала расширится в число раз, равное коэффициенту сжатия, но, поскольку акустооптические устройства имеют широкую полосу пропускания, это вполне допустимо, даже если сжатым сигналом будет модулироваться ВЧ несущая. Сжатие БЭС можно осуществлять, считывая его из буферного запоминающего устройства со скоростью, большей, чем скорость записи. Например, для поиска фрагмента НЧ сигнала длительностью 10 мс в протяженном сигнале с полосой 2 кГц, можно сжать его в 1000 раз. Тогда длительность фрагмента составит 10 мкс, и он поместится на опорном транспаранте коррелятора с длиной, соответствующей временной апертуре ячейки Брэгга. Полоса сжатого сигнала составит 2 МГц. Аналого-цифровой и цифро-аналоговый преобразователи, а также устройство буферной памяти при таких параметрах сигналов можно легко реализовать. В простом акустооптическом корреляторе с опорным транспарантом на выходе фотоприемника при этом формируется огибающая корреляционной функции. Используя набор опорных транспарантов в многоканальном корреляторе, можно реализовать вейвлет-анализ протяженного БЭС с использованием материнского вейвлета, зависящего от двух параметров [12].

Использование жидкокристаллических матриц для обработки БЭС

В настоящее время одно из перспективных оптических устройств ввода информации в систему обработки — жидкокристаллические (ЖК) матрицы с электронным управлением [18]. Рассмотрим возможности использования таких матриц при вводе БЭС в систему обработки [19]. Число отсчетов в реализации НЧ сигналов ЭКГ СВР зачастую невелико, так как вся информация о сигнале, длительностью 1 с с полосой 2 кГц, содержится в 4000 отсчетов. ЖК матрицы с таким числом пикселов в строке существуют. Используя несколько строк матрицы, можно вводить в оптическую систему несколько сигналов для их параллельной обработки. Для сигналов с большим числом отсчетов (до нескольких миллионов) можно применить их растровый ввод в ЖК матрицу, а более длинные сигналы — обрабатывать отдельными фрагментами. В связи с тем, что время на оптическую обработку и регистрацию сигналов на выходе системы гораздо меньше длительности БЭС, пропуски при вводе сигналов из-за обработки предыдущих фрагментов будут малы. Кроме того, при использовании двух поочередно работающих систем, пропусков в обработке можно полностью избежать.

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2022, том 22, № 5 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no 5

На основе оптических устройств обработки с вводом сигналов ЖК матрицами можно создать одноканальные и многоканальные анализаторы спектра, корреляторы и конвольверы сигналов с пространственным интегрированием, в том числе и для обработки протяженных сигналов [20, 21]. В этих устройствах не требуется использовать модуляцию ВЧ несущей НЧ сигналом. Таким образом, применение ЖК матриц с электронным управлением упрощает устройство ввода и является перспективным для обработки БЭС в оптических системах.

Первые экспериментальные исследования возможности оптической обработки БЭС проведены авторами настоящей работы на действующем макете фурье-процессора с ЖК матрицей от видеопроектора [22]. Выборка в 1024 отсчета из ЭКС СВР, снятого в Институте экспериментальной медицины Центра В. А. Алмазова с подопытной крысы [4], вводилась в виде пространственного сигнала в строки ЖК матрицы. Длина сигнала соответствовала длине строки матрицы, а ширина занимала несколько рядом расположенных строк с целью увеличения мощности выходного сигнала процессора. Для ввода биполярных сигналов к ЭКС СВР добавлен сигнал подставки (постоянная составляющая). Пример изображения на мониторе вводимого матрицей входного сигнала оптической системы показан на рис. 2. Темное поле соответствует незанятой сигналом части матрицы.

Выходной сигнал в фокальной плоскости фурьеобъектива, соответствующий энергетическому спектру суммы ЭКГ сигнала и подставки, зарегистрирован с помощью ВЭБ-камеры и выведен на монитор. Одновременно на втором мониторе можно было зарегистрировать выбранное сечение спектра. На рис. 3 приведены выходной сигнал f оптической системы (энергетический спектр) и его сечение по оси частот для низкочастотной составляющей ЭКС СВР (из НЧ канала). Частоты выше примерно 100 Гц отфильтрованы в ЭКС СВР до подачи сигнала в оптическую систему. В спектре хорошо видны гармоники низкочастотных выбросов ЭКС СВР. Ноль на частотной оси (рис. 3, a) совпадает с центром узкого спектра постоянной составляющей, максимум которого ограничен фотопри-





Fig. 2. Input electrocardiac signal image observed in the monitor with the pedestal of the constant component introduced into the optical system by liquid crystal array; x — coordinate along the image

емником. Подчеркнем, что на рис. 2 изображен входной сигнал, соответствующий спектру, показанному на рис. 3, *а*.

На рис. 4 показаны входной и выходной сигналы оптической системы, а также сечение выходного сигнала по оси частот при обработке ВЧ составляющей ЭКС СВР (из ВЧ канала).

Частоты ниже примерно 100 Гц предварительно отфильтрованы в ЭКС СВР. Для удобства регистрации в ВЧ области спектр в данном случае был сжат в два раза по частотной оси. Зная частоту гармоник сигнала в НЧ спектре, можно определить масштаб по частотной оси и границы шумоподобного ВЧ спектра в данной реализации ЭКС СВР.

Сравнение выходных сигналов оптического процессора со спектрами, полученными на электронно-вычислительных машинах, показало их хорошее совпадение, что свидетельствует о перспективности применения оптического фурье-процессора с ЖК матрицей на входе для решения задач обработки биоэлектрических сигналов.



Рис. 3. Выходной сигнал оптической системы (энергетический спектр с фурье-процессора) при обработке низкочастотной составляющей электрокардиосигнала сверхвысокого разрешения (*a*) и его сечение по оси частот (*b*)

Fig. 3. Output signal of the optical system (power spectrum) while the processing of ultra-high resolution electrocardiac signal low frequency component (*a*) and its cross section along the frequency axis (*b*)



Рис. 4. Входной (*a*) и выходной (*b*) сигналы оптической системы; сечение выходного сигнала по оси частот (*c*) при обработке высокочастотной составляющей электрокардиосигнала сверхвысокого разрешения

Fig. 4. Input (*a*) and output (*b*) signals of optical system; cross section of the output signal along the frequency axis (*c*) while the processing of ultra-high resolution electrocardiac signal high frequency component

Заключение

Применение рассмотренных методов оптической и акустооптической обработки биоэлектрических сигналов, а также их совместное использование в раз-

Литература

- 1. Зайченко К.В., Гуревич Б.С. Спектральная обработка биоэлектрических сигналов // Медицинская техника. 2021. № 1. С. 12–14.
- Гуляев Ю.В., Зайченко К.В. Электрокардиография сверхвысокого разрешения. Задачи. Проблемы. Перспективы // Биомедицинская радиоэлектроника. 2013. № 9. С. 5–15.
- Зайченко К.В., Гуревич Б.С. Электроэнцефалография в расширенных амплитудном и частотном диапазонах // Научная сессия ГУАП: Сборник докладов научной сессии, посвященной Всемирному дню авиации и космонавтики. В 3-х ч. Ч. II. Технические науки. СПб.: ГУАП, 2019. С. 150–152.
- Zaichenko K.V., Gurevich B.S., Kordyukova A.A. Method of reliable electrocardiographic control of ischemia appearance in investigations with experimental animals // Proc. of the 2021 Ural Symposium on Biomedical Engineering, Radioelectronics and Information Technology (USBEREIT). 2021. P. 78–81. https://doi.org/10.1109/ USBEREIT51232.2021.9455029
- Yu F.T.S., Jutamulia S. Optical Signal Processing, Computing, and Neural Networks. New York: John Wiley & Sons, 1992. 419 p.
- Наумов К.П., Ушаков В.Н. Акустооптические сигнальные процессоры. М.: Science Press, 2002. 80 с.
- Petrunkin V., Aksyonov E., Starikov G. Wavelet transform in optical processors: potentials and perspectives // Proceedings of SPIE. 2002. V. 4680. P. 256–263. https://doi.org/10.1117/12.454687
- VanderLugt A. Optical Signal Processing. New York, N.Y.: Wiley, 1991. 632 p.
- Feng W., Yan Y., Jin G., Wu M., He Q. Dual multichannel optical wavelet transform processor // Proceedings of SPIE. 1999. V. 3804. P. 249–255. https://doi.org/10.1117/12.363971
- Wang Y., Ma L., Shi S. An optical method for production of Haar wavelet // Optics Communications. 2002. V. 204. N 1–6. P. 107–110. https://doi.org/10.1016/S0030-4018(02)01246-4
- Turpin T.M. Time integrating optical processors // Proceedings of SPIE. 1978. V. 154. P. 196–203. https://doi.org/10.1117/12.938255

личных комбинациях позволит в отдельных специфических случаях существенно упростить процедуры обработки таких информационных сигналов и уменьшить массогабаритные характеристики реализующих устройств.

References

- Zaichenko K.V., Gurevich B.S. Spectral processing of bioelectric signals. *Biomedical Engineering*, 2021, vol. 55, no. 1, pp. 17–20. https://doi.org/10.1007/s10527-021-10062-6
- Gulyaev Y.V., Zaichenko K.V. High-resolution electrocardiography. Task. Problem. Prospects. *Journal Biomedical Radioelectronics*, 2013, no. 9, pp. 5–15. (in Russian)
- 3. Zaichenko K.V., Gurevich B.S. Electroencephalography in the extended amplitude and frequency ranges. SUAI Scientific Session: Conference proceedings of the scientific session dedicated to the World Day of Aviation and Cosmonautics. In 3 parts, Part II. Technical sciences. St. Petersburg, SUAI, 2019, pp. 150–152. (in Russian)
- Zaichenko K.V., Gurevich B.S., Kordyukova A.A. Method of reliable electrocardiographic control of ischemia appearance in investigations with experimental animals. *Proc. of the 2021 Ural Symposium on Biomedical Engineering, Radioelectronics and Information Technology (USBEREIT)*, 2021, pp. 78–81. https://doi.org/10.1109/ USBEREIT51232.2021.9455029
- Yu F.T.S., Jutamulia S. Optical Signal Processing, Computing, and Neural Networks. New York, John Wiley & Sons, 1992, 419 p.
- Naumov K.P., Ushakov V.N. Acousto-Optical Signal Processors. Moscow, Science Press, 2002, 80 p. (in Russian)
- Petrunkin V., Aksyonov E., Starikov G. Wavelet transform in optical processors: potentials and perspectives. *Proceedings of SPIE*, 2002, vol. 4680, pp. 256–263. https://doi.org/10.1117/12.454687
- VanderLugt A. Optical Signal Processing. New York, N.Y., Wiley, 1991, 632 p.
- Feng W., Yan Y., Jin G., Wu M., He Q. Dual multichannel optical wavelet transform processor. *Proceedings of SPIE*, 1999, vol. 3804, pp. 249–255. https://doi.org/10.1117/12.363971
- Wang Y., Ma L., Shi S. An optical method for production of Haar wavelet. *Optics Communications*, 2002, vol. 204, no. 1-6, pp. 107– 110. https://doi.org/10.1016/S0030-4018(02)01246-4

- Kellman P. Time integrating optical signal processing // Optical Engineering. 1980. V. 19. N 3. P. 370-375. https://doi. org/10.1117/12.7972521
- Montgomery R.M. Acousto-optical signal processing system. Patent US3634749. 1972.
- Zaichenko K.V., Gurevich B.S. Early diagnostics of ischemia by means of electrocardiographic signals processing using acousto-optic Fourier processors with time integration // Proceedings of SPIE. 2019. V. 11075. P. 110751U. https://doi.org/10.1117/12.2535709
- Зайченко К.В., Гуревич Б.С. Акустооптическая вейвлет-обработка биоэлектрических сигналов // Письма в Журнал технической физики. 2022. Т. 48. № 1. С. 36–38. https://doi.org/10.21883/ PJTF.2022.01.51877.18988
- Zaichenko K.V. High accuracy adaptive frequency measurements for low signals in acoustic optical processors // Proceedings of SPIE. 1994. V. 2051. P. 732–738. https://doi.org/10.1117/12.165963
- Аристархов Г.М., Воробьев А.В., Гуляев Ю.В., Дмитриев В.Ф., Зайченко К.В. и др. Фильтрация и спектральный анализ радиосигналов. Алгоритмы. Структуры. Устройства. М.: Радиотехника, 2020. 504 с.
- Kuzmin M.S., Rogov S.A. Spatial light modulator based on liquidcrystal video projector matrix for information processing systems // Optical Memory & Neural Networks (Information Optics). 2013. V. 22. N 4. P. 261–266. https://doi.org/10.3103/S1060992X13040103
- Кузьмин М.С., Рогов С.А. Ввод низкочастотных сигналов в оптические системы обработки информации с жидкокристаллической матрицей на входе // XI международная конференция по фотонике и информационной оптике: Сборник научных трудов. М.: НИЯУ МИФИ, 2022. С. 611–612.
- Кузьмин М.С., Рогов С.А. Анализатор свернутого спектра с жидкокристаллическим устройством ввода сигналов // Письма в Журнал технической физики. 2014. Т. 40. № 15. С. 1–5.
- Кузьмин М.С., Рогов С.А. Обработка одномерных сигналов с растровым вводом в двумерных оптических корреляторах // Журнал технической физики. 2015. Т. 85. № 4. С. 156–158.
- Кузьмин М.С., Рогов С.А. Оптический фурье-процессор с жидкокристаллическим устройством ввода информации // Оптический журнал. 2015. Т. 82. № 3. С. 23–29.

Авторы

Зайченко Кирилл Вадимович — доктор технических наук, профессор, заведующий лабораторией, Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, 198095, Российская Федерация, 55927706300, https://orcid.org/0000-0002-2881-4386, kvz235@mail.ru Гуревич Борис Симхович — доктор технических наук, главный научный сотрудник, Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, 198095, Российская Федерация, SE 35756024100, https://orcid.org/0000-0002-7520-7087, bgurevich48@gmail.com

Рогов Сергей Александрович — доктор физико-математических наук, профессор, профессор, Санкт-Петербургский государственный университет телекоммуникаций им. проф. М.А. Бонч-Бруевича, Санкт-Петербург, 193232, Российская Федерация, 57004559141, https://orcid.org/0000-0002-4251-1197, sarogov@mail.ru

Кордюкова Анна Алексеевна — младший научный сотрудник, Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, 198095, Российская Федерация, 557211856932, https://orcid.org/0000-0002-6099-4276, annygm00@mail.ru

Кузьмин Михаил Сергеевич — аспирант, Санкт-Петербургский государственный университет телекоммуникаций им. проф. М.А. Бонч-Бруевича, Санкт-Петербург, 193232, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0001-6044-2423, ranlitik@gmail.com

Статья поступила в редакцию 12.07.2022 Одобрена после рецензирования 22.08.2022 Принята к печати 28.09.2022



- Turpin T.M. Time integrating optical processors. *Proceedings of* SPIE, 1978, vol. 154, pp. 196–203. https://doi.org/10.1117/12.938255
- Kellman P. Time integrating optical signal processing. Optical Engineering, 1980, vol. 19, no. 3, pp. 370–375. https://doi. org/10.1117/12.7972521
- 13. Montgomery R.M. Acousto-optical signal processing system. *Patent* US3634749, 1972.
- Zaichenko K.V., Gurevich B.S. Early diagnostics of ischemia by means of electrocardiographic signals processing using acousto-optic Fourier processors with time integration. *Proceedings of SPIE*, 2019, vol. 11075, pp. 110751U. https://doi.org/10.1117/12.2535709
- Zaichenko K.V., Gurevich B.S. Acousto-optic wavelet processing of bioelectric signals. *Pis'ma v Zhurnal tehnicheskoj fiziki*, 2022, vol. 48, no. 1, pp. 36–38. (in Russian). https://doi.org/10.21883/ PJTF.2022.01.51877.18988
- Zaichenko K.V. High accuracy adaptive frequency measurements for low signals in acoustic optical processors. *Proceedings of SPIE*, 1994, vol. 2051, pp. 732–738. https://doi.org/10.1117/12.165963
- Aristarkhov G.M., Vorobev A.V., Guliaev Iu.V., Dmitriev V.F., Zaichenko K.V. et al. *Filtration and Spectral Analysis of Radio Signals*. Moscow, Publishing house "Radiotekhnika", 2020, 504 p. (in Russian)
- Kuzmin M.S., Rogov S.A. Spatial light modulator based on liquidcrystal video projector matrix for information processing systems. *Optical Memory & Neural Networks (Information Optics)*, 2013, vol. 22, no. 4, pp. 261–266. https://doi.org/10.3103/ S1060992X13040103
- Kuzmin M.S., Rogov S.A. Input of low-frequency signals into optical information processing systems with a liquid crystal matrix input. *Proc. of the XI International Conference Photonics and Information Optics*, Moscow, NRNU MEPhI, 2022, pp. 611–612. (in Russian)
- Kuzmin M.S., Rogov S.A. A folded-spectrum analyzer with a liquidcrystal input device. *Technical Physics Letters*, 2014, vol. 40, no. 8, pp. 629–631. https://doi.org/10.1134/S1063785014080082
- Kuz'min M.S., Rogov S.A. Processing of 1D signals with raster input in 2D optical correlators. *Technical Physics*, 2015, vol. 60, no. 4, pp. 631–633. https://doi.org/10.1134/S1063784215040179
- Kuz'min M.S., Rogov S.A. Optical fourier processor with a liquidcrystal information-input device. *Journal of Optical Technology*, 2015, vol. 82, no. 3, pp. 147–152. https://doi.org/10.1364/ JOT.82.000147

Authors

Kirill V. Zaichenko — D. Sc. (Technology), Professor, Head of Laboratory, Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, 198095, Russian Federation, 55927706300, https://orcid.org/0000-0002-2881-4386, kvz235@mail.ru Boris S. Gurevich — D. Sc. (Technology), Chief Researcher, Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, 198095, Russian Federation, 535756024100, https://orcid.org/0000-0002-7520-7087, bgurevich48@gmail.com

Sergey A. Rogov — D. Sc. (Physics & Mathematics), Full Professor, The Bonch-Bruevich Saint Petersburg State University of Telecommunications, Saint Petersburg, 193232, Russian Federation, 🐨 7004559141, https://orcid.org/0000-0002-4251-1197, sarogov@mail.ru

Anna A. Kordyukova — Junior Researcher, Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, 198095, Russian Federation, 57211856932, https://orcid.org/0000-0002-6099-4276, annygm00@mail.ru

Mikhail S. Kuzmin — PhD Student, The Bonch-Bruevich Saint Petersburg State University of Telecommunications, Saint Petersburg, 193232, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0001-6044-2423, ranlitik@gmail.com

Received 12.07.2022 Approved after reviewing 22.08.2022 Accepted 28.09.2022

Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial»

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2022, том 22, № 5 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no 5

I/İTMO

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 No 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

университет итмо

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-846-853 УДК 681.784

Полихромный источник света для реализации многоспектрального метода обработки изображений кожных новообразований Кирилл Вадимович Зайченко¹, Борис Симхович Гуревич^{2⊠}, Виталия Игоревна Святкина³

1.2.3 Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, 198095, Российская Федерация

1 kvz235@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-2881-4386

² bgurevich48@gmail.com^{\Box}, https://orcid.org/0000-0002-7520-7087

³ svyatkina.vi@edu.spbstu.ru, https://orcid.org/0000-0002-6456-8776

Аннотация

Предмет исследования. При диагностике онкологических заболеваний кожи остается актуальной проблема несвоевременного выявления патологий. Современные диагностические методы имеют ряд недостатков, связанных с ограниченными возможностями человеческого зрения, высокими требованиями к неинвазивным исследованиям и к цифровому представлению полученных результатов для их передачи по каналам связи. Важнейшие задачи ранней бинарной диагностики кожных новообразований могут быть решены с использованием методов биорадиофотоники. Метод. В работе рассмотрен авторский многоспектральный метод обработки изображений участков кожи с использованием нового специализированного полихромного источника света с программным управлением длиной волны излучения. Проанализирован принцип действия такого источника и обосновано применение набора светодиодов со специальным расположением, что позволяет направлять пучок света любой длины волны в одном направлении. Подтвержден выбор используемых диапазонов длин волн светодиодов, описан первый вариант макета такого источника света, приведены его оптическая и структурная схемы. Показано, что оптимальным способом программного управления длиной волны является ее грубая настройка переключением светодиодов и тонкая настройка установленными на выходе источника акустооптическими перестраиваемыми фильтрами. Основные результаты. Приведен ряд тестовых снимков пигментного пятна на коже размером 40 × 30 мм с длинами волн в пределах от ближнего ультрафиолетового до ближнего инфракрасного диапазонов с использованием черно-белой камеры. При цифровой обработке полученных монохроматических изображений проведены гистограммная эквализация и медианная фильтрация снимков для расширения динамического диапазона уровней яркости и минимизации искажений, вызванных неравномерностью исследуемого участка кожи и наличием теневой засветки. Получены графики распределения амплитудной интенсивности в исходных и отфильтрованных снимках для выбранных длин волн светодиодов. Показано, что о наличии кожного новообразования можно судить по провалам кривой распределения интенсивности света. Обосновано радиальное расположение светодиодов на плате для минимизации теневой засветки при освещении кожи. Практическая значимость. Проведенные исследования многоспектральной обработки изображений с помощью реализованного полихромного источника света вносят вклад в развитие новых методов ранней диагностики кожных новообразований на основе фотоники и оптоэлектроники и могут найти практическое применение в медицинских технологиях.

Ключевые слова

источник света, рак кожи, программное управление, набор светодиодов, акустооптические перестраиваемые фильтры, цифровая обработка изображений

Благодарности

Работа поддержана Минобрнауки Российской Федерации, госзадание № 075-00761-22-00, тема № FZZM-2022-0011.

Ссылка для цитирования: Зайченко К.В., Гуревич Б.С., Святкина В.И. Полихромный источник света для реализации многоспектрального метода обработки изображений кожных новообразований // Научнотехнический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 846–853. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-846-853

© Зайченко К.В., Гуревич Б.С., Святкина В.И., 2022

Polychromic light source for the realization of multispectral processing method of skin malignant lesions images

Kirill V. Zaichenko¹, Boris S. Gurevich², Vitaliya I. Svyatkina³

^{1,2,3} Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, 198095, Russian Federation

1 kvz235@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-2881-4386

² bgurevich48@gmail.com^{\Box}, https://orcid.org/0000-0002-7520-7087

³ svyatkina.vi@edu.spbstu.ru, https://orcid.org/0000-0002-6456-8776

Abstract

When diagnosing oncological skin diseases, the problem of untimely detection of pathologies remains relevant. Modern diagnostic methods have a number of disadvantages associated with the limited capabilities of human vision, high requirements for non-invasive studies and digital representation of the results obtained for their transmission over communication channels. The most important tasks of early binary diagnostics of skin neoplasms can be solved using bioradiophotonics methods. The paper considers the author's multispectral method for processing images of skin areas using a new specialized polychrome light source with software control of the radiation wavelength. The principle of operation of such a source is analyzed and the use of a set of LEDs with a special arrangement is justified which makes it possible to direct a beam of light of any wavelength in one direction. The choice of the wavelength ranges used for LEDs is confirmed, the first version of the layout of such a light source is described, and its optical and structural diagrams are given. It is shown that the optimal way of the wavelength programmable control is its coarse tuning by switching LEDs and fine tuning by acousto-optic tunable filters installed at the source output. A number of test images of a pigment spot on the skin with a size of 40×30 mm with wavelengths ranging from near ultraviolet to near infrared ranges using a black and white camera are presented. With digital processing, received monochromatic images, histogram equalization and median filtering of images were carried out to expand the dynamic range of brightness levels and minimize distortion caused by the unevenness of the skin area under study and the presence of shadow illumination. Graphs of the amplitude intensity distribution in the original and filtered images are obtained for the selected wavelengths of the LEDs. It is shown that the presence of a skin neoplasm can be judged by the dips in the light intensity distribution curve. The radial arrangement of LEDs on the board is justified to minimize shadow illumination when illuminating the skin. The conducted studies of multispectral image processing using a realized polychrome light source contribute to the development of new methods for the early diagnosis of skin neoplasms based on photonics and optoelectronics and can find practical application in medical technologies.

Keywords

light source, skin cancer, programmable control, LEDs set, acousto-optic tunable filters, digital image processing

Aknowledgements

The work has been supported by Education and Science Ministry of the Russian Federation, State task No. 075-00761-22-00, project No. FZZM-2022-0011.

For citation: Zaichenko K.V., Gurevich B.S., Svyatkina V.I. Polychromic light source for the realization of multispectral processing method of skin malignant lesions images. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 846–853 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-846-853

Введение

Разработка методов ранней бинарной диагностики новообразований кожи чрезвычайно актуальная проблема. В общей структуре онкологических заболеваний в Российской Федерации рак кожи является лидирующим, что подтверждается существенным ростом числа таких пациентов в последнее время. Это вызвано, в частности, несвоевременным выявлением данных патологий [1, 2]. Существующие методы диагностики злокачественных новообразований кожи обладают рядом существенных недостатков и часто не могут обеспечить надежное выявление данных заболеваний на ранних стадиях развития [3]. Активное продвижение методов, основанных на принципах биорадиофотоники, предусматривает опто- и радиоэлектронную обработку биомедицинских данных. Решение данной задачи возможно при исключении неопределенности, возникающей в результате визуального осмотра новообразования. Появление неопределенности обусловлено ограниченными возможностями человеческого зрения, не способного отличать чистые спектральные цвета от составных. Наиболее часто применяют методы рамановской [4, 5] и автофлуоресцентной спектроскопии [6]. Оба метода обладают рядом недостатков. Один из недостатков — потеря части информации из-за ограниченного числа длин волн, в пределах которых проводятся измерения. Решением указанных проблем может стать разработка нового метода цифровой многоспектральной обработки изображений кожных новообразований [7]. Метод основан на преобразовании полихромного изображения в последовательность монохромных изображений, каждое из которых представляет собой распределение интенсивности света на выбранной длине волны. Работу метода обеспечивает применение специального полихромного источника света. Цель работы — разработка программно управляемого полихромного источника света и демонстрация возможностей использования источника для ранней диагностики кожных новообразований.

Принцип работы полихромного источника света

В основу авторского метода многоспектральной обработки изображений кожных новообразований [8–10] заложено преобразование полихромного изображения в последовательность монохромных субизображений, каждое из которых представляет собой распределение интенсивности света на выбранной длине волны. Чем больше число используемых длин волн, тем больший объем спектральной информации можно получить при исследовании новообразования в дополнение к имеющейся пространственной информации. Это реализуется, в первую очередь, за счет применения специально разработанного полихромного источника света с управляемыми длинами волн, выбранными для обеспечения бинарной диагностики рака кожи. Принцип работы прототипа источника рассмотрен в работах [11–13] для применения в биохимических анализаторах.

Полихромный источник света для реализации многоспектрального метода обработки изображений кожных новообразований должен программно переключать длины волн светового потока с помощью переключения светодиодов. Светодиоды расположены радиально относительно центра дифракционной решетки. На фокусном расстоянии от светодиодов находятся сегменты линзы, которые формируют пучки коллимированного света. Все пучки попадают в центр дифракционной решетки под углами падения, выбранными таким образом, чтобы первые дифракционные порядки от каждого пучка распространялись в одном направлении. Переключение длины волны осуществляется подачей тока на выбранный светодиод. На рис. 1 приведена оптическая схема макета источника света.

Основной управляющий элемент источника света – микропроцессор, к которому подключены ключи, коммутирующие светодиоды. Управление источником света производится через модуль USB. Микропроцессор управляет также источниками тока светодиодов и осуществляет получение данных по порту USB. Структурная схема разработанного источника света представлена на рис. 2.

Макет полихромного источника света

В макете в качестве источника света рассмотрены светодиоды с длинами волн в пределах от ближнего ультрафиолетового до ближнего инфракрасного диапазонов. Выбор светодиодов осуществлен оценкой их габаритных и оптических характеристик. Макет



Рис. 1. Оптическая схема полихромного источника света.
 1 — светодиоды; 2 — сегменты линзы; 3 — дифракционная решетка; 4 — зеркало; 5 — линза
 Fig. 1. Optical scheme of the polychrome light source.

1 — LEDs; 2 — segments of lenses; 3 — diffraction grating; 4 — mirror; 5 — lens



Рис. 2. Структурная схема полихромного источника света. ЭВМ — электронная вычислительная машина

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2022, том 22, № 5 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no 5



Puc. 3. Макет полихромного источника света *Fig. 3.* The polychrome light source layout

источника света, реализованный по схеме рис. 2, производит программную грубую настройку длины волны света на 8 поддиапазонах. Более тонкую программную настройку длины волны выполняют установленные на выходе источника света акустооптические перестраиваемые фильтры на ячейках Брэгга [14, 15]. Точные значения длин волн в ячейках заданы программным путем с использованием частоты управляющего сигнала, подаваемого на пьезопреобразователь ячейки Брэгга. В результате возможно обеспечить освещение зоны новообразования светом с полосой пропускания порядка 10 нм. На рис. 3 приведена фотография собранного макета. Регистрация изображений на выходе осуществлена с помощью монохромной камеры Basler асА720–520um.

Расчеты полихромного источника света

Ключевые параметры при выборе дифракционной решетки: дифракционная эффективность, угол дифракции и угловая дисперсия. Для выбранной решетки выполнен расчет углов дифракции:

$$d(\sin\varphi - \sin\varphi') = k\lambda$$
,

где d — период дифракционной решетки; φ — угол падения света; φ' — угол дифракции; k — порядок дифракционного максимума; λ — длина волны излучения. Для описания светодиодов использована модель сферического ламбертовского излучателя, мощность которого в телесном угле получена из выражения:

$$P = 4\pi P_{\rm M3J} \sin^2(q/2),$$

где P — мощность в телесном угле излучателя; $P_{_{\rm ИЗЛ}}$ — мощность излучения источников света; q — телесный угол, в котором распределяется мощность излучения. Для телесного угла, равного 8°30′, значение мощности приблизительно 7 % от общей мощности светодиода, которая имеет в среднем величину порядка нескольких

десятков милливольт. Применение акустооптических перестраиваемых фильтров уменьшает мощность пропорционально полосе выделяемого спектрального интервала по отношению к интервалу светодиода.

Результаты цифровой обработки тестовых изображений

Каждое тестовое изображение представлено в виде матрицы из восьмибитных целых чисел, которые индексированы номером пиксела изображения и соответствуют коду цвета в градации от черного (0) к белому (255). В результате получены графики распределения интенсивности для каждого снимка. Для расширения динамического диапазона уровней яркости и минимизации искажений, вызванных неравномерностью исследуемого участка кожи и наличием теневой засветки предварительно выполнена гистограммная эквализация и медианная фильтрация снимков. На рис. 4 показаны изображения: исходное 1 и обработанные: эквализированное 2 и отфильтрованное 3 для снимков, полученных при освещениях: оранжевом, зеленом, синем, глубоком синем и ближнем ультрафиолете.

Распределения интенсивности света

Для построения графиков распределения интенсивности используем выборку строки пикселов с явно выраженными участками поглощения. На рис. 5 приведены графики распределения интенсивности для изображений: исходного 1 и обработанных: эквализированного 2 и отфильтрованного 3. На месте участка кожи с ярко выраженным образованием наблюдается провал интенсивности яркости.

Получено процентное отношение провала интенсивности к его максимуму для изображений при засветках: оранжевым — 45,7 %; зеленым — 52,5 %; синем — 53,02 %; глубоком синем — 66,67 % и ближнем ультрафиолетом — 66,67 %.



Рис. 4. Изображения, полученные при засветке: оранжевым (*a*); зеленым (*b*); синим (*c*); глубоким синим (*d*) и ближним ультрафиолетом (*e*). Размер изображений 2,5 × 10,97 см.

1 — исходное; 2 — эквализированное и 3 — отфильтрованное

Fig. 4. Images taken when illuminated with orange (*a*); green (*b*); blue (*c*); deep blue (*d*); near-ultraviolet (*e*). Image size 2.5×10.97 cm

1 — initial; 2 — equalize; and 3 — filtered


Рис. 5. Распределения интенсивности, полученные при засветке: оранжевым (*a*); зеленым (*b*); синим (*c*); глубоким синим (*d*) и ближним ультрафиолетом (*e*).

1 — исходное; 2 — эквализированное и 3 — отфильтрованное

Fig. 5. Intensity distribution when illuminated with orange (a); green (b); blue (c); deep blue (d); near-ultraviolet (e). 1 - initial; 2 - equalize; and 3 - filtered

Заключение

Разработанный полихромный источник света позволил сформировать субизображения на нескольких десятках длин волн и получить значительно бо́льший объем спектральной информации, чем это обеспечивают другие спектрометрические методы. В результате полученная максимально возможная спектральная информация, совместно с имеющейся пространственной информацией, позволяют более точно определить характер новообразования и его конфигурацию на коже человека. Построены графики распределения интенсивности в зависимости от длины волны, которые позволяют определить наличие новообразования по провалам кривой. В дальнейшем планируется усовершенствовать методику многоспектральной обработки для выявления бинарной диагностики поражений кожи на ранних стадиях их развития. При снятии серии изображений возник ряд трудностей, связанных с появлением тени на объекте, искажающей графики интенсивности. В настоящее время ведется проектирование усовершенствованной системы светодиодных плат для устранения этой проблемы, а также для обеспечения возможности подсвечивать кожу изнутри. Кроме того, проводится экспериментальное окрашивание снимков в различные цвета с последующим наложением их друг на друга во время обработки изображений с целью бинарной диагностики новообразований, недоступной человеческому зрению.

Литература

- Sung H., Ferlay J., Siegel R.L., Laversanne M., Soerjomataram I., Jemal A., Bray F. Global cancer statistics 2020: GLOBOCAN estimates of incidence and mortality worldwide for 36 cancers in 185 countries // CA: A Cancer Journal for Clinicians. 2021. V. 71. N 3. P. 209–249. https://doi.org/10.3322/caac.21660
- Злокачественные новообразования в России в 2020 году (заболеваемость и смертность) / под ред. А.Д. Каприна, В.В. Старинского, А.О. Шахзадовой. М.: МНИОИ им. П.А. Герцена — филиал ФГБУ «НМИЦ радиологии» Минздрава России, 2021. С. 4–8.
- Солодянкина Т.Н., Апанасевич В.И., Гурина Л.Н. Дерматоскопия как метод диагностики меланомы кожи // Сибирский онкологический журнал. 2009. № 5. С. 63–66.
- Zhao J., Lui H., Kalia S., Zeng H. Real-time Raman spectroscopy for automatic in vivo skin cancer detection: an independent validation // Analytical and Bioanalytical Chemistry. 2015. V. 407. N 27. P. 8373– 8379. https://doi.org/10.1007/s00216-015-8914-9
- Bratchenko I., Artemyev D., Myakinin O., Khristoforova Y.A., Moryatov A.A., Kozlov S.V., Zakharov V.P. Combined Raman and autofluorescence ex vivo diagnostics of skin cancer in near infrared and visible regions // Journal of Biomedical Optics. 2017. V. 22. N 2. P. 027005. https://doi.org/10.1117/1.JBO.22.2.027005
- Borisova E., Ivanov D., Kolev B., Genova T., Mircheva V., Ilyov S., Zaharieva L., Lihachova I., Lihachovs A., Spigulis J., Troyanova P. Autofluorescence spectroscopy of cutaneous neoplasia under ultraviolet, visible and near infrared excitation // Proceedings of SPIE. 2020. V. 11363. P. 113630Z-1. https://doi.org/10.1117/12.2555982
- Зайченко К.В., Гуревич Б.С., Киселева К.Р. Экспериментальное обоснование спектрофотометрического метода анализа характера кожных новообразований // Труды Международной научно-практической конференции «Актуальные проблемы и инновационные технологии в области естественных наук». Т. 2. Ташкент, 2020. С. 520–524.
- Zaichenko K.V., Gurevich B.S. Spectral selection using acousto-optic tunable filters for the skin lesions diagnostics // Proceedings of SPIE. 2021. V. 11922. P. 119221C. https://doi.org/10.1117/12.2615808
- Zaichenko K.V., Gurevich B.S. Application of acousto-optic tunable filters in the devices of skin cancer diagnostics // Proceedings of SPIE. 2020. V. 11585. P. 115850K. https://doi.org/10.1117/12.2581750
- Zaichenko K.V., Gurevich B.S. Development of images multispectral processing for the skin cancer early diagnostics // Proceedings of SPIE. 2022. V. 12144. P. 121440E. https://doi.org/10.1117/12.2624329
- Шаповалов В.В., Гуревич Б.С., Колесов Й.А., Андреев С.В., Беляев А.А. Источник света с произвольно регулируемым спектральным составом для биомедицинских спектральных анализаторов // Биомедицинская электроника. 2009. № 11. С. 16–20.
- Андреев С.В., Беляев А.В., Гуревич Б.С., Колесов И.А., Челак В.Н., Шаповалов В.В. Источник полихромного излучения с управляемым спектром. Патент RU 2478871. Бюл. 2013. № 10.
- Зайченко К.В., Гуревич Б.С. Многоспектральная обработка изображений биологических объектов с помощью акустооптических устройств // Биомедицинская радиоэлектроника. 2013. № 9. С. 70–76.
- 14. Zaichenko K.V., Gurevich B.S. Information productivity of the systems intended for biological objects images multispectral processing using acousto-optic tunable filters // AIP Conference Proceedings. 2019. V. 2140. P. 0200081. https://doi. org/10.1063/1.5122006
- Zaichenko K.V., Gurevich B.S. Efficiency increasing of medical diagnostic systems which use multispectral processing method // Proceedings of SPIE. 2022. V. 12146. P. 121460E. https://doi. org/10.1117/12.2624445

Авторы

Зайченко Кирилл Вадимович — доктор технических наук, профессор, заведующий лабораторией, Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, 198095, Российская Федерация, 55927706300, https://orcid.org/0000-0002-2881-4386, kvz235@mail.ru Гуревич Борис Симхович — доктор технических наук, главный научный сотрудник, Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, 198095, Российская Федерация, в 35756024100, https://orcid.org/0000-0002-7520-7087, bgurevich48@gmail.com

References

- . Sung H., Ferlay J., Siegel R.L., Laversanne M., Soerjomataram I., Jemal A., Bray F. Global cancer statistics 2020: GLOBOCAN estimates of incidence and mortality worldwide for 36 cancers in 185 countries. *CA: A Cancer Journal for Clinicians*, 2021, vol. 71, no. 3, pp. 209–249. https://doi.org/10.3322/caac.21660
- Malignant Neoplasms in Russia in 2020 (Morbidity and Mortality). Ed. by A.D. Kaprin, V.V. Starinskii A.O. Shakhzadova. Moscow, National Medical Research Radiological Centre of the Ministry of Health of the Russian Federation Publ., 2021, pp. 4–8. (in Russian)
- Solodyankina T.N., Apanasevich V.I., Gurina L.I. Dermatoscopy as a method of skin melanoma diagnosis. Siberian Journal of Oncology, 2009, no. 5, pp. 63–66. (in Russian)
- Zhao J., Lui H., Kalia S., Zeng H. Real-time Raman spectroscopy for automatic in vivo skin cancer detection: an independent validation. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 2015, vol. 407, no. 27, pp. 8373–8379. https://doi.org/10.1007/s00216-015-8914-9
- Bratchenko I., Artemyev D., Myakinin O., Khristoforova Y.A., Moryatov A.A., Kozlov S.V., Zakharov V.P. Combined Raman and autofluorescence ex vivo diagnostics of skin cancer in near infrared and visible regions. *Journal of Biomedical Optics*, 2017, vol. 22, no. 2, pp. 027005. https://doi.org/10.1117/1.JBO.22.2.027005
- Borisova E., Ivanov D., Kolev B., Genova T., Mircheva V., Ilyov S., Zaharieva L., Lihachova I., Lihachovs A., Spigulis J., Troyanova P. Autofluorescence spectroscopy of cutaneous neoplasia under ultraviolet, visible and near infrared excitation. *Proceedings of SPIE*, 2020, vol. 11363, pp. 113630Z-1. https://doi.org/10.1117/12.2555982
- Zaichenko K.V., Gurevich B.S., Kiseleva K.R. Experimental substantiation of the spectrophotometric method for analyzing the nature of skin neoplasms. *Proc. of the International scientific &* practical conference "Current topics and innovative technologies in the field of natural sciences". V. 2. Tashkent, 2020, pp. 520–524. (in Russian)
- Zaichenko K.V., Gurevich B.S. Spectral selection using acousto-optic tunable filters for the skin lesions diagnostics. *Proceedings of SPIE*, 2021, vol. 11922, pp. 119221C. https://doi.org/10.1117/12.2615808
- D. Zaichenko K.V., Gurevich B.S. Application of acousto-optic tunable filters in the devices of skin cancer diagnostics. *Proceedings of SPIE*, 2020, vol. 11585, pp. 115850K. https://doi.org/10.1117/12.2581750
- Zaichenko K.V., Gurevich B.S. Development of images multispectral processing for the skin cancer early diagnostics. *Proceedings of SPIE*, 2022, vol. 12144, pp. 121440E. https://doi.org/10.1117/12.2624329
- Shapovalov V.V., Gurevich B.S., Kolesov I.A., Andreev S.V., Beliaev A.A. Light source with an arbitrarily adjustable spectral content for biomedical spectrum analyzers. *Journal Biomedical Radioelectronics*, 2009, no. 11, pp. 16–20. (in Russian)
- Andreev S.V., Beljaev A.V., Gurevich B.S., Kolesov I.A., Chelak V.N., Shapovalov V.V. Controlled spectrum polychromatic radiation source. *Patent RU 2478871*. 2013. (in Russian)
- Zaichenko K.V., Gurevich B.S. Multispectral processing of the biological objects imaging by means of acousto-optic devices. *Journal Biomedical Radioelectronics*, 2013, no. 9, pp. 70–76. (in Russian)
- Zaichenko K.V., Gurevich B.S. Information productivity of the systems intended for biological objects images multispectral processing using acousto-optic tunable filters. *AIP Conference Proceedings*, 2019, vol. 2140, pp. 0200081. https://doi. org/10.1063/1.5122006
- Zaichenko K.V., Gurevich B.S. Efficiency increasing of medical diagnostic systems which use multispectral processing method. *Proceedings of SPIE*, 2022, vol. 12146, pp. 121460E. https://doi. org/10.1117/12.2624445

Authors

Kirill V. Zaichenko — D. Sc. (Technology), Professor, Head of Laboratory, Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, 198095, Russian Federation, 55927706300, https://orcid.org/0000-0002-2881-4386, kvz235@mail.ru Boris S. Gurevich — D. Sc. (Technology), Chief Researcher, (Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, 198095, Russian Federation, 535756024100, https://orcid. org/0000-0002-7520-7087, bgurevich48@gmail.com Святкина Виталия Игоревна — студент, техник, Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, 198095, Российская Федерация, 55 57303379400, https://orcid.org/0000-0002-6456-8776, svyatkina.vi@edu.spbstu.ru

Vitaliya I. Svyatkina — Student, Technologist, Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, 198095, Russian Federation, S 57303379400, https://orcid.org/0000-0002-6456-8776, svyatkina.vi@edu.spbstu.ru

Статья поступила в редакцию 12.07.2022 Одобрена после рецензирования 22.08.2022 Принята к печати 28.09.2022 Received 12.07.2022 Approved after reviewing 22.08.2022 Accepted 28.09.2022



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial»

I/İTMO

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 No 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

университет итмо

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-854-858 УДК 535.4, 532.2, 535.8, 62-529

Автоматическое распознавание структур в полупрозрачных движущихся объектах на основе голографической муаровой интерферометрии (краткое сообщение)

Константин Андреевич Ляхов¹⊠, Василий Аркадьевич Григорьев², Елизавета Георгиевна Циплакова³

¹ Математический институт имени В.А. Стеклова РАН, Москва, 119991, Российская Федерация

² Общество с ограниченной ответственностью «Митлаз-Р», Московская обл., г.о. Солнечногорск, 147552, Российская Федерация

3 Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

¹ Lyakhov2000@yahoo.com^{\Box}, https://orcid.org/0000-0003-2023-5811

² vagrigoriev@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-7662-5769

³ e.tsiplakova@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-1229-4793

Аннотация

Представлена новая принципиальная схема для автоматического распознавания формы и взаимного расположения включений в движущихся полупрозрачных объектах. Введен новый критерий для автоматической идентификации структур (их локализации) на основе анализа интерференционной картины, спроецированной на поверхности ПЗС-матрицы, которая является элементом схемы оптического коррелятора на основе конфокального голографического томографа. Результаты данной работы могут быть полезны специалистам в области неразрушающего контроля и найти применение в соответствующих областях.

Ключевые слова

неразрушающий контроль, лазерная томография, ПЗС-матрица, интерферометрия, голографический коррелятор

Ссылка для цитирования: Ляхов К.А., Григорьев В.А., Циплакова Е.Г. Автоматическое распознавание структур в полупрозрачных движущихся объектах на основе голографической муаровой интерферометрии (краткое сообщение) // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 854–858. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-854-858

Automatic recognition of internal structures in translucent objects based on hologram-moire interferometry

Konstantin A. Lyakhov^{1⊠}, Vasiliy A. Grigoriev², Elizaveta G. Tsiplakova³

¹ Steklov Mathematical Institute, Moscow, 119991, Russian Federation

² Mitlas-R Ltd, Solnechnogorsk, 147552, Russian Federation

³ ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

¹ Lyakhov2000@yahoo.com^{\Box}, https://orcid.org/0000-0003-2023-5811

² vagrigoriev@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-7662-5769

³ e.tsiplakova@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-1229-4793

Abstract

A new principal optical scheme for automatic recognition of the shape and relative position of inclusions in moving translucent objects is presented. A new criterion for automatic identification of structures (their localization) based on the analysis of the interference pattern projected on the surface of a CCD matrix, which is an element of the proposed scheme of an optical correlator based on the confocal laser tomograph, has been introduced. The results of this work may be of interest to the specialists in the field of non-destructive control; it can find application in the relevant fields.

[©] Ляхов К.А., Григорьев В.А., Циплакова Е.Г., 2022

Keywords

non-destructive control, laser tomography, CCD, interferometry, holographic correlator

For citation: Lyakhov K.A., Grigoriev V.A., Tsiplakova E.G. Automatic recognition of internal structures in translucent objects based on hologram-moire interferometry. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 854–858 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-854-858

Введение

В настоящее время активно развиваются методы ранней диагностики различных заболеваний и интраоперационной поддержки принятия решений [1], а также контроля качества в сельском хозяйстве. В связи с этим важно создание новых передовых средств неразрушающего контроля. Особенность контроля объектов в полупрозрачных средах — создание методов оптической диагностики с пространственным разрешением порядка десятых долей миллиметра. Результат исследований обнаружение и распознавание требуемого признака объекта по заранее заданному критерию. Таким образом, наиболее подходящими методами для такой диагностики являются методы лазерной томографии [2, 3] с использованием современных аппаратно-программных средств для получения и обработки оптических изображений. В настоящей работе предложена принципиальная схема распознавания движущихся объектов на основе конфокального голографического томографа, принцип действия которого основан на голограммно-муаровой интерферометрии для полупрозрачных объектов [4, 5]. Установка имеет некоторые сходства со схемой сопряженного фурье-коррелятора, предложенного в работе [6], заключающиеся в использовании пространственного модулятора света для формирования эталонных микроголограмм Фурье в объеме голографического диска и в использовании печи для их фиксации.

В отличие от основной массы работ по детектированию и распознаванию объектов в оптических корреляторах, где предполагается широкое применение нейронных сетей на основе цифровой обработки сигналов, предлагаемый метод детектирования структур в движущихся полупрозрачных объектах на них не основан и не предполагает цифровую обработку сигналов. За счет отсутствия фазы конвертации аналогового сигнала в цифровой ожидается значительное ускорение автоматической идентификации структур в полупрозрачных движущихся объектах.

Принцип распознавания

Техническая реализации процесса распознавания заключается в последовательном переборе микроголограмм Фурье эталонных объектов, записанных на голографическом диске. Перебор осуществляется с помощью вращения диска с некоторой угловой частотой ω. Распознавание осуществляется при помощи сравнения дифракционных картин, соответствующих рассеянию на микроголограммах Фурье и на распознаваемом объекте, на поверхности ПЗС-матрицы. При записи микроголограмм Фурье используется угловое мультиплексирование. При рассмотрении распознавания внутренних структур в движущихся объектах, объект, записанный на голографический диск и совпадающий с эталоном, проходит через поле освещения, формируемое линзой L#7. В результате фиксируется периодическое изменение освещенностей на поверхности ПЗС-матрицы, при этом распределение освещенностей некоторое время будет оставаться однородным.

Очевидно, что в случае смещения волновых полей распознаваемого объекта и эталона на величину, кратную длине волны лазерного излучения, распределение световой энергии по поверхности ПЗС-матрицы будет максимально ярким, а кратное полуволне — максимально тусклым. По этой причине, в отличие от стандартного голографического коррелятора [7, 8], принцип распознавания основан не на аналоговом вычислении корреляционной функции, а на проверке условия, что разность значений интенсивности лазерного излучения между различными пикселами ПЗС-матрицы и, соответственно, глубин потенциальных ям не превышает заданного уровня, определяемого выбранной схемой категоризации внутренних структур. Отметим, что степень огрубления категоризации обусловлена как необходимой степенью точности распознавания, так и объемом доступной памяти голографического диска. Степень огрубления категоризации є, соответствующая задаче автоматического поиска включений в заданном объеме, может быть связана с количеством голограмм *N*, записанных на диске, следующим образом:

$$\varepsilon = \frac{1}{N}.$$
 (1)

В связи со слабой некогерентностью света, прошедшего через полупрозрачное тело, количество записанных голограмм не должно превышать значения, определяемого принципом разрешимости Рэлея.

Так как величины накопленного заряда в каждом пикселе тем больше, чем глубже соответствующая потенциальная яма, то критерий распознавания может быть введен через параметр неоднородности распределения заряда по поверхности ПЗС-матрицы K_{ch} :

$$1 - K_{\rm ch} < \varepsilon,$$

$$K_{\rm ch} = \frac{\langle Q \rangle}{Q_{\rm max}},$$

где $\langle Q \rangle$ — усредненное по всей площади поверхности ПЗС-матрицы значение величины заряда, индуцированного на ней внешним полем. Отметим, что в случае полного совпадения волновых фронтов объекта и эталона выполняется условие: $Q_{\text{max}} = Q_{\text{min}} = \langle Q \rangle$. Это соотношение остается неизменным в течение некоторого времени Δt и при распознавании структур в движущихся объектах, поскольку в этом случае будет только периодически меняться освещенность, но не однородность освещения. Исходя из этого, можно предположить, что только одной голограммы, записанной в статике, достаточно для однозначной идентификации объекта. Например, если расстояние между распознаваемыми объектами L, скорость их поступательного движения v, и количество записанных на голографическом диске голограмм N, то это время можно оценить следующим образом

$$\Delta t = \frac{L}{vN}.$$

Поскольку количество голограмм ограничено доступной памятью на диске, то количество всех возможных размещений эталонного образа включения, записанного на голографический диск, внутри допустимого объема ΔV накладывает следующее условие на элементарный объем распознаваемого объекта, с которым производится сравнение:

$$\Delta V_0 = \frac{\Delta V}{N}.$$

Объем, в котором допустимо варьирование расположением и формой включений, задается, исходя из условия нахождения включения в шаровом сегменте заданного объема:

$$\Delta V(r_0, \theta_0, \varphi_0) = \prod_{\substack{\varphi_0; \theta_0 + \Delta \theta; r_0 + \Delta \theta; r_0 + \Delta r \\ \varphi_0; \theta_0; r_0}} r_a \sin(\theta_a) dr_a d\theta_a d\varphi_a,$$

где *r_a*, *θ_a* и *φ_a* — радиус-вектор, азимутальный и полярный углы элемента объема в соответствующей области:

$$\begin{split} r_0 &< r_a < r_0 + \Delta r \\ \theta_0 &< \theta_a < \theta_0 + \Delta \theta \\ \phi_0 &< \phi_a < \phi_0 + \Delta \phi \end{split} .$$



Рисунок. Принципиальная схема голографического томографа. L#1–11 – собирающие линзы; S#1–5 – оптические затворы; M#1–2 – зеркала; BS#1– 2 –разделители луча

Figure. The principle scheme of holographic correlator.

L#1-11 - focusing lenses, S#1-5 - beam shutters, M#1-2 - mirrors, BS#1-2 - beam splitters

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2022, том 22, № 5 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no 5

Рассмотрим принцип работы предлагаемой установки (рисунок) для автоматического распознавания образов. На этапе приема и записи информации на голографический диск HD оптические затворы S#1, S#3 и S#5 закрыты, а затворы S#2 и S#4 открыты. Зеркало М#2 выдвинуто за пределы лазерного луча. Подавая напряжение на соответствующие пикселы пространственного модулятора света SLM, формируется сигнальная световая волна, соответствующая критерию отбора/распознавания. Интерференция данной сигнальной световой волны совместно с плоской световой волной от импульсного Nd: YAG лазерного источника формирует дифракционную решетку в объеме голографического диска. Фиксация дифракционной решетки, сформированной в объеме регистрирующей среды голографического диска, достигается его нагревом в печи Oven. Голографический диск представляет собой слой регистрирующей среды, нанесенную на отражающую поверхность. На следующем этапе оптические затворы S#2 и S#4 закрываются, а затворы S#1, S#3 и S#5 открываются. Зеркало М#2 вдвигается в пределы лазерного луча, как показано на рисунке. Таким образом, формируются два плеча интерферометра Майкельсона, где свет от He:Ne лазера непрерывного действия, отраженный от вращающегося голографического диска, служит в качестве опорного (референтного) луча. В сигнальном плече интерферометра Майкельсона за линзой L#7 формируется фронт плоской волны, падающий на движущийся полупрозрачный объект OR с различными непрозрачными включениями, форму и расположение которых требуется определить. Механический привод MD выполняет отбраковку объектов в соответствии с их автоматической идентификацией. Автоматическая идентификации осуществляется на основе логической схемы LC, обрабатывающей выходной сигнал от ПЗС-

Литература

- Ellebrecht D.B., Kuempers Ch., Horn M., Keck T., Kleemann M. Confocal laser microscopy as novel approach for real-time and invivo tissue examination during minimal-invasive surgery in colon cancer // Surgical Endoscopy. 2019. V. 33. N 6. P. 1811–1817. https:// doi.org/10.1007/s00464-018-6457-9
- Hillman C.S., Lührs Ch., Bonin T., Koch P., Hüttmann G. Holoscopy– holographic optical coherence tomography // Optics Letters. 2011. V. 36. N 13. P. 2390–2392. https://doi.org/10.1364/OL.36.002390
- Ahmad A., Srivastava V., Dubey V., Mehta D.S. Ultra-short longitudinal spatial coherence length of laser light with the combined effect of spatial, angular, and temporal diversity // Applied Optics Letters. 2015. V. 106. N 9. P. 093701. https://doi. org/10.1063/1.4913870
- Stetson K.A., Powel R.L. Hologram interferometry // Journal of the Optical Society of America. 1966. V. 56. N 9. P. 1161–1166. https:// doi.org/10.1364/JOSA.56.001161
- Brandt G.B. Hologram-moiré interferometry for transparent objects // Applied Optics. 1967. V. 6. N 9. P. 1535–1540. https://doi. org/10.1364/AO.6.001535
- Ryf R., Montemezzani G., Günter P., Grabar A.A., Stoika I.M., Vysochanskii Yu.M. High-frame-rate joint Fourier-transform correlator based on Sn2P2S6 crystal // Optics Letters. 2001. V. 26. N 21. P. 1666–1668. https://doi.org/10.1364/OL.26.001666
- Vander Lugt A. Signal detection by complex spatial filtering // IEEE Transactions on Information Theory. 1964. V. 10. N 2. P. 139–145. https://doi.org/10.1109/TIT.1964.1053650

матрицы (CCD), на основе условия (1). Логическая схема состоит из сумматора, делителя и компаратора уровней напряжений, а также пикового детектора.

В силу наличия спеклов при рассеянии когерентного излучения на полупрозрачном объекте для улучшения качества сравнения с волновым полем эталонного объекта, записанного на голографическом диске, волновой фронт от исследуемой структуры внутри данного объекта должен быть адаптивно промодулирован решеткой Ронки RG, [9]. Для большего увеличения отношения сигнал/шум использована собирающая линза L#6, и плоскость ПЗС-матрица расположена на расстоянии до ее фокальной плоскости. В данной схеме предполагается, что все линзы (двояко- или одновыпуклые) имеют одинаковое фокусное расстояние f. Для снижения влияния тепловых и вибрационных шумов в установке применена схема Паунда–Древера–Холла (Pound–Drever–Hall frequency stabilization technique).

Заключение

В работе представлена принципиальная схема автоматического распознавания внутренних структур в движущихся полупрозрачных объектах. Предложен критерий распознавания, основанный на муаровой-голографической интерферометрии, который соответствует степени равномерности распределения световой энергии по засвеченной площади ПЗС-матрицы. Подбор наилучших вариантов для идентификации внутренних структур в движущихся объектах осуществляется путем перебора всех возможных вариантов при помощи вращения голографического диска, на котором записаны дифракционные решетки, соответствующие волновым фронтам эталонных объектов.

References

- Ellebrecht D.B., Kuempers Ch., Horn M., Keck T., Kleemann M. Confocal laser microscopy as novel approach for real-time and invivo tissue examination during minimal-invasive surgery in colon cancer. *Surgical Endoscopy*, 2019, vol. 33, pp. 1811–1817. https:// doi.org/10.1007/s00464-018-6457-9
- Hillman C.S., Lührs Ch., Bonin T., Koch P., Hüttmann G. Holoscopy– holographic optical coherence tomography. *Optics Letters*, 2011, vol. 36, no. 13, pp. 2390–2392. https://doi.org/10.1364/OL.36.002390
- Ahmad A., Srivastava V., Dubey V., Mehta D.S. Ultra-short longitudinal spatial coherence length of laser light with the combined effect of spatial, angular, and temporal diversity. *Applied Optics Letters*, 2015, vol. 106, no. 9, pp. 093701. https://doi. org/10.1063/1.4913870
- Stetson K.A., Powel R.L. Hologram Interferometry. *Journal of the* Optical Society of America, 1966, vol. 56, no. 9, pp. 1161–1166. https://doi.org/10.1364/JOSA.56.001161
- Brandt G.B. Hologram-moiré interferometry for transparent objects. *Applied Optics*, 1967, vol. 6, no. 9, pp. 1535–1540. https://doi. org/10.1364/AO.6.001535
- Ryf R., Montemezzani G., Günter P., Grabar A.A., Stoika I.M., Vysochanskii Yu.M. High-frame-rate joint Fourier-transform correlator based on Sn2P2S6 crystal. *Optics Letters*, 2001, vol. 26, no. 21, pp. 1666–1668. https://doi.org/10.1364/OL.26.001666
- Vander Lugt A. Signal detection by complex spatial filtering. *IEEE Transactions on Information Theory*, 1964, vol. 10, no. 2, pp. 139–145. https://doi.org/10.1109/TIT.1964.1053650

- Weaver C.S., Goodman J.W. A technique for optically convolving two functions // Applied Optics. 1966. V. 5. N 7. P. 1248–1249. https:// doi.org/10.1364/AO.5.001248
- Кульчин Ю.Н., Витрик О.Б., Камшилин А.А., Ромашко Р.В. Адаптивные методы обработки спекл-модулированных оптических полей. М.: Физматлит, 2009. 223 с.

Авторы

Ляхов Константин Андреевич — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Математический институт имени В.А. Стеклова РАН, Москва, 119991, Российская Федерация, № 18042561700, https://orcid.org/0000-0003-2023-5811, Lyakhov2000@ yahoo.com

Григорьев Василий Аркадьевич — генеральный директор, Общество с ограниченной ответственностью «Митлаз-Р», Московская обл., г.о. Солнечногорск, 147552, Российская Федерация, https:// orcid.org/0000-0001-7662-5769, vagrigoriev@mail.ru

Циплакова Елизавета Георгиевна — студент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, **55** 57348346400, https://orcid.org/0000-0002-1229-4793, e.tsiplakova@itmo.ru

Статья поступила в редакцию 01.07.2022 Одобрена после рецензирования 22.08.2022 Принята к печати 26.09.2022



- Weaver C.S., Goodman J.W. A technique for optically convolving two functions. *Applied Optics*, 1966, vol. 5, no. 7, pp. 1248–1249. https:// doi.org/10.1364/AO.5.001248
- Kulchin Y.N., Vitrik O.B., Kamshilin A.A., Romashko R.V. Adaptive Methods for Processing of Speckle-Modulated Optical Fields. Moscow, Fizmatlit Publ., 2009. 223 p. (in Russia)

Authors

Konstantin A. Lyakhov — PhD, Senior Researcher, Steklov Mathematical Institute, Moscow, 119991, Russian Federation, Sci 18042561700, https://orcid.org/0000-0003-2023-5811, Lyakhov2000@ yahoo.com

Vasiliy A. Grigoriev — General Director, Mitlas-R Ltd, Moscow Region, Solnechnogorsk, 147552, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0001-7662-5769, vagrigoriev@mail.ru

Elizaveta G. Tsiplakova — Student, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, 🚾 57348346400, https://orcid.org/0000-0002-1229-4793, e.tsiplakova@itmo.ru

Received 01.07.2022 Approved after reviewing 22.08.2022 Accepted 26.09.2022

Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» Ι/ΙΤΜΟ

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-859-865 УДК 004.93

Применение технологий нейронных сетей и компьютерного зрения для анализа изображений кожных новообразований Сергей Андреевич Милантьев^{1⊠}, Анна Алексеевна Кордюкова², Даниил Олегович Шевяков³, Евгений Павлович Логачев⁴

1.2.3.4 Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, 198095, Российская Федерация

1 Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

³ Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения, Санкт-Петербург, 190000, Российская Федерация

¹ geerkus@gmail.com[⊠], https://orcid.org/0000-0002-1970-5217

² annygm00@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-6099-4276

³ sevakovdaniil@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-5609-4091

⁴ zhenya.logachev.94@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-4292-9419

Аннотация

Предмет исследования. Исследована возможность применения нейронных сетей и компьютерного зрения для анализа изображений кожных новообразований и выявления признаков развития различных патологий, в том числе онкологических. Разработана методика оценки значимости комбинаций цветовых каналов и пространств с применением технологий компьютерного зрения, а именно, методов локальных бинарных шаблонов и гистограмм ориентированных градиентов для извлечения признаков кожных изменений и бинарной классификации новообразований кожи человека. Оптимизация комбинаций признаков позволит более эффективно решать проблему разделимости данных при классификации. Показана возможность исследования кожных новообразований при использовании набора данных малого объема (менее 1000 изображений). Предложено применение методики к данным, получаемым с помощью нового уникального метода многоспектральной обработки кожных новообразований. Метод. Использованы изображения из наборов данных ISIC-19 и ISIC-20. Для тренировки и валидации моделей сформированы выборки с ограничением в 1000 изображений, а также дополнительная тестовая выборка из 250 изображений. Все изображения приведены к единому размеру 128×128 пикселов и преобразованы в цветовые пространства YCrCb, BGR, Grayscale, HSV. По каждому цветовому каналу извлечены признаки с помощью методов локальных бинарных шаблонов и гистограмм ориентированных градиентов. Для классификации данных применен ряд математических моделей, в том числе нейронные сети. Выполнена оценка эффективности комбинаций объединения признаков по цветовым каналам и методам их извлечения. Предобработанные изображения разделены на тренировочную и валидационную подвыборки в соотношении 70/30 %. Проведена оценка моделей с помощью метрик Accuracy, Recall, Precision и F1-score на стратифицированной кросс-валидации и тестовой выборке. Оптимизация параметров моделей осуществлена на основе функции потерь, представленной усредненным значением по кросс-валидации и оценке на валидационной выборке. Основные результаты. В процессе исследований выполнено более 15 000 оптимизаций параметров моделей. Наиболее устойчивые результаты на валидационном наборе данных достигнуты при ансамблировании моделей, обученных на комбинации признаков с применением методов локальных бинарных шаблонов и гистограмм ориентированных градиентов. Показано, что модели с использованием только метода локальных бинарных шаблонов имеют лучшие значения метрик, применение их не рекомендуется на практике без ансамблирования с более сильными моделями. Практическая значимость. Полученные результаты могут найти применение при использовании ансамбля из state-of-the-art сверточных и рекуррентных нейронных сетей. Предложенный подход является универсальным и применим как для анализа отдельных изображений кожных новообразований, так и для анализа их последовательностей, полученных по методу многоспектральной обработки изображений. Методику можно использовать на наборах данных с ограниченным их количеством. Полученные результаты будут полезны специалистам в областях компьютерного зрения и анализа медицинских снимков.

Ключевые слова

кожные новообразования, нейронные сети, HOG, LBP, цветовые пространства, анализ изображений, многоспектральная обработка изображений

Благодарности

Работа поддержана Минобрнауки Российской Федерации, госзадание № 075-00761-22-00, тема № FZZM-2022-0011.

© Милантьев С.А., Кордюкова А.А., Шевяков Д.О., Логачев Е.П., 2022

Ссылка для цитирования: Милантьев С.А., Кордюкова А.А., Шевяков Д.О., Логачев Е.П. Применение технологий нейронных сетей и компьютерного зрения для анализа изображений кожных новообразований // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 859–865. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-859-865

Application of neural network and computer vision technologies for image analysis of skin lesion

Sergey A. Milantev^{1⊠}, Anna A. Kordyukova², Daniil O. Shevyakov³, Evgeny P. Logachev⁴

^{1,2,3,4} Institute for analytical instrumentation of the Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, 198095, Russian Federation

¹ ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

³ Saint Petersburg State University of Aerospace Instrumentation, Saint Petersburg, 190000, Russian Federation

¹ geerkus@gmail.com^{\scaless}, https://orcid.org/0000-0002-1970-5217

² annygm00@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-6099-4276

³ sevakovdaniil@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-5609-4091

⁴ zhenya.logachev.94@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-4292-9419

Abstract

Opportunity research of using neural networks and computer vision to analyze images of skin lesion and identify features of various pathologies, including oncological neoplasms. A methodology has been developed that makes it possible to evaluate the significance of combinations of color components and spaces in feature extraction using local binary patterns (LBP) and histogram of oriented gradients (HOG) computer vision technologies to extract features of skin changes binary classification of human skin lesions. Optimization of extracted feature makes it possible to more effectively solve the problem of data separability in classification. Research reveals an accessible way to classify skin lesions on a small dataset (less than 1000 images). Research is supposed to be applied to data sequences obtained using a new unique method of multispectral processing of skin lesions. In the course of the work, data from the ISIC-19 and ISIC-20 datasets were used. Samples were formed with a limit of 1000 images for training and validating the models. Additionally, a test sample of 250 images was formed. All images were reduced to 128 × 128 pixels and converted to YCrCb, BGR, Grayscale, HSV color spaces. Features were extracted for each color channel using the HOG and LBP methods. Mathematical models, including neural networks have been used for data classification. The effectiveness of features combinations by color channels and feature extraction methods was evaluated. The preprocessed images were divided into training and validation subsets in a 70/30 ratio. The accuracy, recall, precision and f1-score metrics were used to evaluate the models. The models were evaluated using stratified cross-validation and a test dataset. Optimization of model parameters was carried out based on the loss function represented by the average of cross-validation and evaluation on the validation set. In the process of research, more than 15 000 different optimizations of model parameters were executed. The most stable results on the validation dataset were achieved using ensemble of models, which were trained on a combination of features using local binary patterns (LBP) and histogram of oriented gradients (HOG) technologies. Models which used only local binary patterns technology had the best metrics values, but these models are not recommended to be used in practice without ensemble with stronger models. The results gained can be applied for usage with an ensemble of state-of-the-art convolutional and recurrent neural networks. The proposed approach is universal and applicable both for the analysis of individual images of skin neoplasms and for the analysis of their sequences obtained by the method of multispectral image processing. The technique can be applied to datasets with a limited amount of data. The results obtained will be of interest to specialists in the fields of computer vision and medical images analysis.

Keywords

skin lesion, neural networks, HOG, LBP, color spaces, image analysis, multispectral image processing

Acknowledgements

The work was supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation, state task No. 075-00761-22-00, topic No. FZZM-2022-0011.

For citation: Milantev S.A., Kordyukova A.A., Shevyakov D.O., Logachev E.P. Application of neural network and computer vision technologies for image analysis of skin lesion. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 859–865 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-859-865

Введение

Ранняя диагностика злокачественных новообразований кожи в настоящее время — актуальная проблема. Активное развитие средств биорадиофотоники способствует появлению новых оптических методов исследования кожных новообразований, позволяющих расширить диагностические возможности дермоскопии. Один из них — уникальный метод многоспектральной обработки изображений кожных новообразований [1-4], предложенный и развивающийся в лаборатории «Радио- и оптоэлектронных приборов ранней диагностики патологий живых систем» Института аналитического приборостроения РАН (Санкт-Петербург) под руководством профессора, доктора технических наук К.В. Зайченко. Данный метод основан на получении последовательности монохромных изображений, каждое из которых представляет собой распределение интенсивности света на выбранной длине волны. Таким образом, чем больше число используемых длин волн, тем больший объем спектральной информации можно получить в дополнение к имеющейся пространственной информации.

Для детального изучения любых изображений кожных новообразований, а также их дальнейшего автоматического анализа в процессе принятия диагностического решения, большой интерес представляет применение технологий нейронных сетей и методов компьютерного зрения. С их помощью можно перейти к решению одной из основных задач диагностики кожных новообразований — бинарной классификации новообразований на доброкачественные и злокачественные. Добиться этого можно путем обнаружения в исследуемых изображениях маркеров, имеющих различную природу: цвет, размер, контур, интенсивность отражения света от исследуемого участка кожи. В связи с этим большой интерес представляет проведение оценки цветовых каналов и пространств в исследуемых изображениях, а также оптимизация всех полезных признаков, содержащих в себе информацию о наличии либо отсутствии патологии.

Цель работы — применение технологий нейронных сетей и компьютерного зрения для анализа изображений кожных новообразований и выявления признаков развития различных патологий, в том числе онкологии. Для этого необходимо решить следующую задачу разработать методику, которая позволит оценить статистическую значимость комбинаций цветовых каналов и пространств на основе применения методов локальных бинарных шаблонов (Local Binary Patterns, LBP) и гистограмм ориентированных градиентов (Histogram of Oriented Gradients, HOG), а также нейронных сетей. Оценка значимости будет выражена показателями метрик моделей по каждому проведенному эксперименту. Работа может внести вклад в развитие метода многоспектральной обработки изображений (монохромных) кожных новообразований [1-4], а также позволяет проводить исследования и других изображений (цветных), представляющих интерес для диагностики рака кожи.

Методы и подходы

Основной подход настоящей работы — выявление наиболее значимых цветовых пространств и каналов для классификации кожных новообразований. Причина реализации подхода — исследование применения методики на датасетах малого объема (менее 1000 изображений). Поиск наибольшей значимости цветовых пространств на изображениях кожных новообразований позволит решить остро стоящую проблему разделимости данных в рамках небольшого датасета.

Данные. При решении поставленной задачи учтем, что сбор изображений кожных новообразований с помощью нового метода многоспектральной обработки изображений в соответствующий датасет находится на начальной стадии. Недостаточное количество данных служит препятствием для оценки статистической значимости экспериментов. В связи с этим для формирования задачи бинарной классификации используем существующие датасеты ISIC-19 [5-7] и ISIC-20 [8]. В проводимых экспериментах для симуляции будущего применения методики к данным, полученным методом многоспектральной обработки изображений, наложим ограничения на количество данных. Отметим, что датасет ISIC-19 включает в себя более 25 000 дерматоскопических изображений, содержащих многоклассовые кожные новообразования (как злокачественные, так и доброкачественные), а именно: кератоз, нейрофиброматоз, базально-клеточная карцинома, дерматофиброма, болезнь Боуэна, плоскоклеточный рак, лентиго, бородавки, злокачественная меланома и др. Архив ISIC-20 содержит, в том числе и данные из других датасетов: MSK (различные размеры изображений), НАМ10000 (размеры изображений 600 × 450 пикселов) и BCN20000 (размеры изображений 1024 × 1024 пикселов).

В результате первоначально на основе наборов данных ISIC-19 и ISIC-20¹ случайным образом сгенерирована сбалансированная по классам подвыборка. Ее размер ограничен 1000 изображений, 700 из которых использованы в тренировочной подвыборке, а 300 — в валидационной. Также сформирована тестовая выборка из дополнительных 250 изображений, моделирующая процесс оценки эксплуатации на новых данных. Тренировочная, валидационная и тестовая подвыборки строго предопределены по индексам идентификаторами изображений.

Во время проведения экспериментов и обучения моделей использованы дополнительные оценки и техники для предотвращения процесса переобучения моделей. В первую очередь применена L2-регуляризация для получения устойчивых моделей. Проведена оптимизация параметров моделей по средним значениям, исходя из оценок кросс-валидации и валидационной выборке.

Предобработка данных. Отметим, что в используемых датасетах ISIC-19 и ISIC-20 встречаются изображения, имеющие черные области. Во избежание возможных ухудшений метрик в процессе обучения и оптимизации моделей эти области минимизируются с помощью преобразования из библиотеки ImageMagick с коэффициентом нечеткости около 5 %. Затем все изображения преобразуются в единый размер 128 × 128 пикселов. Для аугментации данных и улучшения их структуры в отдельных экспериментах применено гауссовское размытие с ядром 3×3 или 5×5 в различных масштабах. В работе [9] рассмотрен подход оценки освещенности, подтверждающий оптимальный коэффициент нормы Минковского (Minkowski norm p = 6). С целью дополнительной нормализации изображений в настоящей работе также внедрен данный подход, на основании которого выполнено примерно 15 % от общего числа экспериментов.

Далее к каждому из изображений были применены разложения по цветовым пространствам: BGR (RGB), YCrCb, HSV, Grayscale. BGR — аддитивное цветовое пространство, в котором итоговый цвет задается линейной комбинацией по всем фильтрам, имеющим

¹ International Skin Imaging Collaboration [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://www.isic-archive.com (дата обращения: 27.09.2022).

корреляцию с интенсивностью освещения. В YCrCbпространстве выделяется канал яркости Ү, полученный после гамма-коррекции из RGB, а также канал Cr (Cr = R-Y), показывающий расстояние R от Y и канал Cb (Cb = B-Y) — расстояние В от Ү. Одно из главных преимуществ пространства YCrCb — разделение информации об интенсивности освещения и цветовой информации. Цветовое пространство HSV состоит из канала тона Н (доминирующая длина волны), насыщенности цвета S и значения цвета. Значимым преимуществом данного цветового пространства является использование канала Н для описания цвета, которое остается неизменным при изменении интенсивности освещения. Цветовое пространство Grayscale позволяет исследовать измерения интенсивности света в каждом пикселе в соответствии с определенной длиной волны, что актуально для монохромных изображений, полученных методом многоспектральной обработки изображений.

Методы извлечения признаков. Рассмотрим применение методов компьютерного зрения LBP [10] и HOG [11], с помощью которых можно получить предикторы (массив исследуемых признаков), содержащие дополнительные нелинейные зависимости. Также исследуем комбинации признаков, в том числе и объединение предикторов HOG и LBP, зарекомендовавшее себя в научных работах о задачах классификации изображений для диагностики рака желудка [12] и молочной железы [13].

Метод HOG в настоящей работе применен в качестве одного из методов извлечения признаков из исследуемых изображений. Основная идея метода HOG заключается в том, что любое изображение может быть описано с помощью распределения интенсивности градиентов. Данный метод основан на подсчете количества направлений градиента в локальных областях изображения и подразумевает следующие этапы.

- Разделение пикселов каждого изображения на ячейки. Внутри каждой ячейки вычислена локальная гистограмма направлений градиентов. После вычисления градиентов каждый пиксел получил значения направления от 0 до 180° и величину градиента. При составлении локальной гистограммы направлений градиентов значение его величины добавлено в интервал гистограммы, к которому принадлежит значение направления пиксела. В данном эксперименте гистограмма содержала 9 интервалов, соответствующих углам 0, 20, 40, 60, 80, 100, 120, 140 и 160° [12, 13]. Так как использованы значения беззнаковых градиентов, то направления 0 и 180° являются эквивалентными.
- 2. Объединение ячеек в блоки. Для повышения инвариантности метода к бликам, теням и к другим шумам, ячейки объединены в блоки. Внутри каждого блока ко всем ячейкам применена нормализация гистограмм направлений градиентов. Данная операция заключается в объединении всех локальных гистограмм направлений градиентов внутри блока, где полученные результаты представляются в виде вектора, который необходимо разделить на длину данного вектора.

 Выполнение операции конкатенации гистограмм градиентов по всем цветовым каналам для получения результирующего вектора признаков.

Метод LBP также применен для извлечения признаков. В изолированном виде данный метод имеет лучшие показатели метрик по сравнению с методом HOG. Принцип работы метода LBP основан на сравнении значений пикселов изображения со значениями своих соседей и подразумевает следующие этапы.

- Разделение пикселов каждого изображения на ячейки. При этом каждая ячейка формируется на основании заранее определенных значений параметров радиуса и количества соседей. В данном эксперименте применены параметры радиуса со значением 3 и количеством соседей — 24.
- Определение количества соседей. В каждой ячейке значение центрального пиксела является пороговым для определения значений соседей. Для каждого соседнего пиксела со значением бо́льшим или равным центральному устанавливается 1, в противном случае — 0. Результирующая матрица является построчной формой записи для восьмибитного двоичного числа.
- Преобразование чисел в пикселы. Полученное восьмибитное двоичное число преобразуется в десятичное и устанавливается на месте центрального пиксела. В случае если точка соседа находится между пикселами, применяется билинейная интерполяция, где значение точки оценивается по взвешенному среднему из значений четырех ближайших пикселов.
- 4. Вычисление локальной гистограммы. После преобразования всех пикселов внутри ячейки выполнено вычисление локальной гистограммы распределения частот значений пикселов в ячейке. Для нормализации полученная локальная гистограмма представлена в виде вектора, который необходимо разделить на длину данного вектора.
- Получение результирующего вектора. Результирующий вектор признаков состоит из конкатенации всех локальных гистограмм по всем цветовым каналам.

Далее к базовым и извлеченным признакам применены техники нормализации и масштабирования: по максимальному абсолютному значению, MinMax, степенное преобразование Yeo-Johnson, квантильные преобразования и z-преобразование. Выбор данных техник связан с одинаковой равномерностью для всех экспериментов и по показателям оптимизаций (см. подробнее в подразделе «Обучение и оптимизация моделей»).

Модели

Для решения поставленной задачи рассмотрим следующие классификационные модели: полносвязные нейронные сети, градиентный бустинг над решающими деревьями (реализация LightGBM), байесовские модели, квадратичный дискриминантный анализ, модель логистической регрессии, модели на гауссовских процессах, методы опорных векторов и ближайших соседей. При реализации нейронных сетей между скрытыми слоями добавлены блоки batch-нормализации и функции активации ReLU, которые трансформируют входные данные в шкалу с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией. В некоторых экспериментах (примерно 5 % от общего числа) использован метод главных компонент. Все модели применены в равных условиях для определения показателей метрик, отражающих выявление признаков патологии для различных математических моделей. Полученный наилучший результат по значениям метрик определяет показатель качества работы моделей.

Обучение и оптимизация моделей. Выполним объединение полученных признаков в предикторы по различным комбинациям. В первую очередь проведем оценку эффективности конкатенации признаков по цветовым каналам. Рассмотрим комбинации по способу получения признаков: по изображению без изменений, методами LBP и HOG. Напомним, что все преобразованные данные разделены в соотношении 70/30 % для тренировки и валидации моделей. Подвыборки сгенерированы однократно, в полученной коллекции сохранены индексы, которые строго предопределены с целью оценки моделей после обучения и оптимизаций на одинаковых данных.

Затем для каждой из моделей вручную (путем объективного поиска границ для диапазона значений) описаны пространства для оптимизации параметров моделей. Все классификационные модели оптимизированы с применением байесовских алгоритмов, основанных на гауссовских процессах и деревьях решений [14]. Данный подход является одной из итераций оптимизационного алгоритма. В качестве функции потерь использованы средние значения по метрикам на кросс-валидации и метрики Recall.

Все модели обучены в равных условиях с применением стратифицированной кросс-валидации для оценки показателей метрик. После получения результатов модели были обучены на тренировочной и валидационной выборках. Архитектура данной методики представлена на рисунке.

В работе выполнено более 15 000 экспериментов и оптимизаций. Все итерации по оптимизациям сохранены в облачном MLOps сервисе Weights&Biases, позволяющем эффективно отслеживать эксперименты и сохранять метрики, датасеты, модели и прочие артефакты с поддержкой версионирования в облачном хранилище.

На основе оптимизаций проведен поиск лучших моделей по всем комбинациям цветовых каналов и способу получения предикторов. Выявлены лучшие модели по типу использованного классификационного алгоритма. После получения лучших моделей для каждого разреза сформированы ансамбли моделей, основанные на взвешенном голосовании по правилу большинства.

Оценка моделей. Кроме тренировочной и валидационной выборок, сформирована тестовая выборка из дополнительных 250 изображений, моделирующая процесс оценки эксплуатации моделей на новых данных. Тестовая выборка аналогичным образом строго предопределялась по индексам. При этом оценка моделей в задаче классификации на всех этапах выполнена по основным метрикам Accuracy, Recall, Precision и F1-Score. Модели, в том числе и ансамбли, также оценены на стратифицированной кросс-валидации и тестовом наборе данных.

Результаты

Получены показатели метрик моделей, сгруппированные по результатам цветовых пространств и методам извлечения признаков. Выполнено ансамблирование по пяти лучшим моделям на основании значений кросс-валидации. Ансамбль двух методов показал наиболее стабильные показатели метрик. Результаты исследования представлены в таблице. В столбце «CV-Score» выделены показатели наиболее устойчивых моделей на кросс-валидации. В большинстве экспериментов по показателям на кросс-валидации наиболее стабильными оказались модели с применением только метода LBP и комбинации цветовых пространств HSV и YCrCb. Отметим, что ансамбли из комбинации методов LBP и HOG также показали хорошие результаты.

Полученные результаты (таблица) не являются оптимальными для внедрения, поскольку составляют приблизительно 70–75 %, что, со статистической точки зрения, является не достоверным показателем. Однако извлеченные данные позволят улучшить показатели метрики моделей при анализе последовательностей,



Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2022, том 22, № 5 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no 5

	Метод	Метрики			
цветовое пространство		Accuracy	Recall	F1-Score	CV-Score
BGR (RGB)	—	$0,6909 \pm 0,067$	$0,6909 \pm 0,067$	$0,6908 \pm 0,078$	$0,6922 \pm 0,049$
YCrCb	LBP	$0,6909 \pm 0,035$	$0,6909 \pm 0,035$	$0,6904 \pm 0,048$	$0,7091 \pm 0,039$
YCrCb	HOG	$0,6545 \pm 0,034$	$0,6545 \pm 0,034$	$0,6541 \pm 0,061$	$0,6377 \pm 0,02$
HSV+YCrCb	LBP	$0,703 \pm 0,039$	$0,703 \pm 0,039$	$0,703 \pm 0,054$	$0,735 \pm 0,051$
HSV+YCrCb	HOG	$0,6424 \pm 0,042$	$0,6424 \pm 0,042$	$0,6423 \pm 0,075$	$0,6208 \pm 0,031$
SV+YCrCb	LBP	$0,684 \pm 0,038$	$0,\!684 \pm 0,\!038$	$0,686 \pm 0,055$	$0,713 \pm 0,042$
SV+YCrCb	HOG	$0,667 \pm 0,039$	$0,667 \pm 0,039$	$0,667 \pm 0,066$	$0,633 \pm 0,031$
Ensemble of LBP (HSV + YCrCb)	LBP	0,6927	0,6927	0,6927	0,7516
Ensemble of LBP (HSV + YCrCb) and HOG (YCrCb)	LBP + HOG	0,7017	0,7017	0,7017	0,7419

Таблица. Метрики моделей, сгруппированные на основе цветовых пространств и технологий извлечения *Table*. Model metrics grouped by color spaces and extraction technologies

полученных с помощью многоспектрального метода, и ансамбля state-of-the-art сверточных нейронных сетей [15].

Заключение

В работе рассмотрен способ использования моделей для бинарной классификации кожных новообразований с ограничением по размерности данных для обучения. Выполнен ряд исследований по оценке эффективности методов извлечения признаков и цветовых пространств для поиска дополнительных линейных и нелинейных зависимостей. Эксперименты проведены на малой выборке (менее 1000 изображений), где значительная часть данных применена только в процессе тестирования моделей. В большинстве экспериментов лучших показателей метрик достиг метод локальных бинарных шаблонов, однако ансамблирование с методом гистограмм ориентированных векторов способствовало улучшению показателей.

В дальнейшем планируется:

 внедрить расширенную стратегию аугментации данных после получения последовательностей суби-

Литература

- Зайченко К.В., Гуревич Б.С. Многоспектральная обработка изображений биологических объектов с помощью акустооптических устройств // Биомедицинская радиоэлектроника. 2013. № 9. С. 70–76.
- Zaichenko K.V., Gurevich B.S. Application of acousto-optic tunable filters in the devices of skin cancer diagnostics // Proceedings of SPIE. 2020. V. 11585. P. 11585OK. https://doi.org/10.1117/12.2581750
- Zaichenko K.V., Gurevich B.S. Spectral selection using acousto-optic tunable filters for the skin lesions diagnostics // Proceedings of SPIE. 2021. V. 11922. P. 119221C. https://doi.org/10.1117/12.2615808
- Zaichenko K.V., Gurevich B.S. Skin lesions diagnostics by means of multispectral acousto-optic image processing with complexing by x-ray image data // AIP Conference Proceedings. 2020. V. 2250. P. 020033. https://doi.org/10.1063/5.0013186
- Tschandl P., Rosendahl C., Kittler H. The HAM10000 dataset, a large collection of multi-source dermatoscopic images of common pigmented skin lesions // Scientific Data. 2018. V. 5. P. 180161. https://doi.org/10.1038/sdata.2018.161

зображений с помощью метода многоспектральной обработки изображений кожных новообразований; применить модели на рекуррентных нейронных сетях U-Net и R2U-Net для предобработки изображений;

применить полученные модели в архитектуру, построенную на ансамбле state-of-the-art сверточных нейронных сетей. Планируется провести конкатенацию результирующего вектора по моделям из эксперимента с полносвязным слоем во всех моделях сверточных нейронных сетей из ансамбля. При этом следует применять нескольких dense-слоев с batch-нормализацией и функцией активации ReLU и dropout с низкой вероятностью для глобальной регуляризации обучения. Все это позволит улучшить метрики последующей модели, которая станет следующей задачей в реализации данных исследований.

Разработанная методика применима как для анализа отдельных изображений кожных новообразований, так и для анализа их последовательностей, полученных по методу многоспектральной обработки изображений.

References

- Zaichenko K.V., Gurevich B.S. Multispectral processing of the biological objects imaging by means of acousto-optic devices. *Journal Biomedical Radioelectronics*, 2013, no. 9, pp. 70–76. (in Russian)
- Zaichenko K.V., Gurevich B.S. Application of acousto-optic tunable filters in the devices of skin cancer diagnostics. *Proceedings of SPIE*, 2020, vol. 11585, pp. 11585OK. https://doi.org/10.1117/12.2581750
- Zaichenko K.V., Gurevich B.S. Spectral selection using acousto-optic tunable filters for the skin lesions diagnostics. *Proceedings of SPIE*, 2021, vol. 11922, pp. 119221C. https://doi.org/10.1117/12.2615808
- Zaichenko K.V., Gurevich B.S. Skin lesions diagnostics by means of multispectral acousto-optic image processing with complexing by x-ray image data. *AIP Conference Proceedings*, 2020, vol. 2250, pp. 020033. https://doi.org/10.1063/5.0013186
- Tschandl P., Rosendahl C., Kittler H. The HAM10000 dataset, a large collection of multi-source dermatoscopic images of common pigmented skin lesions. *Scientific Data*, 2018, vol. 5, pp. 180161. https://doi.org/10.1038/sdata.2018.161

- Codella N.C.F., Gutman D., Celebi M.E., Helba B., Marchetti M.A., Dusza S.W., Kalloo A., Liopyris K., Mishra N., Kittler H., Halpern A. Skin lesion analysis toward melanoma detection: A challenge at the 2017 International symposium on biomedical imaging (ISBI), hosted by the international skin imaging collaboration (ISIC) // Proc. of the 15th IEEE International Symposium on Biomedical Imaging (ISBI). 2018. P. 168–172. https://doi.org/10.1109/ISBI.2018.8363547
- Combalia M., Codella N.C.F., Rotemberg V., Helba B., Vilaplana V., Reiter O., Carrera C., Barreiro A., Halpern A.C., Puig S., Malvehyet J. BCN20000: Dermoscopic lesions in the wild // arXiv. 2019. arXiv:1908.02288. https://doi.org/10.48550/arXiv.1908.02288
- Rotemberg V., Kurtansky N., Betz-Stablein B., Caffery L., Chousakos E., Codella N., Combalia M., Dusza S., Guitera P., Gutman D., Halpern A., Helba B., Kittler H., Kose K., Langer S., Lioprys K., Malvehy J., Musthaq S., Nanda J., Reiter O., Shih G., Stratigos A., Tschandl P., Weber J., Soyer H.P. A patient-centric dataset of images and metadata for identifying melanomas using clinical context // Scientific Data. 2021. V. 8. N 1. P. 34. https://doi. org/10.1038/s41597-021-00815-z
- Finlayson G., Trezzi E. Shades of gray and colour constancy // Proc. of the IST/SID 12th Color Imaging Conference. 2004. P. 37–41.
- Kumar D.M., Babaie M., Zhu S., Kalra S., Tizhoosh H.R. A comparative study of CNN, BoVW and LBP for classification of histopathological images // Proc. of the 2017 IEEE Symposium Series on Computational Intelligence (SSCI). 2017. P. 1–7. https://doi. org/10.1109/SSCI.2017.8285162
- Korkmaz S., Akçiçek A., Binol H.B., Korkmaz M. Recognition of the stomach cancer images with probabilistic HOG feature vector histograms by using HOG features // Proc. of the 15th IEEE International Symposium on Intelligent Systems and Informatics (SISY). 2017. P. 339–342. https://doi.org/10.1109/SISY.2017.8080578
- Korkmaz S., Binol H. Classification of molecular structure images by using ANN, RF, LBP, HOG, and size reduction methods for early stomach cancer detection // Journal of Molecular Structure. 2018. V. 1156. P. 255–263. https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2017.11.093
- Alhakeem Z., Jang S.-I. An LBP-HOG descriptor based on matrix projection for mammogram classification // arXiv. 2021. arXiv.1904.00187. https://doi.org/10.48550/arXiv.1904.00187
- Agrawal T. Hyperparameter Optimization in Machine Learning. Apress Berkeley, CA. 2021. XIX, 166 p. https://doi.org/10.1007/978-1-4842-6579-6
- Milantev S., Olyunin V., Bykov I., Milanteva N., Bessmertnyi I. Skin lesion analysis using ensemble of CNN with dermoscopic images and metadata // CEUR Workshop Proceedings. 2021. V. 2893.

Авторы

Милантьев Сергей Андреевич — программист, Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, 198095, Российская Федерация, аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, 557225127274, https://orcid.org/0000-0002-1970-5217, geerkus@gmail.com

Кордюкова Анна Алексеевна — младший научный сотрудник, Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, 198095, Российская Федерация, SS 57211856932, https://orcid.org/0000-0002-6099-4276, annygm00@mail.ru

Шевяков Даниил Олегович — программист, Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, 198095, Российская Федерация, аспирант, Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения, Санкт-Петербург, 190000, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0001-5609-4091, sevakovdaniil@gmail.com

Логачев Евгений Павлович — младший научный сотрудник, Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, 198095, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0003-4292-9419, zhenya.logachev.94@mail.ru

Статья поступила в редакцию 01.07.2022 Одобрена после рецензирования 31.08.2022 Принята к печати 29.09.2022

- Codella N.C.F., Gutman D., Celebi M.E., Helba B., Marchetti M.A., Dusza S.W., Kalloo A., Liopyris K., Mishra N., Kittler H., Halpern A. Skin lesion analysis toward melanoma detection: A challenge at the 2017 International symposium on biomedical imaging (ISBI), hosted by the international skin imaging collaboration (ISIC). *Proc. of the* 15th IEEE International Symposium on Biomedical Imaging (ISBI), 2018, pp. 168–172. https://doi.org/10.1109/ISBI.2018.8363547
- Combalia M., Codella N.C.F., Rotemberg V., Helba B., Vilaplana V., Reiter O., Carrera C., Barreiro A., Halpern A.C., Puig S., Malvehyet J. BCN20000: Dermoscopic lesions in the wild. *arXiv*, 2019, arXiv:1908.02288. https://doi.org/10.48550/arXiv.1908.02288
- Rotemberg V., Kurtansky N., Betz-Stablein B., Caffery L., Chousakos E., Codella N., Combalia M., Dusza S., Guitera P., Gutman D., Halpern A., Helba B., Kittler H., Kose K., Langer S., Lioprys K., Malvehy J., Musthaq S., Nanda J., Reiter O., Shih G., Stratigos A., Tschandl P., Weber J., Soyer H.P. A patient-centric dataset of images and metadata for identifying melanomas using clinical context. *Scientific Data*, 2021, vol. 8, no. 1, pp. 34. https:// doi.org/10.1038/s41597-021-00815-z
- Finlayson G., Trezzi E. Shades of gray and colour constancy. Proc. of the IST/SID 12th Color Imaging Conference, 2004, pp. 37–41.
- Kumar D.M., Babaie M., Zhu S., Kalra S., Tizhoosh H.R. A comparative study of CNN, BoVW and LBP for classification of histopathological images. *Proc. of the 2017 IEEE Symposium Series* on Computational Intelligence (SSCI), 2017, pp. 1–7. https://doi. org/10.1109/SSCI.2017.8285162
- Korkmaz S., Akçiçek A., Binol H.B., Korkmaz M. Recognition of the stomach cancer images with probabilistic HOG feature vector histograms by using HOG features. *Proc. of the 15th IEEE International Symposium on Intelligent Systems and Informatics* (SISY), 2017, pp. 339–342. https://doi.org/10.1109/ SISY.2017.8080578
- Korkmaz S., Binol H. Classification of molecular structure images by using ANN, RF, LBP, HOG, and size reduction methods for early stomach cancer detection. *Journal of Molecular Structure*, 2018, vol. 1156, pp. 255–263. https://doi.org/10.1016/j. molstruc.2017.11.093
- Alhakeem Z., Jang S.-I. An LBP-HOG descriptor based on matrix projection for mammogram classification. arXiv, 2021, arXiv.1904.00187. https://doi.org/10.48550/arXiv.1904.00187
- Agrawal T. Hyperparameter Optimization in Machine Learning. Apress Berkeley, CA, 2021, XIX, 166 p. https://doi.org/10.1007/978-1-4842-6579-6
- Milantev S., Olyunin V., Bykov I., Milanteva N., Bessmertnyi I. Skin lesion analysis using ensemble of CNN with der moscopic images and metadata. *CEUR Workshop Proceedings*, 2021, vol. 2893.

Authors

Sergey A. Milantev — Software Developer, Institute for analytical instrumentation of the Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, 198095, Russian Federation; PhD Student, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, 57225127274 https://orcid.org/0000-0002-1970-5217, geerkus@gmail.com

Anna A. Kordyukova — Junior Researcher, Institute for analytical instrumentation of the Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, 198095, Russian Federation, 57211856932, https://orcid.org/0000-0002-6099-4276, annygm00@mail.ru

Daniil O. Shevyakov — Software Developer, Institute for analytical instrumentation of the Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, 198095, Russian Federation; PhD Student, Saint Petersburg State University of Aerospace Instrumentation, Saint Petersburg, 190000, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0001-5609-4091, sevakovdaniil@gmail.com

Evgeny P. Logachev — Junior Researcher, Institute for analytical instrumentation of the Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, 198095, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0003-4292-9419, zhenya.logachev.94@mail.ru

Received 01.07.2022 Approved after reviewing 31.08.2022 Accepted 29.09.2022



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» **I/İTMO**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 No 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

ОПТИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ И ТЕХНОЛОГИИ OPTICAL ENGINEERING

университет итмо

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-866-872 УДК 535.015

Уменьшение влияния амплитудных искажений LiNbO₃ фазового модулятора на сигнал волоконно-оптического гироскопа за счет применения дополнительной модуляции Евгений Владимирович Востриков^{1⊠}, Ангелина Валерьевна Умнова², Артем Сергеевич Алейник³, Григорий Константинович Погудин⁴,

Владимир Евгеньевич Стригалев⁵, Игорь Касьянович Мешковский⁶

1,2,3,4,5,6 Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

¹ Innolume GmbH, Дортмунд, 44263, Германия

² Hitachi Energy, Людвика, 77131, Швеция

¹ e.v.vostrikov@yandex.ru[⊠], https://orcid.org/0000-0001-5682-5819

² aumnova@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0001-7027-0178

³ artemal@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-7682-348X

⁴ gkpogudin@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-7280-0985

⁵ vestrigalev@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-7151-9235

⁶ igorkm@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0003-3470-1000

Аннотация

Предмет исследования. Паразитная амплитудная модуляция оптического сигнала в фазовом модуляторе один из факторов, ограничивающих точность высокочувствительных волоконно-оптических датчиков. Волоконно-оптический гироскоп — датчик угловой скорости, чувствительность которого составляет менее 0,001 °/ч. Изменение интенсивности оптического излучения при прохождении через фазовый модулятор приводит к возникновению ложного сигнала рассогласования в интерферометре Саньяка, что вносит ошибку в сигнал угловой скорости. Способы подавления паразитной амплитудной модуляции основаны на уменьшении отражений в местах стыковки оптических волокон, изготовлении поглощающих канавок для блокировки оптического излучения от нижней грани фазового модулятора и алгоритмических способов компенсации. Метод. Представлен новый метод уменьшения влияния паразитной амплитудной модуляции LiNbO₃ фазового модулятора на сигнал волоконно-оптического гироскопа. Особенность метода — применение дополнительной модуляции дифференциальным сигналом с равномерным распределением амплитуд в диапазоне рабочих напряжений фазового модулятора. Основные результаты. Предложенный метод позволяет уменьшить влияние паразитной амплитудной модуляции фазового модулятора многофункциональной интегрально-оптической схемы на сигнал волоконно-оптического гироскопа более чем в три раза. Для этого применена дополнительная модуляция треугольным сигналом с частотой f = 200,09 МГц и мощностью P = 36 дБм. Практическая значимость. Разработанный метод может использоваться для повышения точностных характеристик волоконнооптических гироскопов. Кроме того, метод может быть применим и к другим волоконно-оптическим датчикам, в которых использованы фазовые модуляторы на основе кристалла ниобата лития. Работа может быть интересна специалистам в области высокочувствительных волоконно-оптических датчиков, волоконной и интегральной оптики

Ключевые слова

паразитная амплитудная модуляция, фазовый модулятор, волоконно-оптический гироскоп, ниобат лития, модуляция

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, Госзадание № 2019-0923.

Ссылка для цитирования: Востриков Е.В., Умнова А.В., Алейник А.С., Погудин Г.К., Стригалев В.Е., Мешковский И.К. Уменьшение влияния амплитудных искажений LiNbO₃ фазового модулятора на

© Востриков Е.В., Умнова А.В., Алейник А.С., Погудин Г.К., Стригалев В.Е., Мешковский И.К., 2022

сигнал волоконно-оптического гироскопа за счет применения дополнительной модуляции // Научнотехнический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 866–872. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-866-872

Application of additional high-frequency modulation to reduce influence of residual amplitude modulation LiNbO₃ phase modulator on fiber optical gyroscope signal

Evgenii V. Vostrikov^{1⊠}, Angelina V. Umnova², Artem S. Aleinik³, Grigorii K. Pogudin⁴, Vladimir E. Strigalev⁵, Igor K. Meschkovskii⁶

1,2,3,4,5,6 ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

¹ Innolume GmbH, Dortmund, 44263, Germany

² Hitachi Energy, Ludvica, 77131, Sweden

¹ e.v.vostrikov@yandex.ru^{\boxdots}, https://orcid.org/0000-0001-5682-5819

² aumnova@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0001-7027-0178

³ artemal@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-7682-348X

⁴ gkpogudin@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-7280-0985

⁵ vestrigalev@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-7151-9235

⁶ igorkm@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0003-3470-1000

Abstract

Residual amplitude modulation in LiNbO₃ phase modulator is one of the key factors that limit the accuracy of highsensitive fiber-optical sensors. A fiber-optical gyroscope is an angular velocity sensor whose sensitivity is better than 0.001 °/h. Optical light intensity changes after phase modulator is a reason for wrong phase difference that introduces an error in the angular velocity signal. Most existing residual amplitude modulation suppression methods are based on reduction of back reflections between an optical fiber and integrated optical waveguide, absorbing groove to suppress or reduce reflection on the bottom face, and algorithmic compensation. In this paper, new approach to reduce residual amplitude modulation in LiNbO₃ for fiber optical gyroscope application is presented. Method feature is an application of additional differential signal modulation with uniform amplitude distribution in the input signal voltage range of the phase modulator. The proposed method allows to suppress residual amplitude modulation of the multifunctional integrated optical circuit phase modulator more than 3 times using additional triangle signal modulation with the frequency f = 200.09 MHz and power P = 36 dBm. This method is suitable for improving fiber optical gyroscope accuracy. Moreover, it could be applied for any fiber-optic sensors based on LiNbO₃ phase modulator. The paper will be of interest to specialists in the field of highly sensitive fiber optical sensors, fiber, and integrated optics.

Keywords

residual amplitude modulation, phase modulator, fiber-optical gyroscope, lithium niobite, modulation

Aknowledgements

This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, goszadanie no. 2019-0923.

For citation: Vostrikov E.V., Umnova A.V., Aleinik A.S., Pogudin G.K., Strigalev V.E., Meschkovskii I.K. Application of additional high-frequency modulation to reduce influence of residual amplitude modulation LiNbO₃ phase modulator on fiber optical gyroscope signal. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 866–872 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-866-872

Введение

Волоконно-оптические датчики получили широкое распространение во многих областях науки и техники и до сих пор не теряют актуальность ввиду своих неоспоримых преимуществ [1, 2]. Волоконно-оптический гироскоп (ВОГ) — высокочувствительный датчик, способный детектировать значение угловой скорости менее 0,001 °/ч, что соответствует стратегическому классу точности. Фазовый модулятор является неотъемлемой частью ВОГ и необходим для стабилизации его рабочей точки на линейном участке интерферометрической функции [3–5]. Искажения оптического сигнала, возникающие в фазовом модуляторе, служат одним из определяющих факторов, ограничивающим точность ВОГ. В большинстве случаев фазовый модулятор используется в составе многофункциональной интегральной оптической схемы (МИОС), которая также выполняет функции оптического ответвителя и поляризатора. В научно-технической литературе выделяют фазовые искажения и амплитудные искажения, которые также называют паразитной амплитудной модуляцией (ПАМ) в фазовом модуляторе [6, 7]. Фазовые искажения проявляются в изменении фазы оптического сигнала при прохождении оптического излучения через фазовый модулятор без изменения управляющего напряжения. В то же время ПАМ в фазовом модуляторе проявляется в виде изменения интенсивности оптического излучения при прохождении через него оптического сигнала. Фазовые искажения и ПАМ являются причиной возникновения сигнала ошибки в высокочувствительных волоконно-оптических датчиках. Уменьшение фазовых искажений или ПАМ позволяют увеличить точностные характеристики ВОГ, в частности стабильность масштабного коэффициента и сигнала угловой скорости. В настоящей работе рассмотрена ПАМ оптического сигнала ВОГ. Традиционные способы подавления ПАМ основаны на: уменьшении отражений в местах стыковки оптических волокон; изготовлении поглощающих канавок для блокировки оптического излучения от нижней грани фазового модулятора; алгоритмических способах компенсации [3, 4, 6, 8, 9]. Предложенный новый подход — альтернатива традиционным способам и основан на использовании дополнительной модуляции дифференциальным сигналом.

Постановка задачи

Причины возникновения ПАМ в фазовом модуляторе: обратный пьезоэлектрический, фоторефрактивный и электрооптический эффекты; потери на стыковке; рэлеевское рассеяние; отражение оптического излучения от граней кристалла фазового модулятора; неравномерное распределение электрического поля в кристалле, что является причиной неравномерного показателя преломления в оптическом волноводе [8, 10–12]. Отражения от граней кристалла фазового модулятора, в местах стыковки с оптическими волокнами создают паразитные интерферометрические сигналы, которые вносят ошибку в сигнал угловой скорости ВОГ. Влияние ПАМ на полезный сигнал нелинейно и зависит от формы, частоты и распределения напряжений управляющего сигнала. Также, в связи с эффектами релаксации внутреннего электрического поля МИОС, подвижности заряженных дефектов и ОН-групп в приповерхностном слое кристалла ниобата лития, перезарядки барьерных емкостей на границе электрод-кристалл на ПАМ оптического сигнала МИОС влияет не только текущее состояние управляющего сигнала, но и предыдущее состояние. Применение управляющего сигнала с равномерным распределением напряжений в рабочем диапазоне позволяет усреднить влияние данных эффектов. Кроме того, использование дифференциального сигнала уменьшает влияние паразитных интерферометрических сигналов, возникающих в местах соединения волноводов МИОС с оптическими волокнами волоконно-оптической катушки ВОГ за счет разной фазовой задержки для каждого из сигналов. Применение противофазных сигналов для каждого из двух плеч фазового модулятора МИОС не вносит разность фаз в интерферометрический сигнал. Тем самым использование дополнительной модуляции совместно с основной модуляцией не окажет влияния на полезный сигнал угловой скорости ВОГ. Таким образом, в работе поставлена задача уменьшения влияния ПАМ фазового модулятора МИОС на сигнал ВОГ с применением дополнительной дифференциальной модуляции с равномерным распределением напряжений.

Типовая схема подключения МИОС

Использование интегрально-оптических схем позволяет уменьшить количество компонентов, оптических и электрических соединений и потери в оптической схеме. Для применения в ВОГ и стабилизации рабочей





Fig. 1. Typical connection scheme of multifunctional integrated optical circuit: U_{mod_FOG} — modulation signal source of FOG (fiber-optic gyroscope); φ_{mod} — phase shift in optical signal

точки на линейном участке интерферометрической функции в схеме Саньяка применена типовая схема подключения МИОС (рис. 1).

Принцип работы ВОГ известен и описан во многих работах [3, 4]. Выходное излучение оптического источника вводится в интегрально-оптическую схему и разделяется на две равные части посредством планарного Ү-ответвителя, далее через канальные волноводы оптическое излучение проходит через фазовый модулятор (фмод) и попадает в волоконно-оптическую катушку. К центральному электроду подключается положительный полюс источника управляющего сигнала $(U_{\text{мод}_BO\Gamma})$, боковые электроды соединяются между собой, чтобы обеспечить одинаковую напряженность электрического поля для каждого из двух плеч фазового модулятора. Изменение сигнала модуляции в ВОГ происходит с периодом τ, который соответствует времени обхода оптическим сигналом волоконно-оптической катушки. Итоговая разность фаз, вносимая фазовым модулятором МИОС, верна при любом τ и выражается формулой:

$$\Delta \varphi_{\rm M} = 2\varphi_{\rm MOI}(t) - 2\varphi_{\rm MOI}(t-\tau), \tag{1}$$

где $\Delta \phi_{\rm M}$ — итоговая разность фаз; $\phi_{\rm Mod}(t)$ и $\phi_{\rm Mod}(t-\tau)$ — фазы, которые добавляются в оптический сигнал в моменты времени (t) и (t – τ). Параллельно между центральными и боковыми электродами установлен высокоомный резистор с сопротивлением около 100 кОм для разрядки паразитных емкостей и выравнивания потенциалов электродов.

Описание предлагаемого метода

Конфигурация МИОС позволяет изменить способ подключения источника сигнала модуляции к его электродам. В таком случае управляющий сигнал модуляции поступает не на центральный электрод, а на боковые электроды МИОС, что лишь меняет полярность вносимой в оптический сигнал разности фаз. Применение дополнительного сигнала модуляции может быть реализовано с использованием преобразователя униполяр-



Рис. 2. Блок-схема формирования синфазного и дифференциального сигналов: $U_{\text{мод}_BOF}$ — источник сигнала модуляции ВОГ; $U_{\text{синф.}}$ — синфазный сигнал модуляции ВОГ; $U_{\text{доп}_мод.}$ — источник сигнала дополнительной модуляции, $U_{\text{дифф.}}$ — дифференциальный сигнал дополнительной модуляции; k — коэффициент усиления сигнала дополнительной модуляции

Fig. 2. Block diagram of common-mode and differential signals forming: U_{mod_FOG} — modulation signal source of FOG; $U_{\text{in-phase}}$ — in-phase modulation signal of FOG; $U_{\text{add}_\text{mod}}$ — additional modulation signal source; U_{diff} — differential additional modulation signal; k — gain of additional modulation signal

ного сигнала в дифференциальный и схемы сложения каждого из противофазных сигналов дополнительной модуляции с синфазными сигналами для каждого из боковых электродов. Для формирования синфазного и дифференциальных сигналов собрана электрическая схема, блок-схема которой представлена на рис. 2.

В качестве генератора дополнительного сигнала модуляции ($U_{\text{доп}_MOG}$) использована отладочная плата ReFLEX Atilla ARRIA 10 с высокочастотным цифро-аналоговым преобразователем прямого синтеза AD9164 с разрядностью 16 бит, частотой дискретизации $F_{\text{д}} = 5$ Гвыб/с, выходной мощностью $P_{\text{вых}} = 7$ дБм, полосой генерирования сигналов $F_{\text{пп}} = 2,5$ ГГц, которая

позволила сформировать сигналы произвольной формы [13]. В связи с широким диапазоном рабочих напряжений МИОС от минус 10 до 10 В выполнено увеличение мощности дополнительного сигнала модуляции с помощью усилительного каскада Усилителя с суммарным коэффициентом усиления 30 дБ и точкой децибельной компрессии $P_{1,\rm db}$ = 36 дБм. Для формирования дифференциального сигнала применен Балун компании Marki, для преобразования несимметричного сигнала в симметричный. Блок сложения сигналов объединил дифференциальный сигнал дополнительной модуляции и синфазный сигнал модуляции ВОГ ($U_{\rm мод}$ вог).

Сформированные сигналы модуляции поступают на электроды МИОС для дальнейшей модуляции оптического сигнала. Подключение МИОС для применения дополнительной модуляции дифференциальным сигналом представлено на рис. 3. С учетом дополнительного сигнала модуляции выражение (1) приобретает вид:

$$\Delta \phi_{\rm M} = \left[2 \varphi_{\rm cutq.}(t) + \varphi_{\rm duqq.}(t) - \varphi_{\rm duqq.}(t) \right] - \left[2 \varphi_{\rm cutq.}(t-\tau) + \varphi_{\rm duqq.}(t-\tau) - \varphi_{\rm duqq.}(t-\tau) \right],$$
(2)

где $\phi_{\text{синф.}}(t)$ и $\phi_{\text{синф.}}(t-\tau)$ — фазы, которые добавляются в оптический сигнал синфазной составляющей сигнала модуляции в моменты времени (t) и (t – τ); $\phi_{\text{дифф.}}(t)$ и $\phi_{\text{дифф.}}(t-\tau)$ — фазы, которые добавляются в оптический сигнал дифференциальной составляющей сигнала модуляции в моменты времени (t) и (t – τ).

Формулы (1) и (2) описывают операцию дифференцирования. Итоговая разность фаз определена разницей между текущим состоянием фазы и состоянием фазы, задержанным на время распространения в волоконно-оптической катушке (τ). В случае равенства противофазных составляющих дифференциального сигнала дополнительной модуляции формулу (2) можно упростить к виду $\Delta \phi_{\rm M} = 4\phi_{\rm синф.}$, тем самым разность фаз в сигнал угловой скорости ВОГ будет вносить только синфазная составляющая сигнала модуляции.

Для усреднения влияния эффектов, возникающих в фазовом модуляторе МИОС, предложено использовать



Рис. 3. Схема подключения многофункциональной интегрально-оптической схемы для применения дополнительной модуляции дифференциальным сигналом

Fig. 3. Multifunctional integrated optical circuit connection scheme for additional differential high-frequency modulation



Рис. 4. Оценка паразитной амплитудной модуляции фазового модулятора многофункциональной интегрально-оптической схемы без и с дополнительной модуляцией

Fig. 4. Residual amplitude modulation evaluation of multifunctional integrated optical circuit with additional differential high-frequency modulation and without it

сигнал с равномерным распределением напряжений. Такими сигналами являются: равномерный шум, треугольный и пилообразные сигналы. Преимущества использования треугольного или пилообразного сигналов: относительная простота создания сигналов по сравнению с равномерным шумом, а также возможность изменения их частоты.

Передаточная характеристика интерферометра Саньяка обладает максимумами и минимумами, которые определяются длиной и, следовательно, временем обхода оптического сигнала волоконно-оптической катушки (т). Частота сигнала модуляции для стабилизации рабочей точки ВОГ соответствует максимуму и определяется выражением:

$$f_p = \frac{1}{2\tau},$$

где f_p — собственная частота волоконно-оптической катушки.

Удвоенная частота $2f_p$, как и все четные частоты $(4f_p, 6f_p$ и т. д.) соответствуют минимумам передаточной функции интерферометра Саньяка [14, 15]. Таким образом, применение пилообразного или треугольного сигнала с частотой, соответствующей частоте одного из минимумов передаточной функции интерферометра Саньяка, позволяет увеличить ослабление сигнала дополнительной модуляции в дополнение к применению дифференциального сигнала.

Результаты эксперимента

Оценка ПАМ фазового модулятора МИОС осуществлена в составе ВОГ по методу, подробно описанному в работе [8]. На рис. 4 показаны зависимости нормированной интенсивности оптического излучения на выходе фазового модулятора МИОС от приложенного напряжения при разных мощностях дополнительной модуляции (диагональ ПАМ). Усреднение для каждого измерения составило 3 мин. В качестве дополнительного го дифференциального сигнала с равномерным распределением напряжений использован треугольный сигнал частотой 2936 $f_p = 200,09$ МГц (при $f_p = 68,15$ кГц).

Мощность сигнала (P) дополнительной модуляции измерена с помощью спектроанализатора Siglent SVA1015X. Амплитуда рассчитывается как половина размаха напряжения дополнительного сигнала модуляции $U_{\text{амп}} = U_{\text{размах}}/2$ для импеданса $Z_0 = 50$ Ом.

В ходе анализа представленных данных выявлено, что размах ПАМ в диапазоне рабочих напряжений от минус 10 В до 10 В уменьшился более чем в три раза с применением дополнительной модуляции дифференциальным сигналом с равномерным распределением напряжений и максимальной мощностью 36 дБм ($U_{\text{амп}} \approx 20$ В). Таким образом, эффективность предложенного метода по уменьшению ПАМ составила более 60 %.

Заключение

В работе представлен новый метод уменьшения влияния паразитных амплитудных искажений фазового модулятора многофункциональной интегрально-оптической схемы на сигнал волоконно-оптического гироскопа, основанный на введении дополнительной модуляции дифференциальным сигналом с равномерным распределением напряжений. Полученные результаты свидетельствуют об эффективности применения данного метода. Предложенный метод позволяет уменьшить влияние паразитной амплитудной модуляции фазового модулятора на сигнал угловой скорости более чем в три раза с применением треугольного сигнала частотой f = 200,09 МГц и мощностью P = 36 дБм в качестве сигнала дополнительной модуляции. Необходимые требования использования данного метода: наличие дополнительной электрической схемы для преобразования несимметричного сигнала дополнительной модуляции в дифференциальную форму и сложения с сигналом модуляции волоконно-оптического гироскопа. В дальнейших исследованиях планируется оценить влияние данного метода на сигнал угловой скорости волоконно-оптического гироскопа. Метод может быть использован в других волоконно-оптических датчиках, в которых используются фазовые модуляторы на основе кристалла ниобата лития.

Литература

- Wei L., Tjin S.C. Special issue «Fiber optic sensors and applications»: An overview // Sensors. 2020. V. 20. N 12. P. 3400. https://doi. org/10.3390/s20123400
- Волоконно-оптические датчики / под ред. Э.Удда. М.: Техносфера, 2008. 520 с.
- Lefevre H.C. The Fiber-Optic Gyroscope. Boston: Artech House, 2014. 391 p.
- Lefevre H.C., Martin P., Morisse J., Simonpietri P., Vivenot P., Arditti H.J. High-dynamic-range fiber gyro with all-digital signal processing // Proceedings of SPIE. 1991. V. 1367. P. 72–80. https:// doi.org/10.1117/12.24730
- Новиков А.В. Принцип работы волоконно-оптического гироскопа // Гео-Сибирь. 2006. Т. 4. С. 72–75 [Электронный ресурс]. URL: https://cyberleninka.ru/article/n/printsip-raboty-volokonnoopticheskogo-giroskopa (дата обращения: 15.03.2022).
- Wang D., Sheng F. Residuary intensity modulation of the phase modulator in IFOG and its measurement // Guangdian Gongcheng/ Opto-Electronic Engineering. 2007. V. 34. N 7. P. 26–29.
- Wang W., Wang J. Study of modulation phase drift in an interferometric fiber optic gyroscope // Optical Engineering. 2010. V. 49. N 11. P. 114401. https://doi.org/10.1117/1.3509360
- Погорелая Д.А. Исследование влияния фазовых и амплитудных искажений оптического сигнала в электрооптическом модуляторе на точностные характеристики волоконно-оптического гироскопа: диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук: 05.11.01. СПб.: Университет ИТМО, 2019. 155 с.
- Ishibashi C., Ye J., Hall J.L. Analysis/reduction of residual amplitude modulation in phase/frequency modulation by an EOM // Proc. of the Summaries of Papers Presented at the Quantum Electronics and Laser Science Conference. 2002. P. 91–92. https://doi.org/10.1109/ QELS.2002.1031144
- Петров В.М., Шамрай А.В. СВЧ интегрально-оптические модуляторы. Теория и практика: учебное пособие. СПб.: Университет ИТМО, 2021. 225 с.
- Mondain F., Brunel F., Hua X., Gouzien E., Zavatta A., Lunghi T., Doutre F., De Micheli M.P., Tanzilli S., D'Auria V. Photorefractive effect in LiNbO₃-based integrated-optical circuits for continuous variable experiments // Optics Express. 2020. V. 28. N 16. P. 23176– 23188. https://doi.org/10.1364/OE.399841
- Аксарин С.М., Смирнова А.В., Шулепов В.А., Парфенов П.С., Стригалев В.Е., Мешковский И.К. Исследование пироэлектрического спонтанного переключения доменов в межэлектродном зазоре фазового модулятора на основе титан-диффузионных волноводов в кристаллах ниобата лития // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2021. Т. 21. № 3. С. 361–373. https://doi.org/10.17586/2226-1494-2021-21-3-361-373
- Кузнецов В.Н., Литвинов Е.В., Востриков Е.В., Дейнека И.Г. Вспомогательный генератор сигнала произвольной формы для волоконно-оптического гироскопа // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22. № 2. С. 302–307. https://doi.org/10.17586/2226-1494-2022-22-2-307
- Vázquez C., Vargas E.S., Sanchez Pena J.M. Sagnac loop in ring resonators for tunable optical filters // Journal of Lightwave Technology. 2005. V. 23. N 8. P. 2555–2567. https://doi.org/10.1109/ JLT.2005.850793
- Chan E.H.W., Minasian R.A. Widely tunable, high-FSR, coherencefree microwave photonic notch filter // Journal of Lightwave Technology. 2008. V. 26. N 8. P. 922–927. https://doi.org/10.1109/ JLT.2007.912529

Авторы

Востриков Евгений Владимирович — инженер, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация; инженер, Innolume GmbH, Дортмунд, 44263, Германия, 57219034468, https://orcid.org/0000-0001-5682-5819, e.v.vostrikov@yandex.ru

Умнова Ангелина Валерьевна — инженер, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация; инженер, Hitachi Energy, Людвика, 771 31, Швеция, № 57381228100, https://orcid. org/0000-0001-7027-0178, aumnova@itmo.ru

References

- Wei L., Tjin S.C. Special issue «Fiber optic sensors and applications»: An overview. *Sensors*, 2020, vol. 20, no. 12, pp. 3400. https://doi. org/10.3390/s20123400
- Fiber Optic Sensors: An Introduction for Engineers and Scientists. Ed. by E. Udd. John Wiley & Sons, Inc., 2006.
- 3. Lefevre H.C. *The Fiber-Optic Gyroscope*. Boston, Artech House, 2014, 391 p.
- Lefevre H.C., Martin P., Morisse J., Simonpietri P., Vivenot P., Arditti H.J. High-dynamic-range fiber gyro with all-digital signal processing. *Proceedings of SPIE*, 1991, vol. 1367, pp. 72–80. https:// doi.org/10.1117/12.24730
- Novikov A.V. Operation principle of fiber optic gyroscope. *GEO-Siberia*, 2006, vol. 4, pp. 72–75. Available at: https://cyberleninka.ru/article/n/printsip-raboty-volokonno-opticheskogo-giroskopa (accessed: 15.03.2022). (in Russian)
- Wang D., Sheng F. Residuary intensity modulation of the phase modulator in IFOG and its measurement. *Guangdian Gongcheng/ Opto-Electronic Engineering*, 2007, vol. 34, no. 7, pp. 26–29.
- Wang W., Wang J. Study of modulation phase drift in an interferometric fiber optic gyroscope. *Optical Engineering*, 2010, vol. 49, no. 11, pp. 114401. https://doi.org/10.1117/1.3509360
- Pogorelaia D.A. Investigation of phase and amplitude distortions influence of an optical signal in an electro-optic modulator on the accuracy characteristics of a fiber optic gyroscope. Dissertation for the degree of candidate of technical sciences. St. Petersburg, ITMO University, 2019, 155 p. (in Russian)
- Ishibashi C., Ye J., Hall J.L. Analysis/reduction of residual amplitude modulation in phase/frequency modulation by an EOM. Proc. of the Summaries of Papers Presented at the Quantum Electronics and Laser Science Conference, 2002, pp. 91–92. https://doi.org/10.1109/ QELS.2002.1031144
- Petrov V.M., Shamrai A.V. Microwave Integrated Optical Modulators. Theory and Practice. Moscow, ITMO University, 2021, 225 p. (in Russian)
- Mondain F., Brunel F., Hua X., Gouzien E., Zavatta A., Lunghi T., Doutre F., De Micheli M.P., Tanzilli S., D'Auria V. Photorefractive effect in LiNbO₃-based integrated-optical circuits for continuous variable experiments. *Optics Express*, 2020, vol. 28, no. 16, pp. 23176–23188. https://doi.org/10.1364/OE.399841
 Aksarin S.M., Smirnova A.V., Shulepov V.A., Parfenov P.S.,
- Aksarin S.M., Smirnova A.V., Shulepov V.A., Parfenov P.S., Strigalev V.E., Meshkovskiy I.K. The study of spontaneous domain nucleation in the interelectrode gap of phase modulator based on titanium indiffused waveguides in lithium niobate crystals. *Scientific* and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2021, vol. 21, no. 3, pp. 361–373. (in Russian). https://doi. org/10.17586/2226-1494-2021-21-3-361-373
- Kuznetsov V.N., Litvinov E.V., Vostrikov E.V., Deyneka I.G. Auxiliary arbitrary waveform generator for fiber optic gyroscope. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 2, pp. 302–307. (in Russian). https://doi.org/10.17586/2226-1494-2022-22-2-302-307
- Vázquez C., Vargas E.S., Sanchez Pena J.M. Sagnac loop in ring resonators for tunable optical filters. *Journal of Lightwave Technology*, 2005, vol. 23, no. 8, pp. 2555–2567. https://doi. org/10.1109/JLT.2005.850793
- Chan E.H.W., Minasian R.A. Widely tunable, high-FSR, coherencefree microwave photonic notch filter. *Journal of Lightwave Technology*, 2008, vol. 26, no. 8, pp. 922–927. https://doi.org/10.1109/ JLT.2007.912529

Authors

Evgenii V. Vostrikov — Engineer, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation; Engineer, Innolume GmbH, Dortmund, 44263, Germany, **5**7219034468, https://orcid.org/0000-0001-5682-5819, e.v.vostrikov@yandex.ru

Angelina V. Umnova — Engineer, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation; Engineer, Hitachi Energy, Ludvica, 77131, Sweden, 57381228100, https://orcid.org/0000-0001-7027-0178, aumnova@itmo.ru

Алейник Артём Сергеевич — кандидат технических наук, доцент, заведующий лабораторией, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, 554793978900, https://orcid.org/0000-0002-7682-348X, artemal@itmo.ru

Погудин Григорий Константинович — инженер, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, https://orcid. org/0000-0002-7280-0985, gkpogudin@itmo.ru

Стригалев Владимир Евгеньевич — кандидат физико-математических наук, доцент, профессор, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, 🚾 6603225596, https://orcid.org/0000-0002-7151-9235, vestrigalev@itmo.ru

Мешковский Игорь Касьянович — доктор технических наук, профессор, профессор, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, 😨 6603640937, https://orcid.org/0000-0003-3470-1000, igorkm@itmo.ru Artem S. Aleinik — PhD, Associate Professor, Head of Laboratory, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, 54793978900, https://orcid.org/0000-0002-7682-348X, artemal@ itmo.ru

Grigorii K. Pogudin — Engineer, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0002-7280-0985, gkpogudin@itmo.ru

Vladimir E. Strigalev — PhD (Physics & Mathematics), Associate Professor, Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, S 6603225596, https://orcid.org/0000-0002-7151-9235, vestrigalev@itmo.ru

Igor K. Meschkovskii — D. Sc., Full Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, **10** 6603640937, https://orcid.org/0000-0003-3470-1000, igorkm@itmo.ru

Статья поступила в редакцию 30.04.2022 Одобрена после рецензирования 23.08.2022 Принята к печати 27.09.2022



Approved after reviewing 23.08.2022 Accepted 27.09.2022

Received 30.04.2022

Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» **I/İTMO**

HAVЧHO-TEXHИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 No 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКІ

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-873-880 УДК 621.383.522

Расчет и оптимизация оптической схемы фотоприемного модуля спектрального диапазона 1,3–1,6 мкм

Яков Николаевич Ковач¹[∞], Владислав Васильевич Андрюшкин², Евгений Сергеевич Колодезный³, Иннокентий Игоревич Новиков⁴, Артем Александрович Петренко⁵, Анна Владимировна Камарчук⁶, Станислав Станиславович Рочас⁷, Дмитрий Андреевич Бауман⁸

1,2,3,4,5,6,7,8 Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

¹ j-n-kovach@itmo.ru[⊠], https://orcid.org/0000-0003-4858-4968

² vvandriushkin@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-7471-8627

³ evgenii_kolodeznyi@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-3056-8663

⁴ innokenty.novikov@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0003-1983-0242

⁵ aapetrenko@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-7862-971X

⁶ annakamarchuck@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-2953-0334

⁷ stanislav_rochas@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-6519-2897

⁸ dabauman@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-5762-5920

Аннотация

Предмет исследования. Рассмотрен метод проектирования и оптимизации оптической схемы фотоприемного модуля, содержащего одномодовое оптическое волокно и полупроводниковый p-i-n фотодиод с активной областью InGaAs, чувствительной к оптическому излучению диапазона 1.3-1.6 мкм. Исследована проблема потерь оптической мощности при согласовании расположенных в фотоприемном модуле оптического волокна и активной области p-i-n фотодиода, что приводит к уменьшению спектральной фоточувствительности и внешней квантовой эффективности модуля. Метод. Оптимизация оптической схемы стыковки оптического волокна и *p-i-n* фотодиода выполнена с использованием программного комплекса Zemax® с применением встроенного алгоритма Левенберга-Марквардта. Выполнены численные расчеты влияния продольных и поперечных сдвигов оптического волокна на качество оптической стыковки в фотоприемном модуле и его фоточувствительность. Основные результаты. Предложена и оптимизирована оптическая схема фотоприемного модуля на базе стандартного металлостеклянного корпуса. Определено оптимальное расстояние между элементами системы, при котором более 93 % излучения, выходящего из оптического волокна, достигает активной области p-i-n фотодиода. Найдена предельная чувствительность линейных микротрансляторов, необходимых для сборки фотоприемных модулей и обеспечения юстировки оптических элементов. Получена эффективность согласования оптического волокна с активной областью *p-i-n* фотодиода более 90 %. Практическая значимость. Результаты работы могут быть использованы при проектировании фотоприемных модулей инфракрасного диапазона. Предложенные решения найдут применение при создании фотоприемных модулей для использования в других спектральных диапазонах.

Ключевые слова

оптическая стыковка, фотоприемный модуль, оптимизация, программный комплекс Zemax®

Благодарности

Моделирования оптических систем и расчетов фоточувствительности выполнены при финансовой поддержке Программы создания и развития Центра компетенций НТИ по направлению «Фотоника» при государственной поддержке Фонда поддержки проектов Национальной технологической инициативы и Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (договор предоставления гранта № 70-2021-00309 от 18.12.2021; договор на выполнение ОКТР № 763 от 26.04.2022); в части характеризации гетероструктур работа выполнена при финансовой поддержке программы «Приоритет 2030».

© Ковач Я.Н., Андрюшкин В.В., Колодезный Е.С., Новиков И.И., Петренко А.А., Камарчук А.В., Рочас С.С., Бауман Д.А., 2022

Ссылка для цитирования: Ковач Я.Н., Андрюшкин В.В., Колодезный Е.С., Новиков И.И., Петренко А.А., Камарчук А.В., Рочас С.С., Бауман Д.А. Расчет и оптимизация оптической схемы фотоприемного модуля спектрального диапазона 1,3–1,6 мкм // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 873–880. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-873-880

Optimization of the optical scheme of a photodetector module operating in the spectral range of 1.3–1.6 µm

Yakov N. Kovach^{1⊠}, Vladislav V. Andryushkin², Evgenii S. Kolodeznyi³, Innokenty I. Novikov⁴, Artem A. Petrenko⁵, Anna V. Kamarchuk⁶, Stanislav S. Rochas⁷, Dmitrii A. Bauman⁸

1,2,3,4,5,6,7,8 ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

¹ j-n-kovach@itmo.ru^{\equiv}, https://orcid.org/0000-0003-4858-4968

² vvandriushkin@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-7471-8627

³ evgenii_kolodeznyi@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-3056-8663

⁴ innokenty.novikov@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0003-1983-0242

⁵ aapetrenko@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-7862-971X

⁶ annakamarchuck@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-2953-0334

⁷ stanislav_rochas@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-6519-2897

8 dabauman@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-5762-5920

Abstract

Optical system consisting of single-mode optical fiber and *p-i-n* photodiode semiconductor chip with InGaAs active layer was investigated. Considered photodetector module has responsivity in $1.3-1.6 \mu$ m. The problem of optical power loss due to inaccurate matching between the optical fiber and the active medium of photodiode in photodetector modules is investigated; resolving the power loss problem will lead to an increase in the spectral photosensitivity and external quantum efficiency of the photodetector module. Optimization of optical fiber coupling with semiconductor chip was implemented in Zemax® software with built-in Levenberg–Marquardt algorithm. Also, numerical calculations of the influence of the transverse and longitudinal displacement on optical coupling efficiency in the photodetector module were carried out. The optical system of photodetector module based on standard metal can package was built in Zemax® software. Optimal distances between elements of the photodetector module were calculated, and maximum efficiency of 93.1 % optical coupling between single-mode fiber and photodiode aperture was achieved. The necessary sensitivity of linear micro translators used during the assembly of photodetector modules was determined to ensure the alignment of optical elements with coupling efficiency more than 90 %. The results of this work can be used in the design of photodetector modules. The proposed solutions can be relatively easily modified to create photodetector modules of other spectral ranges.

Keywords

optical coupling, photodetector module, optimization, Zemax® software

Acknowledgements

This work was supported by the Program of the Formation and Development of the NTI Center of Excellence in Photonics with the government support of the Foundation for National Technology Initiative's Project Support and the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (grant agreement No. 70-2021-00309 of 12.18.2021; R&D contract No. 763 of 26.04.2022) for the part of optical modeling and photoresponsivity calculation and by Priority 2030 program for the part of heterostructure characterization.

For citation: Kovach Y.N., Andryushkin V.V., Kolodeznyi E.S., Novikov I.I., Petrenko A.A., Kamarchuk A.V., Rochas S.S., Bauman D.A. Optimization of the optical scheme of a photodetector module operating in the spectral range of 1.3–1.6 µm. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 873–880 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-873-880

Введение

Приборные структуры оптоэлектронных устройств требуется защищать от воздействий внешней среды, так как она оказывает значительное влияние на состояние поверхности структуры прибора, из-за чего в процессе эксплуатации могут сильно изменяться характеристики прибора. Для обеспечения защиты приборные структуры размещают в корпусах, среди которых самые распространенные — корпуса типа ТО и «Butterfly» [1, 2]. При этом во время разработки фотоприемных модулей важным вопросом является обеспечение оптической стыковки ОВ (оптического волокна) с входным окном фотоприемника: от ее качества будет зависеть итоговая спектральная фоточувствительность модуля [3].

Часто для обеспечения оптического согласования ОВ реализуют конструкцию оптоэлектронного модуля, где ОВ расположено напротив входного окна фотодиода. Однако в таком случае расстояние между ОВ и *p-i-n* фотодиодом составляет порядка 0,2–0,4 мм, что значительно меньше, чем размеры стандартного корпуса типа ТО. В таком случае для оптической стыковки со свободным распространением выходящего из ОВ излучения требуется применять кристаллодержатель.

Еще один распространенный метод оптического согласования — использование в конструкции модуля фокусирующей линзы. В работе [4] предложено разместить на торце ОВ полимерную сферическую микролинзу или применить волоконную линзу, которую возможно получить при помощи травления или плавления конца OB [5]. Также используют системы с микролинзой, которую применяют как в конструкции отдельного фотоприемного модуля [6], так и в конструкции оптико-электронных межсоединений на печатной плате [7].

Наиболее патентуемыми являются конструкции BOSA (Bidirectional Optical Sub-Assembly), которые содержат приемник и передатчик излучения [8–10].

В конструкциях приемников излучения с микролинзами [11–13] предложены устройства, которые обеспечивают разъемное соединение с ОВ, тогда как в настоящей работе использован фотоприемный модуль с оптическим волокном, на конце которого смонтирован разъемный коннектор типа FC/APC.

В оптоэлектронных устройствах для расчета оптического согласования применяется метод Монте-Карло, с помощью которого производят расчеты для лазерных [14, 15] и фотоприемных модулей [7, 16, 17].

Простота реализации численного моделирования позволяет оценить влияние качества оптических элементов или точности их установки на оптическое согласование в системе.

В настоящей работе рассмотрена конструкция фотоприемного модуля без использования кристаллодержателя, который может усложнить схему электрического согласования импедансов и процесс сборки. Отметим, что при применении одиночной сферической микролинзы в конструкции модуля возможно выполнить монтаж *p-i-n* фотодиода в стандартный металлостеклянный корпус типа ТО со значительно большим допуском. Возможно произвести герметизацию корпуса до операции оптической стыковки, что упрощает технологический маршрут фотоприемного модуля.

Описание элементов оптической системы фотоприемного модуля

При описании численной модели в непоследовательном режиме программного комплекса Zemax® заданы следующие основные объекты: источник излучения с оптической мощностью 10 мВт, длиной волны 1550 нм, диаметром модового пятна 10,4 мкм и числовой апертурой 0,14¹. Для описания фоточувствительной области *p-i-n* фотодиода использован квадратный детектор излучения со следующими характеристиками: размером 40×40 мкм и количеством пикселов 500×500 .

Для создания качественной модели *p-i-n* фотодиода проведено исследование его гетероструктуры (см. таблицу), выращенной с помощью установки RIBER49 методом молекулярно-пучковой эпитаксии на подложке InP. Исследованная фотолюминесценция гетероструктуры (рис. 1, *a*) подтвердила свое высокое структурное совершенство и позволяет судить об измеренных далее спектрах отражения как истинных спектрах отражения гетероструктуры *p-i-n* фотодиода.

Для исследования спектра отражения от гетероструктуры в программном комплексе Zemax® заданы дисперсионные кривые материалов в спектральном диапазоне 1-1,6 мкм следующих материалов: In_{0,53}Ga_{0,47}As [18, 19], In_{0.52}Al_{0.48}As [19, 20], InP [21], Si₃N₄ [22] и градиентного слоя $In_{0.53}Ga_{0.47}As-In_{0.52}Al_{0.48}As$ (таблица). Показатель преломления градиентного слоя рассчитан как среднее арифметическое значение для двух указанных материалов. Слой Si₃N₄ толщиной 0,2 мкм [23] использован для уменьшения обратного отражения на границе раздела гетероструктура-воздух. На рис. 1, b представлены расчетные и экспериментальные спектры отражения для гетероструктуры, из которых видно, что отражение оказалось меньше, а его использование уменьшает ошибку численной модели спектра отражения *p-i-n* фотодиода в среднем на 3,51 % в спектральном диапазоне 1,3-1,6 мкм.

В качестве критерия оптической прочности часто рассматривается следующая комбинация механических и тепловых характеристик, от которых зависит нагрев *p-i-n* фотодиода при его облучении оптическим излучением [24]:

¹ G.652: Characteristics of a single-mode optical fibre and cable [Электронный ресурс]. 2016. URL: https://www.itu.int/ rec/T-REC-G.652-201611-I/en (дата обращения: 20.09.2021).

Назначение слоя	Материал слоя	Толщина слоя, нм	Тип полупроводника	Концентрация, см ⁻³ , и материал легирующей примеси	Показатель преломления слоя на длине волны 1550 нм
Просветляющий	Si ₃ N ₄	200		_	3,166
Контактный	In _{0,53} Ga _{0,47} As	100	р	1·10 ¹⁹ , C	3,532
Градиентный	In _{0,52} Al _{0,48} As- In _{0,53} Ga _{0,47} As	25	р	1·10 ¹⁹ , C	3,366
Барьерный	In _{0,52} Al _{0,48} As	100	р	3·10 ¹⁸ , C	3,201
Поглощающий	In _{0,53} Ga _{0,47} As	1000	i	_	3,532
Окно	In _{0,52} Al _{0,48} As	100	п	5·10 ¹⁸ , Si	3,201
Градиентный	$ \begin{array}{c} In_{0,53}Ga_{0,47}As\text{-}\\ In_{0,52}Al_{0,48}As \end{array} $	25	п	5·10 ¹⁸ , Si	3,366
Контактный	In _{0,53} Ga _{0,47} As	500	п	5·10 ¹⁸ , Si	3,532
Подложка	InP	_		_	3,154

Таблица. Исследованная гетероструктура *p-i-n* фотодиода *Table*. Examined *p-i-n* photodiode heterostructure



Puc. 1. Измеренный спектр фотолюминесценции (*a*); рассчитанные и экспериментальный спектры отражения (*b*) *Fig. 1.* Measured photoluminescence spectrum (*a*); *p-i-n* heterostructure reflection spectra (*b*)

$$\varepsilon = \frac{\sigma_y \lambda_t}{\alpha K E},\tag{1}$$

где σ_y — предел упругости; λ_t — теплопроводность; α — коэффициент линейного расширения; K — коэффициент поглощения; E — модуль упругости.

При расчете критерия оптической прочности для InGaAs использованы следующие значения: $\sigma_y = 5,3\cdot10^8 \text{ кг/m}^2 [25]; \lambda_t = 5 \text{ Br/(K·m)}, \alpha = 5,66\cdot10^{-6} \text{ l/K}, E = 8,5\cdot10^9 \text{ кг/m}^2$ взяты из база данных института им. А. Ф. Иоффе¹; $K = 7,717\cdot10^5 \text{ m}^{-1} [26]$. Элементарный рассматриваемый участок активной области является квадратом со стороной 40 нм, из чего критическое значение оптической прочности (1) составляет 4,46·10¹³ Br/m².

Материалом микролинзы в Zemax® задан плавленый кварц, который при толщине образца 10 мм пропускает 93 % излучения на длине волны 1550 нм, а величина показателя преломления при этом составляет 1,44². Выбранный радиус сферической микролинзы, равный 670 мкм, должен позволить сконструировать компактную систему, но при этом сохранить относительную легкость юстировки.

Отметим, что в Zemax® была добавлена модель стандартного металлостеклянного корпуса ТО-46, выполненная в системе автоматизированного проектирования по спецификации³. Часть корпуса, созданная из кевлара, задана как полностью поглощающая, при этом входное окно — сапфир, показатель преломления которого равен 1,7462 [27]. На поверхности входного окна корпуса и микролинзы задан просветляющий слой MgF₂ толщиной 0,2 мкм.

Результаты численного моделирования оптического согласования

Выполним расчет начального значения фокусного расстояния линзы по формуле для идеальной толстой линзы:

$$\frac{1}{f} = (n-1) \left[\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_2} + \frac{(n-1)d}{nR_1R_2} \right],$$
(2)

где *f* — фокальное расстояние; *n* — показатель преломления линзы; *R*₁ и *R*₂ — радиусы кривизны поверхностей; *d* — толщина линзы.

Для рассматриваемой сферической микролинзы значение фокусного расстояния по формуле (2) равно 1,09 мм. Зададим данное значение между ОВ и активной областью фотодиода. Проведем оптимизацию фокусного расстояния между элементами системы для максимизации освещенности фотоприемной площадки. При этом в Редакторе функции качества (Merit Function Editor) использован единственный операнд NSDD и встроенный в программный комплекс Zemax® алгоритм оптимизации Левенберга–Марквардта [28].

На рис. 2 показаны оптическая система фотоприемного модуля после оптимизации и итоговая освещенность активной области фотодиода. Эффективность согласования в такой системе составила 93,1 %.

При помощи идеальной линзы возможно сфокусировать все приходящее излучение в точку, чего следует избегать при оптическом согласовании: так как может

¹ NSM Archive — Physical properties of Gallium Indium Arsenide (GaInAs) [Электронный ресурс]. URL: http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/GaInAs/ (дата обращения: 05.10.2021).

² Fused Silica: Fused Silica windows and lenses | Alkor Technologies [Электронный ресурс]. URL: http://www.alkor. net/FusedSilica_windows_and_lenses.html (дата обращения: 28.09.2021).

³ TO-46 4 pin packadge || AMT8210 datasheet [Электронный pecypc]. URL: https://www.datasheetarchive.com/pdf/download. php?id=72536020a38b07c83a3f61673a84a3d0bb5b61&type=P&

term=4%2520PIN%2520TO46%2520package (дата обращения: 15.03.2022).

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2022, том 22, № 5 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no 5





Рис. 2. Оптическая система фотоприемного модуля со сферической микролинзой (*a*); результирующее распределение освещенности фотодиода (*b*)

Fig. 2. Optical system of the photodetector module with a spherical microlens (a); resulting photodiode illumination distribution (b)

быть превышено критическое значение оптической прочности, что приведет к выходу *p-i-n* фотодиода из строя. Также при малом диаметре распределения оптического излучения освещенность активного слоя будет выше, и тогда возможна ситуация насыщения фототока [29], что в итоге означает уменьшение спектральной чувствительности фотоприемного модуля.

В предложенной конструкции фотоприемного модуля также возможно управлять диаметром освещенного участка, обеспечивая требуемый уровень оптического согласования. Отметим, что конфигурацию системы с одиночной сферической микролинзой возможно назвать универсальной для осуществления оптической стыковки ОВ и *p-i-n* фотодиода в фотоприемных модулях, которые реализованы в стандартных металлостеклянных ТО корпусах.

По выполненному расчету, который был аналогичен расчетам в работах [30, 31], монохроматическая фоточувствительность гетероструктуры (табл. 1) составила 1,126 А/Вт на длине волны 1550 нм. Тогда, учитывая рассчитанную эффективность оптического согласования, значение фоточувствительности для рассматриваемой конструкции фотоприемного модуля равна 1,047 А/Вт, что превосходит представленные на рынке аналоги.

Расчет влияния сдвигов оптического волокна на качество оптической стыковки

Проведем анализ влияния продольного и поперечного сдвигов ОВ на эффективность оптической стыковки в конфигурации фотоприемного модуля со сферической микролинзой. В разделе «Результаты численного моделирования оптического согласования» было описано, что при оптического согласовании следует избегать фокусировки оптического излучения в точку (рис. 3). В связи с этим для осуществления качественной оптической стыковки ОВ с фотодиодом требуется расположить последний на таком расстоянии, где достигается наибольший размер модового пятна, но эффективность стыковки при этом отличается незначительно от максимальной.

На рис. 4 показаны результаты расчетов для продольных и поперечных сдвигов ОВ от исходного положения, полученного в ходе оптимизации оптической системы фотоприемного модуля.

Видно, что из-за наличия фокусирующего элемента оптическая система гораздо чувствительнее к децентрировке, чем к смещению в продольном направлении к оптической оси. Исходя из полученных данных возможно судить о требуемой точности микрометровых транс-



Рис. 3. Распределение освещенности фотоприемного окна *p-i-n* фотодиода при продольных сдвигах оптического волокна от положения, определенного в ходе оптимизации

Fig. 3. Illumination distribution on the crystal photoreceiving window at longitudinal shifts of the optical fiber decentering



Рис. 4. Эффективность оптического согласования для продольных (a) и поперечных (b) смещений. Зеленая зона — участки, в которых диаметр модового пятна превышает 20 мкм; красная зона — участки, где превышен порог лучевой прочности; черная горизонтальная линия — эффективность согласования при децентрировке оптического волокна *Fig. 4.* The efficiency of optical matching for longitudinal displacements where the green zone on the graph marks the areas in

which the spot diameter exceeds 20 µm with the matching efficiency exceeding 90 %; and the red zone marks the area in which the radiation strength threshold was exceeded (*a*); efficiency of optical matching at optical fiber decentering (*b*)

ляторов для конечной юстировки оптической системы. Так, точности трансляторов равной 1 мкм оказалось достаточно, чтобы осуществить оптическую стыковку ОВ и фотодиода с диаметром апертуры 40 мкм.

Заключение

В работе рассмотрена универсальная конструкция фотоприемного модуля, реализованная на основе стандартного металлостеклянного корпуса, которая позволяет осуществить оптическую стыковку оптического волокна с *p-i-n* фотодиодом в независимости от диаметра апертуры его активной области. Настоящая конструкция позволяет отказаться от использования кристаллодержателя и значительно снизить требования к точности посадки *p-i-n* фотодиода при его монтаже в стандартный металлостеклянный корпус.

Литература

- Tekin T. Review of packaging of optoelectronic, photonic, and MEMS components // IEEE Journal on Selected Topics in Quantum Electronics. 2011. V. 17. N 3. P. 704–719. https://doi.org/10.1109/ JSTQE.2011.2113171
- Zimmermann L., Preve G.B., Tekin T., Rosin T., Landles K. Packaging and assembly for integrated photonics — a review of the ePIXpack photonics packaging platform // IEEE Journal on Selected Topics in Quantum Electronics. 2011. V. 17. N 3. P. 645–651. https:// doi.org/10.1109/JSTQE.2010.2084992
- Fischer-Hirchert U.H.P. Photonic Packaging Sourcebook. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2015. 325 p. https://doi.org/10.1007/978-3-642-25376-8
- Zaboub M., Guessouma A., Demaghab N.-E., Guermata A. Fabrication of polymer microlenses on single mode optical fibers for light coupling // Optics Communications. 2016. V. 366. P. 122–126. https://doi.org/10.1016/j.optcom.2015.12.010
- 5. Latry O., Ketata M., Ketata K., Debrie R. Optimization of the coupling between a tapered fibre and a p-i-n photodiode // Journal of

В ходе оптимизации оптической системы фотоприемного модуля достигнута эффективность согласования 93,1 % при гауссовом распределении освещенности по фоточувствительной площадке. Определено требуемое позиционирование оптического волокна в системе, при котором поддерживается высокая эффективность согласования и диаметр модового пятна более 20 мкм.

При помощи численного модулирования исследовано влияние продольных и поперечных сдвигов на эффективность согласования оптической схемы. Проведенные вычисления позволяют определить требуемую точность юстировки оптических элементов модуля и, следовательно, требования к микрометровым линейным трансляторам, которые используются во время сборки фотоприемного модуля: для *p-i-n* фотодиода с апертурой 40 мкм достаточным является разрешение транслятора 1 мкм.

References

- Tekin T. Review of packaging of optoelectronic, photonic, and MEMS component. *IEEE Journal on Selected Topics in Quantum Electronics*, 2011, vol. 17, no. 3, pp. 704–719. https://doi.org/10.1109/ JSTQE.2011.2113171
- Zimmermann L., Preve G.B., Tekin T., Rosin T., Landles K. Packaging and assembly for integrated photonics — a review of the ePIXpack photonics packaging platform. *IEEE Journal on Selected Topics in Quantum Electronics*, 2011, vol. 17, no. 3, pp. 645–651. https://doi.org/10.1109/JSTQE.2010.2084992
- Fischer-Hirchert U.H.P. *Photonic Packaging Sourcebook*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2015, 325 p. https://doi.org/10.1007/978-3-642-25376-8
- Zaboub M., Guessouma A., Demaghab N.-E., Guermata A. Fabrication of polymer microlenses on single mode optical fibers for light coupling. *Optics Communications*, 2016, vol. 366, pp. 122–126. https://doi.org/10.1016/j.optcom.2015.12.010
- 5. Latry O., Ketata M., Ketata K., Debrie R. Optimization of the coupling between a tapered fibre and a p-i-n photodiode. *Journal of*

Physics D: Applied Physics. 1995. V. 28. N 8. P. 1562–1572. https://doi.org/10.1088/0022-3727/28/8/004

- Sakai K., Kawano M., Aruga H., Takagi S.-I., Kaneko S.-I., Suzuki J., Negishi M., Kondoh Y., Fukuda K.-I. Photodiode packaging technique using ball lens and offset parabolic mirror // Journal of Lightwave Technology. 2009. V. 27. N 17. P. 3874–3879. https://doi.org/10.1109/ JLT.2009.2020068
- Mangal N., Missinne J., Van Campenhout J., Snyder B., Van Steenberge G. Ball lens embedded through-package via to enable backside coupling between silicon photonics interposer and boardlevel interconnects // Journal of Lightwave Technology. 2020. V. 38. N 8. P. 2360–2369. https://doi.org/10.1109/JLT.2020.2966446
- Ori T., Masuko K. Bi-directional optical module. Patent US7917036B2. 2011. P. 20.
- Wang K.-W., Lin C.-C., Li C.-J., Chang C., Shih T.-T., Chuang Y.-C. Wavelength division multiplexing and demultiplexing transistor outline (TO)-can assemblies for use in optical communications, and methods. Patent US9784919B2. 2017. P. 15.
- Baek J.-M., Park J.-W. Bidirectional optical transceiver. Patent US7281865B2, 2007. P. 13.
- Ball lans unit for transmitter/receiver optical sub assembly of transceiver, and apparatus and method for manufacturing the same. Patent KR100746260B1. 2007. P. 12. (in Korean)
- Blasingame R.W., Chen B.S., Lee J.C., Orenstein J.D., Guenter J.K. Pluggable optical optic system having a lens fiber stop. Patent US7298942B2. 2007. P. 14.
- 13. Optical sub-module structure for optical fibre transceiver. Patent CN2607584Y. 2003. P. 20. (in Chinese)
- Lu S., Zhang F., Xu C., Duan J. Coupling efficiency of a laser diode to a single-mode fiber via a microlens on the fiber tip // Optical Fiber Technology. 2022. V. 68. P. 102766. https://doi.org/10.1016/j. yofte.2021.102766
- Junhong Y., Linhui G., Hualing W., Huicheneng M., Hao T., Songxin G., Deyong W. Analysis influence of fiber alignment error on laser-diode fiber coupling efficiency // Optik. 2016. V. 127. N 6. P. 3276–3280. https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2015.11.219
- Ramesh R., Tiwari N., Joshi P. Design of a coupling lens assembly and study on the impact of optical misalignments and variations of lens assembly on BER of a system // Proc. of the 2017 International Conference on Nextgen Electronic Technologies: Silicon to Software (ICNETS2). 2017. P. 10–13. https://doi.org/10.1109/ ICNETS2.2017.8067886
- Yang C.-C., Huang Y.-H., Peng T.-C., Wu M.-C., Ho C.-L., Hong C.-C., Liu I.-M., Tsai Y.-T. Monte Carlo ray trace simulation for micro-ball-lens-integrated high-speed InGaAs p-i-n photodiodes // Journal of Applied Physics. 2007. V. 101. N 3. P. 033107. https:// doi.org/10.1063/1.2432484
- Engelbrecht J.A.A. An assessment of some theoretical models used for the calculation of the refractive index of InXGa1–xAs // Physica B: Condensed Matter. 2018. V. 535. P. 8–12. https://doi.org/10.1016/j. physb.2017.05.047
- Dinges H.W., Burkhard H., Lösch R., Nickel H., Schlapp W. Refractive indices of InAlAs and InGaAs/InP from 250 to 1900 nm determined by spectroscopic ellipsometry // Applied Surface Science. 1992. V. 54. P. 477–481. https://doi.org/10.1016/0169-4332(92)90090-K
- Dinges H.W., Burkhard H., Lösch R., Nickel H., Schlapp W. Determination of refractive indexes of In_{0.52}Al_{0.48}As on InP in the wavelength range from 250 to 1900 nm by spectroscopic ellipsometry // Materials Science and Engineering: B. 1993. V. 20. N 1–2. P. 180– 182. https://doi.org/10.1016/0921-5107(93)90423-K
- Pettit G.D., Turner W.J. Refractive index of InP // Journal of Applied Physics. 1965. V. 36. N 6. P. 2081. https://doi. org/10.1063/1.1714410
- Luke K., Okawachi Y., Lamont M.R.E., Gaeta A.L., Lipson M. Broadband mid-infrared frequency comb generation in a Si₃N₄ microresonator // Proc. of the Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO). 2015. P. 7184257. https://doi.org/10.1364/CLEO_ SI.2015.STu4I.8
- Kolodeznyi E.S., Novikov I.I., Gladyshev A.G., Rochas S.S., Sharipo K.D., Karachinsky L.Ya., Egorov A.Yu., Bougrov V.E. Study of antireflection coatings for high-speed 1.3–1.55 μm InGaAs/InP PIN photodetector // Materials Physics and Mechanics. 2017. V. 32. N 2. P. 194–197. https://doi.org/10.18720/MPM.3222017-11
- Блистанов А.А. Кристаллы квантовой и нелинейной оптики. М.: МИСИС, 2000. 432 с.

Physics D: Applied Physics, 1995, vol. 28, no. 8, pp. 1562–1572. https://doi.org/10.1088/0022-3727/28/8/004

- Sakai K., Kawano M., Aruga H., Takagi S.-I., Kaneko S.-I., Suzuki J., Negishi M., Kondoh Y., Fukuda K.-I. Photodiode packaging technique using ball lens and offset parabolic mirror. *Journal of Lightwave Technology*, 2009, vol. 27, no. 17, pp. 3874–3879. https://doi. org/10.1109/JLT.2009.2020068
- Mangal N., Missinne J., Van Campenhout J., Snyder B., Van Steenberge G. Ball lens embedded through-package via to enable backside coupling between silicon photonics interposer and boardlevel interconnects. *Journal of Lightwave Technology*, 2020, vol. 38, no. 8, pp. 2360–2369. https://doi.org/10.1109/JLT.2020.2966446
- 8. Ori T., Masuko K. Bi-directional optical module. *Patent* US7917036B2, 2011, pp. 20.
- Wang K.-W., Lin C.-C., Li C.-J., Chang C., Shih T.-T., Chuang Y.-C. Wavelength division multiplexing and demultiplexing transistor outline (TO)-can assemblies for use in optical communications, and methods. *Patent US9784919B2*, 2017, pp. 15.
- 10. Baek J.-M., Park J.-W. Bidirectional optical transceiver. Patent US7281865B2, 2007, pp. 13.
- Ball lans unit for transmitter/receiver optical sub assembly of transceiver, and apparatus and method for manufacturing the same. *Patent KR100746260B1*, 2007, pp. 12. (in Korean)
- Blasingame R.W., Chen B.S., Lee J.C., Orenstein J.D., Guenter J.K. Pluggable optical optic system having a lens fiber stop. *Patent* US7298942B2, 2007, pp. 14.
- 13. Optical sub-module structure for optical fibre transceiver. *Patent CN2607584Y*, 2003, pp. 20. (in Chinese)
- Lu S., Zhang F., Xu C., Duan J. Coupling efficiency of a laser diode to a single-mode fiber via a microlens on the fiber tip. *Optical Fiber Technology*, 2022, vol. 68, pp. 102766. https://doi.org/10.1016/j. yofte.2021.102766
- Junhong Y., Linhui G., Hualing W., Huicheneng M., Hao T., Songxin G., Deyong W. Analysis influence of fiber alignment error on laser-diode fiber coupling efficiency. *Optik*, 2016, vol. 127, no. 6, pp. 3276–3280. https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2015.11.219
- Ramesh R., Tiwari N., Joshi P. Design of a coupling lens assembly and study on the impact of optical misalignments and variations of lens assembly on BER of a system. *Proc. of the 2017 International Conference on Nextgen Electronic Technologies: Silicon to Software* (*ICNETS2*), 2017, pp. 10–13. https://doi.org/10.1109/ ICNETS2.2017.8067886
- Yang C.-C., Huang Y.-H., Peng T.-C., Wu M.-C., Ho C.-L., Hong C.-C., Liu I.-M., Tsai Y.-T. Monte Carlo ray trace simulation for micro-ball-lens-integrated high-speed InGaAs p-i-n photodiodes. *Journal of Applied Physics*, 2007, vol. 101, no. 3, pp. 033107. https:// doi.org/10.1063/1.2432484
- Engelbrecht J.A.A. An assessment of some theoretical models used for the calculation of the refractive index of InXGa_{1-x}As. *Physica B: Condensed Matter*, 2018, vol. 535, pp. 8–12. https://doi.org/10.1016/j. physb.2017.05.047
- Dinges H.W., Burkhard H., Lösch R., Nickel H., Schlapp W. Refractive indices of InAlAs and InGaAs/InP from 250 to 1900 nm determined by spectroscopic ellipsometry. *Applied Surface Science*, 1992, vol. 54, pp. 477–481. https://doi.org/10.1016/0169-4332(92)90090-K
- Dinges H.W., Burkhard H., Lösch R., Nickel H., Schlapp W. Determination of refractive indexes of In_{0.52}Al_{0.48}As on InP in the wavelength range from 250 to 1900 nm by spectroscopic ellipsometry. *Materials Science and Engineering: B*, 1993, vol. 20, no. 1–2, pp. 180–182. https://doi.org/10.1016/0921-5107(93)90423-K
- Pettit G.D., Turner W.J. Refractive index of InP. Journal of Applied Physics, 1965, vol. 36, no. 6, pp. 2081. https://doi. org/10.1063/1.1714410
- 22. Luke K., Okawachi Y., Lamont M.R.E., Gaeta A.L., Lipson M. Broadband mid-infrared frequency comb generation in a Si₃N₄ microresonator. *Proc. of the Conference on Lasers and Electro-Optics* (*CLEO*), 2015, pp. 7184257. https://doi.org/10.1364/CLEO_SI.2015. STu4I.8
- Kolodeznyi E.S., Novikov I.I., Gladyshev A.G., Rochas S.S., Sharipo K.D., Karachinsky L.Ya., Egorov A.Yu., Bougrov V.E. Study of antireflection coatings for high-speed 1.3–1.55 μm InGaAs/InP PIN photodetector. *Materials Physics and Mechanics*, 2017, vol. 32, no. 2, pp. 194–197. https://doi.org/10.18720/MPM.3222017-11
- Blistanov A.A. Crystals of Quantum and Nonlinear Optics. Moscow, MISIS Publ., 2000, 432 p. (in Russian)

- Korte S., Farrer I., Beere H.E., Clegg W.J. Discontinuous yield in InGaAs thin films // Surface and Coatings Technology. 2008. V. 203. N 5–7. P. 713–716. https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2008.08.052
- Kelly R.L. Program of the 1972 Annual Meeting of the Optical Society of America // Journal of the Optical Society of America. 1972. V. 62. N 11. P. 1336. https://doi.org/10.1364/JOSA.62.001336
- 27. Курташ В.А., Егоренков А.А. Исследование оптических свойств структур фотокатода InP/InGaAs/InP // Материалы XI Ежегодной научно-технической конференции молодых специалистов «Техника и технология современной фотоэлектроники» 14– 15 апреля 2020 г. Базовый научный центр АО ЦНИИ «Электрон» [Электронный ресурс]. URL: http://www.niielectron.ru/ issledovanie-opticheskih-svojstv-struktur-fotokatoda-inp-ingaas-inp/, свободный (дата обращения: 01.09.2022).
- 28. Zemax User's Manual. 2014. 879 p.
- 29. Chen S., Chen J. Optimization of absorption layer in InGaAs/InP uni-traveling carrier photodiode // Proceedings of SPIE. 2021. V. 11781. P. 117811E. https://doi.org/10.1117/12.2591305
- Wang X.D., Hu W.D., Chen X.S., Xu J.T., Li X.Y., Lu W. Photoresponse study of visible blind GaN/AlGaN p-i-n ultraviolet photodetector // Optical and Quantum Electronics. 2011. V. 42. N 11. P. 755–764. https://doi.org/10.1007/s11082-011-9473-8
- Rochas S.S., Kolodeznyi E.S., Kozyreva O.A., Voropaev K.O., Sudas D.P., Novikov I.I., Egorov A.Yu. A heterostructure for resonantcavity GaAs p-i-n photodiode with 840-860 nm wavelength // Journal of Physics: Conference Series. 2019. V. 1236. N 1. P. 012071. https:// doi.org/10.1088/1742-6596/1236/1/012071

Авторы

Ковач Яков Николаевич — инженер, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0003-4858-4968, j-n-kovach@itmo.ru

Андрюшкин Владислав Васильевич — младший научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, 57209329441, https://orcid.org/0000-0002-7471-8627, vvandriushkin@itmo.ru

Колодезный Евгений Сергеевич — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, 🖬 56520395600, https:// orcid.org/0000-0002-3056-8663, evgenii_kolodeznyi@itmo.ru

Новиков Иннокентий Игоревич — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, ст 7202658480, https:// orcid.org/0000-0003-1983-0242, innokenty.novikov@itmo.ru

Петренко Артем Александрович — младший научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, **5** 57221166765, https://orcid.org/0000-0002-7862-971X, aapetrenko@itmo.ru

Камарчук Анна Владимировна — младший научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0002-2953-0334, annakamarchuck@ itmo.ru

Рочас Станислав Станиславович — младший научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, 5 57197720739, https://orcid.org/0000-0002-6519-2897, stanislav rochas@itmo.ru

Бауман Дмитрий Андреевич — кандидат физико-математических наук, ведущий инженер, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, SS 57197463747, https://orcid.org/0000-0002-5762-5920, dabauman@itmo.ru

- Korte S., Farrer I., Beere H.E., Clegg W.J. Discontinuous yield in InGaAs thin films. *Surface and Coatings Technology*, 2008, vol. 203, no. 5–7, pp. 713–716. https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2008.08.052
- Kelly R.L. Program of the 1972 Annual Meeting of the Optical Society of America. *Journal of the Optical Society of America*, 1972, vol. 62, no. 11, pp. 1336. https://doi.org/10.1364/JOSA.62.001336
- Kurtash V.A., Egorenkov A.A. Investigation of the optical properties of the photocathode InP/InGaAs/InP structures. *Proc. of the XI Annual Scientific and Technical Conference of Young Professionals «Modern photoelectronics technique and technology»*. Available at: http://www. niielectron.ru/issledovanie-opticheskih-svojstv-struktur-fotokatodainp-ingaas-inp/ (accessed: 01.09.2022). (in Russian)
- 28. Zemax User's Manual. 2014, 879 p.
- Chen S., Chen J. Optimization of absorption layer in InGaAs/InP uni-traveling carrier photodiode. *Proceedings of SPIE*, 2021, vol. 11781, pp. 117811E. https://doi.org/10.1117/12.2591305
- Wang X.D., Hu W.D., Chen X.S., Xu J.T., Li X.Y., Lu W. Photoresponse study of visible blind GaN/AlGaN p-i-n ultraviolet photodetector. *Optical and Quantum Electronics*, 2011, vol. 42, no. 11, pp. 755–764. https://doi.org/10.1007/s11082-011-9473-8
- Rochas S.S., Kolodeznyi E.S., Kozyreva O.A., Voropaev K.O., Sudas D.P., Novikov I.I. Egorov A.Yu. A heterostructure for resonantcavity GaAs p-i-n photodiode with 840-860 nm wavelength. *Journal* of *Physics: Conference Series*, 2019, vol. 1236, no. 1, pp. 012071. https://doi.org/10.1088/1742-6596/1236/1/012071

Authors

Yakov N. Kovach — Engineer, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0003-4858-4968, j-n-kovach@itmo.ru

Vladislav V. Andryushkin — Junior Researcher, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, S 57209329441, https://orcid. org/0000-0002-7471-8627, vvandriushkin@itmo.ru

Evgenii S. Kolodeznyi — PhD (Physics & Mathematics), Senior Researcher, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, S 56520395600, https://orcid.org/0000-0002-3056-8663, evgenii_kolodeznyi@itmo.ru

Innokenty I. Novikov — PhD (Physics & Mathematics), Senior Researcher, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, @ 7202658480, https://orcid.org/0000-0003-1983-0242, innokenty.novikov@itmo.ru

Artem A. Petrenko — Junior Researcher, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, S 57221166765, https://orcid. org/0000-0002-7862-971X, aapetrenko@itmo.ru

Anna V. Kamarchuk — Junior Researcher, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0002-2953-0334, annakamarchuck@itmo.ru

Stanislav S. Rochas — Junior Researcher, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, 57197720739, https://orcid.org/0000-0002-6519-2897, stanislav_rochas@itmo.ru

Dmitrii A. Bauman — PhD (Physics & Mathematics), Leading Engineer, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, 57197463747, https://orcid.org/0000-0002-5762-5920, dabauman@ itmo.ru

Статья поступила в редакцию 16.06.2022 Одобрена после рецензирования 21.07.2022 Принята к печати 21.09.2022 Received 16.06.2022 Approved after reviewing 21.07.2022 Accepted 21.09.2022



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» **I/İTMO**

HAVHHO-TEXHIVECKИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-881-888

Residue feature analysis with empirical mode decomposition for mining spatial sequential patterns from serial remote sensing images R. Angelin Preethi^{1⊠}, G. Anandharaj²

¹ Department of Computer Science, Kamban College of Arts and Science for Women, Tiruvannamalai, 606603, TamilNadu, India

² Department of Computer Science, Adhiparasakthi College of Arts and Science, Kalavai, TamilNadu, 632506, India ¹ papupree@gmail.com[⊠], https://orcid.org/0000-0002-9233-9858

² younganand@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-2209-0460

Abstract

An extensive growth of serial remote sensing images paves the way for abundant data intended for the sequential spatial pattern determination in several fields like monitoring of agriculture, development of urban areas, and the vegetative area. However, conventional spatial sequential pattern mining is not applied efficiently or directly in the aspect of serial remote sensing images. Therefore, a residue feature analysis with empirical mode decomposition is proposed so as to enhance the spatial sequential pattern mining efficacy from the raster serial remote sensing images. At first, input images are being extracted by means of minima and maxima pattern by computing the mean of envelops and the intrinsic mode function components. If the intrinsic mode function condition is satisfied, then it is being subtracted from the original image; finally, the image is decomposed into many intrinsic mode functions and residue. The experimental outcomes attained indicate that the proposed strategy is proficient of mining spatial sequential pattern from the images of serial remote sensing. Though the support values of the patterns might not be attained accurately, the presented scheme guarantees that the whole patters are being extracted at lower consumption of time.

Keywords

serial remote sensing images, intrinsic mode function (IMF), image decomposition, residue feature analysis, empirical mode decomposition (EMD)

For citation: Angelin Preethi R., Anandharaj G. Residue feature analysis with empirical mode decomposition for mining spatial sequential patterns from serial remote sensing images. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 881–888. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-881-888

УДК 004.932

Анализ остаточных признаков с декомпозицией по эмпирическим модам для извлечения пространственных последовательных шаблонов из серийных изображений дистанционного зондирования

Раджакумар Анджелин Прити ¹, Ганесан Анандхарадж ²

¹ Камбанский колледж искусств и науки для женщин, Тируваннамалай, Тамил Наду, 606603, Индия

² Колледж искусств и наук Адхипарасакти, Калаваи, Тамил Наду, 632506, Индия

¹ papupree@gmail.com^{\Box}, https://orcid.org/0000-0002-9233-9858

² younganand@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-2209-0460

Аннотация

Значительный рост последовательно получаемых изображений при дистанционном зондировании ведет к увеличению количества данных. Такие данные используются в таких областях как: мониторинг сельского хозяйства, развитие городских районов и наблюдение за растительными зонами. Отметим, что обычное последовательное извлечение пространственных структур эффективно не применяется особенно по отношению к последовательно получаемым изображениям в результате дистанционного зондирования. Предложен анализ

© Angelin Preethi R., Anandharaj G., 2022

остаточных признаков при разложении изображений по эмпирическим модам для повышения эффективности извлечения пространственных последовательных структур из растровых изображений дистанционного зондирования. Входные изображения извлечены с помощью минимальных и максимальных растровых структур путем вычисления среднего значения огибающих и компонентов функции разложения на внутренние моды для спектрального анализа Гильберта. При выполнении условия функции разложения на внутренние моды, производится операция вычитания функции из исходного изображения. Далее изображение разлагается на множество функций внутренних мод и на остаток. Полученные экспериментальные результаты показали, что предложенная стратегия способна непрерывно извлекать пространственные структуры из последовательно получаемых изображений дистанционного зондирования. Хотя опорные значения структур могут быть получены неточно, представленная схема гарантирует, что структуры в целом извлекаются с меньшими затратами времени.

Ключевые слова

последовательные изображения дистанционного зондирования, функция разложения на внутренние моды (IMF), разложение изображения, анализ остаточных признаков, разложение по эмпирическим модам (EMD)

Ссылка для цитирования: Анджелин Прити Р., Анандхарадж Г. Анализ остаточных признаков с декомпозицией по эмпирическим модам для извлечения пространственных последовательных шаблонов из серийных изображений дистанционного зондирования // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 881–888 (на англ. яз.). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-881-888

Introduction

A growth of technology in earth observation leads to development of spatial data accumulation continuously. Amongst this kind of data, due to its temporal and spatial features Serial Remote Sensing Images (SRSI) offer potential for tracking changes in environment, urban expansion, development of agriculture and so on. Several studies have been made that focus on the knowledge mining from the SRSI [1]. The growth of SRSI offers huge amount of data for recognizing spatial sequential patterns in several arenas [2-4]. The Sequential Spatial Pattern Mining (SSPM) is regarded as the utmost significant means of the information which was being concealed at the SRSI and, in turn, attracts huge range of interest over researchers. The scheme of Sequential Pattern Mining (SPM) is regarded to be the technical SSPM base that mostly intends in extracting the recurrent patterns from the database operation. It is varied from their precursor SSPM that tries in discovering the spatio-temporal recurrent categorizations from the geospatial databases [5, 6]. The structure complexity, geospatial data desired features like spatial auto-correlation and spatial relation amongst objects, and huge volumes, in turn, prevent the SPM algorithms from being applied effectually for the sequential spatial pattern mining. Moreover, these structure complexity, desired features, and high volumes prevent the use of SPM approach in mining effective spatial sequence pattern [7-10].

Many approaches have been presented in existing techniques. However, there were many limitations such as inefficiency in decomposing input image. So as to overcome this drawback, the proposed approach is presented by employing Empirical Mode Decomposition (EMD) method for the effective decomposition of input image.

Related work

An approach of pixel clustering was presented in [11] to enhance the SSPM from the raster SRSI. At first, the image is compressed with the use of Run-Length Coding (RLC) scheme. After that, the pixels were being clustered

with the use of RLC based function of spatial overlay. Eventually, a strategy of pruning is employed for prefix span extending approach so as to skip unwanted database while skimming and mining from the groups of pixel. In this work, authors have analyzed the issues in spatial mining from SRSI and proposed prefix Span algorithms for improving the efficiency of sequential spatial mining from SRSI. The work claims that it proved the improved efficiency in spatial mining and it can be applied in various fields.

However, the accuracy of pattern recognition is low when compared to other related work.

In the paper [12], the authors presented a Quantized ternary pattern dependent grouping of pixel with the Single Value Decomposition and the RLC for pattern mining. These utilized processes were later experimented using dataset cropland data. A presented approach was effective in terms of mining time and sequence pattern generation. However, the work increases the computational time that leads to performance degradation in the mining process.

The author in this paper [13] presented spatial-spectral ConvLSTM 3-D version for preserving the inherent hyperspectral data structure to enhance the performance of classification. The conducted experiments in three common employed Histopathological Image Classification (HIS) datasets, illustrate that the presented models have some competitive benefits and might help in offering good classification performance compared to other traditional systems. However, it is not evident that the proposed work alone provides a better classification. The proposed work should be combined with other modern models to yield a better result.

A novel Frequent Pattern Mining was suggested in [14] which was called Mining Frequent Patterns (MFP) and had two central characteristics that were new. The attained outcome describes that the MFP approach is effective in recognizing the patterns in the optimized time. Even though the work reduces the time in processing the pattern during classification, the feature selection approach utilized in the work is not efficient in terms of accuracy.

The Remote Sensing Image (RSI) classification is regarded as a normal employment of RSI [15]. For enhancing the performance of RSI classifier, groupings of the multiplier classifiers were utilized to categorize images in Landsat-8 OLI (Landsat-8 Operational Land Imager). Few combinations of classifier techniques and algorithms are evaluated. This approach uses a votingbased classification technique utilizing ensemble learning to improve the accuracy of classification. Even though this method achieves higher accuracy, the work caused stability issues due to the use of multiple classifiers.

A survey was carried out in [16] regarding the mining sequential pattern and its applications. The aim was to offer an introduction and also the SPM with the recent research and advances opportunities survey. The approach was divided into four major portions: initially, SPM was defined by reviewing their application after that. The terminologies and the major aspects were introduced. However, the major strategies and approaches were projected for solving SPM.

A well-defined final research process in the form of images retrieval based on quantization, called hypergraph and hacking process, was introduced in [17]. In [18], the author employed encoders that are bi-generative, along with the multi-modal stochastic Recurrent Neural Network intended for effective image recovery, and binary autoencoders that are hierarchical.

An algorithm of sparse Support Vector Machine (SVM) classifier was presented in the paper[19]. The segmented images were then categorized as a small number of patches. After the process of extraction, segmentation of images was made and was then categorized to small patches.

The Modified Extrema Pattern is used to provide greyscale invariant transformation of pixel intensity values [20]. An improved Single Shot Detector model was established for detecting an object over remote sensing photos or images [21]. A contourlet transform was employed in for identifying the directions according to the strategy as this helps to effectively present images as multiple directional bands that havemore accurate directional information than the spatial derivatives [22].

From the literatures studied, we observed that all the approaches tried to satisfy the efficient pattern mining from rater images. Most of the work discussed in this section is related to the calculation of individual pixel which is unnecessary and will result in additional overhead in computational process. In our work, we proposed an idea of grouping the pixels that are having similar patterns. Then we perform calculating the grouped pixel which reduces the computational time.

Proposed work

The entire workflow of the presented technique is illustrated briefly in this part. The workflow depiction is provided in Fig. 1.

Maxima and minima should be computed first for the data decomposing into Intrinsic Mode Functions (IMFs). To find the maxima and minima, you have to locate the points where slope changes occurred. After finding these points, one spline curve for each is placed for maxima and minima. These curves define the upper and lower envelopes. Having these, mean of the envelope is computed. The calculation for the mean envelope is given in the following formula



Fig. 1. Workflow of presented scheme

$$m_e = e_{up} + e_{lower}/2$$
,

where e_{up} , e_{lower} are the upper and lower envelope respectively.

Then the mean envelope m_e is subtracted from the signal d(t) to generate the first envelope

$$I_1 = d(t) - m_e,$$

where I_1 is the first IMF, d(t) is the signal and m_e is the mean envelope. The outcome of the above equation is the first component of the data. This process is repeated and finally sum of IMFs and residue signal is generated. The steps for the process are given in EMD for image decomposition.

Input image retrieval, processing and decomposition

The work flow diagram is shown above. Initially, input images are taken and a difference is being estimated among the adjacent and the center pixel of every pattern over the estimation of number of columns and rows. Then the extraction of minima and maxima values is made from the image. The conversion of binary patterns is made with regard to the center pixel based on the upper and lower envelops. Then we compute the mean of this envelop. At the center pixel, an extrema patterns are formed by means of IMF which is then followed by the Hilbert transformation process of that specified pattern. This IMF needs to be satisfied so that the properties of the input image should be preserved. Thus, a decomposition process is carried out to decompose the image as IMFs and residue.

Empirical Mode Decomposition for image decomposition

We proposed an enhanced Prefix span model called EMD prefix span. The proposed model is regarded as the image decomposition depending on the image local characteristics that fascinates the multi-resolution advantages of the wavelet transform and thus overwhelms the problem of selecting the basis of wavelet thereby determining the scale of decomposition in the wavelet transform. Hence, it is highly appropriate for the nonstationary non-linear image analysis and is thus adaptive EMD. The EMD considers that any complex image is comprised of IMFs that are simple ones, and each IMF is independent mutually. This EMD could be decomposed as different scales, or time series data trends, into their stepby-step component with an image sequence series having similar characteristics of scale produced. By this, the nonlinear non-stationary data is being transformed as a smooth linear data. On comparing the original sequence of data, after decomposition the sequence have greater regularity which helps in recognizing hidden relationship and might enhance the prediction accuracy. The EMD steps for the given time series are shown below.

Step 1: the upper envelope $e_{up}(t)$ and the lower envelop $e_{lower}(t)$ are determined from the local minimum and local maximum of time series data x(t), and, in turn, computes the mean envelope $m_1(t)$.

$$m_1(t) = \frac{e_{up}(t) + e_{lower}(t)}{2}$$

Step 2: subtract $m_1(t)$ from the x(t) for getting $h_1(t)$ as the lower image x(t); step 1 is repeated on taking screening k times till $h_1(t) = x(t) - m_1(t)$ meets the conditions of IMF; after that $c_1(t)$ is regraded as the initial IMF time series component since it comprises of the shorter periodic component of the original sequence.

$$c_1(t) = x(t) - m_1(t)$$

Step 3: once the first IMF component is separated from time series x(t), the other components $r_1(t)$ of x(t) is attained as shown:

$$r_1(t) = x(t) - c_1(t).$$

Step 4: consider $r_1(t)$ as the new time series, and the steps 1 and 3 are repeated for attaining the qualified IMF component series $c_1(t)$ and the residual $r_n(t)$. After that, the original time series x(t) is expressed by means of the following IMF component and the residual component as shown:

$$x(t) = \sum_{n=1}^{n} c_i(t) + r_n(t).$$

Of these steps from 1 to 4, the original time series is decomposed as sub-sequences of varied frequencies termed IMF and residual r. After that, the prediction trend of all sequence is being made and the outcomes of subsequence prediction are being superimposed for attaining the original sequence prediction outcome.

Step 5: the noise-added image $s_j(t)$ is decomposed as *n* IMFs and the residues by means of

$$s_j(t) = \sum_{i=1}^n c_{ij}(t) + r_j(t).$$

Here, $c_{ij}(t)$ and $r_j(t)$ signifies *i*-th IMF and the residues of *j*-th realization correspondingly.

Step 6: the ensemble mean is computed as shown:

$$c_i(t) = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^{M} c_{ij}(t),$$
$$r(t) = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} r_j(t).$$

Here, $c_i(t)$ signifies the EMD's IMF and r(t) illustrates the EMD residues.

Performance Analysis

The assessment of projected approach performance is made and the outcomes attained are shown in this section. The Cropland data layer dataset is utilized so as to estimate the overall performance of proposed algorithm. From the following link¹, the dataset is obtained.

The images that consist of continental areas of the US, termed Iowa state. It contains about 150 K sq.kms, where each pixel of the image comprises about sq.m. The several cultivated yields at areas are recognized by map color. This datasets were segregated as 4 categories such as D1, D2, D3, and D4 based on the period of time in image required.

Fig. 2, *a* shows the representation of input image. The input image attained from the dataset is projected below in Fig. 2, *a*. The input image is taken from cropland layer dataset. It represents the area Iowa state of US. The colors on the map represent the different crops cultivated in that region.

¹ https://nassgeodata.gmu.edu/CropScape/ (accessed: 11.11.2021).

Table 1. Dataset detail representation. Duration from 2010 to 2016 year

ID of the dataset	Region	Volume of data, MB	Pixel count
D1	Butler country smaller portion	1.7	21 × 132
D2	Butler country Regions	20	1323 × 3534
D3	ASD 1910 Region	141	5971 × 3534
D4	IOWA state Region	594	17795 × 11671

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2022, том 22, № 5 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no 5



Fig. 2. Images of 1200 × 1200 pixels: input (a) and disassembled (decomposition of a multilinear matrix — D1) (b)

Fig. 2, *b* signifies the decomposed image. The attained decomposed image is represented. The decomposition is carried out by means of EMD.

The consumption of time analysis on the test D1, D2, D3, and D4 datasets is represented in Fig 3.



Fig. 3. Analysis of time consumption by a set of test data: D1 (a); D2 (b); D3 (c); D4 (d)



Fig. 4. Comparative estimation test datasets mining time: D1 (a); D2 (b); D3 (c); D4 (d)

H represents the user defined threshold value which is the number of occurrences of a frequent sequence. The mining time is decreased when the threshold value increases. The analysis was carried and an outcome is thus related to the traditional approaches for proving the proposed system efficiency of presented technique. The estimation of mining time on D1, D2, D3, and D4 test dataset is projected in Fig. 4. The estimation is carried and an outcome attained is then related to traditional approaches for proving the efficiency of presented method with other existing methodology. The outcomes show that the projected system is effectual in overwhelming the traditional issues in SRSI images.

Fig. 5 shows the comparative analysis of support produced by prefix span model and the EMD-Prefix span model. Support values indicate the sequence of minimum number of patterns that appears frequently in the mining process. The support values are counted by the number of times the dataset been mined to get the accurate results. X-axis units are simple sequential numbers. From the above comparative analysis, support generated by the EMD-Prefix range is minimal when compared to the Prefix range model. The assessment of support values of the SPM approach with traditional approaches is made and the outcome attained is shown in Fig. 5. Therefore, through the entire performance



Fig. 5. Comparative analysis of SPM method support values
examination, it was obvious that the projected scheme is improved by the offering decreased rate of mining time and reducing the consumption time for the test datasets.

Conclusion

An effective approach of residue feature analysis with empirical mode decomposition was presented for enhancing the competence of SSPM from raster SRSI. Initially, images were extracted through minima and maxima patterns by computing the mean of envelops

References

- Kumar T.S., Nagarajan V. Local tetra pattern based on contourlet directions. Proc. of the 6th IEEE International Conference on Communication and Signal Processing (ICCSP), 2017, pp. 754–757. https://doi.org/10.1109/ICCSP.2017.8286462
- Zhang P., Gong M., Su L., Liu J., Li Z. Change detection based on deep feature representation and mapping transformation for multispatial-resolution remote sensing images. *ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing*, 2016, vol. 116, pp. 24–41. https://doi.org/10.1016/j.isprsjprs.2016.02.013
- Wright A.P., Wright A.T., McCoy A.B., Sittig D.F. The use of sequential pattern mining to predict next prescribed medications. *Journal of Biomedical Informatics*, 2015, vol. 53, pp. 73–80. https:// doi.org/10.1016/j.jbi.2014.09.003
- Molijn R.A., Iannini L., Hanssen R.F., Vieira Rocha J. Sugarcane growth monitoring through spatial cluster and temporal trend analysis of radar and optical remote sensing images. *Proc. of the 36th IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS)*, 2016, pp. 7141–7144. https://doi.org/10.1109/IGARSS.2016.7730863
- Tiwari P., Shukla P.K. A review on various features and techniques of crop yield prediction using geo-spatial data. *International Journal of Organizational and Collective Intelligence (IJOCI)*, 2019, vol. 9, no. 1, pp. 37–50. https://doi.org/10.4018/IJOCI.2019010103
- Wei J., Mi L., Hu Y., Ling J., Li Y., Chen Z. Effects of lossy compression on remote sensing image classification based on convolutional sparse coding. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters*, 2022, vol. 19. https://doi.org/10.1109/ LGRS.2020.3047789
- Zhang C., Wei S., Ji S., Lu M. Detecting large-scale urban land cover changes from very high resolution remote sensing images using CNNbased classification. *ISPRS International Journal of Geo-Information*, 2019, vol. 8, no. 4, pp. 189. https://doi.org/10.3390/ijgi8040189
- Xu X., Chen Y., Zhang J., Chen Y., Anandhan P., Manickam A. A novel approach for scene classification from remote sensing images using deep learning methods. *European Journal of Remote Sensing*, 2021, vol. 54, no. sup2, pp. 383–395. https://doi.org/10.1080/22797 254.2020.1790995
- He Z., Zhang S., Wu J. Significance-based discriminative sequential pattern mining. *Expert Systems with Applications*, 2019, vol. 122, pp. 54–64. https://doi.org/10.1016/j.eswa.2018.12.046
- Cai G., Lee K., Lee I. Itinerary recommender system with semantic trajectory pattern mining from geo-tagged photos. *Expert Systems* with Applications, 2018, vol. 94, pp. 32–40. https://doi.org/10.1016/j. eswa.2017.10.049
- Wu X., Zhang X.J.C. An efficient pixel clustering-based method for mining spatial sequential patterns from serial remote sensing images. *Computers and Geosciences*, 2019, vol. 124, pp. 128–139. https://doi. org/10.1016/j.cageo.2019.01.005
- Preethi R.A., Anandharaj G. Quantized ternary pattern and singular value decomposition for the efficient mining of sequences in SRSI images. *SN Applied Sciences*, 2020, vol. 2, no. 10, pp. 1–14. https:// doi.org/10.1007/s42452-020-03474-8
- Hu W.-S., Li H-C., Pan L., Li W., Tao R., Du Q. Spatial-spectral feature extraction via deep ConvLSTM neural networks for hyperspectral image classification. *IEEE Transactions on Geoscience* and Remote Sensing, 2020, vol. 58, no. 6, pp. 4237–4250. https://doi. org/10.1109/TGRS.2019.2961947
- 14. Driss K., Boulila W., Leborgne A., Gançarski P. Mining frequent approximate patterns in large networks. *International Journal of*

and the IMF components. In case if the IMF condition is satisfied, the IMF is subtracted from original image and then the image was decomposed into IMFs and residue.

The technique proposed in this article can effectively decompose the image and thus help to correctly extract SSP from SRSI. Though, for the patterns the support rates might not be attained precisely, the projected technique may perhaps guarantee that entire patterns were being mined at lower time consumption.

Литература

- Kumar T.S., Nagarajan V. Local tetra pattern based on contourlet directions // Proc. of the 6th IEEE International Conference on Communication and Signal Processing (ICCSP). 2017. P. 754–757. https://doi.org/10.1109/ICCSP.2017.8286462
- Zhang P., Gong M., Su L., Liu J., Li Z. Change detection based on deep feature representation and mapping transformation for multispatial-resolution remote sensing images // ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing. 2016. V. 116. P. 24–41. https:// doi.org/10.1016/j.isprsjprs.2016.02.013
- Wright A.P., Wright A.T., McCoy A.B., Sittig D.F. The use of sequential pattern mining to predict next prescribed medications // Journal of Biomedical Informatics. 2015. V. 53. P. 73–80. https://doi. org/10.1016/j.jbi.2014.09.003
- Molijn R.A., Iannini L., Hanssen R.F., Vieira Rocha J. Sugarcane growth monitoring through spatial cluster and temporal trend analysis of radar and optical remote sensing images // Proc. of the 36th IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS). 2016. P. 7141–7144. https://doi.org/10.1109/IGARSS.2016.7730863
- Tiwari P., Shukla P.K. A review on various features and techniques of crop yield prediction using geo-spatial data // International Journal of Organizational and Collective Intelligence (IJOCI). 2019. V. 9. N 1. P. 37–50. https://doi.org/10.4018/IJOCI.2019010103
- Wei J., Mi L., Hu Y., Ling J., Li Y., Chen Z. Effects of lossy compression on remote sensing image classification based on convolutional sparse coding // IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters. 2022. V. 19. https://doi.org/10.1109/LGRS.2020.3047789
- Zhang C., Wei S., Ji S., Lu M. Detecting large-scale urban land cover changes from very high resolution remote sensing images using CNNbased classification // ISPRS International Journal of Geo-Information. 2019. V. 8. N 4. P. 189. https://doi.org/10.3390/ ijgi8040189
- Xu X., Chen Y., Zhang J., Chen Y., Anandhan P., Manickam A. A novel approach for scene classification from remote sensing images using deep learning methods // European Journal of Remote Sensing. 2021. V. 54. N sup2. P. 383–395. https://doi.org/10.1080/22797254. 2020.1790995
- He Z., Zhang S., Wu J. Significance-based discriminative sequential pattern mining // Expert Systems with Applications. 2019. V. 122. P. 54–64. https://doi.org/10.1016/j.eswa.2018.12.046
- Cai G., Lee K., Lee I. Itinerary recommender system with semantic trajectory pattern mining from geo-tagged photos // Expert Systems with Applications. 2018. V. 94. P. 32–40. https://doi.org/10.1016/j. eswa.2017.10.049
- Wu X., Zhang X.J.C. An efficient pixel clustering-based method for mining spatial sequential patterns from serial remote sensing images // Computers and Geosciences. 2019. V. 124. P. 128–139. https://doi. org/10.1016/j.cageo.2019.01.005
- Preethi R.A., Anandharaj G. Quantized ternary pattern and singular value decomposition for the efficient mining of sequences in SRSI images // SN Applied Sciences. 2020. V. 2. N 10. P. 1–14. https://doi. org/10.1007/s42452-020-03474-8
- Hu W.-S., Li H-C., Pan L., Li W., Tao R., Du Q. Spatial-spectral feature extraction via deep ConvLSTM neural networks for hyperspectral image classification // IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing. 2020. V. 58. N 6. P. 4237–4250. https://doi. org/10.1109/TGRS.2019.2961947
- 14. Driss K., Boulila W., Leborgne A., Gançarski P. Mining frequent approximate patterns in large networks // International Journal of

Imaging Systems and Technology, 2021, vol. 31, no. 3, pp. 1265–1279. https://doi.org/10.1002/ima.22533

- Shen H., Lin Y., Tian Q., Xu K., Jiao J. A comparison of multiple classifier combinations using different voting-weights for remote sensing image classification. *International Journal of Remote Sensing*, 2018, vol. 39, no. 11, pp. 3705–3722. https://doi.org/10.1080/01431 161.2018.1446566
- Fournier-Viger P., Lin J.C.-W., Kiran R.U., Koh Y.S., Thomas R. A survey of sequential pattern mining. *Data Science and Pattern Recognition*, 2017, vol. 1, no. 1, pp. 54–77.
- Song J., Zhang H., Li X., Gao L., Wang M., Hong R. Self-supervised video hashing with hierarchical binary auto-encoder. *IEEE Transactions on Image Processing*, 2018, vol. 27, no. 7, pp. 3210– 3221. https://doi.org/10.1109/TIP.2018.2814344
- Song J., Guo Y., Gao L., Li X., Hanjalic A., Shen H.T. From deterministic to generative: Multimodal stochastic RNNs for video captioning. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 2019, vol. 30, no. 10, pp. 3047–3058. https://doi. org/10.1109/TNNLS.2018.2851077
- Menaka D., Padmasuresh L., Selvin Prem Kumar S. Classification of multispectral satellite images using sparse SVM classifier. *Indian Journal of Science and Technology*, 2015, vol. 8, no. 24, pp. 1–7. https://doi.org/10.17485/ijst/2015/v8i24/85355
- Rajakumar A.P., Ganesan A. A modified extrema pattern with multilinear matrix decomposition based RLC scheme for efficient serial remote sensing images mining. *Traitement du Signal*, 2022, vol. 39, no. 1, pp. 153–163. https://doi.org/10.18280/ts.390115
- Gopal B., Ganesan A. Real time deep learning framework to monitor social distancing using improved single shot detector based on overhead position. *Earth Science Informatics*, 2022, vol. 15, no. 1, pp. 585–602. https://doi.org/10.1007/s12145-021-00758-4
- 22. Kumar T.S., Nagarajan V. Local contourlet tetra pattern for image retrieval. *Signal, Image and Video Processing*, 2018, vol. 12, no. 3, pp. 591–598. https://doi.org/10.1007/s11760-017-1197-1

Authors

Rajakumar Angelin Preethi — Assistant Professor, Kamban College of Arts and Science For Women, Tiruvannamalai, Tamil Nadu, 606603, India, 57221964237, https://orcid.org/0000-0002-9233-9858, papupree@ gmail.com

Ganesan Anandharaj — Associate Professor, Adhiparasakthi College of Arts and Science, Kalavai, Tamil Nadu, 632506, India, 📧 57211313341, https://orcid.org/0000-0002-2209-0460, younganand@gmail.com

Received 18.03.2022 Approved after reviewing 16.07.2022 Accepted 18.09.2022



Imaging Systems and Technology. 2021. V. 31. N 3. P. 1265–1279. https://doi.org/10.1002/ima.22533

- Shen H., Lin Y., Tian Q., Xu K., Jiao J. A comparison of multiple classifier combinations using different voting-weights for remote sensing image classification // International Journal of Remote Sensing. 2018. V. 39. N 11. P. 3705–3722. https://doi.org/10.1080/0 1431161.2018.1446566
- Fournier-Viger P., Lin J.C.-W., Kiran R.U., Koh Y.S., Thomas R. A survey of sequential pattern mining // Data Science and Pattern Recognition. 2017. V. 1. N 1. P. 54–77.
- Song J., Zhang H., Li X., Gao L., Wang M., Hong R. Self-supervised video hashing with hierarchical binary auto-encoder // IEEE Transactions on Image Processing. 2018. V. 27. N 7. P. 3210–3221. https://doi.org/10.1109/TIP.2018.2814344
- Song J., Guo Y., Gao L., Li X., Hanjalic A., Shen H.T. From deterministic to generative: Multimodal stochastic RNNs for video captioning // IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems. 2019. V. 30. N 10. P. 3047–3058. https://doi.org/10.1109/ TNNLS.2018.2851077
- Menaka D., Padmasuresh L., Selvin Prem Kumar S. Classification of multispectral satellite images using sparse SVM classifier // Indian Journal of Science and Technology. 2015. V. 8. N 24. P. 1–7. https:// doi.org/10.17485/ijst/2015/v8i24/85355
- Rajakumar A.P., Ganesan A. A modified extrema pattern with multilinear matrix decomposition based RLC scheme for efficient serial remote sensing images mining // Traitement du Signal. 2022. V. 39. N 1. P. 153–163. https://doi.org/10.18280/ts.390115
- Gopal B., Ganesan A. Real time deep learning framework to monitor social distancing using improved single shot detector based on overhead position // Earth Science Informatics. 2022. V. 15. N 1. P. 585–602. https://doi.org/10.1007/s12145-021-00758-4
- Kumar T.S., Nagarajan V. Local contourlet tetra pattern for image retrieval // Signal, Image and Video Processing. 2018. V. 12. N 3. P. 591–598. https://doi.org/10.1007/s11760-017-1197-1

Авторы

Анджелин Прити Раджакумар — исследователь, Камбанский колледж искусств и науки для женщин, Тируваннамалай, 606603, Индия, 57221964237, https://orcid.org/0000-0002-9233-9858, papupree@ gmail.com

Анандхарадж Ганесан — доцент, Колледж искусств и наук Адхипарасакти, Калаваи, Тамил Наду, 632506, Индия, 🔤 57211313341, https://orcid.org/0000-0002-2209-0460, younganand@gmail.com

Статья поступила в редакцию 18.03.2022 Одобрена после рецензирования 16.07.2022 Принята к печати 18.09.2022

Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» **VİTMO**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 No 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКІ

АВТОМАТИЧЕСКОЕ УПРАВЛЕНИЕ И РОБОТОТЕХНИКА AUTOMATIC CONTROL AND ROBOTICS

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-889-895 УДК 681.5.015

Формирование траектории цифрового двойника многозвенного механизма с использованием адаптивного алгоритма оценки параметров нелинейного движения

Алексей Викторович Мешков¹, Владислав Сергеевич Громов²

1,2 Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

¹ avmeshkov@itmo.ru^{\exists}, https://orcid.org/0000-0001-9981-8299

² gromov@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-2416-3766

Аннотация

Предмет исследования. Системы контроля автоматизированных линий требуют высокой точности и скорости обработки получаемой информации. В последние годы быстро развиваются технологии цифрового двойника, цифровой модели системы, повторяющей параметры реального объекта. Цифровой двойник используется в задачах удаленного контроля состояния реальных систем, испытаний реакций воздействия внешних факторов, без прямого влияния на реальную систему. Цифровой двойник применяется во многих сферах, таких как здравоохранение, промышленность, образование, городская инфраструктура и многих других. Несмотря на популярность исследований данной тематики, не выделено единого подхода к формированию цифрового двойника. Зачастую в современных работах освещается задача синтеза двойника с известными параметрами рассматриваемой системы. В данной работе предложен метод формирования цифрового двойника многозвенного механизма с неизвестными параметрами движения рассматриваемой системы, основанный на адаптивной оценке параметров траектории движения многозвенных механизмов, который способен облегчить задачу удаленного контроля состояния производства и расширить применимость технологии цифрового двойника на новый класс задач. Метод. В работе представлено описание синтеза адаптивного регулятора, основанного на внутренней модели, приведено теоретическое обоснование представленного алгоритма, а также описано его применение в задаче слежения за траекторией движения многозвенного механизма. Основные результаты. Выполнена экспериментальная апробация формирования цифрового двойника робота-манипулятора Kuka youBot в реальном времени с использованием адаптивного оценщика, основанного на внутренней модели. Адаптивная оценка параметров движения проведена для двух звеньев манипулятора с целью подтверждения возможности формирования цифрового двойника многозвенного механизма в условиях неизвестных параметров. Параметры движения звеньев робота-манипулятора задавались вручную посредством хаотических генераторов и не были известны адаптивному регулятору. Такой подход к формированию траектории движения звеньев манипулятора использован для оценки точности работы алгоритма путем вычисления ошибки слежения адаптивного алгоритма. Ошибка слежения определена как разность между эталонным воздействием, обеспечивающим движения манипулятора, и выходным сигналом адаптивного оценщика, который использован для описания траектории на модели робота-манипулятора в трехмерном пространстве. Проведены испытания, целью которых стала оценка ошибки слежения описываемого алгоритма. Положительными результатами принято считать сходимость ошибки слежения в области [-0,005, 0,005] рад. По результатам испытаний построены графики оценки, которые показали положительный результат. Существуют колебания ошибки слежения вокруг нуля, что обусловлено шумами измерений и задержками при симуляции режима работы реального времени в выбранной среде моделирования. По итогам испытаний приведены дальнейшие шаги по увеличению точности и производительности описываемого подхода к формированию цифрового двойника. Практическая значимость. Результаты представленной работы могут быть использованы при дальнейших исследованиях технологий цифрового двойника, в условиях неизвестных параметров системы. Представленный метод формирования может применяться в задачах телеуправления манипуляторами, в системах контроля технического состояния роботов на производственной линии, а также в общих задачах слежения за траекторией движения многозвенных механизмов.

Ключевые слова

цифровой двойник, адаптивная оценка, многозвенные механизмы, нелинейная траектория движения

© Мешков А.В., Громов В.С., 2022

Благодарности

Работа поддержана грантом Президента Российской Федерации № МД-3574.2022.4.

Ссылка для цитирования: Мешков А.В., Громов В.С. Формирование траектории цифрового двойника многозвенного механизма с использованием адаптивного алгоритма оценки параметров нелинейного движения // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 889–895. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-889-895

Adaptive nonlinear motion parameters estimation algorithm for digital twin of multi-link mechanism motion trajectory synthesis

Aleksei V. Meshkov^{1⊠}, Vladislav S. Gromov²

^{1,2} ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

¹ avmeshkov@itmo.ru^{\equiv}, https://orcid.org/0000-0001-9981-8299

² gromov@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-2416-3766

Abstract

Monitoring systems of automated production lines requires high accuracy and processing speed of acquired data. Nowadays digital twin technologies are rapidly developing as part of Industry 4.0. Digital twin is a virtual representation of a physical system that mimics the behaviour of a real object, and is used in real-time control, monitoring and disturbance prediction, without influence on a real object. Digital twin is being used in many fields of application such as: healthcare, manufacturing, education, city development, etc. Nonetheless, despite the rising popularity of digital twin researches, there is no basic approach to digital twin synthesis. Mostly, in state of the art articles, systems with known parameters are considered. In this paper, approach to development of digital twin, based on internal model for multi-link mechanisms with unknown motion parameters, is presented. Described approach intended to ease the task of production line monitoring and extend digital twin technology application field. In this article adaptive controller design, based on internal model, is presented, theoretical explanations of design process are provided, and application of the control algorithm in the task of multi-link mechanism motion trajectory parameters estimation is described. In this work the experimental synthesis of digital twin for Kuka youBot manipulator based on presented approach in real time is described. Adaptive motion parameters estimation was made for two links of the manipulator for the sake of confirmation of presented approach usage in the task of digital twin for systems with unknown parameters. Motion trajectory parameters of the robot links were defined manually with the use of chaotic generators to estimate the accuracy of the adaptive control system. This approach was used in order to calculate the error of reference tracking by comparing the control signal for digital twin with the reference exogenous input for manipulator links. As the results of the experiment, the graphs of the error reference tracking for both links are presented. As the goal of the experiment, the convergence of reference tracking error to the field [-0.005, 0.005] radian was set, and as can be seen from graphs this goal was achieved. There is a small disturbance of the error convergence on the graphs within the desired field which was caused by noised measurements and delays of the chosen modelling environment real-time simulations. In the conclusion of this paper, further work to reduce the influence of mentioned causes is described. The results of this paper can be used in further digital twin technology researches. Presented approach can be implemented in robots remote control tasks, production lines technical condition monitoring and in general motion trajectory parameters estimation tasks for multi-link mechanisms.

Keywords

digital twin, adaptive estimation, multi-joint mechanisms, nonlinear motion trajectory

Acknowledgments

The work was supported by President of the Russian Federation (grant MД-3574.2022.4).

For citation: Meshkov A.V., Gromov V.S. Adaptive nonlinear motion parameters estimation algorithm for digital twin of multi-link mechanism motion trajectory synthesis. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 889–895 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-889-895

Введение

В рамках технологий «Индустрия 4.0» введено понятие «Цифровой двойник» (Digital twin) [1]. Это система, повторяющая параметры реального объекта и позволяющая вести удаленное наблюдение за состоянием отслеживаемого объекта в реальном времени. Сферы применения технологии цифрового двойника, как показано в [1], различны и охватывают широкий спектр задач: здравоохранение, промышленность, образование, городская инфраструктура и многие другие. Подробное описание перспектив использования цифрового двойника в различных сферах представлено многими авторами [2–4]. В работе [5] приведен глубокий анализ современного состояния тематики цифрового двойника в промышленности. Авторами сделан вывод о том, что данная тематика — перспективное и популярное направление разработки, что подтверждено увеличением количества работ и патентов в мире. Однако, несмотря на повышенный интерес, не существует единого подхода к формированию цифрового двойника, что подтверждает актуальность исследований данной тематики на сегодняшний день. В [6] формализованы требования к системам обработки данных, пригодных для использования в цифровом двойнике, а также выделены его основные функциональные части. В работе [7] показано текущее состояние разработки цифрового двойника города. Одна из основных сложностей данной разработки — обработка большого массива данных, в том числе и данных о положении и траектории движения объектов. В [8] приведено описание разработки системы безопасности промышленного робота, при использовании технологий машинного обучения и цифрового двойника. Сделано предположение, что системе безопасности известна траектория движения робота-манипулятора в подконтрольной зоне. Данная идея справедлива для разработки систем безопасности на производстве, однако, в то же время оно ограничивает варианты применения сформированного двойника.

В настоящей работе предложено решение для формирования цифрового двойника при условии неизвестной траектории движения многозвенного механизма. Такое решение позволит расширить сферу применения цифрового двойника робота-манипулятора, например, на системы отслеживания контроля технического состояния производственных линий для оценки износа компонентов робота в случае отклонения от заданной траектории движения.

Для формирования цифрового двойника в условиях неизвестной траектории движения робота-манипулятора необходимо решить задачу слежения за объектом. В последние годы решения задачи отслеживания объектов часто основаны на структурах нейронных сетей из-за широкой распространенности и общей приемлемой производительности в конкретных приложениях. Отметим, что технология отслеживания движения распространяется на новые области применения, к которым предъявляются такие требования, как связанность сигналов системы управления и доказательство стабильности [9]. Но в ряде случаев системы, основанные на использовании нейронных сетей, выполнение перечисленных требований не могут гарантировать. Чтобы удовлетворить эти требования, например можно использовать подходы нелинейного управления выходом, основанные на внутренней модели.

Проблема регулирования выхода нелинейных систем изучена в нескольких работах, ее подробное справочное описание можно найти в [10]. Успешное регулирование выхода достигнуто для класса одноканальных систем, которые совмещаются с внутренней моделью специальной формы в работе [11]. Этот подход распространен на класс многоканальных систем, имеющих одинаковое количество входов и выходов [12]. В [13] представлены результаты проектирования адаптивного регулятора по выходу для линейных систем. Доказано, что результаты верны в случае наличия дополнительных измерений, кроме непосредственно измерений регулируемого выхода и управляемого входа. В [14] полученные результаты доказаны применительно к случаю нелинейных систем, аффинных по управляемому входу. В качестве расширения прикладного исследования в настоящей работе предложено проектирование регулятора, основанное на работе [14], для нового случая нелинейных траекторий с новой внутренней моделью. Представлен пример применения отслеживания движения и оценки параметров траектории.

Постановка задачи

Рассмотрим синтез адаптивной системы управления на примере задачи слежения за объектом с нелинейной траекторией движения. Предположим, что объект находится под действием ограниченного внешнего задающего воздействия вида:

$$d\mathbf{x}(t)/dt = f(\mathbf{x}, \mathbf{w}) + g(\mathbf{x}, \mathbf{w})u(t),$$

$$\mathbf{e}(t) = h(\mathbf{x}, \mathbf{w}),$$

$$d\mathbf{w}/dt = S(\mathbf{w}, \mathbf{\rho}),$$

где $\mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^n$ — вектор состояний; $u(t) \in \mathbb{R}^m$ — сигнал слежения; $\mathbf{e}(t) \in \mathbb{R}^m$ — ошибка слежения; $f(\mathbf{x}, \mathbf{w}), g(\mathbf{x}, \mathbf{w}),$ $h(\mathbf{x}, \mathbf{w})$ — векторные функции $\mathbf{x}(t)$ и $\mathbf{w}(t), \mathbf{w}(t) \in \mathbb{R}$ эталонный вектор состояний, вызванный задающим воздействием; $\mathbf{\rho} \in \mathbb{R}$ — вектор неизвестных параметров задающего воздействия; $S(\mathbf{w}, \mathbf{\rho})$ — векторная функция $\mathbf{w}(t)$ и $\mathbf{\rho}$.

Для задачи слежения за объектом неизвестной траектории предположим, что внешнее нелинейное задающее воздействие может быть описано нелинейной хаотической моделью [15]:

$$dw_1/dt = \theta_2[-\theta_3 f(w_2)]w_2 + \frac{d}{dt}([\theta_1 - \theta_3 f(w_2)]w_2), \quad (1)$$

$$dw_2/dt = \frac{1}{\theta_2} (w_1 - [\theta_1 - \theta_3 f(w_2)]w_2),$$
(2)

где w_1, w_2 — переменные состояния; $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ — неизвестные параметры; $f(w_2)$ — известная функция. Данная модель нелинейного сигнала в зависимости от параметров и начальных условий покрывает большой объем различных траекторий.

Цель синтеза адаптивного алгоритма — отслеживание задающего воздействия путем применения алгоритма управления $u = u(\hat{\mathbf{w}}, \hat{\boldsymbol{\rho}})$, который соответствует условию ограниченности всех сигналов и сходимости ошибки $\lim_{t\to\infty} \mathbf{e}(t) = 0$.

Предлагаемое решение

Для достижения поставленной цели используем алгоритм управления, основанный на внутренней модели, представленной в работе [14], вида:

$$d\mathbf{\eta}/dt = \mathbf{F}\mathbf{\eta} + \mathbf{G}\left[\frac{1}{k}\gamma(k\mathbf{\eta}) + \mathbf{e}(t)\right],$$
 (3)

$$u(t) = \frac{1}{k}\gamma(k\mathbf{\eta}) + \mathbf{e}(t), \tag{4}$$

где **η** — вектор состояния внутренней модели; γ — компенсирующая часть сигнала управления; k — подбираемый коэффициент; **F** — матрица состояний в сопутствующей форме; **G** = $(0 \ 0 \ \dots \ 0 \ 1)^T$ — матрица управления. **F** и γ должны быть специально синтезированы для рассматриваемой нелинейной системы.

Сделаем два допущения.

Допущение 1. Существует такой номинальный закон управления $u_0 = u(\mathbf{x}, \mathbf{w})$, при котором ошибка управления $\mathbf{e}(t)$ сходится к нулю. Допущение 2. Существует вид внешнего возмущения, представленный в виде:

$$d\sigma/dt = \mathbf{F}\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{G}\gamma(\boldsymbol{\sigma}),$$
$$\gamma(\boldsymbol{\sigma}) = u_0,$$

где о — вектор состояний.

Для синтеза закона управления при условии существования внешнего воздействия:

$$\sigma = \sigma(\mathbf{w})$$

переменные вектора о определяются как

$$\sigma_1 = w_2,$$

$$\sigma_2 = d\sigma_1/dt = dw_2/dt = \frac{1}{\theta_2} (w_2 - [\theta_1 - \theta_3 f(w_2)]w_2).$$

Таким образом, модель внешнего возмущения (1) и (2) может быть представлена:

$$w_2 = \sigma_1,$$

$$w_1 = [\theta_1 - \theta_3 f(\sigma_1)]\sigma_1 + \theta_2 \sigma_2.$$

Вектора **σ** и **w** взаимовыражаемые, что свидетельствует о существовании системы особого вида, как показано в [14]. Согласно допущениям 1 и 2, существует модель вида:

$$\begin{pmatrix} d\sigma_1/dt \\ d\sigma_2/dt \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\theta_1 & -\theta_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \gamma(\boldsymbol{\sigma}),$$

$$\gamma(\boldsymbol{\sigma}) = \theta_1 \sigma_1 + \theta_2 \sigma_3 - \theta_3 f(\sigma_1) \sigma_1.$$

Однако регулятор такого вида не реализуем, так как он основывается на не определяемом векторе **w**.

Используя (3) и (4) закон управления может быть переписан:

$$\begin{pmatrix} d\eta_1/dt \\ d\eta_2/dt \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\theta_1 & -\theta_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \left[\frac{1}{k} \gamma(k\mathbf{\eta}) + \mathbf{e}(t) \right],$$
$$\gamma(k\eta) = \theta_1 k\eta_1 + \theta_2 \eta_2 - \theta_3 f(k\eta_1) k\eta_1,$$
$$u(t) = \frac{1}{k} \gamma(k\mathbf{\eta}) + \mathbf{e}(t).$$

Получим закон управления в установившемся режиме:

$$d\eta_1/dt = \eta_2,$$

$$d\eta_2/dt = -\theta_3 f(k\eta_1)k\eta_1$$

Однако до тех пор, пока закон управления включает в себя функцию $\gamma(k\mathbf{\eta})$, которая опирается на неизвестные коэффициенты θ_1 , θ_2 , θ_3 , он также физически не реализуем.

Решением этой проблемы служит замена функции на ее оценку

$$\hat{\gamma}(k\eta) = \widehat{\Theta}_1 k\eta_1 + \widehat{\Theta}_2 k\eta_2 - \widehat{\Theta}_3 f(k\eta_1) k\eta_1,$$

или $\hat{\gamma}(k\eta) = \hat{\Theta} \beta(k\eta),$

где оценочный вектор

 $\hat{\mathbf{\theta}} = [\widehat{\theta_1}, \widehat{\theta_2}, \widehat{\theta_3}], \, \mathbf{\beta}(k\mathbf{\eta})^T = [k\eta_1, k\eta_2, -f(k\eta_1)k\eta_1].$

Вектор оценки определяется путем выбора закона адаптации, который в данном случае имеет вид:

$$d\hat{\boldsymbol{\theta}}^{T}/dt = -k_{0}\mathbf{e}(t)\boldsymbol{\beta}(k\boldsymbol{\eta})$$

где *k*₀ — подбираемый коэффициент.

Экспериментальное исследование

Основная цель проведения экспериментальной апробации — необходимость оценки возможности формирования цифрового двойника в реальном времени посредством адаптивного алгоритма оценки траектории нелинейного движения. Для точного и правильного формирования цифрового двойника необходима точность работы алгоритма в реальном времени.

На рис. 1 представлен макет экспериментального стенда. Стенд содержит робот-манипулятор KUKA youBot, выступающий в виде отслеживаемого объекта, и обрабатывающего центра — среды MATLAB Simulink. Цифровой двойник сформирован за счет построения в среде Simulink модели робота, основанной на его физических характеристиках, и данных о положении звеньев, получаемых в реальном времени с датчиков робота-манипулятора. Траектория движения цифрового двойника формировалась за счет работы адаптивного регулятора, основанного на внутренней модели.

В ходе эксперимента рассмотрен пример, в котором данные о положении звеньев манипулятора в реальном времени известны, а задающее воздействие, формирующее траекторию движения звеньев, неизвестно. Поставлена задача — оценить параметры задающей траектории и сформировать управляющий сигнал цифрового двойника для двух звеньев робота-манипулятора.

Сигнал управления роботом-манипулятором в реальном времени получен с помощью хаотических ге-



Рис. 1. Макет экспериментального стенда:
 1 — обрабатывающий центр в виде среды моделирования MATLAB Simulink, содержащий цифрового двойника системы; *2* — робот-манипулятор KUKA youBot

Fig. 1. Experimental setup: *1* — simulation system in MATLAB Simulink which includes digital twin; *2* — robotic manipulator KUKA youBot

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2022, том 22, № 5 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no 5



Puc. 2. Задающее воздействие: для первого (*a*) и третьего (*b*) звеньев манипулятора *Fig.* 2. External disturbance: for first (*a*) and third (*b*) manipulator links

нераторов нелинейной траектории для двух звеньев манипулятора вида (1) и (2) с умножением результирующего вектора на коэффициент k. Для первого звена параметры генератора заданы вручную: $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = 1$; k = -1 для третьего звена $\theta_1 = 1$; $\theta_2 = \theta_3 = 2$; k = 0,1. Результирующая траектория задающего сигнала представлена на рис. 2, *а* для первого звена и на рис. 2, *b* — для третьего. Ручной способ формирования траектории задающего воздействия позволил оценить точность работы адаптивного алгоритма оценки путем сравнения выходного сигнала регулятора и задающего воздействия.

Отметим, что существующее ограничение на применяемое количество звеньев, для траектории которых может быть произведена адаптивная оценка, обусловлено ограничениями технической базы. В настоящей работе для доказательства возможности формирования цифрового двойника многозвенного механизма проведена оценка двух звеньев в реальном времени.

В результате получено отклонение данных, получаемых с датчика положения поворота звена, от входного управляющего сигнала, что вызвано задержкой отправки сигнала по протоколу TCP/IP, а также физических сопротивлений при движении звеньев манипулятора. Адаптивный регулятор, основанный на использовании внутренней модели, предназначен для решения этой проблемы. Получая данные о реальном положении, система выполнила оценку параметров траектории движения и сформировала управляющий сигнал, подаваемый на цифрового двойника. Ошибка слежения вычислена путем сравнения эталонного задающего воздействия и выходного сигнала адаптивного регулятора. На рис. 3 приведены графики ошибки слежения e(t) по первому и третьему звеньям. Была решена задача попасть в область [-0,005, 0,005] рад по ошибке слежения. Колебания в области нуля вызваны шумами измерения.

Из рис. З видно перерегулирование выходного сигнала регулятора, что связано с особенностями работы систем реального времени в среде MATLAB, а также шумами измерений. Однако, учитывая поставленную цель, можно сделать вывод, что экспериментальная апробация такого метода формирования цифрового двойника прошла успешно. Цифровой двойник успешно повторил движения робота-манипулятора, форма сигнала слежения совпала с формой задающего воздействия, и ошибка слежения попала в установленную область.



Рис. 3. Графики ошибки слежения траектории движения: первого (*a*) и третьего (*b*) звеньев робота-манипулятора. Пунктирными линиями показана заданная область

Fig. 3. Movement tracking error graphs: for first (*a*) and third (*b*) manipulator links. Tracking goal shown on graphs between dotted lines

Заключение

В ходе проведения экспериментальной апробации адаптивного алгоритма оценки нелинейной траектории движения установлена возможность использования алгоритма для успешного формирования траектории цифрового двойника. В качестве дальнейшей работы в данной области можно выделить следующие шаги:

Литература

- Rasheed A., San O., Kvamsdal T. Digital twin: Values, challenges and enablers from a modeling perspective // IEEE Access. 2020. V. 8. P. 21980–22012. https://doi.org/10.1109/ACCESS.2020.2970143
- He B., Bai K.J. Digital twin-based sustainable intelligent manufacturing: A review // Advances in Manufacturing. 2021. V. 9. N 1. P. 1–21. https://doi.org/10.1007/s40436-020-00302-5
- Cimino C., Negri E., Fumagalli L. Review of digital twin applications in manufacturing // Computers in Industry. 2019. V. 113. P. 103130. https://doi.org/10.1016/j.compind.2019.103130
- Madni A.M., Madni C.C., Lucero S.D. Leveraging digital twin technology in model-based systems engineering // Systems. 2019. V. 7. N 1. P. 7. https://doi.org/10.3390/systems7010007
- Tao F., Zhang H., Liu A., Nee A.Y.C. Digital twin in industry: Stateof-the-art // IEEE Transactions on Industrial Informatics. 2019. V. 15. N 4. P. 2405–2415. https://doi.org/10.1109/TII.2018.2873186
- Lu Y., Liu C., Wang K.-K., Huang H., Xu X. Digital Twin-driven smart manufacturing: Connotation, reference model, applications and research issues // Robotics and Computer-Integrated Manufacturing. 2020. V. 61. P. 101837. https://doi.org/10.1016/j.rcim.2019.101837
- Shahat E., Hyun C.T., Yeom C. City digital twin potentials: A review and research agenda // Sustainability. 2021. V. 13. N 6. P. 3386. https://doi.org/10.3390/su13063386
- Bilberg A., Malik A.A. Digital twin driven human–robot collaborative assembly // CIRP Annals. 2019. V. 68. N 1. P. 499–502. https://doi. org/10.1016/j.cirp.2019.04.011
- Gromov V., Borisov O., Vedyakov A., Pyrkin A., Shavetov S., Bobtsov A., Salikhov V., Aranovskiy S. Adaptive multisinusoidal signal tracking system with input delay // IFAC-PapersOnLine. 2016. V. 49. N 13. P. 105–110. https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2016.07.935
- Huang J. Nonlinear Output Regulation: Theory and Applications. SIAM, 2004. 318 p. https://doi.org/10.1137/1.9780898718683
- Isidori A., Marconi L. Shifting the internal model from control input to controlled output in nonlinear output regulation // Proc. of the 51st IEEE Conference on Decision and Control (CDC). 2012. P. 4900– 4905. https://doi.org/10.1109/CDC.2012.6426464
- Astolfi D., Isidori A., Marconi L., Praly L. Nonlinear output regulation by post-processing internal model for multi-input multioutput systems // IFAC Proceedings Volumes (IFAC-PapersOnline). 2013. V. 9. N 1. P. 295–300. https://doi.org/10.3182/20130904-3-FR-2041.00118
- Pyrkin A., Isidori A. Adaptive output regulation of invertible mimo systems // IFAC-PapersOnLine. 2017. V. 50. N 1. P. 5498–5503. https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2017.08.1089
- Pyrkin A., Isidori A. Output regulation for robustly minimum-phase multivariable nonlinear systems // Proc. of the 56th IEEE Annual Conference on Decision and Control (CDC). 2017. P. 873–878. https://doi.org/10.1109/CDC.2017.8263769
- Zapateiro M., Vidal Y., Acho L. A secure communication scheme based on chaotic duffing oscillators and frequency estimation for the transmission of binary-coded messages // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. 2014. V. 19. N 4. P. 991–1003. https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2013.07.029

получение информации о положении объекта посредством внешнего наблюдателя, настройка параметров адаптивного регулятора для увеличения точности функционирования в реальном времени, проведение экспериментальной апробации на машине, предназначенной для использования в режиме работы реального времени (Real-Time machine), для оценки точности работы алгоритма.

References

- Rasheed A., San O., Kvamsdal T. Digital twin: Values, challenges and enablers from a modeling perspective. *IEEE Access*, 2020, vol. 8, pp. 21980–22012. https://doi.org/10.1109/ACCESS.2020.2970143
- He B., Bai K.J. Digital twin-based sustainable intelligent manufacturing: A review. Advances in Manufacturing, 2021, vol. 9, no. 1, pp. 1–21. https://doi.org/10.1007/s40436-020-00302-5
- Cimino C., Negri E., Fumagalli L. Review of digital twin applications in manufacturing. *Computers in Industry*, 2019, vol. 113, pp. 103130. https://doi.org/10.1016/j.compind.2019.103130
- Madni A.M., Madni C.C., Lucero S.D. Leveraging digital twin technology in model-based systems engineering. *Systems*, 2019, vol. 7, no. 1, pp. 7. https://doi.org/10.3390/systems7010007
- Tao F., Zhang H., Liu A., Nee A.Y.C. Digital twin in industry: Stateof-the-art. *IEEE Transactions on Industrial Informatics*, 2019, vol. 15, no. 4, pp. 2405–2415. https://doi.org/10.1109/TII.2018.2873186
- Lu Y., Liu C., Wang K.-K., Huang H., Xu X. Digital Twin-driven smart manufacturing: Connotation, reference model, applications and research issues. *Robotics and Computer-Integrated Manufacturing*, 2020, vol. 61, pp. 101837. https://doi.org/10.1016/j.rcim.2019.101837
- Shahat E., Hyun C.T., Yeom C. City digital twin potentials: A review and research agenda. *Sustainability*, 2021, vol. 13, no. 6, pp. 3386. https://doi.org/10.3390/su13063386
- Bilberg A., Malik A.A. Digital twin driven human–robot collaborative assembly. *CIRP Annals*, 2019, vol. 68, no. 1, pp. 499–502. https://doi. org/10.1016/j.cirp.2019.04.011
- Gromov V., Borisov O., Vedyakov A., Pyrkin A., Shavetov S., Bobtsov A., Salikhov V., Aranovskiy S. Adaptive multisinusoidal signal tracking system with input delay. *IFAC-PapersOnLine*, 2016, vol. 49, no. 13, pp. 105–110. https://doi.org/10.1016/j. ifacol.2016.07.935
- Huang J. Nonlinear Output Regulation: Theory and Applications. SIAM, 2004, 318 p. https://doi.org/10.1137/1.9780898718683
- Isidori A., Marconi L. Shifting the internal model from control input to controlled output in nonlinear output regulation. *Proceedings of the* 51st IEEE Conference on Decision and Control (CDC), 2012, pp. 4900–4905. https://doi.org/10.1109/CDC.2012.6426464
- Astolfi D., Isidori A., Marconi L., Praly L. Nonlinear output regulation by post-processing internal model for multi-input multioutput systems. *IFAC Proceedings Volumes (IFAC-PapersOnline)*, 2013, vol. 9, no. 1, pp. 295–300. https://doi.org/10.3182/20130904-3-FR-2041.00118
- Pyrkin A., Isidori A. Adaptive output regulation of invertible mimo systems. *IFAC-PapersOnLine*, 2017, vol. 50, no. 1, pp. 5498–5503. https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2017.08.1089
- Pyrkin A., Isidori A. Output regulation for robustly minimum-phase multivariable nonlinear systems. *Proc. of the 56th IEEE Annual Conference on Decision and Control (CDC)*, 2017, pp. 873–878. https://doi.org/10.1109/CDC.2017.8263769
- Zapateiro M., Vidal Y., Acho L. A secure communication scheme based on chaotic duffing oscillators and frequency estimation for the transmission of binary-coded messages. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 2014, vol. 19, no. 4, pp. 991–1003. https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2013.07.029

Авторы

Мешков Алексей Викторович — аспирант, инженер, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, 57222576415, https://orcid.org/0000-0001-9981-8299, avmeshkov@ itmo.ru

Громов Владислав Сергеевич — кандидат технических наук, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, 557196959497, https://orcid.org/0000-0002-2416-3766, gromov@itmo.ru

Статья поступила в редакцию 05.05.2022 Одобрена после рецензирования 14.07.2022 Принята к печати 21.09.2022

Authors

Aleksei V. Meshkov — PhD Student, Engineer, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, <u>57222576415</u>, https://orcid. org/0000-0001-9981-8299, avmeshkov@itmo.ru

Vladislav S. Gromov — PhD, Associate Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, <u>57196959497</u>, https://orcid.org/0000-0002-2416-3766, gromov@itmo.ru

Received 05.05.2022 Approved after reviewing 14.07.2022 Accepted 21.09.2022



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» **VİTMO**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 No 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

НОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ И НАНОТЕХНОЛОГИИ MATERIAL SCIENCE AND NANOTECHNOLOGIES

:

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-896-902 УДК 535.372

Исследование спектрально-люминесцентных свойств квантовых точек CsPb(BrCl)₃ во фторфосфатных стеклах

Артем Александрович Макурин¹, Елена Вячеславовна Колобкова²

1,2 Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

¹ temkkaa1.8@gmail.com. https://orcid.org/0000-0001-8101-3134

² kolobok106@rambler.ru^{\vee}, https://orcid.org/0000-0002-0134-8434

Аннотация

Предмет исследования. В рамках научного проекта «Исследование спектрально-люминесцентных свойств квантовых точек CsPb(BrCl)₃ во фторфосфатных стеклах» синтезированы и исследованы квантовые точки CsPbX₃ (X = Br, Cl). Методика исследования. Исследование спектров поглощения выполнено с помощью двулучевого спектрофотометра Perkin Elmer lambda 650. Для получения спектров люминесценции использован спектрофлуориметр Perkin Elmer LS50B. Изучены температурные зависимости спектров люминесценции посредством оригинальной установки, включающей спектрофлуориметр, многомодовое оптическое волокно, криостат и температурную приставку. Возбуждающий свет от лампы спектрофлуориметра фокусировался на входной канал оптического волокна. После выхода из канала излучение собиралось линзой, в фокусе которой находился образец, закрепленный в термостате. Люминесценция образца собиралась в обратном направлении с выводом на приемник спектрофлуориметра, который соединен с компьютером. Термостат, в свою очередь, был подключен к криогенной приставке «Variable Temperature Cell», позволяющей регулировать температуру в пределах от 74 до 472 К. Основные результаты. Показано, что при увеличении времени термообработки образцов происходит рост квантовых точек, что приводит к уменьшению ширины запрещенной зоны вследствие квантово-размерного эффекта. При замене в CsPbBr3 брома на хлор были получены смешанные нанокристаллы CsPb(BrCl)₃, что привело к сдвигу полос поглощения и люминесценции в коротковолновую область. Таким образом, выбирая различные лиганды для CsPbX₃ (X = Br, Cl), изменяя их соотношение и условия термообработки, можно перестроить длину волны люминесценции в широкой области видимого диапазона. Исследование зависимости ширины запрещенной зоны от температуры наглядно показало влияние фазовых переходов. Определена последовательность фазовых переходов для различных химических составов, а именно, был обнаружен вклад введения хлора в изменение температурной зависимости ширины запрещенной зоны в диапазоне от 180 до 400 К. Предположено, что основными причинами тушения люминесценции выше 300 К являются фазовые переходы. Практическая значимость. В результате доказано, что фторфосфатное стекло — химически устойчивая среда для защиты квантовых точек от внешних воздействий. В работе получена возможность создания стабильных люминофоров, новых лазерных сред и люминесцирующих покрытий как белого света, так и во всем видимом диапазоне.

Ключевые слова

квантовые точки, смешанные нанокристаллы, фторфосфатное стекло, анионное замещение, квантово-размерный эффект, температурный сдвиг запрещенной зоны, фазовые переходы в кристаллах

Ссылка для цитирования: Макурин А.А., Колобкова Е.В. Исследование спектрально-люминесцентных свойств квантовых точек CsPb(BrCl)₃ во фторфосфатных стеклах // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 896–902. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-896-902

[©] Макурин А.А., Колобкова Е.В., 2022

Investigation of spectral-luminescent properties of cesium CsPb(BrCl)₃ quantum dots in fluorophosphate glasses

Artem A. Makurin¹, Elena V. Kolobkova^{2⊠}

1,2 ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

¹ temkkaa1.8@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-8101-3134

² kolobok106@rambler.ru[⊠], https://orcid.org/0000-0002-0134-8434

Abstract

Within the framework of the scientific project "Investigation of spectral-luminescent properties of CsPb(BrCl)₃ quantum dots in fluorophosphate glasses" $CsPbX_3$ (X = Br, Cl) quantum dots were synthesized and investigated. The absorption spectra were studied using a Perkin Elmer lambda 650 double beam spectrophotometer. A Perkin Elmer LS50B spectrofluorimeter was used to obtain luminescence spectra. The temperature dependences were studied by means of an original setup, including a spectrofluorimeter, a multimode optical fiber, a cryostat and a temperature stand. The exciting light from the spectrofluorimeter lamp was focused on the input channel of the optical fiber. After leaving the channel, the radiation was collected by a lens in the focus of which was a sample fixed in a thermostat. The luminescence of the sample was collected in the opposite direction with the output to the receiver of the spectrofluorimeter, which is connected to the computer. The thermostat, in turn, was connected to a cryogenic set-top box with variable temperature, which allows adjusting the temperature in the range from 74 to 472 K. It is shown that an increase in the heat treatment time leads to an increase in quantum dots and, accordingly, to a decrease in the band gap due to the quantum confinement effect. When replacing bromine in CsPbBr₃ with chlorine, mixed CsPb(BrCl)₃ nanocrystals were obtained which leads to a shift of the absorption and luminescence bands to the short-wavelength region. Thus, by choosing different ligands for CsPbX₃ (X = Br, Cl), changing their ratio and heat treatment conditions, it is possible to adjust the wavelength of luminescence in a wide area of the visible range. The study of the dependence of the band gap width on temperature clearly showed the presence of phase transformations of the crystal structure. The sequence of phase transitions for various chemical compositions was determined, namely, the contribution of chlorine to the change in dependence in the range from 180 to 400 K. It is assumed that the main causes of luminescence quenching above 300 K are phase transitions. As a result, it is proved that fluorophosphate glass is a chemically stable medium for protecting quantum dots from external influences. The possibility of creating stable phosphors, new laser media and luminescent coatings of both white light and in the entire visible range has been obtained.

Keywords

quantum dots, mixed nanocrystals, fluorophosphate glass, anion-exchange, quantum-dimensional effect, forbidden gap temperature shift, phase changes in crystals

For citation: Makurin A.A., Kolobkova E.V. Investigation of spectral-luminescent properties of cesium CsPb(BrCl)₃ quantum dots in fluorophosphate glasses. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 896–902 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-896-902

Введение

Особенностью квантовых точек (КТ) является квантово-размерный эффект, который позволяет изменять спектрально-люминесцентные характеристики наноматериалов посредством вариации размеров активатора. Другой метод изменения спектрально-люминесцентных характеристик — анионное замещение, широко применяемое для коллоидных КТ. Таким образом, варьируя условия синтеза и состав КТ, можно изменять оптические характеристики материала, а именно, сдвигать ширину запрещенной зоны и люминесценцию от ультрафиолетовой до инфракрасной области спектра [1].

Однако коллоидные нанокристаллы CsPbX₃ обладают низкой стойкостью к внешнему воздействию, в связи с чем происходит падение квантового выхода даже в процессе исследований [2]. Решить эту проблему можно путем формирования КТ в стекле, которое может служить защитой от внешней среды [3–5]. В таком случае спектрально-люминесцентные свойства КТ практически не претерпевают деградации в ходе эксплуатации [6]. Одна из наиважнейших особенностей КТ CsPbX₃ — устойчивость к дефектам, что является основным фактором, определяющим интенсивную люминесценцию [7]. В качестве материалов оптики и фотоники КТ CsPbX₃ находят свое применение в лазерах [8], поляризаторах [9], светодиодах [10], солнечных панелях [11], фотоприемниках [12], а также в медицине в качестве оптических меток [13].

Известно, что фотолюминесценция бромидных нанокристаллов находится в зеленой области спектра. Введение хлора к брому приводит к анионному замещению со сдвигом излучения в синюю область спектра.

Цель настоящей работы — исследование спектрально-люминесцентных характеристик КТ CsPbX₃ (X = Br, Cl) с различной их концентрацией при разной температуре.

Материалы и методы

Синтез образцов. Образцы фторфосфатного стекла $40P_2O_5$ -35BaO-5NaF-10AlF₃-10Ga₂O₃ (мол.%), активированные Cs₂O, PbF₂, BaBr₂ и NaCl, изготовлены методом охлаждения из расплава. Синтез стекла проведен в закрытом стеклоуглеродном тигле при температуре 1273 К. Около 50 г шихты расплавлены в тигле в течение 30 мин, затем расплав стекла был отлит на стеклоуглеродную пластину. В результате был получен образец стекла толщиной около 2 мм и диаметром 7–8 см.

Отжиг образцов выполнен при температуре на 50 К ниже температуры стеклования T_g . Нанокристаллы CsPbX₃ были сформированы в процессе термообработки (TO) при T = 687 К.

Характеристики стекла. Для измерения T_g использован дифференциальный сканирующий калориметр STA 449F1 Jupiter Nietzsche. Температура T_g составила 663 К.

Измерительное оборудование. Исследование спектров поглощения проведено с помощью двулучевого спектрофотометра Perkin Elmer lambda 650 при комнатной температуре в диапазоне от 800 до 200 нм с шагом 0,2 нм. Образцы предварительно подготовлены к измерениям посредством шлифовки и полировки с обеих сторон. Толщина образцов составила 1 мм.

Спектры люминесценции получены с помощью спектрофлуориметра Perkin Elmer LS50В при комнатной температуре с шагом 0,5 нм. Длина волны возбуждающего света — 405 нм.

Температурные зависимости изучены при помощи оригинальной установки, включающей спектрофлуориметр, многомодовое оптическое волокно, криостат и температурную приставку. Возбуждающий свет от лампы спектрофлуориметра фокусировался на входной канал оптического волокна. После выхода из канала излучение собиралось линзой, в фокусе которой находился образец, закрепленный в термостате. Люминесценция образца собиралась в обратном направлении с выводом на приемник спектрофлуориметра, который соединен с компьютером. Термостат подключен к криогенной приставке с переменной температурой «Variable Temperature Cell», позволяющей регулировать температуру в пределах от 74 до 472 К. Измерения при температуре выше комнатной (303-423 К) произведены с помощью нагрева, регулируемого приставкой. Измерения при температурах ниже комнатной от 93 до 303 К проводились при использовании жидкого азота. Для таких

измерений необходим вакуум, который был получен с использованием вакуумного насоса, понижающего давление до 20 мбар с погрешностью 20 %.

Результаты и обсуждение

Поглощение и люминесценция. Фторофосфатное стекло, активированное КТ CsPbBr₃, дополнительно обработано при температуре 688 К в течение 30, 60 и 90 мин. Спектры поглощения и люминесценции, в зависимости от времени ТО, приведены на рис. 1.

Из рис. 1, *а* видно, что с увеличением времени ТО спектры сдвигаются в длинноволновую область, что свидетельствует о росте размеров КТ. Из-за сильного поглощения активатора наблюдается только край зоны поглощения (E_g) без характерного экситонного пика, что связано с высокой концентрацией нанокристаллов. Для монокристалла CsPbBr₃ E_g = 525 нм.

С увелечением размера $\bar{\text{KT}}$ слектры люминесценции (рис. 1, *b*) претерпевают аналогичный сдвиг в длинноволновую область с 499 нм до 514 нм. Полуширина пиков составляет около 20 нм. Стоксов сдвиг равен 10–15 нм. Таким образом, полоса поглощения перекрывается с полосой люминесценции, что приводит к реабсорбции излучения и искажению полос.

Для стекол, содержащих хлор и бром, выполнена ТО при аналогичных условиях. Рентгено-фазовый анализ показал наличие нанокристалла состава CsPb(Cl_{1,5}Br_{1,5}). Зависимости спектров поглощения и люминесценции от времени ТО приведены на рис. 2.

В результате показано, что спектры поглощения и люминесценции сдвигаются в длинноволновую область с увеличением времени ТО. Край границы поглощения сдвигается с 450 до 495 нм. Максимумы полос излучения перекрывают область от 454 до 498 нм. Полуширина полос люминесценции составляет примерно 20 нм.



Рис. 1. Зависимости спектров поглощения (*a*) и люминесценции (*b*) квантовых точек CsPbBr₃ от времени термообработки (TO). *E_g* — край зоны поглощения монокристалла

Fig. 1. Dependence of absorption (a) and luminescence (b) spectra of CsPbBr₃ quantum dots vs. the heat treatment time. E_g is the bulk crystals band gap



Рис. 2. Зависимости спектров поглощения (*a*) и люминесценции (*b*) квантовых точек CsPb(Cl_{1,5}Br_{1,5}) от времени термообработки

Fig. 2. Dependence of absorption (a) and luminescence (b) spectra of $CsPb(Cl_{1,5}Br_{1,5})$ quantum dots vs. the heat treatment time

В полосе люминесценции до ТО наблюдается плечо на 470 нм, что говорит о том, что в стекле могут формироваться КТ с разным соотношением хлора и брома.

В спектре люминесценции стекла после 90 мин ТО появляются три пика на длинах волн 477, 498 и 528 нм, что говорит о фазовой сегрегации в материале. Пик с максимумом 477 нм имеет малую интенсивность, так как находится в области сильного поглощения. Пики 498 нм и 528 нм свидетельствуют о росте КТ с различными соотношениями хлор/бром.

Возникновение нескольких пиков люминесценции в результате ТО связано с тем, что в процессе охлаждения стекла различные области расплава охлаждаются с разной скоростью, в результате чего рост каждой точки протекает с различной скоростью. **Температурные зависимости люминесценции.** Данные измерения проведены с использованием жидкого азота в диапазоне температур от 90 до 423 К. Зависимость ширины запрещенной зоны от температуры для образца CsPbBr₃ приведена на рис. 3, *а*.

Размер КТ в данном образце составил 6 нм [14]. В диапазоне температур от 100 до 180 К происходит линейное увеличение ширины запрещенной зоны нанокристаллов [15]. При 180 К наблюдается отклонение от линейной зависимости, что, вероятнее всего, связано с потерей центра симметрии кристаллической решетки. Также, начиная с 300 К и 400 К происходит изменение коэффициента наклона прямой, описывающей температурный коэффициент сдвига зоны. Данное явление связано с тем, что при температуре около 300 К нанокристалл CsPbBr₃ претерпевает структурный пе-



Рис. 3. Зависимости ширины запрещенной зоны от температуры для квантовых точек (*a*) и интегральной интенсивности от обратной температуры стекла (*b*) для нанокристалла CsPbBr₃

Fig. 3. Dependences of the band gap on temperature for quantum dots (a) and the integral intensity vs. the reciprocal glass temperature (b) for a CsPbBr₃ nanocrystal



Рис. 4. Зависимости ширины запрещенной зоны от температуры (*a*) и интегральной интенсивности обратной температуры стекла (*b*) с нанокристаллами CsPbCl_{2.25}Br_{0.75}

Fig. 4. Dependences of the band gap vs. temperature (*a*) and the integral intensity of the reciprocal temperature of glass (*b*) with $CsPbCl_{2.25}Br_{0.75}$ nanocrystals

реход. При 400 К кристаллическая решетка переходит в высокотемпературную нелюминесцентную фазу. Температурное окно для фазовых модификаций составляет всего 100 К [16, 17].

Механизм изменения зонной структуры определяется электрон-фононным взаимодействием и термическим расширением нанокристалла, причем оба эффекта дают сдвиг с разным знаком.

На рис. 3, *b* представлена зависимость интегральной интенсивности от обратной температуры.

Для КТ характерно падение интенсивности излучения с ростом температуры, что полностью коррелирует с рис. 3, *а* и говорит об активации процессов тушения. На различных участках кривой наблюдается изменение коэффициента наклона прямой интерполяции, что также объясняется фазовыми переходами кристаллической структуры. Аналогично с рис. 3, *а* на зависимости (рис. 3, *b*) при T = 180 К наблюдается перегиб, связанный с потерей центра инверсии, т. е. понижением симметрии элементарной ячейки кристаллической решетки. Изменение наклона при 310 К соответствует переходу из низкотемпературной моноклинной фазы в высокотемпературную моноклинную, вследствие чего происходит сильное падение интенсивности фотолюминесценции.

Иная зависимость наблюдается в смешанном нанокристалле CsPbCl_{2,25}Br_{0,75} (рис. 4, a). Содержание хлора в данных КТ преобладает над бромом. Информация по данной структуре ограничена лишь узким кругом научных работ, и потому сложно объяснить все механизмы формирования данной зависимости. В диапазоне от 80 до 180 К наблюдается похожее увеличение ширины запрещенной зоны, но при 180–300 К происходит ее сужение. При достижении комнатной температуры осуществляется фазовый переход, и зависимость меняет свой знак, с увеличением температуры видно увеличение E_g . Затем при 325 К нанокристалл переходит в высокотемпературную фазу, что полностью согласуется с данными научных работ. Данная зависимость сходна с аналогичной зависимостью для хлоридных КТ [18].

На рис. 4, *b* представлена зависимость интегральной интенсивности люминесценции KT CsPbCl_{2,25}Br_{0,75} от температуры.

Для КТ CsPbBr₃ и CsPbCl_{2,25}Br_{0,75} наблюдается тушение люминесценции с ростом температуры. За ускорение тушения люминесценции ответственны фазовые переходы.

Заключение

Выявлены высокая интенсивность люминесценции квантовых точек CsPbX₃ с возможностью их перестройки за счет изменения размера и состава нанокристаллов.

Показано, что внедрение CsPbX₃ в матрицу стекла приводит к высокой устойчивости нанокристаллов к температуре, сохраняя их превосходные люминесцентные свойства на протяжении длительного времени.

В ходе температурных измерений обнаружено, что фазовые переходы вносят значительный вклад в тушение люминесценции наряду с тушащими дефектами поверхности.

Таким образом, изменение размеров и соотношения хлор/бром в квантовых точках CsPbX₃ во фторофосфатном стекле позволяет изменять оптические характеристики люминесцентного материала в широком спектральном диапазоне.

Литература

- Kolobkova E.V., Kuznetsova M.S., Nikonorov N.V. Perovskite CsPbX₃ (X = Cl, Br, I) Nanocrystals in fluorophosphate glasses // Journal of Non-Crystalline Solids. 2021. V. 563. P. 120811 https://doi. org/10.1016/j.jnoncrysol.2021.120811
- Kovalenko M.V., Protesescu L., Bodnarchuk M.I. Properties and potential optoelectronic applications of lead halide perovskite nanocrystals // Science. 2017. V. 358. N 6364. P. 745–750. https://doi. org/10.1126/science.aam7093
- Yuan X., Ji S., De Siena M.C., Fei L., Zhao Z., Wang Y., Li H., Zhao J., Gamelin D.R. Photoluminescence temperature dependence, dynamics, and quantum efficiencies in Mn²⁺-doped CsPbCl₃ perovskite nanocrystals with varied dopant concentration // Chemistry of Materials. 2017. V. 29. N 18. P. 8003–8011. https://doi.org/10.1021/ acs.chemmater.7b03311
- Ai B., Liu C., Wang J., Xie J., Han J., Zhao X. Precipitation and optical properties of CsPbBr₃ quantum dots in phosphate glasses // Journal of the American Ceramic Society. 2016. V. 99. N 9. P. 2975– 2877. https://doi.org/10.1111/jace.14400
- Di X., Hu Z., Jiang T., He M., Zhou L., Xiang W., Liang X. Use of long-term stable CsPbBr₃ perovskite quantum dots in phospho-silicate glass for highly efficient white LEDs // Chemical Communications. 2017. V. 53. N 80. P. 11068–11071. https://doi.org/10.1039/ C7CC06486A
- Ye Y., Zhang W.C., Zhao Z.Y., Wang J., Liu C., Deng Z., Zhao X., Han J. Highly luminescent cesium lead halide perovskite nanocrystals stabilized in glasses for light-emitting applications // Advanced Optical Materials. 2019. V. 7. N 9. P. 1801663. https://doi. org/10.1002/adom.201801663
- Shao G., Liu S., Ding L., Zhang Z., Xiang W., Liang X. K_xCs_{1-x}PbBr₃ NCs glasses possessing super optical properties and stability for white light emitting diodes // Chemical Engineering Journal. 2019. V. 375. P. 122031. https://doi.org/10.1016/j. cej.2019.122031
- Fu Y., Zhu H., Stoumpos C.C., Ding Q., Wang J., Kanatzidis M.G., Zhu X., Jin S. Broad wavelength tunable robust lasing from singlecrystal nanowires of cesium lead halide perovskites (CsPbX₃, X = Cl, Br, I) // ACS Nano. 2016. V. 10. N 8. P. 7963–7972. https://doi. org/10.1021/acsnano.6b03916
- Wang D., Wu D., Dong D., Chen W., Hao J., Qin J., Xu B., Wang K., Suna X. Polarized emission from CsPbX₃ perovskite quantum dots // Nanoscale. 2016. V. 8. N 22. P. 11565–11570. https://doi.org/10.1039/ C6NR01915C
- Liu P., Chen W., Wang W., Xu B., Wu D., Hao J., Cao W., Fang F., Li Y., Zeng Y., Pan R., Chen S., Cao W., Sun X.W., Wang K. Haliderich synthesized cesium lead bromide perovskite nanocrystals for light-emitting diodes with improved performance // Chemistry of Materials. 2017. V. 29. N 12. P. 5168–5173. https://doi.org/10.1021/ acs.chemmater.7b00692
- Mei A., Li X., Liu L., Ku Z., Liu T., Rong Y., Xu M., Hu M., Chen J., Yang Y., Grätzel M., Han H. A hole-conductor–free, fully printable mesoscopic perovskite solar cell with high stability // Science. 2014. V. 345. P. 295–298. https://www.science.org/doi/10.1126/ science.1254763
- Lv L., Xu Y., Fang H., Luo W., Xu F., Liu L., Wang B., Zhang X., Yang D., Hu W., Dong A. Generalized colloidal synthesis of highquality, two-dimensional cesium lead halide perovskite nanosheets and their applications in photodetectors // Nanoscale. 2016. V. 8. N 28. P. 13589–13596. https://doi.org/10.1039/C6NR03428D
- Здобнова Т.А., Лебеденко Е.Н., Деев С.М. Квантовые точки для молекулярной диагностики опухолей // Acta Naturae. 2011. V. 3. N 1(8). P. 30–49.
- Ai B., Liu C., Deng Z., Wang J., Han J., Zhao X. Low temperature photoluminescence properties of CsPbBr₃ quantum dots embedded in glasses // Physical Chemistry Chemical Physics. 2017. V. 19. N 26. P. 17349–17355. https://doi.org/10.1039/C7CP02482G
- Saran R., Heuer-Jungemann A., Kanaras A.G., Curry R.J. Giant bandgap renormalization and exciton–phonon scattering in perovskite nanocrystals // Advanced Optical Materials. 2017. V. 5. N 17. P. 1700231. https://doi.org/10.1002/adom.201700231
- 16. Nedelcu G., Protesescu L., Yakunin S., Bodnarchuk M.I., Grotevent M.J., Kovalenko M.V. Fast anion-exchange in highly luminescent nanocrystals of cesium lead halide perovskites (CsPbX₃, X = Cl, Br, I) // Nano Letters. 2015. V. 15. N 8. P. 5635–5640. https:// doi.org/10.1021/acs.nanolett.5b02404

References

- Kolobkova E.V., Kuznetsova M.S., Nikonorov N.V. Perovskite CsPbX₃ (X = Cl, Br, I) Nanocrystals in fluorophosphate glasses. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2021, vol. 563, pp. 120811 https:// doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2021.120811
- Kovalenko M.V., Protesescu L., Bodnarchuk M.I. Properties and potential optoelectronic applications of lead halide perovskite nanocrystals. *Science*, 2017, vol. 358, no. 6364, pp. 745–750. https:// doi.org/10.1126/science.aam7093
- Yuan X., Ji S., De Siena M.C., Fei L., Zhao Z., Wang Y., Li H., Zhao J., Gamelin D.R. Photoluminescence temperature dependence, dynamics, and quantum efficiencies in Mn²⁺-doped CsPbCl₃ perovskite nanocrystals with varied dopant concentration. *Chemistry* of Materials, 2017, vol. 29, no. 18, pp. 8003–8011. https://doi. org/10.1021/acs.chemmater.7b03311
- Ai B., Liu C., Wang J., Xie J., Han J., Zhao X. Precipitation and optical properties of CsPbBr₃ quantum dots in phosphate glasses. *Journal of the American Ceramic Society*, 2016, vol. 99, no. 9, pp. 2975–2877. https://doi.org/10.1111/jace.14400
- Di X., Hu Z., Jiang T., He M., Zhou L., Xiang W., Liang X. Use of long-term stable CsPbBr₃ perovskite quantum dots in phospho-silicate glass for highly efficient white LEDs. *Chemical Communications*, 2017, vol. 53, no. 80, pp. 11068–11071. https://doi.org/10.1039/ C7CC06486A
- Ye Y., Zhang W.C., Zhao Z.Y., Wang J., Liu C., Deng Z., Zhao X., Han J. Highly luminescent cesium lead halide perovskite nanocrystals stabilized in glasses for light-emitting applications. *Advanced Optical Materials*, 2019, vol. 7, no. 9, pp. 1801663. https://doi.org/10.1002/ adom.201801663
- Shao G., Liu S., Ding L., Zhang Z., Xiang W., Liang X. K_xCs_{1-x}PbBr₃ NCs glasses possessing super optical properties and stability for white light emitting diodes. *Chemical Engineering Journal*, 2019, vol. 375, pp. 122031. https://doi.org/10.1016/j. cej.2019.122031
- Fu Y., Zhu H., Stoumpos C.C., Ding Q., Wang J., Kanatzidis M.G., Zhu X., Jin S. Broad wavelength tunable robust lasing from singlecrystal nanowires of cesium lead halide perovskites (CsPbX₃, X = Cl, Br, I). ACS Nano, 2016, vol. 10, no. 8, pp. 7963–7972. https://doi. org/10.1021/acsnano.6b03916
- Wang D., Wu D., Dong D., Chen W., Hao J., Qin J., Xu B., Wang K., Suna X. Polarized emission from CsPbX₃ perovskite quantum dots. *Nanoscale*, 2016, vol. 8, no. 22, pp. 11565–11570. https://doi. org/10.1039/C6NR01915C
- Liu P., Chen W., Wang W., Xu B., Wu D., Hao J., Cao W., Fang F., Li Y., Zeng Y., Pan R., Chen S., Cao W., Sun X.W., Wang K. Haliderich synthesized cesium lead bromide perovskite nanocrystals for light-emitting diodes with improved performance. *Chemistry of Materials*, 2017, vol. 29, no. 12, pp. 5168–5173. https://doi. org/10.1021/acs.chemmater.7b00692
- Mei A., Li X., Liu L., Ku Z., Liu T., Rong Y., Xu M., Hu M., Chen J., Yang Y., Grätzel M., Han H. A hole-conductor-free, fully printable mesoscopic perovskite solar cell with high stability. *Science*, 2014, vol. 345, pp. 295–298. https://www.science.org/doi/10.1126/ science.1254763
- Lv L., Xu Y., Fang H., Luo W., Xu F., Liu L., Wang B., Zhang X., Yang D., Hu W., Dong A. Generalized colloidal synthesis of highquality, two-dimensional cesium lead halide perovskite nanosheets and their applications in photodetectors. *Nanoscale*, 2016, vol. 8, no. 28, pp. 13589–13596. https://doi.org/10.1039/C6NR03428D
- Zdobnova T.A., Lebedenko E.N., Deyev S.M. Qquantum dots for molecular diagnostics of tumors. *Acta Naturae*, 2011, vol. 3, no. 1, pp. 29–47. https://doi.org/10.32607/20758251-2011-3-1-29-47
- Ai B., Liu C., Deng Z., Wang J., Han J., Zhao X. Low temperature photoluminescence properties of CsPbBr₃ quantum dots embedded in glasses. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2017, vol. 19, no. 26, pp. 17349–17355. https://doi.org/10.1039/C7CP02482G
- Saran R., Heuer-Jungemann A., Kanaras A.G., Curry R.J. Giant bandgap renormalization and exciton–phonon scattering in perovskite nanocrystals. *Advanced Optical Materials*, 2017, vol. 5, no. 17, pp. 1700231. https://doi.org/10.1002/adom.201700231
- Nedelcu G., Protesescu L., Yakunin S., Bodnarchuk M.I., Grotevent M.J., Kovalenko M.V. Fast anion-exchange in highly luminescent nanocrystals of cesium lead halide perovskites (CsPbX₃, X = Cl, Br, I). *Nano Letters*, 2015, vol. 15, no. 8, pp. 5635–5640. https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.5b02404

- Mannino G., Deretzis I., Smecca E., La Magna A., Alberti A., Ceratti D., Cahen D. Temperature-dependent optical band gap in CsPbBr₃, MAPbBr₃, and FAPbBr₃ single crystals // Journal of Physical Chemistry Letters. 2020. V. 11. N 7. P. 2490–2496. https:// doi.org/10.1021/acs.jpclett.0c00295
- Carabatos-Nédelec C., Oussaïd M., Nitsch K. Raman scattering investigation of cesium plumbochloride, CsPbCl₃, phase transitions // Journal of Raman Spectroscopy. 2003. V. 34. N 5. P. 388–393. https://doi.org/10.1002/jrs.1005

Авторы

Макурин Артем Александрович — студент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, https://orcid. org/0000-0001-8101-3134, temkkaa1.8@gmail.com

Колобкова Елена Вячеславовна — доктор химических наук, профессор, профессор, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, 55 7004361788, https://orcid.org/0000-0002-0134-8434, kolobok106@rambler.ru

Статья поступила в редакцию 25.05.2022 Одобрена после рецензирования 21.07.2022 Принята к печати 21.09.2022

- Mannino G., Deretzis I., Smecca E., La Magna A., Alberti A., Ceratti D., Cahen D. Temperature-dependent optical band Gap in CsPbBr₃, MAPbBr₃, and FAPbBr₃ single crystals. *Journal of Physical Chemistry Letters*, 2020, vol. 11, no. 7, pp. 2490–2496. https://doi. org/10.1021/acs.jpclett.0c00295
- Carabatos-Nédelec C., Oussaïd M., Nitsch K. Raman scattering investigation of cesium plumbochloride, CsPbCl₃, phase transitions. *Journal of Raman Spectroscopy*, 2003, vol. 34, no. 5, pp. 388–393. https://doi.org/10.1002/jrs.1005

Authors

Artem A. Makurin — Student, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0001-8101-3134, temkkaa1.8@gmail.com

Elena V. Kolobkova — D. Sc. (Chemistry), Full Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, sc 7004361788, https://orcid.org/0000-0002-0134-8434, kolobok106@rambler.ru

Received 25.05.2022 Approved after reviewing 21.07.2022 Accepted 21.09.2022



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» **I/İTMO**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 No 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-903-911 УДК 535.8; 621.383

Исследование оптических явлений в мультиспектральном матричном фотоприемнике на основе кремния Вера Леонидовна Жбанова¹²², Юрий Борисович Парвулюсов²

¹ Филиал федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет «МЭИ» в г. Смоленске, г. Смоленск, 214013, Российская Федерация

² Московский государственный университет геодезии и картографии, Москва, 105064, Российская Федерация

¹ Vera-zhbanova@yandex.ru^{\box}, https://orcid.org/0000-0001-7597-0675

² parvulusov@miigaik.ru, https://orcid.org/0000-0002-7219-652X

Аннотация

Предмет исследования. Представлено исследование в области разработки и создания модернизированных мультиспектральных систем цветоделения многослойного типа, обладающих повышенным цветовым разрешением. Рассмотрены виды структур разработанных шаблонов матричных фотоприемников на основе многослойного кремния с рабочими слоями для применения в синем, зеленом, красном и инфракрасном диапазонах спектра. Метод. Предложена методика расчетов слоев кремния в виде оптических пленок с заданными характеристиками. Слои кремния выполняют функции как чувствительного элемента, так и фильтра определенной длины волны для выделения синиего, зеленого, красного и инфракрасного диапазонов спектра. Выполнен расчет коэффициентов отражения и пропускания для выбранных длин волн при различных углах падения на сенсор. Рассчитан угол Брюстера для этих длин волн. Учтено возможное наличие поверхности сенсора микролинзы. Представлены расчеты для ячеек с четырехслойной и двухслойной структурами при различных комбинациях слоев. Основные результаты. Получены зависимости коэффициентов отражения и пропускания для двухслойных и четырехслойных структур полупроводниковых сенсоров для *p*-и *s*-поляризации, также для неполяризованного света. Показано, что минимальным коэффициентом отражения и максимальным коэффициентом пропускания обладает сочетание слоев красного и инфракрасного диапазонов спектра. Практическая значимость. Полученные результаты могут быть использованы при разработке многослойных мультиспектральных систем с регистрацией инфракрасного излучения. В результате возможно применение пары красного и инфракрасного спектров в качестве основы шаблона матричного фотоприемника, а слои синего и зеленого спектров как вспомогательные для построения полноцветного изображения.

Ключевые слова

фотоприемник, инфракрасный, сенсор, тонкие пленки, многослойный, кремний, потенциальная яма, отражение, пропускание

Благодарности

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-79-00012, https://rscf.ru/ project/21-79-00012/

Ссылка для цитирования: Жбанова В.Л., Парвулюсов Ю.Б. Исследование оптических явлений в мультиспектральном матричном фотоприемнике на основе кремния // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 903–911. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-903-911

© Жбанова В.Л., Парвулюсов Ю.Б., 2022

Investigation of optical phenomena in multispectral matrix photodetector based on silicon

Vera L. Zhbanova^{1⊠}, Yurij B. Parvulusov²

¹ The Branch of National Research University "Moscow Power Engineering Institute" in Smolensk, Smolensk,

214013, Russian Federation

² Moscow State University of Geodesy and Cartography, Moscow, 105064, Russian Federation

¹ Vera-zhbanova@yandex.ru^{\overline}, https://orcid.org/0000-0001-7597-0675

² parvulusov@miigaik.ru, https://orcid.org/0000-0002-7219-652X

Absract

A study is presented in the field of development and creation of modernized multi-layer color separation multispectral systems with increased color resolution. The types of structures of the developed patterns of matrix photodetectors based on multilayer silicon with working layers for use in the blue, green, red and infrared spectral ranges are considered. A method for calculating silicon layers in the form of optical films with specified characteristics is proposed. The silicon layers act as both a sensing element and a specific wavelength filter to highlight the blue, green, red and infrared ranges of the spectrum. The reflection and transmission coefficients were calculated for the selected wavelengths at various angles of incidence on the sensor. The Brewster angle for these wavelengths is also calculated. The possible presence of a microlens sensor surface is taken into account. Calculations are presented for cells with four-layer and two-layer structures for various combinations of layers. The dependences of the reflection and transmission coefficients for two-layer and four-layer structures of semiconductor sensors for *p*- and *s*-polarization, also for unpolarized light, are obtained. It is shown that the combination of layers in the red and infrared ranges of the spectra has the minimum reflection coefficient and the maximum transmission coefficient. The results obtained can be used in the development of multilayer multispectral systems with registration of infrared radiation. As a result, it is possible to use a pair of red and infrared spectra as the basis of a matrix photodetector pattern, and layers of blue and green spectra as auxiliary ones for building a full-color image.

Keywords

photodetector, infrared, sensor, thin films, multilayer, silicon, potential well, reflection, transmission

Acknowledgments

The research was carried out at the expense of a grant from the Russian Science Foundation № 21-79-00012, https:// rscf.ru/en/project/21-79-00012/

For citation: Zhbanova V.L., Parvulusov Yu.B. Investigation of optical phenomena in multispectral matrix photodetector based on silicon. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 903–911 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-903-911

Введение

Важнейшая составляющая современных регистрирующих систем — регистрирующее устройство в виде матричного фотоприемника [1–4]. Постоянно возрастающие требования к качеству и информативности снимков могут быть обеспечены, прежде всего за счет повышения пространственного и цветового разрешений матричных фотоприемников [3].

Для получения качественного снимка современные фирмы разрабатывают фотоприемники на основе различных систем цветоделения. Особое внимание уделяется приемникам с регистрацией инфракрасного (ИК) спектра [4–8]. Например, компания Sony представила шаблон датчика изображения RGB-IR¹ (Red — красный, Green — зеленый, Blue — синий) с функцией работы в инфракрасном диапазоне (IR — инфракрасный). Отметим, что данные шаблоны имеют низкое цветовое разрешение, так как построены на основе стандартного шаблона Байера или являются его модификацией.

Большой интерес в области матричных фотоприемников представляют материалы на основе кремния [9–12]. Наиболее интересные разработки в этой области — многослойные сенсоры на основе кремния, где в каждом сенсоре регистрируется основной цвет в видимой области спектра (зеленый, синий, красный) [13–16]. Технология TFA² (Thin Film on Application-Specific Integrated Circuit (ASIC)) представляет собой интеграцию слоя детектора из аморфного гидрогенизированного кремния (a-Si:H) на кристалл ASIC [13]. TFA не получила широкого применения из-за высокой стоимости производства. Компания Foveon предложила датчик трехслойного типа X3 [14–16], Canon³ — пятислойный сенсор, в который, кроме трех слоев в видимом спектре, введены также ультрафиолетовый и ИК. При введении дополнительных слоев появляется больше шумов, связанных со сложностью обвязки, включающей регистры, буферы, и т. д. для каждого слоя.

Для решения данной проблемы в настоящей работе предложена система на основе двухслойной матрицы с функцией регистрации ИК диапазона [17, 18]. Новизна разработки заключается в объединении технологии многослойного сенсора и пространственного цветоделения, по аналогии с шаблонами Байера. В итоге разработанный шаблон будет состоять из трех видов ячеек, но, в отличие от шаблона RGB-IR, будет возмож-

¹ [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://www.ovt. com/purecel-pixel-tech/rgb-ir-technology/faqs (дата обращения: 14.04.2022).

² [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://www.epfl. ch/labs/pvlab/research/thin_film_electronics/ (дата обращения: 14.04.2022).

³ [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://www. dailycameranews.com/2014/06/canon-5-layer-foveon-like-sensor/ (дата обращения: 14.04.2022).

ность ввести слой регистрации ИК излучения. Засчет уменьшения слоев, в отличие от технологий Foveon X3 и Canon, будет уменьшена обвязка пиксела, и, соответственно, уменьшены шумы матрицы. В результате разнесения слоев видимого диапазона получены три вида сенсора со следующими комбинациями: В и IR, G и IR, R и IR. Эти сенсоры могут быть разнесены в пространстве по шаблону Байера RGBG, либо по любой другой его модификации [17]. Подобная разработка позволит регистрировать как видимое, так и ИК излучение. Следует понимать, что в сравнении с Foveon X3 пространственное разрешение для видимого излучения уменьшится, однако уменьшатся и шумы в самой матрице (из-за применения только двух слоев), что положительно отразится на достоверности выходной информации.

Для выявления сильных и слабых сторон разработки, проведем исследование оптических явлений в шаблонах. Выполним расчеты и сравнения коэффициентов отражения и пропускания для четырехслойного сенсора (BGR + IR) и разработанных двухслойных сенсоров с одинаковыми параметрами слоев. В работе [19] приведено доказательство положительного влияния разнесения слоев для видимого спектра излучения.

Цель работы — исследование оптических явлений в мультиспектральном матричном фотоприемнике на основе кремния. Поставлены следующие задачи: определить коэффициенты отражения и пропускания для четырехслойного сенсора (BGR + IR) и двухслойных сенсоров (B + IR, G + IR, R + IR); провести сравнение исследованных шаблонов по оптическим явлениям в сенсорах.

Аналитическое описание оптических явлений в многослойном сенсоре

Так как для деления излучения на составляющие G, B, R, IR используются дисперсные свойства кремния, поэтому исследуем преломление света на границах этих слоев [15]. Для наиболее полной оценки рассмотрим дисперсию, которая возникает при прохождении света через светочувствительные слои. Преломление оптической системы постоянно при освещении монохроматическим светом; для сложносоставного света учтем зависимость коэффициента преломления вещества от длины волны. При падении на поверхность сенсора, свет несет в себе синюю, зеленую, красную и ИК составляющие. При ИК излучении скорость распространения в среде максимальная, а степень преломления лучей минимальная. При ультрафиолетовом излучении степень преломления лучей максимальная [20].

Соответственно, дойдя до первого, В-слоя, синий луч будет преломлен больше, и не выйдет за пределы своего слоя. Также «зеленая» составляющая будет преломляться сильнее «красной», и попадать в G-слой. Подобное будет происходить с R и IR составляющими излучения. Кроме того, при изменении пористости кремния появится дополнительная дисперсия, которая наиболее заметна в темно-синей части спектра; однако данное несовпадение в линиях не существенно. В связи с этим в дальнейших расчетах дисперсия не будет учтена. Рассмотрим отражение и поглощение на слоях матрицы.

Глубина залегания потенциальной ямы в датчике Foveon X3 [14]: $h_{\rm R} = 2$ нм, $h_{\rm G} = 0,6$ нм, $h_{\rm B} = 0,2$ нм, при сравнении характеристик из работы [20], получим длины волн 580 нм, 475 нм и 420 нм. Расхождение с классическими длинами волн, например по Д.К. Максвеллу (красный 630 нм, зеленый 528 нм, синий 457 нм), можно объяснить введением примесей в кремний для получения *p*-*n* перехода, что приводит в дальнейшем к сдвигу спектральных характеристик. В результате было принято решение для слоев видимого излучения взять глубину залегания как и в Foveon X3, а для ИК слоя выбрать глубину 9 мкм, что соответствует длине волны 770 нм и является началом среднего ИК спектра.

В программе, написанной на языке программирования С# и учитывающей значения показателя преломления в зависимости от глубины залегания потенциальной ямы в кремнии [20], найдем углы преломления и оптические коэффициенты. Программа основана на расчетах по формулам Френеля. Найдем коэффициенты отражения (R_p) и пропускания (R_s) поляризованных волн в плоскости падения и перпендикулярной плоскости падения. Выражения коэффициентов имеют вид [20]:

$$\begin{cases} R_p = \frac{\mathrm{tg}^2(\alpha_0 - \alpha_1)}{\mathrm{tg}^2(\alpha_0 + \alpha_1)}, \\ R_s = \frac{\mathrm{sin}^2(\alpha_0 - \alpha_1)}{\mathrm{sin}^2(\alpha_0 + \alpha_1)}, \end{cases}$$
(1)

где α₀, α₁ — углы падающего и преломленного лучей. При этом получим, что:

— при нормальном падении света на вещество ($\alpha_0 = 0$):

$$R_p = R_s = \left(\frac{n_0 - n_1}{n_0 + n_1}\right)^2,\tag{2}$$

где *n*₀, *n*₁ — показатели преломления среды падающего и преломленного лучей;

— при падении света под углом $\pi/2$ имеем: $R_p = R_s = 1$.

На основании (1) и (2) учтем, что направление распространения отраженной и преломленной волн происходит перпендикулярно друг другу. Из закона преломления получим значение угла Брюстера:

$$tg_{\alpha_{\rm En}} = n_1/n_0. \tag{3}$$

При этом показатели преломления найдем в зависимости от глубины залегания потенциальной ямы в кремнии по зависимости, представленной в источнике [21].

Рассчитаем коэффициент отражения естественного света:

$$R_{\rm e} = \frac{1}{2} (R_p + R_s). \tag{4}$$

Получим соответственно коэффициенты пропускания прошедших волн:

$$\begin{cases} T_p = \frac{\sin 2\alpha_0 \sin 2\alpha_1}{\sin^2(\alpha_0 + \alpha_1)\cos^2(\alpha_0 - \alpha_1)} \\ T_s = \frac{\sin 2\alpha_0 \sin 2\alpha_1}{\sin^2(\alpha_0 + \alpha_1)} \end{cases}$$
(5)

Найдем углы преломления для каждого слоя из зависимости:

$$\frac{\sin\alpha_0/\sin\alpha_1 = n_1/n_0}{\alpha_1 = \arcsin((n_0 \sin\alpha_0)/n_1)}.$$
(6)

При расчете углов значения получены в радианах, а затем переведены в градусы.

Оптические явления в сенсорах

Для наглядности прохождения света представлен четырехслойный сенсор на рис. 1, a и пара слоев B + IR (рис. 1, b).

На основе рассчитанных данных по формулам (1)–(6) построим зависимости коэффициентов отражения и пропускания от угла падения всех пар слоев. Построенные на основании расчетов зависимости для сенсора В + IR, показаны на рис. 2.

На рис. 2, *а* видно, что кривая R_s возрастает линейно от 0,4194 (при $\alpha_0 = 1^\circ$) до 0,9999 (при $\alpha_0 = 90^\circ$). Кривая R_p уменьшается от 0,4193 (при $\alpha_0 = 1^\circ$) практически до нуля (при $\alpha_0 = 76^\circ$), а затем возрастает до 0,9848 (при $\alpha_0 = 90^\circ$). График R_e линеен до $\alpha_0 = 71^\circ$, а затем резко возрастает до значения 0,3997 (при $\alpha_0 = 90^\circ$).

На рис. 2, *b* кривые на всем диапазоне: R_s возрастает, R_p убывает, R_e линейна. Основные изменения показателей относятся к верхнему слою (В), вне зависимости от «цвета». Изменения в ИК подложке наблюдаются, но не существенные. Следовательно, коэффициенты верхнего слоя, являются определяющими для системы и определяют общий коэффициент системы.

Средний коэффициент отражения для В-слоя составляет:

$$\overline{\rho} = \frac{1}{2}(\rho_0 + \rho_{90}).$$
(7)

В результате расчета (7) получим для В-слоя 71,14 % и для IR-слоя 99,8 % от максимального коэффициента преломления.

На рис. 2, *с* график T_s уменьшается линейно, T_p возрастает от 0,5806 (при $\alpha_0 = 1^\circ$) до 1,0 (при $\alpha_0 = 78^\circ$),

а затем падает до значения 0,015 (при $\alpha_0 = 90^\circ$). Кривая $T_{\rm e}$, плавно возрастает до 0,600 (при $\alpha_0 = 59^\circ$) и далее уменьшается до 0,0079 (при $\alpha_0 = 90^\circ$).

На рис. 2, *d* график T_s падает от значения 0,9820 (при $\alpha_0 = 1^\circ$) до 0,9796 (при $\alpha_0 = 90^\circ$), а T_p возрастает до 0,9842 (при $\alpha_0 = 90^\circ$). T_e линейно уменьшается на всем диапазоне.

Можно сделать вывод, что коэффициент пропускания для В-слоя является основным, и оказывает влияние на общий коэффициент пропускания системы. Получим средний коэффициент пропускания для слоев:

$$\bar{\tau} = \frac{1}{2}(\tau_0 + \tau_{90}). \tag{8}$$

По формуле (8) получим для В- и IR-слоя в среднем 50,68 % и 99,99 % соответственно от максимального коэффициента пропускания.

Найдем коэффициенты отражения и пропускания ячейки G + IR (рис. 3). На основе рассчитанных данных по формулам (1)–(6) построим зависимости коэффициентов отражения и пропускания от угла падения для сенсора G + IR (рис. 4).

Формы кривых для пары слоев G + IR соответствуют графикам, представленным на рис. 2. На рис. 4, *а* видно, что кривая R_s возрастает от 0,3642 (при $\alpha_0 = 1^\circ$) до 0,9991 (при $\alpha_0 = 90^\circ$). R_p уменьшается от 0,3641 практически до нуля, а далее резко возрастает до 0,9867 (при $\alpha_0 = 90^\circ$). График R_e проходит линейно до 0,3699 (при $\alpha_0 = 71^\circ$), а затем возрастает до 0,9929 (при $\alpha_0 = 90^\circ$).

На рис. 4, *b* кривые на всем диапазоне: R_s возрастает; R_p убывает, R_e линейна.

Усредненный коэффициент отражения найдем по формуле (7), который составляет для G- и IR-слоя в среднем 68,34 % и 99,74 % соответственно от максимального коэффициента преломления.

На рис. 4, *с* кривая T_s уменьшается линейно, T_p линеен от значения 0,6358 (при $\alpha_0 = 1^\circ$) до 0,975 (при $\alpha_0 = 80^\circ$), затем уменьшается до 0,0132 (при $\alpha_0 = 90^\circ$). График T_e плавно возрастает до 0,6358 (при $\alpha_0 = 1^\circ$) и затем падает до 0,0070 (при $\alpha_0 = 90^\circ$).



Рис. 1. Разрезы сенсоров: четырехслойный (a) и двухслойный B + IR (b).

ρ₀-ρ₄ — коэффициенты отражении от слоев сред; *n*₀-*n*₄ — показатели преломления сред

Fig. 1. Sensor sections: four-layer (*a*) and two-layer B + IR(b)

 $\rho_0 - \rho_4$ — reflection coefficients from the medium; $n_0 - n_4$ — refractive indices of media

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2022, том 22, № 5 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no 5



Puc. 2. Зависимости коэффициентов для сенсора B + IR: отражения $\rho_1(a)$ и $\rho_2(b)$, пропускания $\tau_1(c)$ и $\tau_2(d)$ от угла падения α_0 *Fig.* 2. Dependence of coefficients for B + IR sensor: reflections $\rho_1(a)$ и $\rho_2(b)$, transmission $\tau_1(c)$ и $\tau_2(d)$ vs. the angle of incidence α_0

На рис. 4, *d* кривая T_s уменьшается от 0,9961 (при $\alpha_0 = 1^\circ$) до 0,9955 (при $\alpha_0 = 90^\circ$), а T_p возрастает до 0,9966 (при $\alpha_0 = 90^\circ$). T_e линейно падает на всем диа-пазоне.

Средний коэффициент пропускания для слоев найдем по формуле (8): для G-слоя 50,55 % и для IR-слоя 99,99 % от максимального коэффициента пропускания.

Рассмотрим отражение и пропускание матрицы R + IR (рис. 5). По формулам (1)–(6) выполним расчеты и построим зависимости коэффициентов отражения и пропускания от угла падения для сенсора R + IR (рис. 6). Заметим, что формы кривых для пары слоев R + IR аналогичны графикам, показанным на рис. 2.

На рис. 6, *а* видно, что кривая R_s возрастает от 0,3447 (при $\alpha_0 = 1^\circ$) до 0,9991 (при $\alpha_0 = 90^\circ$). R_p уменьшается от 0,3446 практически до нуля, а далее возрастает до 0,9874 (при $\alpha_0 = 90^\circ$). График R_e линейно



Puc. 3. Двухслойный сенсор G+IR в разрезе *Fig. 3.* Sectional view of a two-layer G+IR sensor



Puc. 4. Зависимости коэффициентов для сенсора G + IR: отражения $\rho_1(a)$ и $\rho_2(b)$, пропускания $\tau_1(c)$ и $\tau_2(d)$ от угла падения α_0 *Fig. 4.* Dependence of coefficients for G + IR sensor: reflections $\rho_1(a)$ и $\rho_2(b)$, transmission $\tau_1(c)$ и $\tau_2(d)$ vs. the angle of incidence α_0

возрастает до 0,3573 (при $\alpha_0 = 71^\circ$), а затем возрастает до 0,9932 (при $\alpha_0 = 90^\circ$).

На рис. 6, b кривые на всем диапазоне: R_s возрастает; R_p убывает, R_e линейна.

Средний коэффициент отражения для слоев найдем по формуле (7) и составляет для R- и IR-слоя 67,35 % и 100 % соответственно от максимального коэффициента преломления.

На рис. 6, *d* кривая T_s практически линейно падает от значения 0,6552 (при $\alpha_0 = 1^\circ$) до 0,0008 (при $\alpha_0 = 90^\circ$). График T_p линеен до 0,9997 (при $\alpha_0 = 80^\circ$), а затем падает до 0,0126 (при $\alpha_0 = 90^\circ$). T_e плавно возрастает до 0,6217 (при $\alpha_0 = 75^\circ$), далее уменьшается до 0,0067 (при $\alpha_0 = 90^\circ$).

На рис. 6, с график T_s уменьшается до 0,9984 (при $\alpha_0 = 90^\circ$). T_p возрастает до значения 0,9988 (при



Puc. 5. Двухслойный сенсор R + IR в разрезе *Fig. 5.* Sectional view of a two-layer R + IR sensor



Puc. 6. Зависимости коэффициентов для сенсора R + IR: отражения $\rho_1(a)$ и $\rho_2(b)$, пропускания $\tau_1(c)$ и $\tau_2(d)$ от угла падения α_0 *Fig. 6.* Dependence of coefficients for R + IR sensor: reflections $\rho_1(a)$ и $\rho_2(b)$, transmission $\tau_1(c)$ и $\tau_2(d)$ vs. the angle of incidence α_0

Таблица. Значения коэффициентов отражения и пропускания для четырехслойной и двухслойной матриц для угла падения 30° *Table*. Values of reflection and transmission coefficients for a four-layer and two-layer matrix for 30°

Коэффициент	Четырехслойный сенсор, слои				Двухслойный сенсор, слои				Соотношение, %		
	В	G	R	IR	В	G	R	IR	G	R	IR
R _p	0,366	0,295	0,276	0,249	0,366	0,311	0,292	0,261	-5,42	-5,80	-4,82
R_s	0,470	0,399	0,379	0,350	0,470	0,415	0,396	0,371	-4,01	-4,49	-6,00
R _e	0,418	0,347	0,328	0,299	0,418	0,363	0,344	0,316	-4,61	-4,88	-5,69
T_p	0,633	0,704	0,723	0,750	0,633	0,688	0,707	0,738	2,27	2,21	1,60
T_s	0,529	0,600	0,620	0,649	0,529	0,584	0,603	0,628	2,67	2,74	3,24
T _e	0,581	0,652	0,671	0,700	0,581	0,636	0,655	0,683	2,45	2,38	2,43

 $\alpha_0 = 90^\circ$). Кривая T_e линейно уменьшается на всем диапазоне.

Усредненный коэффициент пропускания для слоев найдем по формуле (8): для R- и IR-слоя 50,51 % и 100 % соответственно от максимального коэффициента пропускания.

Сравним четырехслойные и модифицированные двухслойные матрицы. В таблице представлены значения коэффициентов рассмотренных шаблонов. В качестве примера взяты значения для угла падения 30°, который считается рабочим для матриц с и без микролинзы.

Заключение

Выполнено исследование оптических явлений в мультиспектральном матричном фотоприемнике на основе кремния. Полученные результаты показали, что зависимости коэффициентов от угла падения имеют нелинейный характер. Для первого и второго слоев формы кривых отличаются: для первого слоя форма кривых имеет более сложный характер, чем для второго.

При сравнении изменений четырехслойной и двухслойной систем для угла падения 30° в процентном соотношении обнаружено: с увеличением глубины залегания в кремнии в четрыхслойном и в двухслойном сенсоре коэффициент отражения уменьшается, а пропускания увеличивается; изменения коэффициента отражения нелинейны для *p*-поляризации и увеличиваются для *s*-поляризации и естественного света; изменения коэффициента пропускания нелинейны для естественного света и уменьшаются для *s*- и *p*-поляризации и естественного света.

Разбиение ячеек на двухслойные привело в основном к падению пропускания и повышению отражения: для слоя G увеличен коэффициент отражения примерно на 4,7 %, коэффициент пропускания уменьшен на

Литература

- Андрианов В.П., Базаров Ю.Б., Губачев А.В., Дулин О.Н., Елгаёнков А.Е., Каменев В.Г., Кузин В.М., Литвинова М.С., Лобастов С.А., Туркин В.Н., Шубин А.С. Цифровой фотохронографический регистратор для исследования быстропротекающих процессов // Физика горения и взрыва. 2018. Т. 54. № 5. С. 117– 121. https://doi.org/10.15372/FGV20180516.
- Тарасов В.В., Якушенков Ю.Г. Двух- и многодиапазонные оптико-электронные системы с матричными приемниками излучения. М.: Университетская книга, Логос, 2007. 192 с.
- Zhbanova V.L. Features of digital colourimetry application in modern scientific research // Light & Engineering. 2021. V. 29. N 3. P. 146– 158. https://doi.org/10.33383/2021-028
- 4. Айнбунд М.Р., Егоренков А.А., Пашук А.В. Особенности изображений воды, льда, снега, предметов и человека, формируемых гибридной телевизионной камерой в ближнем инфракрасном диапазоне // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2021. Т. 21. № 5. С. 619–625. https://doi.org/10.17586/2226-1494-2021-21-5-619-625
- Nonaka Y., Yoshida D., Kitamura S., Yokota T., Hasegawa M., Ootsu K. Monocular color-IR imaging system applicable for various light environments // Proc. of the 2018 IEEE International Conference on Consumer Electronics (ICCE). 2018. P. 1–5. https://doi. org/10.1109/ICCE.2018.8326238
- Stotko P., Weinmann M., Klein R. Albedo estimation for real-time 3D reconstruction using RGB-D and IR data // ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing. 2019. V. 150. P. 213–225. https://doi.org/10.1016/j.isprsjprs.2019.01.018
- Siekański P., Paśko S., Malowany K., Malesa M. Online correction of the mutual miscalibration of multimodal VIS-IR sensors and 3D Data on a UAV platform for surveillance applications // Remote Sensing. 2019. V. 11. N 21. P. 2469. https://doi.org/10.3390/ rs11212469
- Choe G., Park J., Tai Y.-W., Kweon I. Refining geometry from depth sensors using ir shading images // International Journal of Computer Vision. 2017. V. 122. N 1. P. 1–16. https://doi.org/10.1007/s11263-016-0937-v
- Григорьев Л.В. Кремниевая фотоника. СПб.: Университет ИТМО, 2016. 94 с.
- Лизункова Д.А. Исследование электрических и оптических свойств фоточувствительных структур на наноструктурированном кремнии: диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Самара, 2018. 150 с.
- Хенкин М.В. Электрические, фотоэлектрические и оптические свойства двухфазных пленок гидрогенезированного кремния: диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. М., 2015.
- Овсюк В.Н., Сидоров Ю.Г., Васильев В.В., Шашкин В.В. Матричные фотоприемники 128 × 128 на основе слоев HgCdTe и многослойных гетероструктур с квантовыми ямами GaAs/

2,5 %. Для слоя R коэффициент отражения также увеличен примерно на 5,1 %, коэффициент пропускания, в свою очередь, уменьшился на 2,4 %. Для слоя IR коэффициент отражения увеличен на 5,5 %, коэффициент пропускания уменьшился примерно на 2,4 %.

Наилучшей комбинацией является пара R и IR: имеет минимальный коэффициент отражения и максимальный коэффициент пропускания, что может быть положено в основу дальнейшей разработки многослойных мультиспектральных систем с регистрацией инфракрасного излучения. Таким образом, в шаблоне можно применять пару R и IR как основу матричного фотоприемника, а слои B и G как вспомогательные. Подобные системы позволят разработать матричные фотоприемники, работающие как в видимом, так и инфракрасном спектре, с нормированными показателями шума и цветового разрешения.

References

- Andrianov V.P., Dulin O.N., Kamenev V.G., Kuzin V.M., Turkin V.N., Shubin A.S., Bazarov Y.B., Gubachev A.V., Elgaenkov A.E., Litvinova M.S., Lobastov S.A. Rotating mirror digital streak camera for investigation of fast processes. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2018, vol. 54, no. 5, pp. 618–623. https://doi.org/10.1134/ S0010508218050167
- Tarasov V.V., Iakushenkov Iu.G. Dual- and Multiband Opto-Electronic Systems with Matrix Radiation Receivers. Moscow, Universitetskaja kniga, Logos Publ., 2007, 192 p. (in Russian)
- Zhbanova V.L. Features of digital colourimetry application in modern scientific research. *Light & Engineering*, 2021, vol. 29, no. 3, pp. 146–158. https://doi.org/10.33383/2021-028
- Ainbund M.R., Egorenkov A.A., Pashuk A.V. Features of images of water, ice, snow, objects and a human formed by a hybrid television camera in the near-infrared range. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2021, vol. 21, no. 5, pp. 619–625. (in Russian). https://doi.org/10.17586/2226-1494-2021-21-5-619-625
- Nonaka Y., Yoshida D., Kitamura S., Yokota T., Hasegawa M., Ootsu K. Monocular color-IR imaging system applicable for various light environments. *Proc. of the 2018 IEEE International Conference* on Consumer Electronics (ICCE), 2018, pp. 1–5. https://doi. org/10.1109/ICCE.2018.8326238
- Stotko P., Weinmann M., Klein R. Albedo estimation for real-time 3D reconstruction using RGB-D and IR data. *ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing*, 2019, vol. 150, pp. 213–225. https://doi.org/10.1016/j.isprsjprs.2019.01.018
- Siekański P., Paśko S., Malowany K., Malesa M. Online correction of the mutual miscalibration of multimodal VIS-IR sensors and 3D Data on a UAV platform for surveillance applications. *Remote Sensing*, 2019, vol. 11, no. 21, pp. 2469. https://doi.org/10.3390/ rs11212469
- Choe G., Park J., Tai Y.-W., Kweon I. Refining geometry from depth sensors using ir shading images. *International. Journal of Computer Vision*, 2017, vol. 122, no. 1, pp. 1–16. https://doi.org/10.1007/ s11263-016-0937-y
- Grigorev L.V. Silicon Photonics. St. Petersburg, 2016, 94 p. (in Russian)
- Lizunkova D.A. *Electrical and optical properties investigation of photosensitive structures on nanostructured silicon*. Dissertation for the degree of candidate of physical and mathematical sciences. Samara, 2018, 150 p. (in Russian)
- Khenkin M.V. Electrical, photoelectric and optical properties of twophase films of hydrogenated silicon. Dissertation for the degree of candidate of physical and mathematical sciences. Moscow, 2015. (in Russian)
- Ovsyuk V.N., Sidorov Yu.G., Vasil'ev V.V., Shashkin V.V. Arrays of 128 × 128 photodetectors based on hgcdte layers and multilayer heterostructures with GaAs/AlGaAs quantum wells. *Semiconductors*, 2001, vol. 35, no. 9, pp. 1110–1116. https://doi.org/10.1134/1.1403577

AlGaAs // Физика и техника полупроводников. 2001. Т. 35. № 9. С. 1159–1166.

- 13. Rieve P., Walder M., Seibel K., Prima J., Mirhamed A. TFA image sensor with stability-optimized photodiode. Patent US7701023. 2010.
- Merrill R.B. Color separation in an active pixel cell imaging array using a triple-well structure. Patent US5965875. 1999.
- Lyon R.F., Hubel P.M. Eyeing the Camera: into the Next Century // IS&T Reporter "The window on imaging". 2002. V. 17. N 6.
- Gehrke R., Greiwe A. Multispectral image capturing with Foveon sensors // ISPRS – International Archives of the Photogrammetry Remote Sensing and Spatial Information Sciences. 2013. V. 40. N 1/ W2(1). P. 151–156. https://doi.org/10.5194/isprsarchives-XL-1-W2-151-2013
- Zhbanova V.L., Parvulyusov Yu.B., Solomatin V.A. Multispectral matrix silicon photodetectors with the IR range registration // Journal of Physics: Conference Series. 2020. V. 1679. N 2. P. 022039. https:// doi.org/10.1088/1742-6596/1679/2/022039
- Solomatin V.A., Parvulyusov Yu.B., Zhbanova V.L. Spatial-frequency characteristics of photo matrices for colour image // Journal of Physics: Conference Series. 2020. V. 1679. N 2. P. 022038. https:// doi.org/10.1088/1742-6596/1679/2/022038
- Парвулюсов Ю.Б., Жбанова В.Л. Моделирование хода лучей в матричном фотоприемнике с многослойной структурой // Известия высших учебных заведений. Геодезия и аэрофотосъемка. 2014. № 4. С. 108–113.
- 20. Ландсберг Г.С. Оптика. М.: Физматлит, 2003. 848 с.
- Green M.A., Keevers M. Optical properties of intrinsic silicon at 300 K // Progress in Photovoltaics. 1995. V. 3. N 3. P. 189–192. https:// doi.org/10.1002/pip.4670030303

Авторы

Жбанова Вера Леонидовна — кандидат технических наук, доцент, доцент, Филиал федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет «МЭИ» в г. Смоленске, г. Смоленск, 214013, Российская Федерация, 557190029669, https://orcid.org/0000-0001-7597-0675, Vera-zhbanova@yandex.ru

Парвулюсов Юрий Борисович — кандидат технических наук, профессор, заслуженный геодезист, Московский государственный университет геодезии и картографии, Москва, 105064, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0002-7219-652X, parvulusov@miigaik.ru

Статья поступила в редакцию 23.06.2022 Одобрена после рецензирования 12.07.2022 Принята к печати 23.09.2022



- Rieve P., Walder M., Seibel K., Prima J., Mirhamed A. TFA image sensor with stability-optimized photodiode. *Patent US7701023*, 2010.
- 14. Merrill R.B. Color separation in an active pixel cell imaging array using a triple-well structure. *Patent US5965875*, 1999.
- 15. Lyon R.F., Hubel P.M. Eyeing the Camera: into the Next Century. *IS&T Reporter "The window on imaging"*, 2002, vol. 17, no. 6.
- Gehrke R., Greiwe A. Multispectral image capturing with Foveon sensors. *ISPRS — International Archives of the Photogrammetry Remote Sensing and Spatial Information Sciences*, 2013, vol. 40, no. 1/W2, pp. 151–156. https://doi.org/10.5194/isprsarchives-XL-1-W2-151-2013
- Zhbanova V.L., Parvulyusov Yu.B., Solomatin V.A. Multispectral matrix silicon photodetectors with the IR range registration. *Journal* of *Physics: Conference Series*, 2020, vol. 1679, no. 2, pp. 022039. https://doi.org/10.1088/1742-6596/1679/2/022039
- Solomatin V.A., Parvulyusov Yu.B., Zhbanova V.L. Spatial-frequency characteristics of photo matrices for colour image. *Journal of Physics: Conference Series*, 2020, vol. 1679, no. 2, pp. 022038. https://doi. org/10.1088/1742-6596/1679/2/022038
- Parvuliusov Iu.B., Zhbanova V.L. Simulation of the rays path in the matrix photodetector with a multilayer structure. *Izvestia vuzov*. *Geodesy and Aerophotosurveying*, 2014, vol. 4, pp. 108–113. (in Russian)
- Landsberg G.S. Optics. Moscow, Fizmatlit Publ., 2003, 848 p. (in Russian)
- Green M.A., Keevers M. Optical properties of intrinsic silicon at 300 K. *Progress in Photovoltaics*, 1995, vol. 3, no. 3, pp. 189–192. https://doi.org/10.1002/pip.4670030303

Authors

Vera L. Zhbanova — PhD, Associate Professor, Associate Professor, The Branch of National Research University "Moscow Power Engineering Institute" in Smolensk, Smolensk, 214013, Russian Federation, 57190029669, https://orcid.org/0000-0001-7597-0675, Vera-zhbanova@yandex.ru

Yurij B. Parvulusov — PhD, Professor, Honored Geodesist, Moscow State University of Geodesy and Cartography, Moscow, 105064, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0002-7219-652X, parvulusov@miigaik.ru

Received 23.06.2022 Approved after reviewing 12.07.2022 Accepted 23.09.2022

Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial»

I/İTMO

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 No 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-912-920 УДК 666.3

Исследование влияния отклонения от стехиометрии иттрий-алюминиевого граната на эффективность конверсии ионов хрома в четырехвалентное состояние

Федор Федорович Малявин¹[∞], Александр Александрович Кравцов², Виталий Алексеевич Тарала³, Ирина Сергеевна Чикулина⁴, Дмитрий Сергеевич Вакалов⁵, Вячеслав Анатольевич Лапин⁶, Марина Сергеевна Никова⁷, Светлана Эдуардовна Хорошилова⁸, Евгений Викторович Медяник⁹, Дмитрий Сергеевич Кулешов¹⁰

1.2.3.4,5.6,7.8,9.10 Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, 355009, Российская Федерация 2.6 Федеральный исследовательский центр Южного научного центра Российской академии наук, Ростов-на-Дону, 344060, Российская Федерация

¹ fedormalyavin@mail.ru^{\overline\$}, https://orcid.org/0000-0002-5255-9346

² sanya-kravtsov@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0002-0645-1166

³ vitaly-tarala@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0001-6688-2681

⁴ iraaaa@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0002-0871-8776

⁵ megadims@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-6788-3811

⁶ viacheslavlapin@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0002-1938-4134

⁷ m-s-shama@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0001-8810-4493

⁸ skhoroshilova@ncfu.ru, https://orcid.org/0000-0002-4287-8183

⁹ miedianik84@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-5947-7810

¹⁰ kule-dmitry@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0003-4314-1578

Аннотация

Предмет исследования. Исследованы эффективность конверсии ионов Cr⁴⁺ и оптические свойства керамики на основе иттрий-алюминиевого граната, легированного хромом. Повышение эффективности конверсии ионов Cr³⁺ в Cr⁴⁺ открывает широкие перспективы использования керамики в качестве насыщающихся поглотителей для пассивной модуляции добротности Nd- и Yb-твердотельных лазеров. Цель работы — исследование влияния концентрации оксида магния на эффективность конверсии ионов Cr³⁺ в Cr⁴⁺ в условиях избытка катионов Al³⁺ (4,8 мол.%) и Y³⁺ (2,9 мол.%) в структуре граната, а также при стехиометричном соотношении Y³⁺/Al³⁺ = 3/5. Исследована возможность изменения концентрации ионов Cr⁴⁺ как в октаэдрической, так и тетраэдрической позициях за счет образующихся дефектов замещения магния при отклонении состава композиции от стехиометрии иттрий-алюминиевого граната. Метод. Оптическая керамика на основе иттрийалюминиевого граната с различным соотношением катионов Y³⁺/Al³⁺, допированная хромом, получена методом двухстадийного соосаждения. В качестве спекающей добавки и компенсатора заряда для преобразования ионов хрома из трехвалентного в четырехвалентное состояние использован оксид магния в концентрациях от 0 до 0,2 масс.%. Основные результаты. Установлено, что наличие избытка алюминия в матрице иттрийалюминиевого граната приводит к снижению эффективности конверсии ионов Cr³⁺ в Cr⁴⁺. Отклонение от стехиометрии в сторону избытка иттрия способствует снижению температуры отжига на воздухе, при которой происходит окисление ионов хрома в четырехвалентное состояние и их переход в тетраэдрическую позицию. Однако оптическое пропускание образцов с избытком иттрия ниже, чем в случае избытка алюминия и стехиометрии. Показано, что при увеличении температуры вакуумного спекания от 1780 до 1820 °С в образцах с избытком алюминия происходит повышение концентрации ионов Cr4+ в тетраэдрической позиции, о чем свидетельствует более высокая интенсивность поглощения на длине волны 1030 нм. Для случаев стехиометрии и избытка иттрия в гранате данный эффект выражен слабее. Практическая значимость. Получены образцы оптической керамики иттрий-алюминиевого граната со светопропусканием более 75 % в видимом и ближнем

[©] Малявин Ф.Ф., Кравцов А.А., Тарала В.А., Чикулина И.С., Вакалов Д.С., Лапин В.А., Никова М.С., Хорошилова С.Э., Медяник Е.В., Кулешов Д.С., 2022

инфракрасном диапазонах с выраженными полосами поглощения хрома. Результаты работы могут быть применены при создании пассивных затворов для твердотельных лазеров.

Ключевые слова

оптически прозрачная керамика, иттрий-алюминиевый гранат, насыщающиеся поглотители для пассивной модуляции добротности, спектры оптического пропускания, стехиометрия, хром

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации (проект MK-3786.2021.1.3). Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования Северо-Кавказского федерального университета при финансовой поддержке Минобрнауки России, уникальный идентификатор проекта RF----2296.61321X0029 (соглашение № 075-15-2021-687).

Ссылка для цитирования: Малявин Ф.Ф., Кравцов А.А., Тарала В.А., Чикулина И.С., Вакалов Д.С., Лапин В.А., Никова М.С., Хорошилова С.Э., Медяник Е.В., Кулешов Д.С. Исследование влияния отклонения от стехиометрии иттрий-алюминиевого граната на эффективность конверсии ионов хрома в четырехвалентное состояние // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 912–920. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-912-920

The impact of yttrium aluminum garnet stoichiometry deviation on the conversion efficiency of tetravalent chromium ions

Fedor F. Malyavin^{1⊠}, Alexander A. Kravtsov², Vitaly A. Tarala³, Irina S. Chikulina⁴, Dmitry S. Vakalov⁵, Viacheslav A. Lapin⁶, Marina S. Nikova⁷, Svetlana E. Khoroshilova⁸, Evgenii V. Medyanik⁹, Dmitry S. Kuleshov¹⁰

1.2.3,4,5,6,7,8,9,10 North-Caucasus Federal University, Stavropol, 355009, Russian Federation
 2.6 Federal Research Center of the Southern Scientific Centre of the Russian Academy of Sciences, Rostov-on-Don, 344060, Russian Federation

¹ fedormalyavin@mail.ru^{\overlinewy}, https://orcid.org/0000-0002-5255-9346

² sanya-kravtsov@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0002-0645-1166

³ vitaly-tarala@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0001-6688-2681

4 iraaaa@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0002-0871-8776

⁵ megadims@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-6788-3811

⁶ viacheslavlapin@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0002-1938-4134

⁷ m-s-shama@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0001-8810-4493

⁸ skhoroshilova@ncfu.ru, https://orcid.org/0000-0002-4287-8183

⁹ miedianik84@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-5947-7810

¹⁰ kule-dmitry@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0003-4314-1578

Abstract

In this work, the conversion efficiency of Cr^{4+} ions and the optical properties of ceramics based on chromium-doped yttrium aluminum garnet were investigated. Increasing the conversion efficiency of Cr^{3+} to Cr^{4+} opens up broad prospects for using YAG ceramics as saturable absorbers for passive O-switching of Nd- and Yb-solid-state lasers. The aim of this work was to study the effect of magnesium oxide concentration on the conversion efficiency of Cr³⁺ to Cr^{4+} under conditions of Al³⁺ (4.8 mol.%) and Y³⁺ (2.9 mol.%) cations excess in the garnet structure as well as the stoichiometric ratio $Y^{3+}/Al^{3+} = 3/5$. The possibility of changing the concentration of Cr^{4+} ions in both the octahedral and tetrahedral positions due to the formation of magnesium substitution defects when the composition deviates from the yttrium-aluminum garnet stoichiometry has been studied. Chromium-doped transparent optical ceramics based on yttrium-aluminum garnet with different ratios of Y^{3+}/Al^{3+} cations was obtained by the two-stage coprecipitation method. Magnesium oxide was used as a sintering additive and charge compensator for converting chromium ions from the trivalent to the tetravalent state in concentrations of 0 to 0.2 wt.%. It was found that aluminum excess in the yttriumaluminum garnet matrix leads to a decrease in the Cr^{3+} to Cr^{4+} conversion efficiency. A deviation of stoichiometry towards an excess of yttrium leads to a decrease of air annealing temperature for oxidizing chromium ions to the tetravalent state and their transition to the tetrahedral position. However, the samples optical transmittance with an excess of yttrium was lower than in the cases of an excess of aluminum and stoichiometry. It was found that with an increase in the vacuum sintering temperature from 1780 to 1820 °C in the samples with an excess of aluminum, an increase in the concentration of Cr⁴⁺ ions in the tetrahedral position occurs, as evidenced by higher absorption intensity at a wavelength of 1030 nm. For the cases of stoichiometry and an excess of yttrium in garnet, this effect is less pronounced. Samples of optical ceramics of yttrium-aluminum garnet with a light transmission of more than 75 % in the visible and near-IR ranges with pronounced absorption bands of chromium have been obtained. The results of the work can be applied to the creation of passive switches for solid-state lasers.

Keywords

optical transparent ceramics, yttrium aluminum garnet, saturable absorbers for passive Q-switching, optical transmission spectra, stoichiometry, chromium

Acknowledgments

This work was financially supported by the Council for Grants of the President of the Russian Federation (project No. MK-3786.2021.1.3). The work was carried out using the equipment of the Center for Collective Use of the North

Caucasus Federal University with financial support from the Ministry of Education and Science of Russia, unique project identifier RF ---- 2296.61321X0029 (agreement No. 075-15-2021-687).

For citation: Malyavin F.F., Kravtsov A.A., Tarala V.A., Chikulina I.S., Vakalov D.S., Lapin V.A., Nikova M.S., Khoroshilova S.E., Medyanik E.V., Kuleshov D.S. The impact of yttrium aluminum garnet stoichiometry deviation on the conversion efficiency of tetravalent chromium ions. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 912–920 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-912-920

Введение

Иттрий-алюминиевый гранат, легированный хромом (YAG:Cr⁴⁺), обладает уникальным набором характеристик, что делает его незаменимым материалом поглотителей для пассивной модуляции добротности в Nd- или Yb-легированных кристаллах в диапазоне длин волн 0,85–1,2 мкм [1–6]. Кристаллы YAG:Cr⁴⁺ получают методом Чохральского или с помощью керамической технологии [7]. Керамическая технология обладает рядом преимуществ перед технологией роста монокристаллов, такик как более высокая скорость и простота производства, снижение затрат на резку и обработку выращенных кристаллов; возможность получения изделий необходимой формы и размеров, а также композитных структур непосредственно в процессе компактирования, и т. д. [8].

Известно, что для изготовления насыщаемых поглотителей на основе керамики YAG:Сг необходимо обеспечить высокую эффективность конверсии ионов Cr³⁺ в Cr⁴⁺ в материале [9–11] и переход максимального количества ионов Cr⁴⁺ в тетраэдрическую позицию [12]. Данная задача является нетривиальной, так как изначально в процессе синтеза керамического порошка хром входит в кристаллическую решетку граната только в виде трехвалентного иона Cr³⁺ в октаэдрическую позицию алюминия [5, 13, 14]. Для перехода Cr³⁺ в Cr⁴⁺ необходимо наличие примесей двухвалентных катионов Ca²⁺ или Mg²⁺ в кристаллической решетке YAG и проведение после вакуумного спекания длительного окислительного обжига при температурах свыше 1000 °C [9, 13].

Отметим, что только небольшая доля ионов хрома переходит в четырехвалентное состояние. В работе [13], при исследовании спектров люминесценции неотоженного и отоженного на воздухе монокристалла YAG:Cr, разница интенсивностей поглощения хрома составила не более 5 %. Показано, что общая концентрация ионов Cr^{4+} — постоянная величина, так как снижение интенсивности пиков Cr^{4+} после отжига на воздухе при 1000 °C в октаэдрической позиции сопровождается появлением пиков в тетраэдрической [13].

В настоящее время проведено большое количество исследований с целью увеличения эффективности конверсии ионов Cr³⁺ в Cr⁴⁺ в YAG:Cr керамике. Исследования включали оценку влияния: спекающих добавок [15–17], условий и среды отжига [9, 10], соотношений CaO/MgO [20] и (CaO + MgO)/Cr₂O₃ [15], а также концентрации ионов хрома [9] и кальция [18, 19], и т. д.

Принято, что оксид кальция (CaO) — более эффективная добавка для увеличения эффективности конверсии ионов Cr³⁺ в Cr⁴⁺ [21], а добавка оксида магния (MgO), предположительно, необходима для улучшения

прозрачности YAG:Cr⁴⁺ керамики, допированной кальцием. В то же время в работах [18, 22] рассмотрено изготовление прозрачной YAG:Cr⁴⁺ керамики с использованием только добавки CaO. Заметим, что работ, в которых показано влияние магния на эффективность конверсии ионов Cr³⁺ в Cr⁴⁺, очень мало.

Например, в [21, 23] предположено, что ионы Mg^{2+} в YAG:Сг могут занимать интерстиции, конкурируя за пространство с октаэдрически координированными ионами Cr³⁺. В результате эффективность конверсии ионов Cr³⁺ в Cr⁴⁺ ниже, чем в случае совместного легирования с кальцием. Также ионы Mg^{2+} могут встраиваться в октаэдрические позиции, что приводит к искажению решетки YAG [21].

В работе [23] показано, что при использовании добавки MgO очень критична температура вакуумного спекания. В частности, концентрация ионов Cr⁴⁺, особенно в тетраэдрической позиции, снижается при увеличении температуры от 1750 до 1800 °С. Авторы предположили, что увеличение температуры вакуумного спекания способствует перемещению большего числа ионов Mg²⁺ в интерстиции, в результате чего последние не участвуют в формировании Cr⁴⁺.

В предыдущей работе авторов [24] показано, что ионы магния могут занимать как октаэдрические, так и додекаэдрические позиции в решетке граната в зависимости от смещения стехиометрии в сторону избытка иттрия или алюминия соответственно. Это, в свою очередь, оказало существенное влияние на оптические свойства и микроструктуру керамики [25].

В настоящей работе проведены исследования изученных ранее составов оптических керамик [24, 25], дополнительно солегированных ионами хрома. Исследование представляет большой научный и практический интерес, так как вероятно, что смещение стехиометрии в сочетании с изменением положения внедренных ионов магния может оказывать влияние на эффективность конверсии ионов Cr³⁺ в Cr⁴⁺ в матрице иттрий-алюминиевого граната.

Цель работы — исследование влияния концентрации оксида магния на эффективность конверсии ионов Cr^{3+} в Cr^{4+} в условиях избытка катионов Al^{3+} (4,8 мол.%) и Y^{3+} (2,9 мол.%) в структуре граната, а также при стехиометричном соотношении $Y^{3+}/Al^{3+} = 3/5$.

Материалы и методы

При синтезе керамики использованы следующие реагенты: аммиак водный (25 %, ОСЧ, Sigma tech, Россия); алюминия нитрат нонагидрат (99,99 % (следы металлов), Acros organics, Бельгия); иттрия нитрат гексагидрат (99,9 %, (следы металлов), Chemical point, Германия); нитрат хрома (III) нонагидрат (99,99 %, Acros organics, Бельгия); аммоний сернокислый (99 %, Ч, Интерхим, Россия); изопропиловый спирт (99,95 %, XЧ, Экос-1, Россия); гексаметилентетрамин (99,7 %, Марка С, сорт высший, Интерхим, Россия); магний хлористый, гексагидрат (99,9 %, ЧДА, Интерхим, Россия). Все химические вещества применены без стадии дополнительной очистки. Для всех реакций и процессов обработки использована деионизованная вода.

Образцы керамических порошков, соответствующие различной стехиометрии (Al_Cr (4,8 мол.% избытка Al), S_Cr (стехиометричный YAG), Y_Cr (2,9 мол.% избытка Y)) получены методом двухстадийного соосаждения уротропином с последующим измельчением и прокаливанием порошка прекурсора. Методика получения керамического порошка подробно описана в работе [26]. На стадии измельчения прекурсора в каждый из полученных составов введена спекающая добавка MgO в концентрациях 0, 0,05, 0,1, 0,2 масс.% в пересчете на керамический порошок. Концентрация хрома фиксирована во всех образцах и составила 0,01 ат.%.

Компактирование керамических порошков проведено методом одноосного прессования в стальной пресс-форме диаметром 13 мм без использования связующих добавок. Давление прессования имело постоянное значение 50 МПа.

Выбор величины давления одноосного прессования проведен с учетом результатов, представленных в работе [27]. Выполнен отжиг полученных компактов на воздухе при температуре 1300 °С в течение 2 ч в печи Nabertherm HT 40/17 (Германия).

Спекание компактов осуществлено в вакуумной печи СШВЭ-1.2,5/25 с вольфрамовыми нагревателями при температурах 1780 и 1820 °С в течение 20 ч. Полученные образцы керамики последовательно отожжены на воздухе при температурах 1100, 1300 и 1500 °С в течение 10 ч. Далее образцы прошли двустороннюю шлифовку и полировку, и измерение спектров светопропускания. Финальная толщина образцов составила 2,5 \pm 0,1 мм.

Оптические свойства полученных образцов керамики проанализированы методом спектрофотометрии с помощью спектрофотометра SF-56 (ОКБ «ЛОМО», Санкт-Петербург, Россия).

Результаты и их обсуждение

Известно, что хром входит в кристаллическую решетку граната только в виде трехвалентного иона Cr³⁺ [13]. Из-за близости ионных радиусов Al³⁺ (0,0535 нм — октаэдрическая позиция) и Cr³⁺ (0,0615 нм), последний встраивается вначале только в октаэдрическую позицию алюминия в решетке иттрий-алюминиевого граната [12]. Полосы поглощения Cr³⁺ (octa) соответствуют длинам волн 430 нм и 590 нм [9-11]. В результате сразу после вакуумного спекания образцы имеют зеленоватую окраску. При последующем обжиге керамики YAG:Cr, содержащей в своем составе двухвалентные катионы Ca²⁺ или Mg²⁺, на воздухе часть ионов Cr³⁺ окисляется до Cr⁴⁺ за счет диффузии молекулярного кислорода и компенсации кислородных вакансий [28]. Часть уже окисленных ионов Cr⁴⁺, находящихся в октаэдрической позиции — Cr⁴⁺ (octa) переходит в тетраэдрические позиции алюминия за счет внутрирешеточного катионного обмена [9, 13, 28, 29]. В итоге образуются центры поглощения — Cr⁴⁺ (tetra). Наиболее выраженный пик Cr⁴⁺ (octa) приходится на длину волны порядка 480 нм, Cr⁴⁺ (tetra) — широкая полоса поглощения в диапазоне 800-1200 нм с центром при 1030 нм [9]. Цвет хромсодержащих образцов ҮАС после обжига на воздухе приобретает коричневатую окраску.

В таблице представлены фотографии образцов керамики YAG:Cr до и после отжига при различных тем-

Таблица. Фотографии керамических образцов *Al_Cr*, *S_Cr* и *Y_Cr* с различной концентрацией оксида магния и отклонением от стехиометрии. Размер изображения 14 мм × 14 мм

Table. Photographs of ceramic samples Al_Cr , S_Cr and Y_Cr with different concentrations of magnesium oxide and deviation from stoichiometry. The size of images is 14 mm × 14 mm

Образец	Al_Cr				S_Cr		Y_Cr				
Концентрация	Температура отжига на воздухе <i>T</i> , °С										
оксида магния, масс.%	1100	1300	1500	1100	1300	1500	1100	1300	1500		
0,00	(an)	aG, T	AGAT			0		C			
0,05	(;;Yb	YAG;)	AG; Y	1 <i>G;Yb</i>	YAG;	YAG; YI	Yb	4G; Y	(AG;)t		
0,10	G; Yb	YAG;	AG;Y			0		(1G;)	(YAG)		
0,20	;Yb	YAG;Y	YAG;Y				Yb				

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2022, том 22, № 5 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no 5



Рисунок. Спектры оптического пропускания YAG керамики после вакуумного спекания при 1780 °С (*a*) и 1820 °С (*b*) и отжига на воздухе при 1500 °С

Figure. Optical transmittance spectra of YAG ceramics after vacuum sintering at 1780 °C (*a*) and 1820 °C (*b*) and air annealing at 1500 °C

пературах на воздухе. При увеличении температуры отжига на воздухе образцы YAG:Cr, имеющие в своем составе оксид магния, приобрели характерную для YAG:Cr⁴⁺ коричневую окраску. С увеличением температуры отжига и концентрации оксида магния цвет образцов стал более насыщенным. Образцы керамики, не имеющие в своем составе оксида магния, не изменили цвет после отжига. Данный факт свидетельствует об отсутствии конверсии ионов Cr³⁺ в Cr⁴⁺ при условии отсутствия компенсатора заряда, в роли которого использован ион Mg²⁺.

Предположим, что отклонение от стехиометрии оказывает влияние на температуру, при которой начинается процесс конверсии ионов Cr^{3+} в Cr^{4+} и их переход из

октаэдрического в тетраэдрическое положение. Так, у образца Al_Cr , имеющего в составе избыток алюминия и MgO окрашивание наблюдается только после отжига при температуре 1300 °C. Цвет образца Al_Cr менее насыщен, чем образцов *S Cr* и *Y Cr*.

Образец S_Cr , соответствующий стехиометричному составу приобрел окрашивание после отжига при температуре 1300 °С. Изменение цвета образцов Y_Cr , содержащих избыток иттрия, при концентрациях MgO 0,05 и 0,1 масс.% наблюдается при температуре отжига 1100 °С. Следовательно, в случае избытка иттрия для начала окисления ионов хрома в четырехвалентное состояние и их перехода в тетраэдрическое положение в решетке иттрий-алюминиевого граната требуется меньшая температура отжига на воздухе, чем в случае избытка алюминия и стехиометрии.

Данный факт можно объяснить следующим образом. В работе [24] показано, что расчетная концентрация ионов магния на месте алюминия в позиции 16а (в октаэдрической подрешетке YAG) выше в случае избытка иттрия. Исходя из этого, можно предположить, что при избытке иттрия создаются благоприятные условия для встраивания ионов Mg^{2+} в октаэдрическую позицию. В результате генерируется значительное количество кислородных вакансий и связанных с ними комплексных точечных дефектов, участвующих в окислении хрома при обжиге на воздухе. Кроме того, в октаэдрической позиции существует достаточное число позиций для внедрения ионов Cr^{3+} и исключения их конкуренции с ионами Mg^{2+} .

При избытке алюминия возникает обратная ситуация — затрудняется внедрение ионов Cr^{3+} и Mg²⁺ в октаэдрическую подрешетку. За счет компенсации стехиометрии часть ионов магния занимает позиции иттрия [24, 25]. Сравнительно слабое поглощение при 800–1200 нм у образца Al_Cr по сравнению с образцами S_Cr и Y_Cr указывает на очень малое количество ионов Cr^{4+} (tetra) (рисунок, *a*).

Отметим, что светопропускание керамики с избытком иттрия Y_Cr составило не более 60 %, что значительно ниже, чем в случаях стехиометрического состава образцов S_Cr и избытка алюминия Al_Cr .

Сравнивая спектры светопропускания, представленные на рисунке, *a*, *b*, очевидно, что не только стехиометрия, но и температура вакуумного спекания оказывает влияние на концентрацию ионов Cr^{4+} . Образец Al_Cr , полученный при температуре 1820 °C, имеет более темную и насыщенную окраску по сравнению с полученным при температуре 1780 °C. На спектрах оптического пропускания образца Al_Cr , полученного при температуре 1820 °C, наблюдается более высокая интенсивность полос поглощения Cr^{4+} (octa) и Cr^{4+} (tetra). Данный факт дает основание полагать, что спекание при более высокой температуре привело к увеличению концентрации ионов Cr^{4+} и их доли в тетраэдрической позиции.

Заключение

Исследовано влияние отклонения от стехиометрии на эффективность конверсии ионов Cr^{3+} в Cr^{4+} при использовании в качестве компенсатора заряда добавки оксида магния. Показано, что избыток алюминия снижает эффективность конверсии ионов Cr^{3+} в Cr^{4+} . В образцах с избытком алюминия (4,8 мол.%), полученных при температуре 1780 °С, поглощение при длине волны около 1030 нм практически отсутствует, что свидетельствует о сравнительно малой концентрации центров Cr^{4+} (tetra) по сравнению со стехиометрическими образцами и образцами с избытком иттрия. При этом образцы с избытком алюминия в гранате обладают высокой прозрачностью.

Смещение стехиометрии в сторону избытка иттрия при получении керамики YAG:Cr⁴⁺ в присутствии магния в качестве одиночной допирующей примеси привела к снижению температуры отжига на воздухе, при которой начинается процесс конверсии ионов Cr³⁺ в Cr⁴⁺ и их переход в тетраэдрическую позицию по сравнению со случаем избытка алюминия и стехиометрии. Возможно, при таком составе композиции в октаэдрической подрешетке YAG имеется достаточное количество позиций для внедрения ионов магния и хрома. Однако для составов YAG: Cr с избытком иттрия светопропускание образцов было ниже, чем для стехиометричных составов и для составов с избытком алюминия.

Стехиометрические составы с содержанием магния не более 0,05 масс.% для температуры 1780 °С и не более 0,1 масс.% для температуры 1820 °С обеспечивают получение высокопрозрачной керамики с выраженными полосами поглощения Cr⁴⁺ как в октаэдрической, так и в тетраэдрической позициях.

Установлено, что при увеличении температуры вакуумного спекания с 1780 до 1820 °С в образцах с избытком алюминия происходит увеличение концентрации ионов Cr^{4+} (tetra). Об этом свидетельствует более насыщенный цвет образцов и более высокая интенсивность поглощения при длине волны около 1030 нм. В образцах стехиометрического состава и с избытком иттрия данный эффект выражен слабее.

Литература

- Dong J., Ueda K., Shirakawa A., Yagi H., Yanagitani T., Kaminskii A. Composite Yb:YAG/Cr⁴⁺:YAG ceramics picosecond microchip lasers // Optics Express. 2007. V. 15. N 22. P. 14516–14523. https://doi. org/10.1364/OE.15.014516
- Kalisky Y. Cr⁴⁺-doped crystals: Their use as lasers and passive Q-switches // Progress in Quantum Electronics. 2004. V. 28. N 5. P. 249–303. https://doi.org/10.1016/j.pquantelec.2004.09.001
- Kalisky Y., Kravchik L., Kokta M. Performance of diode-end-pumped Cr⁴⁺, Nd³⁺:YAG self-Q-switched and Nd:YAG/Cr⁴⁺:YAG diffusion bonded lasers // Optical Materials. 2004. V. 24. N 4. P. 607–614. https://doi.org/10.1016/S0925-3467(03)00163-0
- Dong J., Deng P. Laser performance of monolithic Cr,Nd:YAG self-Q-switched laser // Optics Communications. 2003. V. 220. N 4–6. P. 425–431. https://doi.org/10.1016/S0030-4018(03)01450-0
- Dong J., Ueda K., Yagi H., Kaminskii A. Laser-diode pumped self-Q-switched microchip lasers // Optical Review. 2008. V. 15. N 2. P. 57–74. https://doi.org/10.1007/S10043-008-0010-3

References

- Dong J., Ueda K., Shirakawa A., Yagi H., Yanagitani T., Kaminskii A. Composite Yb:YAG/Cr⁴⁺:YAG ceramics picosecond microchip lasers. *Optics Express*, 2007, vol. 15, no. 22, pp. 14516–14523. https://doi. org/10.1364/OE.15.014516
- Kalisky Y. Cr⁴⁺-doped crystals: Their use as lasers and passive Q-switches. *Progress in Quantum Electronics*, 2004, vol. 28, no. 5, pp. 249–303. https://doi.org/10.1016/j.pquantelec.2004.09.001
- Kalisky Y., Kravchik L., Kokta M. Performance of diode-end-pumped Cr⁴⁺, Nd³⁺:YAG self-Q-switched and Nd:YAG/Cr⁴⁺:YAG diffusion bonded lasers. *Optical Materials*, 2004, vol. 24, no. 4, pp. 607–614. https://doi.org/10.1016/S0925-3467(03)00163-0
- Dong J., Deng P. Laser performance of monolithic Cr,Nd:YAG self-Q-switched laser. *Optics Communications*, 2003, vol. 220, no. 4–6, pp. 425–431. https://doi.org/10.1016/S0030-4018(03)01450-0
- Dong J., Ueda K., Yagi H., Kaminskii A. Laser-diode pumped self-Q-switched microchip lasers. *Optical Review*, 2008, vol. 15, no. 2, pp. 57–74. https://doi.org/10.1007/S10043-008-0010-3

- Ikesue A., Yoshida K., Kamata K. Transparent Cr⁴⁺-doped YAG ceramics for tunable lasers // Journal of the American Ceramic Society. 1996. V. 79. N 2. P. 507–509. https://doi. org/10.1111/j.1151-2916.1996.tb08154.x
- Li J., Wu Y., Pan Y., Guo J. Fabrication of Cr⁴⁺,Nd³⁺:YAG transparent ceramics for self-Q-switched laser // Journal of Non-Crystalline Solids. 2006. V. 352. N 23–25. P. 2404–2407. https://doi. org/10.1016/j.jnoncrysol.2006.02.062
- Kong L.B., Huang Y., Que W., Zhang T., Li S., Zhang J., Dong Z., Tang D. Transparent Ceramics. Springer Cham, 2015. 734 p. (Topics in Mining, Metallurgy and Materials). https://doi.org/10.1007/978-3-319-18956-7
- Zhou T., Zhang L., Li Z., Wei S., Wu J., Wang L., Yang H., Fu Z., Chen H., Wong C., Zhang Q. Enhanced conversion efficiency of Cr⁴⁺ ion in Cr: YAG transparent ceramic by optimizing the annealing process and doping concentration // Journal of Alloys and Compounds. 2017. V. 703. P. 34–39. https://doi.org/10.1016/j. jallcom.2017.01.338
- Yagi H., Takaichi K., Ueda K., Yanagitani T., Kaminskii A. Influence of annealing conditions on the optical properties of chromium-doped ceramic Y₃Al₅O₁₂// Optical Materials. 2006. V. 29. N 4. P. 392–396. https://doi.org/10.1016/j.optmat.2005.08.035
- Chaika M., Paszkowicz W., Strek W., Hreniak D., Tomala R., Safronova N., Doroshenko A., Parkhomenko S., Dluzewski P., Kozłowski M., Vovk O. Influence of Cr doping on the phase composition of Cr,Ca:YAG ceramics by solid state reaction sintering // Journal of the American Ceramic Society. 2019. V. 102. N 4. P. 2104–2115. https://doi.org/10.1111/jace.16024
- Chaika M., Tomala R., Štrek W., Hreniak D., Dluzewski P., Morawiec K., Mateychenko P., Fedorov A., Doroshenko A., Parkhomenko S., Lesniewska-Matys K., Podniesinski D., Kozłowska A., Mancardi G., Vovk O. Kinetics of Cr³⁺ to Cr⁴⁺ ion valence transformations and intra-lattice cation exchange of Cr⁴⁺ in Cr,Ca:YAG ceramics used as laser gain and passive Q-switching media // Journal of Chemical Physics. 2019. V. 151. N 13. P. 134708. https://doi.org/10.1063/1.5118321
- Feldman R., Shimony Y., Burshtein Z. Dynamics of chromium ion valence transformations in Cr,Ca:YAG crystals used as laser gain and passive Q-switching media // Optical Materials. 2003. V. 24. N 1–2. P. 333–344. https://doi.org/10.1016/S0925-3467(03)00146-0
- Boulesteix R., Perrière C., Maître A., Chrétien L., Brenierd A., Guyotd Y. Fabrication of YAG/Cr:YAG transparent composite ceramics and characterization by light sheet fluorescence imaging // Optical Materials. 2019. V. 96. P. 109324. https://doi.org/10.1016/j. optmat.2019.109324
- Zhou T., Zhang L., Yang H., Qiao X., Liu P., Tang D., Zhang J. Effects of sintering AIDS on the transparency and conversion efficiency of Cr⁴⁺ ions in Cr: YAG transparent ceramics // Journal of the American Ceramic Society. 2015. V. 98. N 8. P. 2459–2464. https://doi. org/10.1111/jace.13616
- Zhou T., Zhang L., Shao C., Sun B., Bu W., Yang H., Chen H., Selimd F.A., Zhang Q. Sintering additives regulated Cr ion charge state in Cr doped YAG transparent ceramics // Ceramics International. 2018. V. 44. N 12. P. 13820–13826. https://doi.org/10.1016/j. ceramint.2018.04.226
- Chaika M.A., Mancardi G., Vovk O.M. Influence of CaO and SiO₂ additives on the sintering behavior of Cr,Ca:YAG ceramics prepared by solid-state reaction sintering // Ceramics International. 2020. V. 46. N 14. P. 22781–22786. https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.06.045
- Chaika M.A., Dulina N.A., Doroshenko A.G., Parkhomenko S.V., Gayduk O.V., Tomala R., Strek W., Hreniak D., Mancardi G., Vovka O.M. Influence of calcium concentration on formation of tetravalent chromium doped Y₃Al₅O₁₂ ceramics // Ceramics International. 2018. V. 44. N 12. P. 13513–13519. https://doi. org/10.1016/j.ceramint.2018.04.182
- Chaika M.A., Dluzewski P., Morawiec K., Szczepansk A., Jablonska K., Mancardi G., Tomala R., Hreniak D., Strek W., Safronova N.A., Doroshenko A.G., Parkhomenko S.V., Vovk O.M. The role of Ca²⁺ ions in the formation of high optical quality Cr⁴⁺,Ca:YAG ceramics // Journal of the European Ceramic Society. 2019. V. 39. N 11. P. 3344–3352. https://doi.org/10.1016/j. jeurceramsoc.2019.04.037
- Bezotosnyi V.V., Kanaev A.Yu., Kopylov Yu.L., Koromyslov A.L., Lopukhin K.V., Tupitsyn I. M., Cheshev E.A. Influence of CaO/MgO ratio on Cr³⁺ to Cr⁴⁺ conversion efficiency in YAG:Cr⁴⁺ ceramic

- Ikesue A., Yoshida K., Kamata K. Transparent Cr⁴⁺-doped YAG ceramics for tunable lasers. *Journal of the American Ceramic Society*, 1996, vol. 79, no. 2, pp. 507–509. https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1996.tb08154.x
- Li J., Wu Y., Pan Y., Guo J. Fabrication of Cr⁴⁺,Nd³⁺:YAG transparent ceramics for self-Q-switched laser. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2006, vol. 352, no. 23–25, pp. 2404–2407. https://doi.org/10.1016/j. jnoncrysol.2006.02.062
- Kong L.B., Huang Y., Que W., Zhang T., Li S., Zhang J., Dong Z., Tang D. *Transparent Ceramics*. Springer Cham, 2015, 734 p. Topics in Mining, Metallurgy and Materials Engineering. https://doi. org/10.1007/978-3-319-18956-7
- Zhou T., Zhang L., Li Z., Wei S., Wu J., Wang L., Yang H., Fu Z., Chen H., Wong C., Zhang Q. Enhanced conversion efficiency of Cr⁴⁺ ion in Cr: YAG transparent ceramic by optimizing the annealing process and doping concentration. *Journal of Alloys and Compounds*, 2017, vol. 703, pp. 34–39. https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.01.338
- Yagi H., Takaichi K., Ueda K., Yanagitani T., Kaminskii A. Influence of annealing conditions on the optical properties of chromium-doped ceramic Y₃Al₅O₁₂. *Optical Materials*, 2006, vol. 29, no. 4, pp. 392– 396. https://doi.org/10.1016/j.optmat.2005.08.035
- Chaika M., Paszkowicz W., Strek W., Hreniak D., Tomala R., Safronova N., Doroshenko A., Parkhomenko S., Dluzewski P., Kozłowski M., Vovk O. Influence of Cr doping on the phase composition of Cr,Ca:YAG ceramics by solid state reaction sintering. *Journal of the American Ceramic Society*, 2019, vol. 102, no. 4, pp. 2104–2115. https://doi.org/10.1111/jace.16024
- Chaika M., Tomala R., Strek W., Hreniak D., Dluzewski P., Morawiec K., Mateychenko P., Fedorov A., Doroshenko A., Parkhomenko S., Lesniewska-Matys K., Podniesinski D., Kozłowska A., Mancardi G., Vovk O. Kinetics of Cr³⁺ to Cr⁴⁺ ion valence transformations and intra-lattice cation exchange of Cr⁴⁺ in Cr,Ca:YAG ceramics used as laser gain and passive Q-switching media. *Journal of Chemical Physics*, 2019, vol. 151, no. 13, pp. 134708. https://doi.org/10.1063/1.5118321
- Feldman R., Shimony Y., Burshtein Z. Dynamics of chromium ion valence transformations in Cr,Ca:YAG crystals used as laser gain and passive Q-switching media. *Optical Materials*, 2003, vol. 24, no. 1–2, pp. 333–344. https://doi.org/10.1016/S0925-3467(03)00146-0
- Boulesteix R., Perrière C., Maître A., Chrétien L., Brenierd A., Guyotd Y. Fabrication of YAG/Cr:YAG transparent composite ceramics and characterization by light sheet fluorescence imaging. *Optical Materials*, 2019, vol. 96, pp. 109324. https://doi. org/10.1016/j.optmat.2019.109324
- Zhou T., Zhang L., Yang H., Qiao X., Liu P., Tang D., Zhang J. Effects of sintering AIDS on the transparency and conversion efficiency of Cr⁴⁺ ions in Cr: YAG transparent ceramics. *Journal of the American Ceramic Society*, 2015, vol. 98, no. 8, pp. 2459–2464. https://doi. org/10.1111/jace.13616
- Zhou T., Zhang L., Shao C., Sun B., Bu W., Yang H., Chen H., Selimd F.A., Zhang Q. Sintering additives regulated Cr ion charge state in Cr doped YAG transparent ceramics. *Ceramics International*, 2018, vol. 44, no. 12, pp. 13820–13826. https://doi.org/10.1016/j. ceramint.2018.04.226
- Chaika M.A., Mancardi G., Vovk O.M. Influence of CaO and SiO₂ additives on the sintering behavior of Cr,Ca:YAG ceramics prepared by solid-state reaction sintering. *Ceramics International*, 2020, vol. 46, no. 14, pp. 22781–22786. https://doi.org/10.1016/j. ceramint.2020.06.045
- Chaika M.A., Dulina N.A., Doroshenko A.G., Parkhomenko S.V., Gayduk O.V., Tomala R., Strek W., Hreniak D., Mancardi G., Vovka O.M. Influence of calcium concentration on formation of tetravalent chromium doped Y₃Al₅O₁₂ ceramics. *Ceramics International*, 2018, vol. 44, no. 12, pp. 13513–13519. https://doi. org/10.1016/j.ceramint.2018.04.182
- Chaika M.A., Dluzewski P., Morawiec K., Szczepansk A., Jablonska K., Mancardi G., Tomala R., Hreniak D., Strek W., Safronova N.A., Doroshenko A.G., Parkhomenko S.V., Vovk O.M. The role of Ca²⁺ ions in the formation of high optical quality Cr⁴⁺, Ca:YAG ceramics. *Journal of the European Ceramic Society*, 2019, vol. 39, no. 11, pp. 3344–3352. https://doi.org/10.1016/j. jeurceramsoc.2019.04.037
- Bezotosnyi V.V., Kanaev A.Yu., Kopylov Yu.L., Koromyslov A.L., Lopukhin K.V., Tupitsyn I. M., Cheshev E.A. Influence of CaO/MgO ratio on Cr³⁺ to Cr⁴⁺ conversion efficiency in YAG:Cr⁴⁺ ceramic

saturable absorbers // Optical Materials. 2020. V. 100. P. 109671. https://doi.org/10.1016/j.optmat.2020.109671

- Chen X., Wu Y., Lu Z., Wei N., Qi J., Shi J., Hua T., Zeng Q., Guo W., Lu T. Assessment of conversion efficiency of Cr⁴⁺ ions by aliovalent cation additives in Cr:YAG ceramic for edge cladding // Journal of the American Ceramic Society. 2018. V. 101. N 11. P. 5098–5109. https://doi.org/10.1111/jace.15764
- 22. Chen X., Lu T., Wei N., Lu Z., Chen L., Zhang Q., Cheng G., Qi J. Fabrication and photoluminescence properties of Cr:YAG and Yb,Cr:YAG transparent ceramic // Optical Materials. 2015. V. 49. P. 330–336. https://doi.org/10.1016/j.optmat.2015.09.022
- Doroshenko A.G., Yavetskiy R.P., Parkhomenko S.V., Vorona I.O., Kryzhanovska O.S., Mateychenko P.V., Tolmachev A.V., Vovk E.A., Bovda V.A., Croitoru G., Gheorghe L. Effect of the sintering temperature on the microstructure and optical properties of YAG:Cr,Mg ceramics // Optical Materials. 2019. V. 98. P. 109505. https://doi.org/10.1016/j.optmat.2019.109505
- Kravtsov A.A., Nikova M.S., Vakalov D.S., Tarala V.A., Chikulina I.S., Malyavin F.F., Chapura O.M., Krandievsky S.O., Kuleshov D.S., Lapin V.A. Combined effect of MgO sintering additive and stoichiometry deviation on YAG crystal lattice defects // Ceramics International. 2019. V. 45. N 16. P. 20178–20188. https:// doi.org/10.1016/j.ceramint.2019.06.287
- 25. Малявин Ф.Ф., Кравцов А.А., Тарала В.А., Никова М.С., Чикулина И.С., Вакалов Д.С., Лапин В.А., Кулешов Д.С., Медяник Е.В. Исследование влияния концентрации оксида магния и отклонения от стехиометрии иттрий-алюминиевого граната на микроструктуру и оптическое пропускание керамики на его основе // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2021. Т. 21. № 6. С. 872–879. https:// doi.org/10.17586/2226-1494-2021-21-6-872-879
- 26. Kravtsov A.A., Chikulina I.S., Tarala V.A., Evtushenko E.A., Shama M.S., Tarala L.V., Malyavin F.F., Vakalov D.S., Lapin V.A., Kuleshov D.S. Novel synthesis of low-agglomerated YAG:Yb ceramic nanopowders by two-stage precipitation with the use of hexamine // Ceramics International. 2019. V. 45. N 1. P. 1273–1282. https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2018.10.010
- Malyavin F.F., Tarala V.A., Kuznetsov S.V., Kravtsov A.A., Chikulina I.S., Shama M.S., Medyanik E.V., Ziryanov V.S., Evtushenko E.A., Vakalov D.S., Lapin V.A., Kuleshov D.S., Tarala L.V., Mitrofanenko L.M. Influence of the ceramic powder morphology and forming conditions on the optical transmittance of YAG:Yb ceramics // Ceramics International. 2019. V. 45. N 4. P. 4418–4423. https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2018.11.119
- Chen X., Lu Z., Hu M., Chang H., Duan Y., Fang J., Lu T., Wei N., Wu Y., Guo W. Investigation of the structure, optical properties and Cr⁴⁺ conversion level of Yb³⁺ and Cr³⁺ codoped YAG transparent ceramics // Optical Materials. 2020. V. 109. P. 110406. https://doi. org/10.1016/j.optmat.2020.110406
- Wu Y., Li J., Qiu F., Pan Y., Liu Q., Guo J. Fabrication of transparent Yb,Cr:YAG ceramics by a solid-state reaction method // Ceramics International. 2006. V. 32. N 7. P. 785–788. https://doi.org/10.1016/j. ceramint.2005.06.002

Авторы

Малявин Федор Федорович — заведующий лабораторией, Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, 355009, Российская Федерация, <u>55</u>5748614600, https://orcid.org/0000-0002-5255-9346, fedormalyavin@mail.ru

Кравцов Александр Александрович — кандидат технических наук, старший научный сотрудник, Федеральный исследовательский центр Южного научного центра Российской академии наук, Ростов-на-Дону, 344006, Российская Федерация; научный сотрудник, Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, 355009, Российская Федерация, 557191056680, https://orcid.org/0000-0002-0645-1166, sanya-kravtsov@yandex.ru

Тарала Виталий Алексеевич — кандидат химических наук, заведующий научно-лабораторным комплексом, Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, 355009, Российская Федерация, 36873277700, https://orcid.org/0000-0001-6688-2681, vitaly-tarala@ yandex.ru

Чикулина Ирина Сергеевна — заведующий лабораторией, Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, 355009, saturable absorbers. *Optical Materials*, 2020, vol. 100, pp. 109671. https://doi.org/10.1016/j.optmat.2020.109671

- 21. Chen X., Wu Y., Lu Z., Wei N., Qi J., Shi J., Hua T., Zeng Q., Guo W., Lu T. Assessment of conversion efficiency of Cr⁴⁺ ions by aliovalent cation additives in Cr:YAG ceramic for edge cladding. *Journal of the American Ceramic Society*, 2018, vol. 101, no. 11, pp. 5098–5109. https://doi.org/10.1111/jace.15764
- Chen X., Lu T., Wei N., Lu Z., Chen L., Zhang Q., Cheng G., Qi J. Fabrication and photoluminescence properties of Cr:YAG and Yb,Cr:YAG transparent ceramic. *Optical Materials*, 2015, vol. 49, pp. 330–336. https://doi.org/10.1016/j.optmat.2015.09.022
- Doroshenko A.G., Yavetskiy R.P., Parkhomenko S.V., Vorona I.O., Kryzhanovska O.S., Mateychenko P.V., Tolmachev A.V., Vovk E.A., Bovda V.A., Croitoru G., Gheorghe L. Effect of the sintering temperature on the microstructure and optical properties of YAG:Cr,Mg ceramics. *Optical Materials*, 2019, vol. 98, pp. 109505. https://doi.org/10.1016/j.optmat.2019.109505
- 24. Kravtsov A.A., Nikova M.S., Vakalov D.S., Tarala V.A., Chikulina I.S., Malyavin F.F., Chapura O.M., Krandievsky S.O., Kuleshov D.S., Lapin V.A. Combined effect of MgO sintering additive and stoichiometry deviation on YAG crystal lattice defects. *Ceramics International*, 2019, vol. 45, no. 16, pp. 20178–20188. https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2019.06.287
- 25. Malyavin F.F., Kravtsov A.A., Tarala V.A., Nikova M.S., Chikulina I.S., Vakalov D.S., Lapin V.A., Kuleshov D.S., Medyanik E.V. Impact of magnesium oxide concentration and yttrium-aluminum garnet stoichiometry deviation on the microstructure and optical transmission of yag-based ceramics. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, vol. 21, no. 6, pp. 872–879. (in Russian). https://doi.org/10.17586/2226-1494-2021-21-6-872-879
- 26. Kravtsov A.A., Chikulina I.S., Tarala V.A., Evtushenko E.A., Shama M.S., Tarala L.V., Malyavin F.F., Vakalov D.S., Lapin V.A., Kuleshov D.S. Novel synthesis of low-agglomerated YAG:Yb ceramic nanopowders by two-stage precipitation with the use of hexamine. *Ceramics International*, 2019, vol. 45, no. 1, pp. 1273– 1282. https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2018.10.010
- Malyavin F.F., Tarala V.A., Kuznetsov S.V., Kravtsov A.A., Chikulina I.S., Shama M.S., Medyanik E.V., Ziryanov V.S., Evtushenko E.A., Vakalov D.S., Lapin V.A., Kuleshov D.S., Tarala L.V., Mitrofanenko L.M. Influence of the ceramic powder morphology and forming conditions on the optical transmittance of YAG:Yb ceramics. *Ceramics International*, 2019, vol. 45, no. 4, pp. 4418–4423. https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2018.11.119
- Chen X., Lu Z., Hu M., Chang H., Duan Y., Fang J., Lu T., Wei N., Wu Y., Guo W. Investigation of the structure, optical properties and Cr⁴⁺ conversion level of Yb³⁺ and Cr³⁺ codoped YAG transparent ceramics. *Optical Materials*, 2020, vol. 109, pp. 110406. https://doi. org/10.1016/j.optmat.2020.110406
- Wu Y., Li J., Qiu F., Pan Y., Liu Q., Guo J. Fabrication of transparent Yb,Cr:YAG ceramics by a solid-state reaction method. *Ceramics International*, 2006, vol. 32, no. 7, pp. 785–788. https://doi. org/10.1016/j.ceramint.2005.06.002

Authors

Fedor F. Malyavin — Head of Laboratory, North-Caucasus Federal University, Stavropol, 355009, Russian Federation, 55748614600, https://orcid.org/0000-0002-5255-9346, fedormalyavin@mail.ru

Alexander A. Kravtsov — PhD, Senior Researcher, Federal Research Center of the Southern Scientific Centre of the Russian Academy of Sciences, Rostov-on-Don, 344006, Russian Federation; Scientific Researcher, North-Caucasus Federal University, Stavropol, 355009, Russian Federation, Scientific Scientific Sciences, Sc

Vitaly A. Tarala — PhD (Chemistry), Head of Laboratory Complex, North-Caucasus Federal University, Stavropol, 355009, Russian Federation, S 36873277700, https://orcid.org/0000-0001-6688-2681, vitaly-tarala@yandex.ru

Irina S. Chikulina — Head of Laboratory, North-Caucasus Federal University, Stavropol, 355009, Russian Federation, <u>55204186833</u>, https://orcid.org/0000-0002-0871-8776, iraaaa@yandex.ru

Российская Федерация, 55 57204186833, https://orcid.org/0000-0002-0871-8776, iraaaa@yandex.ru

Вакалов Дмитрий Сергеевич — кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией, Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, 355009, Российская Федерация, 57204185431, https://orcid.org/0000-0001-6788-3811, megadims@ gmail.com

Лапин Вячеслав Анатольевич — кандидат технических наук, старший научный сотрудник, Федеральный исследовательский центр Южного научного центра Российской академии наук, Ростовна-Дону, 344006, Российская Федерация; научный сотрудник, Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, 355009, Российская Федерация, 55748317300, https://orcid.org/0000-0002-1938-4134, viacheslavlapin@yandex.ru

Никова Марина Сергеевна — кандидат технических наук, инженер, Северо- Кавказский федеральный университет, Ставрополь, 355009, Российская Федерация, 557214126664, https://orcid.org/0000-0001-8810-4493, m-s-shama@yandex.ru

Хорошилова Светлана Эдуардовна — кандидат химических наук, ведущий научный сотрудник, Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, 355009, Российская Федерация, 23990875300, https://orcid.org/0000-0002-4287-8183, skhoroshilova@ncfu.ru

Медяник Евгений Викторович — ведущий инженер, Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, 355009, Российская Федерация, 57204793700, https://orcid.org/0000-0002-5947-7810, miedianik84@mail.ru

Кулешов Дмитрий Сергеевич — инженер, Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, 355009, Российская Федерация, 55748259500, https://orcid.org/0000-0003-4314-1578, kule-dmitry@ yandex.ru **Dmitry S. Vakalov** — PhD (Physics & Mathematics), Head of Laboratory, North-Caucasus Federal University, Stavropol, 355009, Russian Federation, se 57204185431, https://orcid.org/0000-0001-6788-3811, megadims@gmail.com

Viacheslav A. Lapin — PhD, Senior Researcher, Federal Research Center of the Southern Scientific Centre of the Russian Academy of Sciences, Rostov-on-Don, 344006, Russian Federation; Scientific Researcher, North-Caucasus Federal University, Stavropol, 355009, Russian Federation, S 55748317300, https://orcid.org/0000-0002-1938-4134, viacheslavlapin@ yandex.ru

Marina S. Nikova — PhD, Engineer, North-Caucasus Federal University, Stavropol, 355009, Russian Federation, s 57214126664, https://orcid. org/0000-0001-8810-4493, m-s-shama@yandex.ru

Svetlana E. Khoroshilova — PhD (Chemistry), Leading Researcher, North-Caucasus Federal University, Stavropol, 355009, Russian Federation, S 23990875300, https://orcid.org/0000-0002-4287-8183, skhoroshilova@ncfu.ru

Evgenii V. Medyanik — Leading Engineer, North-Caucasus Federal University, Stavropol, 355009, Russian Federation, <u>57204793700</u>, https://orcid.org/0000-0002-5947-7810, miedianik84@mail.ru

Dmitry S. Kuleshov — Engineer, North-Caucasus Federal University, Stavropol, 355009, Russian Federation, **5**5748259500, https://orcid. org/0000-0003-4314-1578, kule-dmitry@yandex.ru

Статья поступила в редакцию 23.06.2022 Одобрена после рецензирования 27.07.2022 Принята к печати 23.09.2022 Received 23.06.2022 Approved after reviewing 27.07.2022 Accepted 23.09.2022



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» Ι/ΪΤΜΟ

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКІ

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-921-928 УДК 621.315.592

Влияние низких температур и термического отжига на оптические свойства квантовых точек InGaPAs

Владислав Васильевич Андрюшкин^{1⊠}, Анна Сергеевна Драгунова², Сергей Дмитриевич Комаров³, Алексей Михайлович Надточий⁴, Андрей Геннадьевич Гладышев⁵, Андрей Владимирович Бабичев⁶, Александр Вячеславович Уваров⁷, Иннокентий Игоревич Новиков⁸, Евгений Сергеевич Колодезный⁹, Леонид Яковлевич Карачинский¹⁰, Наталья Владимировна Крыжановская¹¹, Владимир Николаевич Неведомский¹², Антон Юрьевич Егоров¹³, Владислав Евгеньевич Бугров¹⁴

1,5,6,8,9,10,14 Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация 2,3,4,11 Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Санкт-Петербург 190008, Российская Федерация

⁷ Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет имени Ж.И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, 194021, Российская Федерация

⁷ СПбГЭТУ «ЛЭТИ», Санкт-Петербург, 197376, Российская Федерация

¹² Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, 194021, Российская Федерация ¹³ ООО «Коннектор Оптикс», Санкт-Петербург, 194292, Российская Федерация

¹ vvandriushkin@itmo.ru^{\equiv}, https://orcid.org/0000-0002-7471-8627

² adragunova@hse.ru, https://orcid.org/0000-0002-0181-0262

³ skomarov@hse.ru, https://orcid.org/0000-0002-7025-3527

⁴ anadtochiy@hse.ru, https://orcid.org/0000-0003-0982-907X

⁵ andrey.gladyshev@connector-optics.com, https://orcid.org/0000-0002-9448-2471

⁶ andrey.babichev@connector-optics.com, https://orcid.org/0000-0002-3463-4744

7 lumenlight@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-0061-6687

⁸ innokenty.novikov@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0003-1983-0242

9 evgenii kolodeznyi@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-3056-8663

¹⁰ leonid.karachinsky@connector-optics.com, https://orcid.org/0000-0002-5634-8183

¹¹ nataliakryzh@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-4945-9803

¹² nevedom@mail.ioffe.ru, https://orcid.org/0000-0002-7661-9155

13 anton.egorov@connector-optics.com, https://orcid.org/0000-0002-0789-4241

¹⁴ vladislav.bougrov@niuitmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-5380-645X

Аннотация

Предмет исследования. Представлены результаты исследования оптических свойств низкоплотных квантовых точек InGaPAs. Показано влияние на оптические и структурные свойства квантовых точек низких температур и параметров термического отжига. **Метод.** Квантовые точки InGaPAs получены методом молекулярнопучковой эпитаксии за счет замещения фосфора на мышьяк в тонком слое InGaP непосредственно в процессе эпитаксиального роста. Оптические свойства квантовых точек InGaPAs исследованы методом спектроскопии фотолюминесценции, в том числе при температуре жидкого азота (–196 °C), что позволило определить особенности безызлучательной рекомбинации в исследуемых гетероструктурах. Гетероструктуры были подвергнуты кратковременному термическому отжигу при температурах 600 и 650 °C в течение 2 мин для оценки влияния отжига на оптические и структурные свойства квантовых точек. **Основные результаты.** Показано, что при температуре –196 °C вклад безызлучательной рекомбинации можно считать несущественным для всего измеряемого диапазона мощности накачки. При температуре –73 °C наибольший вклад в безызлучательную рекомбинацию вносит рекомбинация Шоккли–Рида. Кратковременный отжиг гетероструктур может уменьшить

[©] Андрюшкин В.В., Драгунова А.С., Комаров С.Д., Надточий А.М., Гладышев А.Г., Бабичев А.В., Уваров А.В., Новиков И.И., Колодезный Е.С., Карачинский Л.Я., Крыжановская Н.В, Неведомский В.Н., Егоров А.Ю., Бугров В.Е., 2022

количество точечных дефектов, что приводит к росту эффективности фотолюминесценции и уменьшению ее полуширины. **Практическая значимость.** Полученные квантовые точки InGaPAs, а также оригинальный метод их получения могут найти применение при создании источников одиночных фотонов на основе микрорезонаторов. Представленные экспериментальные результаты должны быть учтены при реализации таких источников, в частности при оптимизации ширины и интенсивности линии излучения.

Ключевые слова

квантовые точки, гетероструктуры, молекулярно-пучковая эпитаксия, полупроводники, источники одиночных фотонов

Благодарности

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект тематики научных исследований № 2019-1442 в части низкотемпературных измерений. Исследования влияния быстрого термического отжига осуществлены в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

Ссылка для цитирования: Андрюшкин В.В., Драгунова А.С., Комаров С.Д., Надточий А.М., Гладышев А.Г., Бабичев А.В., Уваров А.В., Новиков И.И., Колодезный Е.С., Карачинский Л.Я., Крыжановская Н.В, Неведомский В.Н., Егоров А.Ю., Бугров В.Е. Влияние низких температур и термического отжига на оптические свойства квантовых точек InGaPAs // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 921–928. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-921-928

Influence of low temperatures and thermal annealing on the optical properties of InGaPAs quantum dots

Vladislav V. Andryushkin^{1⊠}, Anna S. Dragunova², Sergey D. Komarov³, Alexey M. Nadtochiy⁴, Andrey G. Gladyshev⁵, Andrey V. Babichev⁶, Alexander V. Uvarov⁷, Innokenty I. Novikov⁸, Evgenii S. Kolodezny⁹, Leonid Ya. Karachinsky¹⁰, Natalia V. Kryzhanovskaya¹¹, Vladimir N. Nevedomskii¹², Anton Yu. Egorov¹³, Vladislav E. Bougrov¹⁴

1,5,6,8,9,10,14 ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

^{2,3,4,11} HSE University, Saint Petersburg, 190008, Russian Federation

⁷ National Research Academic Alferov University of the Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, 194021, Russian Federation

⁷ ETU "LETI", Saint Petersburg, 197376, Russian Federation

¹² Ioffe Physical-Technical Institute of the Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, 194021, Russian Federation

13 Connector Optics LLC, Saint Petersburg, 194292, Russian Federation

¹ vvandriushkin@itmo.ru^{\vee}, https://orcid.org/0000-0002-7471-8627

² adragunova@hse.ru, https://orcid.org/0000-0002-0181-0262

³ skomarov@hse.ru, https://orcid.org/0000-0002-7025-3527

⁴ anadtochiy@hse.ru, https://orcid.org/0000-0003-0982-907X

⁵ andrey.gladyshev@connector-optics.com, https://orcid.org/0000-0002-9448-2471

⁶ andrey.babichev@connector-optics.com, https://orcid.org/0000-0002-3463-4744

⁷ lumenlight@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-0061-6687

⁸ innokenty.novikov@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0003-1983-0242

9 evgenii kolodeznyi@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-3056-8663

¹⁰ leonid.karachinsky@connector-optics.com, https://orcid.org/0000-0002-5634-8183

¹¹ nataliakryzh@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-4945-9803

12 nevedom@mail.ioffe.ru, https://orcid.org/0000-0002-7661-9155

13 anton.egorov@connector-optics.com, https://orcid.org/0000-0002-0789-4241

14 vladislav.bougrov@niuitmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-5380-645X

Abstract

The results of the study of the optical properties of low-density InGaPAs quantum dots, as well as the effect of low temperatures and thermal annealing parameters on their optical and structural properties were presented. InGaPAs quantum dots were formed by substituting phosphorus with arsenic in InGaP layer directly during epitaxial growth. The optical properties of InGaPAs quantum dots were studied by photoluminescence (PL) spectroscopy. Photoluminescence spectra at liquid nitrogen temperature (-196 °C) made it possible to determine the features of nonradiative recombination in heterostructures. The heterostructures were subjected to short-term thermal annealing at temperatures of 600 and 650 °C for 2 min to estimate the effect of annealing on the optical and structural properties of quantum dots. It was shown that at -196 °C the contribution of nonradiative recombination can be observed. Rapid thermal annealing of InGaPAs quantum dots led to reduce the number of point defects and growth of PL intensity. InGaPAs quantum dots and substitution method can find their application in the creation of single photon sources. The presented experimental results should be considered for implementing such sources, especially for optimizing the width and intensity of the radiation line.

Keywords

quantum dots, heterostructure, molecular-beam epitaxy, semiconductors, single-photon source
Acknowledgements

This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (research project No. 2019-1442) in the part of low temperature measurements. The studies on influence of rapid thermal annealing was implemented in the framework of the Basic Research Program at the HSE University.

For citation: Andryushkin V.V., Dragunova A.S., Komarov S.D., Nadtochiy A.M., Gladyshev A.G., Babichev A.V., Uvarov A.V., Novikov I.I., Kolodeznyi E.S., Karachinsky L.Ya., Kryzhanovskaya N.V., Nevedomskii V.N., Egorov A.Yu., Bougrov V.E. Influence of low temperatures and thermal annealing on the optical properties of InGaPAs quantum dots. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 921–928 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-921-928

Введение

В настоящее время большой интерес представляет создание эффективных и компактных источников одиночных фотонов и матричных микроизлучателей для применения в системах оптической квантовой криптографии [1–5]. Наиболее перспективные наноразмерные объекты на роль таких излучателей — помещенные в микрорезонатор квантовые точки (КТ). Однако к КТ для применения в квантовой криптографии предъявляется требование — малая плотность (менее $1 \cdot 10^{10}$ см⁻²) [6]. В работах [7, 8] показано, что в гетероструктурах, полученных методом молекулярно-пучковой эпитаксии, при замещении в процессе роста фосфора в тонком слое InGaP на мышьяк происходит формирование низкоплотных КТ, которые перспективны для источников одиночных фотонов [9]. Основываясь на результатах трансмиссионной электронной микроскопии, оценочная плотность КТ составила 1,3·10¹⁰ см⁻², пик фотолюминесценции лежал в спектральном диапазоне 952-978 нм при комнатной температуре. Спектральная ширина пика фотолюминесценции, связанного с КТ, обусловлена изменениями толщины слоя InGaP, температуры подложки и времени воздействия в потоке мышьяка во время эпитаксиального роста [7, 8] и не превышала 75 мэВ для комнатной температуры. В настоящей работе представлены подробные исследования оптических свойств гетероструктур с InGaPAs КТ. Показано исследование методом спектроскопии фотолюминесценции излучательных параметров КТ InGaPAs в диапазоне температур от -196 до -27 °C. Выполнен анализ рекомбинационных процессов в исследуемых гетероструктурах. Изучено влияние быстрого термического отжига гетероструктур на их оптические и структурные свойства.

Материалы и методы исследования

Получение образцов. Серия из трех гетероструктур (С1, С2, С3) получена на полуизолирующих подложках GaAs методом молекулярно-пучковой эпитаксии с использованием промышленной установки Riber 49.

Структуры состоят из буферного слоя GaAs толщиной 100 нм, обкладки GaAs — 200 нм, ограниченной со стороны подложки и поверхности барьерами AlGaAs толщинами по 100 нм. Верхний барьер прикрыт слоем GaAs толщиной 5 нм для предотвращения процесса окисления. В центр обкладки помещен решеточно-согласованный с подложкой слой InGaP. Все структуры выращены при температуре 580 °С. КТ в гетероструктуре сформированы путем замещения атомов фосфора на атомы мышьяка в исходном слое InGaP. Для этого после осаждения слоя InGaP в потоке фосфора происходила остановка роста и замена потока фосфора на поток мышьяка в течение 30 с. Затем выполнена выдержка ростовой поверхности исключительно в потоке мышьяка в течение 5-10 мин, во время которой происходило замещение атомов элементов пятой группы с последующим формированием КТ InGaPAs за счет релаксации растущего напряжения в преобразуемом слое InGaPAs. Выдержка слоя InGaP в потоке мышьяка проведена при температуре 520-535 °С. После этого слой InGaPAs заращивался прикрышкой GaAs толщиной 5 нм, и происходили остановка роста и подъем температуры подложки до 580 °С в течение 3 мин.

Полученные гетероструктуры имеют отличия друг от друга следующими параметрами: температурой подложки во время роста, толщиной изначального слоя InGaP и временем выдержки гетероструктуры в потоке мышьяка. Время выдержки определено суммой замены атомов элементов пятой группы (0,5 мин) и выдержкой гетероструктуры непосредственно в потоке мышьяка. Значения данных параметров для всех полученных образцов гетероструктур представлены в таблице.

Методы и аппаратура исследования. Проведены исследования эффективности фотолюминесценции в диапазоне температур от –196 до –27 °С. Для низкотемпературных измерений образцы размещены в криостате Janis ST-500, обеспечивающем прецизионный контроль температуры. Возбуждение фотолюминесценции произведено YLF:Nd⁺³ лазером с длиной волны 527 нм. Фокусировка лазера на образец выполнена с помощью линзы 5х Mitutoyo Plan Apo NIR. Спектр фотолюминесценции собран системой фокусирующих линз и детек-

Таблица. Параметры роста гетероструктур *Table*. Heterostructures growth parameters

Гетероструктура	Толщина слоя InGaP, нм	Время выдержки, мин	Температура подложки во время выдержки, °С
C1	2,0	5	520
C2	2,0	5 (0,5 + 4,5)	535
C3	3,0	10 (0,5 + 9,5)	535

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2022, том 22, № 5 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no 5

тирующей системой, которая, в свою очередь, включала монохроматор Sol instruments MS5204i и кремниевый фотодетектор, расположенный на выходе монохроматора. После этого образцы были подвергнуты быстрому термическому отжигу при температурах 600 и 650 °C для исследования влияния отжига на оптические свойства InGaPAs KT.

Результаты и обсуждение

Спектры фотолюминесценции гетероструктур С1– С3 продемонстрировали схожее поведение при различных температурах. На рис. 1 представлены спектры фотолюминесценции гетероструктур при различных температурах и постоянной мощности оптической накачки равной 4,19 мВт.

Для анализа зависимости интегральной интенсивности (мощности) излучения от уровня возбуждения предположим, что полная скорость излучательной рекомбинации в активной области выражается [10, 11]:

$$P = VBn^2, \tag{1}$$

где *V* — объем активной области; *B* — коэффициент излучательной рекомбинации; *n* — концентрация но-сителей зарядов.

Коэффициент *B* не зависит от концентрации носителей зарядов ниже порога инверсии заселенности [12]. Предположим, что имеются три принципиальных канала рекомбинации: излучательная; безызлучательная, линейно зависящая от концентрации носителей зарядов; Оже-рекомбинация. Тогда для полной скорости безызлучательной рекомбинации используем выражение:

$$K = V \left(\frac{n}{\tau_{nr}} + C n^3 \right), \tag{2}$$

где C — эффективный коэффициент Оже-рекомбинации; τ_{nr} — время безызлучательной рекомбинации Шоккли–Рида.

Примем, что рекомбинация вне активной области пренебрежимо мала, тогда для полного рекомбинационного тока запишем:

$$l = e(P + K), \tag{3}$$

где е — заряд электрона.

Использование линейного детектора мощности и неизменность условий измерений во время эксперимента позволяет относительно легко измерить фиксированную долю излучаемой интенсивности. Основываясь на данном утверждении, интенсивность получим в виде:

$$P_{ext} = RP, \tag{4}$$

где P_{ext} — выходная интегральная интенсивности (измеренная мощность); R — коэффициент пропорциональности между измеренной и излучаемой интенсивностями; P — полная выходная мощность (интегральная интенсивность).

Используя выражения (1)–(4), получим выражение для обратной эффективности спонтанной излучательной рекомбинации:

$$\frac{I}{P_{ext}} = \frac{e}{R} + \left(\frac{e^2 V}{R}\right)^{1/2} \left(\frac{1}{\tau_{nr}^2 B}\right) \left(\frac{1}{P_{ext}}\right)^{1/2} + \left(\frac{e^2}{R^3 V}\right)^{1/2} \left(\frac{C}{B^{3/2}}\right) (P_{ext})^{1/2}.$$
(5)

Таким образом, измерение зависимости выходной интегральной интенсивности спонтанного излучения от уровня возбуждения и последующая аппроксимация измеренной зависимости кривой вида (5) позволяют получить информацию о процессах безызлучательной рекомбинации в гетероструктурах C1–C3. На рис. 2 представлены зависимости обратной эффективности спонтанной рекомбинации от корня из выходной интегральной интенсивности для температур 27 °C и –73 °C. Аппроксимация экспериментальных данных кривой



Puc. 1. Спектры фотолюминесценции гетероструктур C1–C3, полученные при температурах: –196 °С (*a*) и –73 °С (*b*) *Fig. 1.* PL spectra of C1–C3 heterostructures measured at temperatures –196 °С (*a*) and –73 °С (*b*)



Рис. 2. Зависимость обратной эффективности спонтанной рекомбинации от корня из оптической мощности в гетероструктурах при температурах: –196 °С (*a*) и –73 °С (*b*)

Fig. 2. Inverse of the spontaneous recombination efficiency versus the square root of the optical power for heterostructures at -196 °C (*a*) and -73 °C (*b*)

вида A + B/x + Cx позволяет вычислить коэффициенты при $(P_{ext})^{1/2}$ и $(P_{ext})^{-1/2}$.

Отметим, что предлагаемая аналитическая модель подразумевает, что все процессы рекомбинации протекают в активной области (КТ), поэтому возможно применить ее только для температур -196 °C и -73 °C из-за довольно высокой интенсивности фотолюминесценции от матрицы GaAs при температуре 27 °C [13, 14]. Основываясь на результатах (рис. 2), видно, что зависимость обратной эффективности спонтанной рекомбинации от корня из оптической мощности при температуре -73 °C хорошо описывается формулой (5), в то время как для температуры -196 °С начальный участок зависимости, который описывает безызлучательную рекомбинацию Шоккли-Рида (т_{пг}), отсутствует. Для температуры –196 °С (рис. 2, а) аппроксимирующая кривая имеет форму близкую к прямой, что говорит о несущественном вкладе безызлучательной рекомбинации Шоккли-Рида при значениях мощности накачки от 0,6 мВт до 37,5 мВт для всех исследованных гетероструктур. В то же время стоит отметить, что при -73 °С диапазона мощности накачки не хватает, чтобы процессы Оже-рекомбинации возобладали над безызлучательной рекомбинацией Шоккли-Рида и линейные участки зависимости (5) стали бы явно выражены [15].

Потенциально кратковременный быстрый термический отжиг позволяет уменьшить количество точечных дефектов в структуре и тем самым уменьшить вклад безызлучательной рекомбинации [16]. Все исследованные гетероструктуры были подвергнуты дополнительному кратковременному термическому отжигу при температурах 600 и 650 °C в течение 2 мин. Построены зависимости относительного изменения интенсивности (отношение интенсивностей фотолюминесценции после (I_{Ann}) и до (I_0) отжига), и сдвига пика фотолюминесценции и температуры отжига (рис. 3). Отжиг при

температуре 600 °C привел к коротковолновому сдвигу пика фотолюминесценции InGaPAs KT, а также значительному увеличению интенсивности линии InGaAsP KT — в три раза для всех гетероструктур.

Для всех гетероструктур после отжига наблюдается уменьшение полуширины линии фотолюминесценции, что говорит о формировании более однородного массива КТ [16]. На рис. 4 представлены спектры фотолюминесценции структуры С2, полученные при комнатной температуре, а также до и после отжига при температурах 600 и 650 °C. Значение полуширины линии фотолюминесценции при комнатной темпера-





Fig. 3. Relative shifts of the PL peak wavelength (curves *1*) and relative changes in the PL intensity of InGaPAs islands (curves *2*)





Fig. 4. PL spectra of C2 heterostructure at room temperature before and after thermal annealing at 600 °C and 650 °C

туре после отжига при 600 °С уменьшилось на 9 мэВ. Увеличение температуры отжига до 650 °С привело к исчезновению линии излучения InGaPAs/GaAs KT, что может служить признаком разложения/растворения материала КТ. Основываясь на вышеизложенных данных, можно предположить, что использование метода термического отжига с оптимальными температурными режимами позволит улучшить структурное совершенство низкоплотных КТ для их применения в качестве микроизлучателей в генераторах одиночных фотонов, за счет повышения однородности длины волны излучения.

Литература

- Michler P., Kiraz A., Becher C., Schoenfeld W.V., Petroff P.M., Zhang L., Huand E., Imamoglu A. A quantum dot single-photon turnstile device // Science. 2000. V. 290. N 5500. P. 2282–2285. https://doi.org/10.1126/science.290.5500.2282
- Ward M.B., Karimov O.Z., Unitt D.C., Yuan Z.L., See P., Gevaux D.G., Shields A.J. On-demand single-photon source for 1.3 μm telecom fiber // Applied Physics Letters. 2005. V. 86. N 20. P. 201111. https://doi.org/10.1063/1.1922573
- Zinoni C., Alloing B., Monat C., Zwiller V., Li L.H., Fiorec A., Lunghi L., Gerardino A., de Riedmatten H., Zbinden H., Gisin N. Time-resolved and antibunching experiments on single quantum dots at 1300 nm // Applied Physics Letters. 2006. V. 88. N 13. P. 131102. https://doi.org/10.1063/1.2190466
- Kok P., Munro W.J., Nemoto K., Ralph T.C., Dowling J.P., Milburn G.J. Linear optical quantum computing with photonic qubits // Reviews of Modern Physics. 2007. V. 79. N 1. P. 135–174. https:// doi.org/10.1103/RevModPhys.79.135
- Aspuru-Guzik A., Walther P. Photonic quantum simulators // Nature Physics. 2012. V. 8. N 4. P. 285–291. https://doi.org/10.1038/ nphys2253
- Ustinov V.M., Maleev N.A., Zhukov A.E., Kovsh A.R., Egorov A.Yu., Lunev A.V., Volovik B.V., Krestnikov I.L., Musikhin Yu.G., Bert N.A., Kop'ev P.S., Alferov Zh.I., Ledentsov N.N., Bimberg D. InAs/InGaAs quantum dot structures on GaAs substrates emitting at 1.3 μm // Applied Physics Letters. 1999. V. 74. N 19. P. 2815–2817. https://doi.org/10.1063/1.124023
- Li Y., Lu H.M. Electron transition energy for vertically coupled InAs/ GaAs semiconductor quantum dots and rings // Japanese Journal of

Заключение

В работе изучены оптические свойства гетероструктур квантовых точек InGaPAs, полученных методом молекулярно-пучковой эпитаксии при замещении фосфора на мышьяк в тонком слое InGaP с использованием подложек GaAs. Показано, что спектры фотолюминесценции всех гетероструктур демонстрируют схожее поведение при различных температурах. Согласно спектрам фотолюминесценции квантовые точки InGaPAs, независимо от режима формирования, излучают в диапазоне длин волн 950-980 нм при температурах в диапазоне от -196 до -27 °C. Для температуры -196 °C аппроксимирующая кривая имеет форму близкую к прямой, что говорит о несущественном вкладе безызлучательной рекомбинации Шоккли-Рида в диапазоне мощности накачки 0,6-37,5 мВт для всех исследованных гетероструктур. При температуре -73 °С диапазона мощности накачки не хватает чтобы процессы Оже-рекомбинации возобладали над безызлучательной рекомбинацией Шоккли-Рида.

Отмечено, что кратковременный отжиг помогает уменьшить количество точечных дефектов и приводит к значительному увеличению интенсивности линии фотолюминесценции InGaAsP квантовых точек. Отжиг при температуре 600 °C привел к коротковолновому сдвигу пика фотолюминесценции InGaPAs KT, а также значительному увеличению интенсивности фотолюминесценции линии квантовых точек InGaAsP в три раза для всех гетероструктур. Использование метода термического отжига с оптимальными температурными режимами имеет потенциал практического применения для улучшения структурного совершенства и повышения однородности фотолюминесценции низкоплотных InGaAsP квантовых точек.

References

- Michler P., Kiraz A., Becher C., Schoenfeld W.V., Petroff P.M., Zhang L., Huand E., Imamoglu A. A quantum dot single-photon turnstile device. *Science*, 2000, vol. 290, no. 5500, pp. 2282–2285. https://doi.org/10.1126/science.290.5500.2282
- 2. Ward M.B., Karimov O.Z., Unitt D.C., Yuan Z.L., See P., Gevaux D.G., Shields A.J. On-demand single-photon source for 1.3 µm telecom fiber. *Applied Physics Letters*, 2005, vol. 86, no. 20, pp. 201111. https://doi.org/10.1063/1.1922573
- Zinoni C., Alloing B., Monat C., Zwiller V., Li L.H., Fiorec A., Lunghi L., Gerardino A., de Riedmatten H., Zbinden H., Gisin N. Time-resolved and antibunching experiments on single quantum dots at 1300 nm. *Applied Physics Letters*, 2006, vol. 88, no. 13, pp. 131102. https://doi.org/10.1063/1.2190466
- Kok P., Munro W.J., Nemoto K., Ralph T.C., Dowling J.P., Milburn G.J. Linear optical quantum computing with photonic qubits. *Reviews of Modern Physics*, 2007, vol. 79, no. 1, pp. 135–174. https:// doi.org/10.1103/RevModPhys.79.135
- Aspuru-Guzik A., Walther P. Photonic quantum simulators. *Nature Physics*, 2012, vol. 8, no. 4, pp. 285–291. https://doi.org/10.1038/ nphys2253
- Ustinov V.M., Maleev N.A., Zhukov A.E., Kovsh A.R., Egorov A.Yu., Lunev A.V., Volovik B.V., Krestnikov I.L., Musikhin Yu.G., Bert N.A., Kop'ev P.S., Alferov Zh.I., Ledentsov N.N., Bimberg D. InAs/InGaAs quantum dot structures on GaAs substrates emitting at 1.3 µm. *Applied Physics Letters*, 1999, vol. 74, no. 19, pp. 2815–2817. https://doi.org/10.1063/1.124023
- Li Y., Lu H.M. Electron transition energy for vertically coupled InAs/ GaAs semiconductor quantum dots and rings. *Japanese Journal of*

Applied Physics, Part 1: Regular Papers and Short Notes and Review Papers. 2004. V. 43. N 4S. P. 2104–2109. https://doi.org/10.1143/JJAP.43.2104

- Kovsh A.R., Zhukov A.E., Livshits D.A., Egorov A.Yu., Ustinov V.M., Maximov M.V., Musikhin Yu.G., Ledentsov N.N., Kop'ev P.S., Alferov Zh.I., Bimberg D. 3.5 W CW operation of quantum dot laser // Electronics Letters. 1999. V. 35. N 14. P. 1161– 1163. https://doi.org/10.1049/el:19990813
- 9. Андрюшкин В.В., Новиков И.И., Гладышев А.А., Карачинский Л.Я., Егоров А.Ю., Бугров В.Е. Полупроводниковая гетероструктура с пониженной поверхностной плотностью квантовых точек. Патент на полезную модель RU209708. Бюл. 2022. № 8.
- Shkolnik A.S., Karachinsky L.Ya., Gordeev N.Yu., Zegrya G.G., Evtikhiev V.P., Pellegrinia S., Buller G.S. Observation of the biexponential ground-state decay time behavior in InAs selfassembled quantum dots grown on misoriented substrates // Applied Physics Letters. 2005. V. 86. N 21. P. 211112. https://doi. org/10.1063/1.1938000
- Huang D., Huang P., Lin D., Wang C., Zeng G. High-speed continuous-variable quantum key distribution without sending a local oscillator // Optics Letters. 2015. V. 40. N 16. P. 3695–3698. https:// doi.org/10.1364/OL.40.003695
- Michler P. Single Semiconductor Quantum Dots. Berlin: Springer, 2009. 390 p.
- Andryushkin V.V., Gladyshev A.G., Babichev A.V., Kolodeznyi E.S., Novikov I.I., Karachinsky L.Ya., Nevedomskii V.N., Egorov A.Yu. Investigation of optical and structural properties of three-dimensional InGaPAs islands formed by substitution of elements of the fifth group // Journal of Physics: Conference Series. 2020. V. 1697. N 1. P. 012106. https://doi.org/10.1088/1742-6596/1697/1/012106
- Gladyshev A.G., Babichev A.V., Andryushkin V.V., Denisov D.V., Nevedomskii V.N., Kolodeznyi E.S., Novikov I.I., Karachinsky L.Ya., Egorov A.Yu. Studying the optical and structural properties of three-dimensional InGaP (As) islands formed by substitution of elements of the fifth group // Technical Physics. 2020.
 V. 65. N 12. P. 2047–2050. https://doi.org/10.1134/ S1063784220120099
- Novikov I.I., Gordeev N.Yu., Maksimov M.V., Shernyakov Yu.M., Semenova E.S., Vasil'ev A.P., Zhukov A.E., Ustinov V.M., Zegrya G.G. Temperature dependence of the effective coefficient of Auger recombination in 1.3 μm InAs/GaAs QD lasers // Semiconductors. 2005. V. 39. N 4. P. 481–484. https://doi. org/10.1134/1.1900267
- 16. Чжень Ч., Бедарев Д.А., Воловик Б.В., Леденцов Н.Н., Лунев А.В., Максимов М.В., Цацульников А.Ф., Егоров А.Ю., Жуков А.Е., Ковш А.Р., Устинов В.М., Копьев П.С. Исследование влияния состава и условий отжига на оптические свойства квантовых точек (In, Ga) As в матрице (Al, Ga) As // Физика и техника полупроводников. 1999. Т. 33. №. 1. С. 91–96.

Авторы

Андрюшкин Владислав Васильевич — младший научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, 57209329441, https://orcid.org/0000-0002-7471-8627, vvandriushkin@itmo.ru

Драгунова Анна Сергеевна — младший научный сотрудник, Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Санкт-Петербург 190008, Российская Федерация, 57205562331, https://orcid.org/0000-0002-0181-0262, adragunova@ hse.ru

Комаров Сергей Дмитриевич — лаборант, Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Санкт-Петербург 190008, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0002-7025-3527, skomarov@hse.ru

Надточий Алексей Михайлович — кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Санкт-Петербург 190008, Российская Федерация, со 26642604500, https://orcid.org/0000-0003-0982-907X, anadtochiy@hse.ru

Гладышев Андрей Геннадьевич — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, 55 6701588481, https:// orcid.org/0000-0002-9448-2471, andrey.gladyshev@connector-optics.com Applied Physics, Part 1: Regular Papers and Short Notes and Review Papers, 2004, vol. 43, no. 48, pp. 2104–2109. https://doi.org/10.1143/JJAP.43.2104

- Kovsh A.R., Zhukov A.E., Livshits D.A., Egorov A.Yu., Ustinov V.M., Maximov M.V., Musikhin Yu.G., Ledentsov N.N., Kop'ev P.S., Alferov Zh.I., Bimberg D. 3.5 W CW operation of quantum dot laser. *Electronics Letters*, 1999, vol. 35, no. 14, pp. 1161–1163. https://doi.org/10.1049/el:19990813
- Andriushkin V.V., Novikov I.I., Gladyshev A.A., Karachinskii L.Ia., Egorov A.Iu., Bugrov V.E. Semiconductor heterostructure with reduced quantum dots surface density. *Patent RU209708*. 2022. (in Russian)
- Shkolnik A.S., Karachinsky L.Ya., Gordeev N.Yu., Zegrya G.G., Evtikhiev V.P., Pellegrinia S., Buller G.S. Observation of the biexponential ground-state decay time behavior in InAs selfassembled quantum dots grown on misoriented substrates. *Applied Physics Letters*, 2005, vol. 86, no. 21, pp. 211112. https://doi. org/10.1063/1.1938000
- Huang D., Huang P., Lin D., Wang C., Zeng G. High-speed continuous-variable quantum key distribution without sending a local oscillator. *Optics Letters*, 2015, vol. 40, no. 16, pp. 3695–3698. https://doi.org/10.1364/OL.40.003695
- 12. Michler P. Single Semiconductor Quantum Dots. Berlin, Springer, 2009, 390 p.
- Andryushkin V.V., Gladyshev A.G., Babichev A.V., Kolodeznyi E.S., Novikov I.I., Karachinsky L.Ya., Nevedomskii V.N., Egorov A.Yu. Investigation of optical and structural properties of three-dimensional InGaPAs islands formed by substitution of elements of the fifth group. *Journal of Physics: Conference Series*, 2020, vol. 1697, no. 1, pp. 012106. https://doi.org/10.1088/1742-6596/1697/1/012106
- Gladyshev A.G., Babichev A.V., Andryushkin V.V., Denisov D.V., Nevedomskii V.N., Kolodeznyi E.S., Novikov I.I., Karachinsky L. Ya., Egorov A.Yu. Studying the optical and structural properties of three-dimensional InGaP (As) islands formed by substitution of elements of the fifth group. *Technical Physics*, 2020, vol. 65, no. 12, pp. 2047–2050. https://doi.org/10.1134/S1063784220120099
- Novikov I.I., Gordeev N.Yu., Maksimov M.V., Shernyakov Yu.M., Semenova E.S., Vasil'ev A.P., Zhukov A.E., Ustinov V.M., Zegrya G.G. Temperature dependence of the effective coefficient of Auger recombination in 1.3 μm InAs/GaAs QD lasers. Semiconductors, 2005, vol. 39, no. 4, pp. 481–484. https://doi. org/10.1134/1.1900267
- Zhen Z., Bedarev D.A., Volovik B.V., Ledentsov N.N., Lunev A.V., Maksimov M.V., Tsatsul'nikov A.F., Egorov A.Yu., Zhukov A.E., Kovsh A.R., Ustinov V.M., Kop'ev P.S. Influence of composition and anneal conditions on the optical properties of (In, Ga)As quantum dots in an (Al, Ga)As matrix. *Semiconductors*, 1999, vol. 33, no. 1, pp. 80–84. https://doi.org/10.1134/1.1187651

Authors

Vladislav V. Andryushkin — Junior Researcher, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, 🐨 57209329441, https://orcid. org/0000-0002-7471-8627, vvandriushkin@itmo.ru

Anna S. Dragunova — Junior Researcher, HSE University, Saint Petersburg, 190008, Russian Federation, S 57205562331, https://orcid. org/0000-0002-0181-0262, adragunova@hse.ru

Sergey D. Komarov — Laboratory Assistant, HSE University, Saint Petersburg, 190008, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0002-7025-3527, skomarov@hse.ru

Alexey M. Nadtochiy — PhD (Physics & Mathematics), Leading Researcher, HSE University, Saint Petersburg, 190008, Russian Federation, S 26642604500, https://orcid.org/0000-0003-0982-907X, anadtochiy@hse.ru

Andrey G. Gladyshev — PhD (Physics & Mathematics), Senior Researcher, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, 6701588481, https://orcid.org/0000-0002-9448-2471, andrey.gladyshev@connector-optics.com Бабичев Андрей Владимирович — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, So 56819964000, https:// orcid.org/0000-0002-3463-4744, andrey.babichev@connector-optics.com Уваров Александр Вячеславович — младший научный сотрудник, Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет имени Ж.И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, 194021, Российская Федерация; младший научный сотрудник, СПБГЭТУ «ЛЭТИ», Санкт-Петербург, 197376, Российская Федерация So 57196281767, https://orcid.org/0000-0002-0061-6687, lumenlight@mail.ru

Новиков Иннокентий Игоревич — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, от 7202658480, https:// orcid.org/0000-0003-1983-0242, innokenty.novikov@itmo.ru

Колодезный Евгений Сергеевич — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, sc 56520395600, https:// orcid.org/0000-0002-3056-8663, evgenii_kolodeznyi@itmo.ru

Карачинский Леонид Яковлевич — доктор технических наук, ведущий научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, 🐨 6603558355, https://orcid.org/0000-0002-5634-8183, leonid.karachinsky@connector-optics.com

Крыжановская Наталья Владимировна — доктор физико-математических наук, профессор, Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Санкт-Петербург 190008, Российская Федерация, с 6701651691, https://orcid.org/0000-0002-4945-9803, nataliakryzh@gmail.com

Неведомский Владимир Николаевич — старший научный сотрудник, Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, 194021, Российская Федерация, Sc 26536321700, https:// orcid.org/0000-0002-7661-9155, nevedom@mail.ioffe.ru

Егоров Антон Юрьевич — доктор физико-математических наук, технический директор, ООО «Коннектор Оптикс», Санкт-Петербург, 194292, Российская Федерация, SC 7202362169, https://orcid.org/0000-0002-0789-4241, anton.egorov@connector-optics.com

Бугров Владислав Евгеньевич — доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, с 8321276100, https:// orcid.org/0000-0002-5380-645X, vladislav.bougrov@niuitmo.ru

Статья поступила в редакцию 29.07.2022 Одобрена после рецензирования 22.08.2022 Принята к печати 28.09.2022 Andrey V. Babichev — PhD (Physics & Mathematics), Senior Researcher, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, S 56819964000, https://orcid.org/0000-0002-3463-4744, andrey.babichev@connector-optics.com

Alexander V. Uvarov — Junior Researcher, National Research Academic Alferov University of the Russian Academy of Sciences; Junior Researcher, ETU "LETI", Saint Petersburg, 197376, Russian Federation, Saint Petersburg, 194021, Russian Federation; S 57196281767, https:// orcid.org/0000-0002-0061-6687, lumenlight@mail.ru

Innokenty I. Novikov — PhD (Physics & Mathematics), Senior Researcher, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, @ 7202658480, https://orcid.org/0000-0003-1983-0242, innokenty.novikov@itmo.ru

Evgenii S. Kolodeznyi — PhD (Physics & Mathematics), Senior Researcher, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, <u>56520395600</u>, https://orcid.org/0000-0002-3056-8663, evgenii kolodeznyi@itmo.ru

Leonid Ya. Karachinsky — D. Sc., Leading Researcher, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, <u>sc</u> 6603558355, https://orcid.org/0000-0002-5634-8183, leonid.karachinsky@connector-optics.com

Natalia V. Kryzhanovskaya — D. Sc. (Physics & Mathematics), Professor, HSE University, Saint Petersburg, 190008, Russian Federation, 6701651691, https://orcid.org/0000-0002-4945-9803, nataliakryzh@ gmail.com

Vladimir N. Nevedomskii — Senior Researcher, Ioffe Physical-Technical Institute of the Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, 194021, Russian Federation, Sci 26536321700, https://orcid.org/0000-0002-7661-9155, nevedom@mail.ioffe.ru

Anton Yu. Egorov — D. Sc. (Physics & Mathematics), Technical Director, Connector Optics LLC, Saint Petersburg, 194292, Russian Federation, Sci 7202362169, https://orcid.org/0000-0002-0789-4241, anton. egorov@connector-optics.com

Vladislav E. Bougrov — D. Sc. (Physics & Mathematics), Chief Researcher, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, @ 8321276100, https://orcid.org/0000-0002-5380-645X, vladislav.bougrov@niuitmo.ru

Received 29.07.2022 Approved after reviewing 22.08.2022 Accepted 28.09.2022



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» νίτμο

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКІ

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-929-940 УДК 67.05

Контроль динамики экструзии при трехмерной печати изделий Ксения Владимировна Зименко^{1⊠}, Максим Яковлевич Афанасьев², Михаил Владимирович Колесников³

1,2,3 Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

¹ zksenia@yahoo.com^{\Box}, https://orcid.org/0000-0002-3792-136X

² amax@niuitmo.ru, https://orcid.org/0000-0003-4061-1407

³ kmv@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0003-1559-1766

Аннотация

Предмет исследования. Рассмотрен один из эффектов, возникающих при печати по технологии экструзии материала или послойного наплавления, который называется нежелательной динамикой экструзии. Этот эффект проявляется при больших ускорениях печатающей головки и приводит к наплавлению в углах деталей и неровностям печатного слоя. Чтобы минимизировать этот эффект, в современных системах управления применяются алгоритмы контроля динамики Advance. Однако такие недостатки как инертность, необходимость экспериментального определения степени компенсации, а также неопределенность влияния материала, геометрии сопла и параметров процесса печати на работу алгоритма не позволяют использовать данную группу решений в промышленных масштабах. Методы. Представлено исследование влияния следующих характеристик печати: типов материала и экструдера; температуры материала; геометрии слоя и сопла на проявление динамики экструзии путем проведения серии экспериментов. Тесты выполнены на трехмерном принтере Creality Ender 3. Полученные экспериментальные данные позволят расширить понимание влияния динамики экструзии при FDM-печати, а также найдут применение для модификации существующих алгоритмов управления динамикой. Представлена модификация алгоритма Advance на основе машинного обучения. Предложено внедрить алгоритм, содержащий две обученные модели нейронной сети. Одна модель предсказывает изменения направления движения печатающей головки для минимизации остаточных дефектов и повышения средней скорости печати. Вторая модель прогнозирует параметр компенсации для конкретных условий печати без необходимости ручной калибровки. Основные результаты. Предложена нейронная сеть, позволяющая определять параметр компенсации в зависимости от типа материала, толщины слоя, геометрии сопла и температуры печати. Обучение нейронной сети выполнено на основе экспериментальных данных. Разработанный алгоритм внедрен в алгоритм Linear Advance системы управления Marlin и протестирован на установке Creality Ender 3. Эксперименты показали, что разработанная модель способна успешно прогнозировать требуемую величину компенсации и может быть применена во время процесса печати. Практическая значимость. Предложенная модификация алгоритма Advance поможет облегчить и автоматизировать процесс компенсации динамики экструзии, что расширит возможности применения трехмерных принтеров в промышленных условиях. Полученный алгоритм может повысить точность и скорость печати, что впоследствии повысит экономическую независимость и конкурентоспособность малых проектных организаций и предприятий России, применяющих трехмерные принтеры. Полученные результаты работы расширят возможности быстрого прототипирования и обеспечат ускорение создания опытных партий.

Ключевые слова

динамика экструзии, трехмерная печать, аддитивное производство, advance, экструдер, Linear advance, Marlin, fused deposition modelling, fused filament fabrication

Благодарности

Работа выполнена в рамках НИР № 620164 «Методы искусственного интеллекта для киберфизических систем».

Ссылка для цитирования: Зименко К.В., Афанасьев М.Я., Колесников М.В. Контроль динамики экструзии при трехмерной печати изделий // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 929–940. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-929-940

[©] Зименко К.В., Афанасьев М.Я., Колесников М.В., 2022

Pressure control in material extrusion additive manufacturing

Ksenia V. Zimenko¹, Mikhail Ya. Afanasev², Maxim V. Kolesnikov³

1,2,3 ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

¹ zksenia@yahoo.com[⊠], https://orcid.org/0000-0002-3792-136X

² amax@niuitmo.ru, https://orcid.org/0000-0003-4061-1407

³ kmv@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0003-1559-1766

Abstract

This paper discusses the effect called undesirable extrusion dynamics that occur during material extrusion printing or fused deposition modeling. This effect is revealed during high acceleration and deceleration of printing head and results in over-extrusion on corners of parts and printed layer unevenness. To minimize this effect, modern control systems use Advance algorithms for dynamics control. However, such disadvantages as inertia, reduced printing speed, need for manual calibration, as well as uncertainty of the influence of material, nozzle geometry, and printing process parameters on the algorithm performance do not allow this group of solutions to be applied on an industrial scale. The paper presents a study of the influence of printing characteristics, such as material type, extruder type, printing temperature, layer and nozzle geometry, on extrusion dynamics through a series of experiments. The experiments were carried out on a Creality Ender 3 printer. The obtained experimental data will allow us to deepen the understanding of extrusion dynamics influence in FDM printing; they are also used in the present study to modify existing dynamics control algorithms. The paper proposes a modification of Advance algorithm based on machine learning. It is proposed to implement an algorithm containing two trained neural network models. One model predicts changes in printing head motion to minimize residual defects and increase average print speed. The second model predicts the compensation parameter for specific printing conditions without the need for manual calibration. A neural network model was trained to determine the compensation parameter depending on the type of material, layer thickness, nozzle geometry and printing temperature. The model was trained based on experimental data. The developed algorithm was introduced into Linear Advance algorithm of the Marlin firmware and tested on Creality Ender 3. The experiments showed that the developed model can successfully predict the required compensation and can be applied during the printing process. The proposed algorithm helps to facilitate and automate the process of extrusion dynamics compensation which will expand the possibilities of FDM printers' application in industrial conditions. The obtained algorithm can improve the accuracy and printing speed which will subsequently help to increase the economic independence and competitiveness of small design organizations and enterprises in Russia that use 3D printers. This research expands the possibilities of rapid prototyping and may help to ensure the rapid creation of pilot batches.

Keywords

3D printing, additive manufacturing, advance, extrusion dynamics, pressure control, extruder, fused deposition modelling, fused filament fabrication

Aknowledgements

The work was carried out under the project no. 620164 "Artificial intelligence methods for cyber-physical systems" conducted at the Faculty of Control Systems and Robotics, ITMO University.

For citation: Zimenko K.V., Afanasev M.Ya., Kolesnikov M.V. Pressure control in material extrusion additive manufacturing. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 929–940 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-929-940

Введение

Одна из наиболее распространенных технологий аддитивного производства — трехмерная печать по методу экструзии материала или послойного наплавления (FDM, fused deposition modeling), также известная как изготовление способом наплавления нитей (FFF, fused filament fabrication). Первый термин был введен изобретателем технологии и соучредителем компании Stratasys Скоттом Крампом¹. После истечения срока действия патента на технологию в 2009 году сторонние компании получили возможность разрабатывать принтеры на основе этого метода, а для обхода юридических ограничений применяется термин FFF.

Технология FDM предполагает формирование трехмерных объектов путем последовательного наплавления слоев материала по контурам заданной цифровой модели. В качестве печатного материала используются термопласты в форме непрерывных нитей. Нить подается в экструдер, устройство с механическим приводом, которое направляет ее к нагревательному элементу. Он расплавляет материал, который затем выводится через сопло на подложку или предыдущие слои.

Один из эффектов, приводящих к дефектам печати, - нежелательная динамика экструзии, вызванная запаздыванием изменения давления материала в сопле по сравнению с изменением скорости печатающей головки экструдера [1]. Эффект проявляется при резком разгоне и торможении печатающей головки и продемонстрирован на рис. 1. При резком разгоне (участок 2) давление в сопле не успевает увеличиться так же быстро, как скорость перемещения рабочего органа, и на слое образуется утяжина, которая постепенно устраняется при новой устоявшейся скорости (участок 3). Аналогичным образом при торможении давление еще какое-то время остается высоким и образуется наплыв материала (участки 4-5). Чаще всего на печати данный эффект проявляется в виде наплывов в углах, где обычно требуется торможение, а также в виде недоэкструзии при переходе от печати внешних стенок к заполнению, где происходит стремительный разгон. Поскольку опи-

¹ [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://www. stratasys.com/en/about-us/history/ (дата обращения: 20.05.2022).



Рис. 1. Типичная картина дефектов слоя при ускорении/ торможении

Fig. 1. Typical pattern of layer defects during acceleration/ deceleration

санные дефекты существенно влияют на получаемые допуски и качество поверхности, полученные детали часто требуют постобработки для удаления лишнего материала. И если наплывы могут быть устранены дополнительной обработкой, то недоэкструзия относится к категории неисправимого брака.

Чтобы минимизировать данные дефекты, необходимы алгоритмы управления экструзией, способные регулировать темпы экструзии, в соответствии с изменяющейся скоростью печатающей головки, и этим поддерживать правильную геометрию слоя.

Постановка задачи

В настоящее время существует группа алгоритмов (именуемых Advance), которые используются в системах числового программного управления (ЧПУ) для минимизации негативного влияния динамики экструзии. В алгоритмах Advance перед торможением производится дополнительный ретракт (втягивание материала обратно в сопло), а перед ускорением — дополнительный вывод материала, что стабилизирует давление в сопле при изменении скорости. Расчет дополнительных ретрактов и выводов материала выполнен с помощью коррекции переменной объемного расхода пластика, применяемой в системах управления печатью, специальным параметром компенсации K_A .

Данные алгоритмы имеют ряд серьезных недостатков, не позволяющих использовать их в промышленных масштабах. Во-первых, требуемое значение параметра компенсации можно найти только экспериментально, а поскольку параметр зависит от большого количества параметров печати, его необходимо находить вручную для каждого конкретного случая, что занимает много времени. В целом отсутствие исследований в этой области приводит к неопределенности того, как на динамику экструзии влияют различные характеристики процесса (высота слоя, материал, температура и геометрия сопла) [1]. Во-вторых, эффективность алгоритма существенно снижается из-за задержки, которая возникает между первым появлением дефекта и его компенсацией, приводящей к остаточным дефектам и, как следствие, к снижению средней скорости печати.

Настоящая работа направлена на исследование влияния характеристик печати, таких как тип материала, температура, параметры слоя и сопла, на динамику экструзии, а также на модификацию алгоритмов Advance, которая позволит устранить существующие недостатки и улучшить качество и скорость FDM-печати.

Предложена модификация алгоритма Linear advance, применяемого в системе с ЧПУ Marlin, на основе машинного обучения¹. Внедрены две модели обученной нейронной сети. Первая модель предсказывает изменения направления движения печатающей головки, которые приводят к изменению скорости, для ускорения процесса компенсации. Это позволит уменьшить негативное влияние инерционности алгоритма и увеличить среднюю скорость печати. Вторая модель прогнозирует значение параметра компенсации при конкретных условиях печати, что позволяет избежать необходимости проведения экспериментов.

Результатом внедрения модели служит оптимизация алгоритмов, используемых в системах управления FDM-печатью.

Работа проведена в рамках научно-исследовательского проекта «Методы искусственного интеллекта для киберфизических систем». Трехмерный принтер является одним из ярких примеров киберфизической системы, включающей в себя интеллектуальные и физические составляющие.

Цель работы — внедрение интеллектуальной системы, направленной на улучшение физического процесса печати.

Выполнен анализ существующих исследований динамики экструзии, а также алгоритмов ее контроля. Описаны теоретические основы алгоритма и раскрыты его недостатки. Приведены результаты исследования влияния характеристик печати на динамику экструзии, а также обоснование выбора исследуемых параметров, плана экспериментов, применяемого оборудования и программного обеспечения. Приведено обоснование предложенной модификации алгоритма Linear advance, а также анализа полученного алгоритма на основе нейронной сети.

Обзор предметной области

Область аддитивного производства и, в частности FDM-печати, в настоящее время динамично развивается. Сообщество энтузиастов активно внедряет новые методики, прежде чем они будут исследованы и напечатаны в научных работах.

Одна из таких новых, широко используемых, но еще не описанных, технологий — группа алгоритмов Advance для компенсации дефектов, вызванных нежелательной динамикой экструзии, возникающей при разгоне/торможении печатающей головки. В связи с тем, что работа над этими алгоритмами ведется в основном открытыми сообществами, большинство источников,

¹ [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://marlinfw. org//docs/features/lin_advance.html (дата обращения: 05.05.2022).

использованных в данном разделе, не относятся к научным работам.

Данный метод контроля получен относительно недавно. Первый алгоритм с открытым исходным кодом, примененный для минимизации описанных дефектов, разработан Мэттом Робертсом (Matt Roberts) в 2019 году и получил название Advance¹. Позже он был реализован в системе управления Marlin. Алгоритм основан на утверждении, что главная причина неровностей слоя — сжатие нити внутри экструдера, а также падение давления в сопле из-за сил, вызванных ускорением материала. Однако позже Бернард Кубичек (Bernard Kubiceck) указал, что на потерю давления в сопле в большей степени влияют силы трения, а не силы, вызванные ускорением. На основе последней идеи разработчики представили новую версию алгоритма JKN-advance для программного обеспечения Sailfish². На базе тех же физических принципов Себастьян Попп (Sabastian Popp) разработал алгоритм для программного обеспечения Marlin. Он называется Linear advance и в настоящее время является наиболее часто используемой версией.

Раскрытие вопроса, связанного с динамикой экструзии в аддитивном производстве, в настоящее время сталкивается с нехваткой научных работ, связанных с FDM-печатью. В работе [2] применено оборудование Stratasys для разработки стратегии управления потоком материала. Отметим, что данная работа заключалась в разработке электронной схемы и основывалась на предположении, что теплопередача, а также характеристики, на которые влияют скорость и температура — основная причина динамики экструзии. Работа [1] содержит математические принципы алгоритма Advance и исследует зависимость между толщиной слоя и производительностью алгоритма.

В России также имеются работы, описывающие проблемы неравномерности экструзии, однако в них причиной эффекта рассматриваются колебания температуры. Например, в [3] приведена динамическая система контроля температуры экструдера, которая позволяет снизить колебания толщины слоя при печати. Однако эффекты недоэкструзии и переэкструзии с точки зрения изменения давления в сопле при изменении скорости печати не рассматриваются. Также имеются материалы от практиков-энтузиастов, которые распространяются через сообщества в социальных сетях и форумах³, но они сводятся к описанию эффекта и настройки алгоритма Advance⁴.

На сегодняшний день нет исследований или разработок в области управления динамикой экструзии, направленных на повышение эффективности алгорит-

³ [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://3dtoday.ru/ blogs/nayuch/get-rid-of-the-sag-on-the-corners-or-linear-advance (дата обращения: 01.06.2022).

⁴ [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://3dgram.ru/ nastrojka-linear-advance/?utm_referrer=https%3A%2F%2Fwww. google.com%2F (дата обращения: 01.06.2022). мов Advance. Кроме того, неопределенность влияния на динамику различных параметров процесса печати приводит к невозможности разработки системы аналитического расчета степени требуемой компенсации. В работе [1] упоминается необходимость получения автоматизированного способа расчета параметра K_A , а также важность дальнейшего исследования влияния параметров процесса (материала, температуры, геометрии слоя и сопла) на проявление дефектов и влияния динамики экструзии на геометрию изделия.

Алгоритм контроля динамики экструзии. Принцип работы и недостатки

Рассмотрим принцип работы метода контроля динамики экструзии на примере наиболее распространенного алгоритма Linear advance.

Данные деформации печатного слоя могут вызываться следующими явлениями: перепадом давления в расплавленном пластике внутри сопла, вызванный ускорением материала; отклонением положения колеса, направляющего материал, относительно сопла; деформацией нити между направляющими и соплом; отклонением трубки Боудена, направляющей нить; зависящей от нагрузки фазовой задержки в шаговом двигателе экструдера [2].

В работе [1] дано подробное описание математических основ алгоритма, для получения представления о принципах его работы дадим краткое описание его физического смысла и математическую формулировку.

Предположим, что система экструдер-нить-сопло квазистатическая, поэтому силы, возникающие между направляющей трубкой и нитью, равны силам, вызванным перепадом давления в сопле. Вклад силы трения, возникающей между направляющими и соплом, не учитывается, так как между нитью пластика и стенками направляющей трубки обычно имеется диаметральный зазор до 0,25 мм, при этом последняя, как правило, имеет покрытие с низким коэффициентом трения. В силы, возникающие в сопле, вносят вклад силы трения F_f и ускорение материала F_a .

Покажем, что силы, вызванные ускорением, являются преобладающими. Силу трения *F*_f получим, используя уравнение Хагена–Пуазейля, если принять течение материала в сопле ламинарным:

$$F_f = \Delta P_f A_{out} = \pi 8 \mu L v_{out}$$

где ΔP_f — падение давления в сопле, вызванное силой трения; A_{out} — поперечное сечение сопла; μ — вязкость материала; L — длина выходного отверстия сопла; v_{out} — выходная скорость экструзии.

Силы, вызванные ускорением материала F_a , найдем по закону Бернулли:

$$F_a = \Delta P_a A_{in} = \frac{\rho v_{out}^2 \left(1 - \frac{d_{out}^4}{d_{in}^4}\right)}{8},$$

где ΔP_a — падение давления в сопле; A_{in} — поперечное сечение нити; ρ — плотность материала; d_{out} — диаметр отверстия сопла; d_{in} — диаметр нити пластика.

¹ [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://reprap. org/wiki/Mattroberts'_Firmware (дата обращения: 15.05.2022).

² [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://web. archive.org/web/20210120142459/http://makerbot.wikidot.com/ jetty-firmware (дата обращения: 28.04.2022).

В ранней версии алгоритма предполагалось, что перепад давления по закону Бернулли является доминирующим. Однако было показано, что силы трения на четыре порядка выше, чем силы ускорения. Для иллюстрации данного утверждения рассчитаем значения сил ускорения и трения для двух пластиков, широко используемых в FDM-печати: полилактида (PLA), имеющего плотность 1250 кг/м³ и вязкость 200–1000 Па·с при 190–220 °С, и ABS-пластика с плотностью 1080 кг/м³ и вязкостью 2000–4000 Па·с при 220–240 °С. Для PLA вклад сил ускорения $F_a = 1,50\cdot10^{-5}$ H, а вклад сил трения $F_f = 0,3-1,5$ H. Для ABS значения составляют 1,29·10⁻⁵ H и 3–6 H соответственно.

В результате получим, что зависимость между скоростью и силами, действующими на сопло, считается линейной [1]. Зависимость между скоростью и сжатием нити связана с постоянной *К* или фактором запаздывания соотношением:

$$\Delta l = K \frac{Q_{out}}{A_{in}},\tag{1}$$

где Q_{out} — выходной объемный расход материала; Δl — величина сжатия нити.

Соотношение между скоростью рабочего органа и экструзии определяется программой деления трехмерной модели на слои (слайсером) на основе геометрии нити, чье поперечное сечение предполагается прямоугольным с полукруглыми концами [4]. Уже имеются работы по микрогеометрии изделий, полученных FDMпечатью, где определяется связь параметров процесса и шероховатости поверхности, например модель эллиптических поперечных сечений [5], основанные на экспериментальных наблюдениях.

Для ускорения и торможения уравнение (1) может быть выражено как:

$$\frac{d}{dt}\Delta l = K \frac{d}{dt} \frac{Q_{out}}{A_{in}}, \frac{Q_{in} - Q_{out}}{A_{in}} = K \frac{\dot{Q}_{out}}{A_{in}},$$

$$v_{in} = K \frac{\dot{Q}_{out}}{A_{in}} + \frac{Q_{out}}{A_{in}},$$
(2)

где v_{in} — входная скорость экструзии; Q_{in} — входной объемный расход материала; \dot{Q}_{out} — производная по времени выходного объемного расхода материала; t — время; Δl — производная сжатия нити по времени.

С другой стороны, в алгоритме Advance входная скорость v_{in} корректируется как:

$$v_{in} = K_A \dot{v}_{in}^0 + v_{in}^0, \tag{3}$$

где v_{in}^0 — требуемая скорость экструзии (задается в коде управляющей программы); K_A — параметр компенсации; \dot{v}_{in}^0 — производная требуемой скорости экструзии по времени. Величина определяется экспериментально [1].

В результате из уравнений (2) и (3) получим:

$$\frac{Q_{out}}{A_{in}} = v_{in}^0 + K_A \frac{Q_{out}}{A_{in}} - K \frac{Q_{out}}{A_{in}}.$$
(4)

При условии $K = K_A$ выражение (4) примет вид $Q_{out}/A_{in} = v_{in}^0$, что требуется для корректной толщины слоя. Так как на перепад давления влияет множество

факторов, FDM-принтер необходимо настраивать индивидуально для каждого типа машины, материала и параметров печати, чтобы алгоритм Advance работал корректно [1].

Несмотря на то, что данный алгоритм способен эффективно стабилизировать давление, он имеет серьезные недостатки, которые можно разделить на две группы.

Первая группа связана с управляющим параметром компенсации K_A . Поскольку его значение зависит от большого количества характеристик сопла, материала и слоя, и может быть найдено только эмпирически, то при любом изменении условий печати его необходимо определять заново, что требует больших затрат времени и материалов. Также из-за отсутствия исследований в этой области сохраняется неопределенность того, как влияют характеристики процесса, такие как высота слоя, материал и геометрия сопла на проявление динамики экструзии и на работу алгоритма [1].

Вторая группа относится к проблеме инерционности алгоритма. При калибровке скорости экструзии имеет место задержка между началом проявления дефекта и его компенсацией, что приводит к остаточной неравномерности полученного слоя. Чтобы получить слой без остаточных дефектов, компенсацию необходимо инициировать раньше, за несколько шагов до изменения скорости печатающей головки. Однако для этого потребуются изменения в алгоритме, которые бы позволили прогнозировать изменение давления в сопле во время печати. Эта проблема также отрицательно сказывается на производительности: чтобы уменьшить проявление инерционности, снижается средняя скорость печати, а значит, растет время печати. Еще одно следствие инерционности связано с режимами печати. В FDM-печати есть два режима — печать оболочки и заполнения, и алгоритмы Advance обычно применяются только к оболочке, чтобы свести к минимуму увеличение времени печати. Однако стабилизация давления при печати заполнения также важна для улучшения качества получаемых деталей.

Таким образом, у применяемых для стабилизации давления алгоритмов Advance имеется ряд недостатков, которые приводят к снижению скорости и качества печати. Настоящая работа направлена на их модификацию с целью исправления данных недостатков.

Исследование влияния параметров печати на динамику экструзии

Проведем серию экспериментов, с целью исследования зависимости динамики экструзии от параметров материала и процесса печати. Опишем ход и результаты экспериментов.

Методика проведения экспериментов. Определим параметры печати, которые могут влиять на динамику экструзии. Рассмотрим: вид материала; температуру печати, T; температуру стола, T_t ; диаметр сопла (физический), D_{ph} ; диаметр сопла (параметры), D_s ; толщину слоя, h.

Выберем три наиболее широко применяемые в FDMпечати материала: ABS (акрилонитрилбутадиенстирол), PLA (полилактид) и PETG (полиэтилентерефталат-гликоль). ABS-пластик не подвержен быстрому разложению, как это происходит с PLA, выдерживает большие ударные нагрузки и обладает большей термостойкостью [6]. С другой стороны, в отличие от PLA он требует нагрева подложки, а также с трудом подвергается механической обработке [7]. РЕТС сочетает в себе прочность и долговечность ABS и нетоксичность PLA, однако имеет низкую термостойкость и затрудненность постобработки, что не позволяет выделить его как однозначно оптимальный материал [8]. Так как FDM-печать в работе рассмотрена как способ изготовления прототипов и готовых изделий, а также для получения большего количества данных, выполним эксперименты для всех трех видов пластика. Выбраны материалы со стандартным составом. Состав ABS-пластика — акрилонитрил (25 %), бутадиен (25 %) и стирол (50 %). PLA-пластик основан на синтезе растительного сырья с применением крахмала. РЕТG-пластик — продукт поликонденсации этиленгликоля с терефталевой кислотой. Единственным примесным элементом является краситель.

Для каждого из материалов выделим следующие диапазоны температур печати *T*: $T_{ABS} = 230-260$ °C; $T_{PLA} = 200-230$ °C; $T_{PETG} = 220-260$ °C. Изменение температуры печати происходит с шагом $\Delta T = 2,5$ °C. Так как температура подложки T_t основное влияние оказывает только на адгезию первого слоя к ее поверхности, поэтому T_t постоянна: 110 °C для ABS, 60 °C для PLA, 85 °C для PETG. Выбран стандартный физический диаметр сопла $D_{ph} = 0,4$ мм (сопло E3D) как наиболее широко применяемый. Параметр диаметра сопла, определяемый в настройках прошивки, — от 0,4 до 0,6 мм. Толщина слоя расположена в пределах от 0,1 до 0,4 мм.

Для каждого из материалов проведена серия экспериментов по выявлению влияния значений параметров (табл. 1), на динамику экструзии.

Для оценки степени проявления динамики экструзии в экспериментах применим алгоритм Linear advance, который определяет оптимальное значение параметра компенсации K_A для конкретных условий печати. Чем больше его значение, тем большая компенсация требуется для сохранения равномерности слоя, а значит, тем большая динамика экструзии наблюдается. В экспериментах применен настольный трехмерный принтер Creality Ender3 с экструдером Bowden и платой управления SKR E3 mini V2.0.

Для каждого сочетания выбранных параметров проведем экспериментальную печать тестовой траектории, сгенерированной на основе стандартного шаблона из документации Marlin (рис. 2, *a*): разгон с низкой скорости до высокой и обратно при различных значениях K_A . Схема содержит отдельные отрезки, где каждая линия состоит из участка с низкой скоростью $V_l = 20$ мм/с, ускорением A = 1000 мм/с² до скорости $V_h = 80$ мм/с и торможением D = -1000 мм/с² до V_l . Низкоскоростные участки имеют длину 30 мм, а ускорение/торможение вместе с высокоскоростным участком — 40 мм. С каждой строкой значение K_A увеличивается. Испытания проведены нанесением материала на подложку. По результатам каждого теста определено оптимальное значение K_A на основе визуальной оценки полученных линий.

Результаты экспериментов. На рис. 2, *b* показан пример печати тестовой траектории для материала PLA при температуре 215 °C и толщине слоя 0,4 мм. Среди напечатанных отрезков выбрана наиболее ровная на основе визуальной оценки, в данном случае $K_A = 0,55$.

На рис. 3 представлен график зависимости параметра K_A от используемого материала для различных толщин слоя при диаметре сопла 0,4 мм и температуре 230 °C. Значения для разных материалов существенно отличаются, что связано с различием их физических свойств. Пластик PETG потребовал наибольшей компенсации. Это может быть вызвано его высокой гибкостью и низким показателем трения, что затрудняет ретракт и оперативное изменение скорости вывода материала из сопла.

Выполним анализ влияния типа экструдера на динамику экструзии. При сравнении результатов экспериментов в работе [1] видно, что при печати с экструдером Боудена динамика проявляется больше. В табл. 2 приведены значения параметра для экструдера Боудена (значения получены в настоящей работе) и экструдера прямого типа (из [1]) для PLA пластика при температуре T = 215 °C. Диаметр сопла в обоих случаях равен 0,4 мм. Параметры скорости и ускорения также одинаковы. Полученные значения параметра K_A отличаются на порядок. Этот факт можно объяснить большей длиной пути нити пластика от направляющего колеса к нагревательному элементу при печати с экструдером Боудена, что влечет за собой большее проявление динамики экструзии.

На рис. 4 представлены графики, демонстрирующие влияние температуры печати *T* на динамику экструзии для трех рассматриваемых материалов. Видно, что уве-

Таблица 1. Характеристики печати, выбранные для экспериментов *Table 1.* Print parameters selected for experiments

Название параметра	Значения параметров			
	ABS	PLA	PETG	
Температура печати T (при $\Delta T = 2,5$), °С	230–260	200–230	220–260	
Температура подложки T_t , °С	110	60	85	
Диаметр сопла (физический) D _{ph} , мм	0,4			
Диаметр сопла (настроечный) D _s , мм	0,4; 0,5; 0,6			
Толщина слоя <i>h</i> , мм	0,1; 0,2; 0,25; 0,3; 0,4			

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2022, том 22, № 5 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no 5



Рис. 2. Схема эксперимента (*a*) и пример напечатанной траектории (*b*). Размер участка тестовой траектории 120 × 220 мм; цифры на изображении соответствуют значениям параметра *K*_A

Fig. 2. Experimental pattern (*a*) and example of a printed trajectory (*b*). The size of the test trajectory area is 120×220 mm; the numbers in the image correspond to the values of the K_A parameter



Рис. 3. График зависимости степени проявления динамики экструзии от высоты слоя *h*

Fig. 3. Dependence of extrusion dynamics vs. the layer height h

личение температуры приводит к снижению значения K_A . Тенденция сохраняется для всех высот слоя и видов материала. Это может быть вызвано тем, что материал становится менее вязким при повышении температуры, что уменьшает перепад давления из-за его более высокой текучести. В то же время улучшенная текучесть

Таблица 2. Сравнение значений *К*_A для разных типов экструдеров

Table 2	Comparison	of K_{i}	values	for	different	extruder	types
10010 2.	Comparison	01114	varues	101	uniterent	onnuau	Lypes

	Параметр компенсации К _А		
Толщина слоя <i>h</i> , мм	Экструдер Боудена	Экструдер прямого типа	
0,3	0,59	0,045	
0,2	0,63	0,060	
0,1	0,90	0,090	

материала снижает сопротивление экструзии при транспортировке расплавленной нити через канал сопла, что, в свою очередь, облегчает процесс ретракта и корректировки скорости подачи. Также из графиков рис. 4 видна зависимость параметра K_A от толщины слоя h. Наблюдается тенденция к росту К_А при уменьшении h для всех материалов. Особенно заметное проявление динамики наблюдается у минимальной толщины слоя 0,1 мм, которое можно объяснить тем, что при выкладке слоя на подложке существует контакт между соплом и расплавом как внутри, так и снаружи. Это приводит к разнице в перепаде давления по высоте слоя. Точно разницу определить затруднительно из-за сложной картины потока с комбинированными открытыми, подвижными и стационарными границами. Предположим, что чем меньше высота слоя, тем больше перепад давления и тем большая компенсация требуется, что согласуется с данными в [1].

Проведем аналогичные эксперименты для разных значений настроечного диаметра сопла D_s . Данная характеристика изменяет ширину слоя. Тесты выполнены для высоты слоя 0,4 мм и всего рассматриваемого диапазона температур для каждого из трех материалов. Пример полученного графика для ABS-пластика представлен на рис. 5. Наблюдается снижение степени проявления динамики экструзии при увеличении диаметра сопла, что может быть вызвано меньшим перепадом давления по ширине слоя.

Результаты исследования влияния параметров печати на динамику экструзии показали, что каждая рассмотренная характеристика оказывает существенное влияние на динамику печати.



Puc. 4. Зависимости параметра K_A от температуры T для пластиков: PLA (a), PETG (b), ABS (c) для различных толщин слоя, h *Fig.* 4. Dependence of parameter K_A vs. temperature T for PLA (a), PETG (b), ABS (c) and different layer heights h

Предлагаемая оптимизация алгоритма

Приведем обоснование предлагаемой модификации алгоритма контроля экструзии.

Для повышения эффективности алгоритмов Advance необходимо: определить зависимости параметра компенсации от характеристик печати; разработать алгоритм расчета оптимального параметра компенсации; минимизировать запаздывание компенсации во избежание появления остаточных дефектов слоя, а также для увеличения средней скорости печати.

Первая задача решена путем проведения экспериментов. А в качестве решения второй и третьей проблем предложена оптимизация алгоритма Advance на





Fig. 5. Dependence of parameter K_A vs. nozzle diameter D_s

основе обученных нейронных сетей. Машинное обучение в настоящее время применяется в аддитивном производстве от оптимизации дизайна установки до контроля качества продукции [9] и оптимизации процесса печати [10]. Поскольку области его применения определяются разнообразием и объемом данных, высокая размерность данных аддитивного производства делает их подходящими для таких алгоритмов, как методы обучения с учителем, например, нейронные сети [11].

Инерционность компенсации давления предложено снизить с помощью алгоритма прогнозирования изменения направления движения экструдера. В системе с ЧПУ знание о последующих перемещениях рабочего органа ограничено конечным размером кадрового буфера. Часто по ходу анализа траектории возникает ситуация, когда буфер наполняется короткими кадрами, не дающими полной информации о дальнейшем движении. Потому напрямую информацию о последующем повороте получить нельзя. Необходимо обучить модель, которая будет предсказывать изменения направления движения вне зависимости от заполненности кадрового буфера. За несколько шагов до поворота или криволинейного участка будет передаваться сигнал к модулю управления экструзией, инициирующий корректировку скорости подачи материала несколько раньше, выравнивая слой. Таким образом, можно минимизировать инерцию алгоритма и повысить скорость печати.

Выполним аналитический расчет параметра K_A , для этого используем алгоритм на основе нейронной сети, предсказывающей искомое значение. Так можно избежать необходимости экспериментального определения параметра, что сэкономит время и ресурсы. Кроме того, вместо использования аппроксимации, полученной на основе экспериментов, параметр может быть найден с большей точностью.

Схема предлагаемого алгоритма вместе с этапами анализа траектории в ЧПУ представлена на рис. 6. Модель ЧПУ основана на системе Smoothieware¹. После интерпретатора команды G-кода преобразуются в отрезки траектории и передаются в блоки «Анализ движения» и «Контроль скорости» [12]. В блоке «Анализ движения» к данным применяется разработанный алгоритм, содержащий модель прогноза изменения направления движения (модель 1). В случае, если кадровый буфер оказывается заполнен короткими участками, не предоставляющими полную картину о последующем перемещении рабочего органа, модель будет анализировать вероятность поворота, который повлечет за собой изменение скорости.

Затем данные передаются в модуль «Интерполяция» и «Управление экструдером», где рассчитывается скорость экструзии [13]. Если было спрогнозировано изменение направления движения рабочего органа, то применяется модель прогнозирования параметра K_A (модель 2). Наконец, инициируется алгоритм Advance, который на основе полученного параметра начнет процесс стабилизации давления раньше, и снижение скорости печати не потребуется.

Проблемой разработки является отсутствие доступных наборов данных для обучения моделей. Для обоих моделей обучающие данные необходимо получать вручную.

Задача получения данных для прогноза движения может быть решена относительно просто. Так как экструдер совершает большое количество движений при печати, то даже печати небольшого количества деталей будет достаточно для получения достаточного количества данных при различных видах движения (повороты, линейное и криволинейное движение). Так как в системе ЧПУ траектория проходит несколько этапов анализа, где данные логически группируются, ее удобно использовать для обучения модели.

Поскольку задача состоит в прогнозировании динамических параметров движения, в дополнение к статическим данным, полученным из системы ЧПУ, решено также учитывать показания от внешнего датчика (акселерометра).

В случае прогнозирования параметра компенсации проблема отсутствия доступных наборов данных сочетается с зависимостью этого параметра от большого количества характеристик процесса. Для обучения данной модели были применены результаты экспериментов, описанных в разделе «Исследование влияния параметров печати на динамику экструзии».

Инструменты разработки. Разработка алгоритма осуществлена на языке программирования Python 3.5. Для работы с нейронными сетями выбрана библиотека машинного обучения Tensorflow 2.6.0 в силу богатой функциональности. Данные для обучения нейронной сети получены и размечены вручную по результатам проведенных экспериментов. Данные для обучения и тестирования сформированы и опубликованы на портале Kaggle². Выбрана нейросетевая регрессия, так как она позволяет получить действительное число.

Текущие результаты. На данном этапе работы получена модель нейронной сети расчета параметра компенсации на основе данных, полученных из экспериментов.

¹ [Электронный ресурс]. Режим доступа: https:// smoothieware.org/ (дата обращения: 05.05.2022).

² [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://www. kaggle.com/kseniazimenko/fdm-linearadvance (дата обращения: 14.05.2022).



Puc. 6. Этапы формирования траектории в системе с числовым программным обеспечением с предложенным алгоритмом *Fig. 6.* Stages of trajectory generation in a numerical control system with the proposed algorithm



Рис. 7. Пример печати: без компенсации динамики экструзии (*a*); с компенсацией на основе ручной калибровки (*b*) и при калибровке нейронной сетью (*c*). Размер участка тестовой траектории 100 × 30 мм

Fig. 7. Printing example: without compensation of extrusion dynamics (*a*); with compensation based on manual calibration (*b*); and with neural network calibration (*c*). The size of the test trajectory section is 100×30 mm

Сеть состоит из трех слоев. К слоям 1 и 2 применена функция активации relu, к слою 3 – сигмоида с одним линейным нейроном для получения действительного числа. Данные приведены к диапазону от 0 до 1. Для выходного значения использована обратная процедура. И обучающая, и проверочная выборки нормированы статистикой на основе обучающей выборки, что позволило выявить ошибки тестовой выборки¹.

Результаты обучения показали отклонения в пределах 0,015 в тестовой выборке. Полученная сеть внедрена в алгоритм Linear Advance и протестирована. Напечатаны отрезки материала с и без применения обученной модели, состоящие из разгона до высокой скорости и торможения до низкой скорости. В эксперименте использован ABS-пластик с параметрами печати h = 0,35 мм, T = 212 °C, $D_s = 0,4$ мм. В результате стабилизация формы слоя по спрогнозированному значению параметра K_A , показанная на рис. 7, *c*, не уступает стабилизации на основе параметра, определенного экспериментально (рис. 7, *b*). Более того, на этапе торможения спрогнозированное значение параметра позволило точнее выровнить слой и минимизировать остаточные дефекты.

Полученная модель нейронной сети может быть применена с алгоритмом Advance для стабилизации давления в сопле как перед началом печати с записью результата в управляющую программу, так и в режиме реального времени. В дальнейшем планируется обучить модель для работы с другими физическими диаметрами сопла. Также необходимо собрать наборы данных и обучить модель для прогнозирования изменения направления движения печатной головки.

Заключение

Рассмотрена проблема нежелательной динамики экструзии при FDM-печати. Проанализированы алгоритмы, которые применяются для решения этой проблемы, выделены их недостатки. Основные проблемы алгоритмов — инерционность и необходимость снижения скорости печати, а также ручная калибровка.

Проведено исследование влияния типа материала и экструдера, толщины слоя и температуры печати на проявление нежелательной динамики. Полученные экспериментальные результаты углубляют понимание влияния динамики экструзии при FDM-печати и открывают возможности для оптимизации существующих алгоритмов ее управления. Планируется в дальнейшем исследовать влияние величины потока, других физических диаметров и длин выходного отверстия сопла на динамику экструзии.

Предложена модификация алгоритма Advance на основе машинного обучения. Рассмотренное решение позволяет повысить качество получаемого слоя и скорость печати, а также избежать необходимости ручной калибровки. Выполнено обучение модели нейронной сети, определяющей величину компенсации в зависимости от параметров печати, которую раньше можно было определить только вручную. Эксперименты по-

¹ [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://www. tensorflow.org/tutorials/keras/regression (дата обращения: 08.05.2022).

казали, что разработанная модель способна успешно прогнозировать требуемую величину компенсации и может быть применена во время процесса печати.

В дальнейшем планируется обучить нейросеть для работы с другими типами материалов (в том числе с гибкими и керамическими) и параметрами печати, а также получить модель для прогнозирования изменения направления движения экструдера.

Предложенная модификация алгоритма Advance способствует автоматизации процесса компенсации

Литература

- Tronvoll S., Popp S., Elverum C., Welo T. Investigating pressure advance algorithms for filament-based melt extrusion additive manufacturing: theory, practice and simulations // Rapid Prototyping Journal. 2019. V. 25. N 5. P. 830–839. https://doi.org/10.1108/RPJ-10-2018-0275
- Bellini A., Güçeri S., Bertoldi M. Liquefier dynamics in fused deposition // Journal of Manufacturing Science and Engineering. 2004. V. 126. N 2. P. 237–246. https://doi.org/10.1115/1.1688377
- Осколков А.А., Матвеев Е.В., Безукладников И.И., Трушников Д.Н., Кротова Е.Л. Передовые технологии аддитивного производства металлических изделий // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Машиностроение, материаловедение. 2018. Т. 20. № 3. С. 90–104. https://doi.org/10.15593/2224-9877/2018.3.11
- Ahn D., Kwoon J.-H., Kwon S., Song J., Lee S. Representation of surface roughness in fused deposition modeling // Journal of Materials Processing Technology. 2009. V. 209. N 15-16. P. 5593–5600. https:// doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2009.05.016
- Pandey P.M., Reddy V.N., Dhande S.G. Improvement of surface finish by staircase machining in fused deposition modeling // Journal of Materials Processing Technology. 2003. V. 132. N 1-3. P. 323–331. https://doi.org/10.1016/S0924-0136(02)00953-6
- Aourik O., Othmani M., Saadouki B., Abouzaid Kh., Chouaf A. Fracture toughness of ABS additively manufactured by FDM process // Journal of Achievements in Materials and Manufacturing Engineering. 2021. V. 109. N 2. P. 49–58. https://doi. org/10.5604/01.3001.0015.6258
- Beniak J., Šooš L., Križan P., Matúš M., Ruprich V. Resistance and strength of conductive PLA processed by FDM additive manufacturing // Polymers. 2022. V. 14. N 4. P. 678. https://doi. org/10.3390/polym14040678
- Srinivasan R., Prathap P., Raj A., Kannan A.S., Deepak V. Influence of fused deposition modeling process parameters on the mechanical properties of PETG parts // Materials Today: Proceedings. 2020. V. 27. N 2. P. 1877–1883. https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.03.809
- Meng L., McWilliams B., Jarosinski W., Park H.-Y., Jung Y.-G., Lee J., Zhang J. Machine learning in additive manufacturing: A review // JOM: The journal of the Minerals, Metals & Materials Society. 2019. V. 72. N 6. P. 2363–2377. https://doi.org/10.1007/ s11837-020-04155-y
- Pérez M., Carou D., Rubio E.M., Teti R. Current advances in additive manufacturing // Procedia CIRP. 2020. V. 88. P. 439–444. https://doi. org/10.1016/j.procir.2020.05.076
- Razvi S.S., Feng S., Narayanan A., Lee Y.-T., Witherell P. A review of machine learning applications in additive manufacturing // Proc. of the ASME International Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference, (IDETC-CIE). 2019. P. 1–10. https://doi.org/10.1115/DETC2019-98415
- Suh S.-H., Kang S.-K., Chung D.-H., Stroud I. Theory and Design of CNC Systems. Springer London, 2008. 455 p. (Springer Series in Advanced Manufacturing). https://doi.org/10.1007/978-1-84800-336-1
- Smid P. CNC Programming Handbook: A Comprehensive Guide to Practical CNC Programming. NY: Industrial Press Inc., 2003. 508 p.

динамики и расширяет возможности применения FDMпринтеров в промышленных условиях. Полученный алгоритм может повысить точность и скорость печати, что впоследствии увеличит конкурентоспособность малых проектных предприятий России, использующих трехмерные принтеры. Работа расширила возможности быстрого прототипирования и создания опытных партий.

References

- Tronvoll S., Popp S., Elverum C., Welo T. Investigating pressure advance algorithms for filament-based melt extrusion additive manufacturing: theory, practice and simulations. *Rapid Prototyping Journal*, 2019, vol. 25, no. 5, pp. 830–839. https://doi.org/10.1108/ RPJ-10-2018-0275
- Bellini A., Güçeri S., Bertoldi M. Liquefier dynamics in fused deposition. *Journal of Manufacturing Science and Engineering*, 2004, vol. 126, no. 2, pp. 237–246. https://doi.org/10.1115/1.1688377
- Oskolkov A.A., Matveev E.V., Bezukladnikov I.I., Trushnikov D.N., Krotova E.L. Advanced technologies for additive manufacturing of metal product. *Bulletin PNRPU. Mechanical engineering, materials science*, 2018, vol. 20, no. 3, pp. 90–105. (in Russian). https://doi. org/10.15593/2224-9877/2018.3.11
- Ahn D., Kweon J.-H., Kwon S., Song J., Lee S. Representation of surface roughness in fused deposition modeling. *Journal of Materials Processing Technology*, 2009, vol. 209, no. 15-16, pp. 5593–5600. https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2009.05.016
- Pandey P.M., Reddy V.N., Dhande S.G. Improvement of surface finish by staircase machining in fused deposition modeling. *Journal of Materials Processing Technology*, 2003, vol. 132, no. 1-3, pp. 323– 331. https://doi.org/10.1016/S0924-0136(02)00953-6
- Aourik O., Othmani M., Saadouki B., Abouzaid Kh., Chouaf A. Fracture toughness of ABS additively manufactured by FDM process. *Journal of Achievements in Materials and Manufacturing Engineering*, 2021, vol. 109, no. 2, pp. 49–58. https://doi. org/10.5604/01.3001.0015.6258
- Beniak J., Šooš L., Križan P., Matúš M., Ruprich V. Resistance and strength of conductive PLA processed by FDM additive manufacturing. *Polymers*, 2022, vol. 14, no. 4, pp. 678. https://doi. org/10.3390/polym14040678
- Srinivasan R., Prathap P., Raj A., Kannan A.S., Deepak V. Influence of fused deposition modeling process parameters on the mechanical properties of PETG parts. *Materials Today: Proceedings*, 2020, vol. 27, no. 2, pp. 1877–1883. https://doi.org/10.1016/j. matpr.2020.03.809
- Meng L., McWilliams B., Jarosinski W., Park H.-Y., Jung Y.-G., Lee J., Zhang J. Machine learning in additive manufacturing: A review. *JOM: The journal of the Minerals, Metals & Materials Society*, 2019, vol. 72, no. 6, pp. 2363–2377. https://doi.org/10.1007/ s11837-020-04155-y
- Pérez M., Carou D., Rubio E.M., Teti R. Current advances in additive manufacturing. *Procedia CIRP*, 2020, vol. 88, pp. 439–444. https:// doi.org/10.1016/j.procir.2020.05.076
- Razvi S.S., Feng S., Narayanan A., Lee Y.-T., Witherell P. A review of machine learning applications in additive manufacturing. *Proc. of the ASME International Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference, (IDETC-CIE)*, 2019, pp. 1–10. https://doi.org/10.1115/DETC2019-98415
- Suh S.-H., Kang S.-K., Chung D.-H., Stroud I. *Theory and Design of* CNC Systems. Springer London, 2008, 508 p. Springer Series in Advanced Manufacturing. https://doi.org/10.1007/978-1-84800-336-1
- Smid P. CNC Programming Handbook: A Comprehensive Guide to Practical CNC Programming. NY, Industrial Press Inc., 2003, 508 p.

Авторы

Зименко Ксения Владимировна — инженер, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, https://orcid. org/0000-0002-3792-136X, zksenia@yahoo.com

Афанасьев Максим Яковлевич — кандидат технических наук, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, 557194081345, https://orcid.org/0000-0003-4061-1407, amax@niuitmo.ru

Колесников Михаил Владимирович — инженер, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, 57214971026, https://orcid.org/0000-0003-1559-1766, kmv@itmo.ru

Статья поступила в редакцию 09.06.2022 Одобрена после рецензирования 19.08.2022 Принята к печати 23.09.2022

Authors

Ksenia V. Zimenko — Engineer, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0002-3792-136X, zksenia@yahoo.com

Maxim Ya. Afanasev — PhD, Associate Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, se 57194081345, https://orcid.org/0000-0003-4061-1407, amax@niuitmo.ru

Mikhail V. Kolesnikov — Engineer, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, 57214971026, https://orcid.org/0000-0003-1559-1766, kmv@itmo.ru

Received 09.06.2022 Approved after reviewing 19.08.2022 Accepted 23.09.2022



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» Ι/ΪΤΜΟ

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 No 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

КОМПЬЮТЕРНЫЕ СИСТЕМЫ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ COMPUTER SCIENCE

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-941-950

An enforced non-negative matrix factorization based approach towards community detection in dynamic networks Bashir Shafia^{1⊠}, Ahmad Manzoor Chachoo ²

1,2 Department of Computer Science, University of Kashmir, Srinagar, 190006, India

¹ imshafia@gmail.com^{\Begin}, https://orcid.org/0000-0002-5570-967X

² manzoor@kashmiruniversity.ac.in, https://orcid.org/0000-0001-6702-6633

Abstract

Identifying community structures within network dynamics is important for analysing the latent structure of the network, understanding the functions of the network, predicting the evolution of the network as well as detecting unusual events of the network. From various perspectives, a diversity of approaches towards dynamic community detection has been advised. However, owing to the difficulty in parameter adjustment, high temporal complexity and detection accuracy is diminishing as time slice rises; and recognizing the community composition in dynamic networks gets extremely complex. The basic models, principles, qualities, and techniques of latent factor models, as well as their various modifications, generalizations and extensions, are summed up systematically in this study which focuses on both theoretical and experimental research into latent factor models across the latest ten years. Latent factor model like non-negative matrix factorization is considered one of the most successful models for community identification which aims to uncover distributed lower dimension representation so as to reveal community node membership. These models are mostly centred on reconstructing the network from node representations while requiring the representation to have special desirable qualities (non-negativity). The purpose of this work is to provide an experimental as well as theoretical comparative analysis of the latent factor approaches employed to detect communities within dynamic networks. Parallelly we have devised the generic and improved non-negative matrix factorization-based model which will help in producing robust community detection results in dynamic networks. The results have been calculated from the experiments done in Python. Moreover our models methodology focuses on information dynamics so as to quantify the information propagation among the involved nodes unlike existing methods that considers networks first-order topological information described by its adjacency matrix without considering the information propagation between the nodes. In addition, this paper intends to create a unified, state of the art framework meant for non-negative matrix factorization conception which could be useful for future study.

Keywords

community detection, principal component analysis, orthogonality, non-negative matrix factorization, singular value decomposition, social network analysis

For citation: Bashir S., Chachoo M.A. An enforced non-negative matrix factorization based approach towards community detection in dynamic networks. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 941–950. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-941-950

УДК 51-78

Подход к обнаружению сообщества в динамических сетях, основанный на принудительной неотрицательной матричной факторизации Башир Шафия^{1⊠}, Ахмад Мансур Чачу²

^{1,2} Университет Кашмира, Срина́гар, 190006, Индия

¹ imshafia@gmail.com^{\Box}, https://orcid.org/0000-0002-5570-967X

² manzoor@kashmiruniversity.ac.in, https://orcid.org/0000-0001-6702-6633

Аннотация

Выявление структур сообщества в сетевой динамике важно для анализа сети относительно: скрытой структуры, понимания функций, прогнозирования развития, обнаружения необычных событий. В рассмотренных научных

© Bashir S., Chachoo M.A., 2022

исследованиях рекомендуется использовать различные подходы к динамическому обнаружению сообщества. Однако из-за сложности настройки параметров, высокой временной сложности и снижения точности обнаружения по мере увеличения временного интервала распознавание состава сообщества в динамических сетях усложняется. Рассмотрены основные схемы, принципы, свойства и методы моделей латентных факторов, а также их системные модификации, обобщения и расширения. Основное внимание уделено теоретическим и экспериментальным исследованиям моделей латентных факторов за последние десять лет. Скрытая факторная модель — неотрицательная матричная факторизация, считается одной из наиболее успешных для идентификации сообщества и направлена на раскрытие распределенного представления более низкого измерения с целью определения членства в узле сообщества. Модели основаны на реконструкции сети из представлений узлов при условии, чтобы представление обладало особыми желательными качествами (например, не отрицательностью). Цель работы — получить экспериментальный и теоретический сравнительные анализы подходов со скрытым фактором, используемых для обнаружения сообществ в динамических сетях. Разработана общая и улучшенная неотрицательные матричные модели, основанные на факторизации для получения надежных результатов обнаружения сообщества в динамических сетях. Полученные результаты рассчитаны на основе экспериментов, проведенных на языке программирования Python. Предложенная методология моделей сфокусирована на динамике информации, для количественной оценки распространения информации между задействованными узлами. Отличие предложенной модели от существующих состоит в получении топологической информации сети первого порядка, описываемой ее матрицей смежности, без учета распространения информации между узлами. Предложено создание единой современной структуры, предназначенной для концепции неотрицательной матричной факторизации, которая может быть полезна для будущих исследований.

Ключевые слова

обнаружение сообщества, анализ главных компонент, ортогональность, неотрицательная матричная факторизация, разложение по сингулярным числам, анализ социальных сетей

Ссылка для цитирования: Башир Ш., Чачу М.А. Подход к обнаружению сообщества в динамических сетях, основанный на принудительной неотрицательной матричной факторизации // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 941–950 (на англ. яз.). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-941-950

Introduction

Community structure regarded as an essential characteristic of dynamic networks reveals as well as exposes the underlying connections. There were more and more studies recently in order to develop methods for community detection. These studies, on the other hand, were mostly focused on static networks; hence they were unable to detect dynamic communities in complex networks. The construction of the network in real-world is however dynamic. The structure of community for most networks, on the other hand, is constantly changing throughout time. Existing static approaches for community detection split the community depend on the network static topology and ignore the interaction between network structures over numerous snapshots. Owing to their highlevel potentiality for comprehending social phenomena across time, dynamic community identification in complex networks has recently gotten lots of attention and turn out to be a popular study area. Social networks, protein-protein connection networks and person to person communication networks are all examples of temporal networks in the real world. Within network dynamics, temporal network analysis can uncover potential rules and essential properties. As a result, developing ways to identify communities in dynamic networks has become progressively more crucial. The uncertainty of the solutions is one of the most significant challenges in recognizing temporal communities. As a result, we can't tell if the change in community discovery is due to the community's evolution or the algorithm instability. A variety of strategies have been offered to address this issue, with the ultimate goal of smoothing the community evolution.

Our goal to develop a more robust Dynamic Community Detection (DCD) methodology was achieved by focusing on information dynamics so as to quantify the information propagation among the involved nodes. This study also focussed on the quantitative (statistical) analysis of the latent factor model based approaches (Non-Negative Matrix Factorization (NMF)) related to community detection in dynamic networks so that the user may obtain a general idea of how the network is organized and a few underlying experiences of the network structure. Moreover, this study is organized in the way where introductory section addresses the fundamentals required for reviewing the DCD followed by literary section which addresses the findings and recent research in SNA (social network analysis) related to detecting dynamic communities. Next section represents the generic and improved NMF based methodology to uncover the dynamic communities. Empirical results have been shown under the result section. Evaluation section evaluates the framework against the two important existing NMF based approaches: Community Detection with Community Structure and Node Attribute (CDCN) and DPNM (NMF incorporated density peak clustering). Next section (Applications) provides the utilization of detecting communities. Lastly, we summarize and conclude the study with some potential future guidelines.

Literature Review

The recognition of a networks community division reflects nodes tendency to form clusters based on their resemblance and hence create communities. Various realworld networks show that community structure exists [1]. Community analysis is necessary to understand the network structural and functional features. The structural feature have been applied to a variety of fields, like viral marketing, epidemic modelling, and detecting important vertices in power systems wherein their failure could create a cascading collapse.

In order to cite only and not to overemphasise the significance of community identification and it's working in the perspective of this study, community identification enables the recognition of few node groupings bearing the intra-group connections denser, implying that it works by recognizing those groups of people whose interaction among them takes place frequently. The detection of communities will aid in identifying the influential nodes as well as their subordinates in real-time. This is one of the rationales wherefore community identification techniques are being developed, tested, and enhanced.

A large number of algorithms in the literature focused on vertices characteristics rather than the link characteristics. For the challenge of dynamic community discovery in evolving networks, there aren't many favourable approaches. However, latent factor models, like NMF models, are one of the most favourable approaches. By rebuilding the original data, matrix factorization is an excellent tool in favour of representation learning. The constraints forced on the base matrix and the coding matrix differs among a variety of matrix factorization techniques. The usage of non-negativity restrictions (constraints) distinguishes NMF from other types of matrix factorization. Additional restrictions can be imposed on NMF such as orthogonality or sparseness that preserves the topological features [2]. Despite these additional constraints, NMF differs from the other techniques of matrix factorization like PCA (principal component analysis) and SVD (singular value decomposition) because to its non-negativity feature. Because they only allow additive combinations but not subtractive combinations, these constraints result in a parts-based representation. NMF approaches use every node as a network dimension, and consider community detection to be the challenge of identifying a lowdimensional network representation. However, they do not guarantee that the representation obtained matches with communities, necessitating some heuristic control to increase interpretability.

NMF, which is popularly utilised in pattern recognition and information retrieval, have recently been employed to resolve the challenge of community discovery [3, 4]. In terms of DCD several research, workers [5-7] had included NMF within a temporal framework, resulting in a plethora of useful DCD models. Wang et al. [4] proposed a model, namely DCD based on NMF, where the transition matrix of community membership was included with the notion of temporal cost so as to smooth out the community structure alterations. Whereas Yang et al. [7] developed a DCD approach based on NMF that takes node strength into account. Their primary premise was that the node pairs bearing stronger connections have a greater chance of belonging to the same community. FacetNet [8] is a well-known method for community analysis together with their evolution considering network dynamics. It combines communities altogether with their evolutions in a unified manner using NMF which differs from standard methods

wherein two-stage processes are treated asynchronously. The FacetNet technique, on the other hand, necessitates prior information and the specification of the number of the community partitions. In many cases, the number of community partitions is difficult to predict in advance. To get over this matter, Lu et al. [9] employed singular value decomposition so as to automatically uncover the number of community partitions. Though the k is representing the number of communities may be automatically collected and a higher grade of community detection can be achieved, the time complexity is considerable. Despite the fact that studies [10, 11] suggest that NMF is the best method for learning object components, it fails to capture the geometrical data structure space that is crucial for clustering. Graph regularisation approach may extract the geometric data structure, according to manifold learning theory and spectral graph theory [12]. Furthermore, the geometric network structure will not get changed significantly in a short period of time if temporal smoothness is assumed. As a result, we suggest that graph regularisation is to be used to simulate the temporal cost function which will be intuitively beneficial. Yu et al. [13] followed a two-stage approach where community detection and community evolution were studied separately, hence was not optimal. Though the authors [14] suggested the efficient approach for community detection yet their approach was very specific to criminal activities.

Ma & Dong [15] presented 2 frameworks for Evolutionary Non-negative Matrix Factorization (ENMF) and demonstrated that evolutionary spectral clustering, ENMF and evolutionary modularity density are all comparable. They also introduced sE-NMF, the semisupervised technique that adds a priori knowledge to ENMF. Sun et al. [16] developed a model-DCD that was comparable to Wang's [5]. The distinction between them, though, is the cost of a snapshot. As a cost function of the snapshot, the earlier adopted standard NMF, while latter used the symmetric NMF (SNMF). In order to achieve better interpretability, Yuan & Liu [17] suggested a model-DCD with node weight matrix and the triple NMF.

Internal connections were used as the graph regularisation requirement by Wang et al. [18] who used the triple NMF with the purpose of increasing the functioning of community identification into networks of bipartite. Matrix factorization accurately depicts the network community structure and guarantees the significant interpretation of the community regardless of the topology of the network. NMF avoids the limitations of modularity optimization approaches [19], like resolution of limit [20], in addition to quantifying how robustly every node contributes to its community. Tokala et al. [21] employed NMF along with the cost function namely I-divergence to present 2 techniques for undirected and directed networks, respectively. Jin et al. [22] employed NMF to construct the model which is generative, treating this as the problem of optimization to identify the linkage formation of communities, grounded upon the relevance of every node while establishing linkage to every community. Even though the study [23] presented a comparative analysis of the already existing approaches and algorithms employed to detect online communities in social networks, yet the

community extraction and community evolution were treated asynchronously in most of the approaches which doesn't make sense in the real environment.

The studies [24, 25] also approached to model community detection with a significant improvement from the past studies. Wang et al. [24], in contrast to the above research studies, employed graph regularisation to capture classical geometric network structure information. They created an efficient iterative algorithm grounded on multiplicative updating principles as well as the proof method. Despite the fact that their method exceeds the competition still in respect of overall functioning, the enhancement on several networks is insignificant. As a result of this vast research review, it is clear that additional research is required and expected so as to advance this field of study.

Methodology

Past works followed a two-stage approach where community detection and community evolution were studied separately. However, our framework follows a more advanced approach by studying the community detection and evolution simultaneously as described below.

By creating a distinctive network where all snapshot nodes are all instances of all nodes, and edges can be regular edges within snapshots or a special sort of edge that connects nodes between snapshots. Then the NMF is made to run on this large network to uncover communities as illustrated in Fig. 1.

Our contribution towards this study mainly consists of the following steps:

— an effective approach to calculate information dynamics among the nodes in a targeted network;

— an integrated framework is proposed where number of communities adopted by NMF is calculated automatically based on the information flow score among nodes;

— a model that merely depends on the targeted network topology to identify true communities is aimed and formalized.

Our framework that uses social networks to recognize active communities has four main interconnected phases (stages) as described below.

Stage 1. We use BFS (Breadth First Search) first to sample a graph around an initial seed node; then the adjacency matrix A is constructed based on the targeted subnetwork having ones depicting links among network nodes and zeroes depicting unknowns like:

$A_{ij} = \{1 \text{ if } i \text{ and } j \text{ are adjacent to each other, otherwise } 0.(1)$

Stage 2. Here the similarity matrix **B** based on contact strength among nodes of matrix **A** is computed first, where contact strength represents the degree of closeness among nodes of a network. Because the triangle structure may better characterise the tightness among the nodes, we employed triangles to formalise the contact strength definition. It is computed using the following formula:

$$CS_{uv} = \frac{N(u) \cap N(v)}{Tu},$$
(2)

where Tu is the number of triangles of vertex u, and the intersection between N(u) and N(v) is the number of triangles common to node u and node v.

So the strategy is based on the fact that strong ties play a major part in community formation and information diffusion. In the network having *n* nodes, the similarity of every node pair according to the above described contact strength formula is computed first and therefore $n \times n$ form of similarity matrix as $\mathbf{B} = \{s_{ij}\}$ is obtained, wherein an element s_{ij} indicate the contact strength closeness between *i* and *j* nodes.

Stage 3. Here we made an attempt to train our framework to calculate the number of communities based on the node information flow. The information about a v node over t time is calculated as:

$$I_{v(t+1)} = I_{v(t)} + \Sigma_u \in {}_{N(v)}(CS_{uv}).$$
(3)

Wherein $I_{v(t)}$ describes the information of a v node at t time, and second part of the expression represents the information which is gained from its neighbours. As may be seen, information of v node at time t + 1 involves the information over time t plus the information gained from its neighbours at time t + 1. With the time evolution, the propagation of information inclines to zero. Ultimately, the network information will achieve a state of equilibrium which blocks the further information interaction.

Stage 4. Then NMF is exploited using the similarity matrix **B** together with the calculated information flow thus uncovering the communities. NMF uncovers the inherent network community composition and improves interpretability and compression because of its "sparse" and "parts based" representation with the solely additive constraint or non-negativity. NMF reduces the matrix $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ into two nonnegative matrices like $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{m \times k}$ and $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{k \times n}$, such that $\mathbf{B} \cong \mathbf{VU}$. Given an information node **B** matrix, we intend to acquire **U** the matrix of node membership using NMF as follows:

$$\mathbf{U}, \mathbf{V} \| \mathbf{B} - \mathbf{V} \mathbf{U} \|_{F}^{2}$$

$$S.t \mathbf{U} \ge 0.$$
(4)

After obtaining the clusters around the seed nodes, the quality scores of each node are computed and the node having highest score in every cluster is selected as the high quality seed. We illustrate the quality-score of a node $v(QS_V)$ as:

$$QS_V = Sim(YG(v), YG(vs)) + \frac{\Sigma u \in N(v)Sim(YG(u), YG(v))}{|N(v)|},$$
(5)

where N(v) is the neighbour set of v; YG(v) is the vector embedding of v node on G; and *Sim* represents the cosine similarity. Moreover we summarize our frameworks work flow in a flow chart (Fig. 1). Four main tasks employed by our methodology discussed above as well are further elaborated as follows:

- 1. Initialization where adjacency matrix **A** is constructed based on targeted network having ones depicting links among network nodes and zeroes depicting unknowns. Then initialization of secondary data structures takes place accordingly.
- Pre-processing where matrix B is constructed based on the information statistics of nodes considering matrix A as a base matrix.
- 3. Training where our framework is made to learn the no. of communities based on the node information flow.
- 4. Detecting where finally the associations between the nodes and the communities are attained via NMF over learnt latent factor representations of the nodes of the network.

The process is repeated until all the snapshots are visited. Once it is done with all the snapshots a sequence of multiple communities are obtained.







Fig. 2. A simple illustration of the community detection in our framework

Our framework is capable of uncovering the connected components in a graph without explicitly specifying the number and size of communities as was required in previous studies [8, 15]. Moreover the approach is scalable enough to accommodate very large networks as often observed in real data. Fig. 2. shows how communities are identified in our framework — blue colored nodes represent community 1 and red colored nodes represent community 2.

Empirical Results

Using three real-world networks as discussed below, the effectiveness of the existing community detection methods based NMF was examined in this study.

Simulated Data

We used the combination of small and large 4 realworld networks as discussed and demonstrated below in order to validate the effectiveness of our model.

In 1970s, 34 fellows from a club-karate at an American university formed a friendship social network known as the Zachary karate club [26]. The network was broken into two sets of friendship due to a disagreement involving the club manager along with the trainer about the charge of training karate.

In the year 2000, American Football College became a games network among Division-I Colleges (teams). Conferences are made up of colleges, with each conference serving as a ground-truth community. The nodes (115) represent Colleges (teams) whereas edges (616) denote games played among teams [1].

Dolphin is a group of 62 dolphins that were spotted in New Zealand Doubtful Sound between 1994 and 2001. Two dolphins that were observed together "more often than the predicted probability" are connected by an edge. The network was separated into two primary communities (partition (a) contains 1-20 nodes and partition (b) contains 21–62 nodes), both of which can be subdivided into three sub communities [27].

Facebook is a network of friendships among Facebook users, wherein the vertex denotes a user and the edge depicts that the users represented with the end points are friends. This is a friendship network (available in SNAP library also) with 347 vertices and 5038 edges [28].

Visualizing Networks Result by our Model

In this study an attempt has been made to produce robust community detection results in dynamic networks. At first our framework was applied on the two fundamental and important networks (Fig. 3) and fortunately we obtained satisfactory results compared with the baseline approaches (Fig. 8).

As shown in Fig. 4 the Dolphin network can be treated as a network having 4 communities, Wherein the main two communities are node 1 — node 20 and node 21 —



Fig. 3. Community structures of the Karate network (*a*) and American football network (*b*) as detected by our model where each color represents distinct community

node 62. Furthermore the community comprising of nodes from node 21 — node 62 are further split into 3 sub-communities.

Next our model was applied on Facebook network. For the sake of expositional clarity, we skip the labels of the nodes so that the different community structures can be seen clearly as shown in Fig. 5.

To visualize the relationship strength and the corresponding relationship score in a better way, we have plotted the Heatmap wherein nodes are represented by columns and rows showing which pair of nodes are most closely related as shown in Fig. 6. Each square shows the relationship between the nodes on each axis where maroon color indicates the positive relationship and blue color indicates the negative relationship. The varying intensity of color represents the measure of relationship. The stronger the color is the larger is the relationship magnitude.

Finally a brief internal working has been shown in Fig. 7 for better understanding of the model. A sampled graph obtained after performing BFS sampling on a simple graph having 15 nodes by taking seed node as 6, since BFS is fast in exploring the neighbourhood of a node so was choosen.

Evaluation Metrics and Performance Comparison

To validate the performance of our model we have employed NMI (normalized mutual information) and ARI (adjusted random index), conductance, F1 score to measure the similarity between the ground truth and detected community structures, and the results are shown in Fig. 8. Both the NMI and the ARI are commonly used similarity assessment standard metrics which are based on information theory and have been proven reliable. Given two community network divisions **A** and **B**, NMI (**A**; **B**) is computed as:

$$NMI(\mathbf{A}; \mathbf{B}) = \frac{2I(\mathbf{A}; \mathbf{B})}{H(\mathbf{A}) + H(\mathbf{B})}.$$
 (6)

Wherein $I(\mathbf{A}; \mathbf{B})$ represents mutual information of \mathbf{A} with \mathbf{B} and $H(\mathbf{B})$ denotes entropy from \mathbf{B} . The NMI value ranges between 0 through 1, wherein 0 means that the communities detected are totally independent of the ground



Fig. 4. Community structure of the Dolphin network clearly showing further splitting of 2nd community represented by green, light green and blue color

Fig. 5. Community structure of Facebook network, each color represents a separate community

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2022, том 22, № 5 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no 5



Fig. 7. Outline of our research framework

truth communities, while 1 means a complete match with the actual communities.

$$ARI = \frac{RI - Expected RI}{\max RI - Expected RI}.$$
 (7)

Wherein *RI* represents the similarity between two networks, partitions comprise all sample pairs. Subsequently, it computes the number of pairs in the expected and actual partitions of the network which are allotted to the different or the same network partitions.

Conductance measures the fraction of total edge volume that points outside the partition. The lower the conductance value the better is the partitioning. Conductance is computed as:

$$f(c) = sc/(2mc + sc).$$
(8)

Wherein f(c) is the quality-measure function which estimates the quality of a given community c; mc is the number of edges inside the community c; and sc is the number of edges leaving the community c, i.e. edges that connect the members of c to the other communities within that network.

F1 Score is the harmonic mean of precision and recall whose value ranges from 0 to 1 and it is calculated as:

F1 Score =
$$2 \frac{\text{precision} \times \text{recall}}{\text{precision} + \text{recall}}$$
. (9)

Fig. 8 reports the results of our framework on various networks using the above mentioned metrics, computed from the formulas (6)–(9).

In order to further compare the performance of our model with other baseline approaches, such as CDCN NMF proposed by Ye et. Al [6] and DPNMF proposed by Lu et al. [25], we used the NMI metric computed from equation (6) and the results are shown below in Fig. 9.



Fig. 8. Comparison of the different metric values obtained for the results of our model for the 4 public datasets

Applications

NMF has become an essential technique in multivariate data study because to the better semantic interpretability and resulting sparsity in accordance with the non-negativity. It has a long history of application to the domains of optimization, maths, neural computing, machine learning, pattern recognition, data mining, computer vision and image engineering, spectral analysis of data, chemo metrics, bioinformatics, criminology, geophysics, economics and finance. More peculiarly, such applications cover digital watermark, data mining of text, denoising of image, restoration of image, segmentation of image, image fusion, classification of image, image retrieval, hallucination of face, recognition of face, recognition of facial expression, audio pattern separation, speech recognition, music genre classification, microarray analysis, spectroscopy, blind source separation, classification of gene expression, cell analysis, processing of EEG signal, pathologic diagnosis, online discussion and prediction, email surveillance, network security, stock market pricing, earthquake prediction, and all that.



Fig. 9. Performance comparison in term of NMI on Karate (a) and Dolphin networks (b)

Conclusion

This work presented an improved non-negative matrix factorization model as well as comprehensive review of existing NMF methods employed in support of dynamic community detection. Moreover, this work highlighted the strengths and limitations of the existing methods in order to determine the extent to which work in this field is being done and to identify the significant research gap that exists as well as to investigate if significant improvement can be achieved on these existing NMF-based models. Fortunately, our model produced satisfactory results compared with the baseline approaches such as CDCN and DPNMF. Simultaneously there are some issues discussed below

References

- Girvan M., Newman M.E.J. Community structure in social and biological networks. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2002, vol. 99, no. 12, pp. 7821–7826. https://doi.org/10.1073/pnas.122653799
- Wang Y., Zhang Y. Nonnegative Matrix Factorization: A comprehensive review. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2013, vol. 25, no. 6, pp. 1336–1353. https://doi. org/10.1109/TKDE.2012.51
- Yang J., Leskovec J. Overlapping community detection at scale: A nonnegative matrix factorization approach. Proc. of the 6th ACM International Conference on Web Search and Data Mining (WSDM), 2013, pp. 587–596. https://doi.org/10.1145/2433396.2433471
- Wang F., Li T., Wang X., Zhu S., Ding C. Community discovery using nonnegative matrix factorization. *Data Mining and Knowledge Discovery*, 2011, vol. 22, no. 3, pp. 493–521. https://doi.org/10.1007/ s10618-010-0181-y
- Gao F., Yuan L., Wang W. Dynamic community detection using nonnegative matrix factorization. *Proc. of the International Conference on Computing Intelligence and Information System* (CIIS), 2017, pp. 39–45. https://doi.org/10.1109/CIIS.2017.56
- Ye Z., Zhang H., Feng L., Shan Z. CDCN: A new NMF-based community detection method with community structures and node attributes. *Wireless Communications and Mobile Computing*, 2021, pp. 5517204. https://doi.org/10.1155/2021/5517204
- Yang K., Guo Q., Liu J.Q. Community detection via measuring the strength between nodes for dynamic networks. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2018, vol. 509, pp. 256–264. https:// doi.org/10.1016/j.physa.2018.06.038
- Lin Y.R., Chi Y., Zhu S., Sundaram H., Tseng B.L. Facetnet: A framework for analyzing communities and their evolutions in dynamic networks. *Proc. of the 17th International Conference on World Wide Web*, 2008, pp. 685–694. https://doi. org/10.1145/1367497.1367590
- Lu H., Sang X., Zhao Q., Lu J. Community detection algorithm based on nonnegative matrix factorization and pairwise constraints. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2020, vol. 545, pp. 123491. https://doi.org/10.1016/j.physa.2019.123491
- Lee D., Seung H.S. Learning the parts of objects with non-negative matrix factorization. *Nature*, 1999, vol. 401, no. 6755, pp. 788–791. https://doi.org/10.1038/44565
- Cai D., He X., Han J., Huang T.S. Graph regularized nonnegative matrix factorization for data representation. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2011, vol. 33, no. 8, pp. 1548–1560. https://doi.org/10.1109/TPAMI.2010.231
- Chung F.R.K. Spectral Graph Theory. Published for the Conference Board of the mathematical sciences by the American Mathematical Society, 1997, 108 p.
- Yu W., Wu H., Jiao P., Wu H., Sun Y., Tang M. Modeling the local and global evolution pattern of community structures for dynamic networks analysis. *IEEE Access*, 2019, vol. 7, pp. 71350–71360. https://doi.org/10.1109/ACCESS.2019.2920237
- Shafia, Chachoo M.A. Social network analysis based criminal community identification model with community structures and node attributes. Proc. of the 4th International Conference on Smart Systems

that need to be considered in the future and we hope to make our approach more effective by resolving these issues and investigating other forms of matrix norm in order to develop the robust objective function.

Although NMF is competitive with well-known community detection approaches, on a variety of wellknown data sets networks, however in systems such as telephone or email networks, asymmetric communication rates pose problems because negative links in the graph are not allowed in NMF. Furthermore, because the NMF is totally a marked adjacency matrix adopter, it is irrelevant in numerous real-world applications where there are issues with data collection. Thus, the model to be used at any given time is determined by a variety of factors.

Литература

- Girvan M., Newman M.E.J. Community structure in social and biological networks // Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America. 2002. V. 99. N 12. P. 7821– 7826. https://doi.org/10.1073/pnas.122653799
- Wang Y., Zhang Y. Nonnegative Matrix Factorization: A comprehensive review // IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering. 2013. V. 25. N 6. P. 1336–1353. https://doi. org/10.1109/TKDE.2012.51
- Yang J., Leskovec J. Overlapping community detection at scale: A nonnegative matrix factorization approach // Proc. of the 6th ACM International Conference on Web Search and Data Mining, WSDM. 2013. P. 587–596. https://doi.org/10.1145/2433396.2433471
- Wang F., Li T., Wang X., Zhu S., Ding C. Community discovery using nonnegative matrix factorization // Data Mining and Knowledge Discovery. 2011. V. 22. N 3. P. 493–521. https://doi.org/10.1007/ s10618-010-0181-y
- Gao F., Yuan L., Wang W. Dynamic community detection using nonnegative matrix factorization // Proc. of the International Conference on Computing Intelligence and Information System (CIIS). 2017. P. 39–45. https://doi.org/10.1109/CIIS.2017.56
- Ye Z., Zhang H., Feng L., Shan Z. CDCN: A new NMF-based community detection method with community structures and node attributes // Wireless Communications and Mobile Computing. 2021. P. 5517204. https://doi.org/10.1155/2021/5517204
- Yang K., Guo Q., Liu J.Q. Community detection via measuring the strength between nodes for dynamic networks // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2018. V. 509. P. 256–264. https://doi. org/10.1016/j.physa.2018.06.038
- Lin Y.R., Chi Y., Zhu S., Sundaram H., Tseng B.L. Facetnet: A framework for analyzing communities and their evolutions in dynamic networks // Proc. of the 17th International Conference on World Wide Web. 2008. P. 685-694. https://doi. org/10.1145/1367497.1367590
- Lu H., Sang X., Zhao Q., Lu J. Community detection algorithm based on nonnegative matrix factorization and pairwise constraints // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2020. V. 545. P. 123491. https://doi.org/10.1016/j.physa.2019.123491
- Lee D., Seung H.S. Learning the parts of objects with non-negative matrix factorization // Nature. 1999. V. 401. N 6755. P. 788–791. https://doi.org/10.1038/44565
- Cai D., He X., Han J., Huang T.S. Graph regularized nonnegative matrix factorization for data representation // IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. 2011. V. 33. N 8. P. 1548– 1560. https://doi.org/10.1109/TPAMI.2010.231
- Chung F.R.K. Spectral Graph Theory. Published for the Conference Board of the mathematical sciences by the American Mathematical Society, 1997. 108 p.
- Yu W., Wu H., Jiao P., Wu H., Sun Y., Tang M. Modeling the local and global evolution pattern of community structures for dynamic networks analysis // IEEE Access. 2019. V. 7. P. 71350–71360. https:// doi.org/10.1109/ACCESS.2019.2920237
- Shafia, Chachoo M.A. Social network analysis based criminal community identification model with community structures and node attributes // Proc. of the 4th International Conference on Smart

and Inventive Technology (ICSSIT), 2022, pp. 334-339. https://doi. org/10.1109/ICSSIT53264.2022.9716286

- Ma X., Dong D. Evolutionary nonnegative matrix factorization algorithms for community detection in dynamic networks. *IEEE Transactions on Knowledge & Data Engineering*, 2017, vol. 29, no. 5, pp. 1045–1058. https://doi.org/10.1109/TKDE.2017.2657752
- Jiao P., Yu W., Wang W., Li X., Sun Y. Exploring temporal community structure and constant evolutionary pattern hiding in dynamic networks. *Neurocomputing*, 2018, vol. 314, pp. 224–233. https://doi. org/10.1016/j.neucom.2018.03.065
- Liu H.-F., Yuan L.-M.-Z. Community detection in temporal networks using triple nonnegative matrix factorization. *DEStech Transactions* on Computer Science and Engineering, 2017. https://doi. org/10.12783/dtcse/mmsta2017/19682
- Wang T., Liu Y., Xi Y.-Y. Identifying community in bipartite networks using graph regularized-based non-negative matrix factorization. *Journal of Electronics and Information Technology*, 2015, vol. 37, no. 9, pp. 2238–2245. (in Chinese). https://doi.org/10.11999/ JEIT141649
- Newman M.E.J. Modularity and community structure in networks. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2006, vol. 103, no. 23, pp. 8577–8582. https://doi. org/10.1073/pnas.0601602103
- Blondel V.D., Guillaume J.L., Lambiotte R; Lefebvre E. Fast unfolding of communities in large networks. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2008, pp. P10008. https://doi. org/10.1088/1742-5468/2008/10/P10008
- 21. Nguyen N.P., Dinh T.N., Tokala S., Thai M.T. Overlapping communities in dynamic networks: their detection and mobile applications. Proc. of the 17th Annual International Conference on Mobile Computing and Networking, MobiCom'11 and Co-Located Workshops, 2011, pp. 85-95. https://doi. org/10.1145/2030613.2030624
- He D., Jin D., Baquero C., Liu D. Link community detection using generative model and nonnegative matrix factorization. *PLoS ONE*, 2014, vol. 9, no. 1, pp. e86899. https://doi.org/10.1371/journal. pone.0086899
- Bashir S., Chachoo M.A. Community detection in online social networks: models and methods, a survey. *Gedrag & Organisatie Review*, 2020, vol. 33, pp. 1164–1175. https://doi.org/10.37896/ gor33.03/498
- Wang S., Li G., Hu G., Wei H., Pan Y., Pan Z. Community detection in dynamic networks using constraint non-negative matrix factorization. *Intelligent Data Analysis*, 2020, vol. 24, no. 1, pp. 119– 139. https://doi.org/10.3233/IDA-184432
- Lu H., Zhao Q., Sang X., Lu J. Community detection in complex networks using nonnegative matrix factorization and density-based clustering algorithm. *Neural Processing Letters*, 2020, vol. 51, no. 2, pp. 1731–1748. https://doi.org/10.1007/s11063-019-10170-1
- Zachary W.W. An information flow model for conflict and fission in small groups. *Journal of Anthropological Research*, 1977, vol. 33, no. 4, pp. 452–473. https://doi.org/10.1086/jar.33.4.3629752
- Lusseau D., Schneider K., Boisseau O.J., Haase P., Slooten E., Dawson S.M. The bottlenose dolphin community of doubtful sound features a large proportion of long-lasting associations. *Behavioral Ecology and Sociobiology*, 2003, vol. 54, no. 4, pp. 396–405. https:// doi.org/10.1007/s00265-003-0651-y
- McAuley J., Leskovec J. Learning to discover social circles in ego networks. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2012, vol. 1, pp. 539–547.

Authors

Shafia Bashir — Research Scholar, University of Kashmir, Srinagar, 190006, India, 57210047446, https://orcid.org/0000-0002-5570-967X, imshafia@gmail.com

Manzoor Ahmad Chachoo — PhD, Scientist-D, University of Kashmir, Srinagar, 190006, India, s 56252797100, https://orcid.org/0000-0001-6702-6633, manzoor@kashmiruniversity.ac.in

Received 17.04.2022 Approved after reviewing 13.07.2022 Accepted 18.09.2022 Systems and Inventive Technology (ICSSIT). 2022. P. 334–339. https://doi.org/10.1109/ICSSIT53264.2022.9716286

- Ma X., Dong D. Evolutionary nonnegative matrix factorization algorithms for community detection in dynamic networks // IEEE Transactions on Knowledge & Data Engineering. 2017. V. 29. N 5. P. 1045–1058. https://doi.org/10.1109/TKDE.2017.2657752
- Jiao P., Yu W., Wang W., Li X., Sun Y. Exploring temporal community structure and constant evolutionary pattern hiding in dynamic networks // Neurocomputing. 2018. V. 314. P. 224–233. https://doi. org/10.1016/j.neucom.2018.03.065
- Liu H.-F., Yuan L.-M.-Z. Community detection in temporal networks using triple nonnegative matrix factorization // DEStech Transactions on Computer Science and Engineering. 2017. https://doi. org/10.12783/dtcse/mmsta2017/19682
- Wang T., Liu Y., Xi Y.-Y. Identifying community in bipartite networks using graph regularized-based non-negative matrix factorization // Journal of Electronics and Information Technology. 2015. V. 37. N 9. P. 2238–2245. (in Chinese). https://doi.org/10.11999/JEIT141649
- Newman M.E.J. Modularity and community structure in networks // Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America. 2006. V. 103. N 23. P. 8577–8582. https://doi. org/10.1073/pnas.0601602103
- Blondel V.D., Guillaume J.L., Lambiotte R., Lefebvre E. Fast unfolding of communities in large networks // Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment. 2008. P. P10008. https://doi. org/10.1088/1742-5468/2008/10/P10008
- Nguyen N.P., Dinh T.N., Tokala S., Thai M.T. Overlapping communities in dynamic networks: their detection and mobile applications // Proc. of the 17th Annual International Conference on Mobile Computing and Networking, MobiCom'11 and Co-Located Workshops. 2011. P. 85–95. https://doi.org/10.1145/2030613.2030624
- He D., Jin D., Baquero C., Liu D. Link community detection using generative model and nonnegative matrix factorization // PLoS ONE. 2014. V. 9. N 1. P. e86899. https://doi.org/10.1371/journal. pone.0086899
- Bashir S., Chachoo M.A. Community detection in online social networks: models and methods, a survey // Gedrag & Organisatie Review. 2020. V. 33. P. 1164–1175. https://doi.org/10.37896/ gor33.03/498
- Wang S., Li G., Hu G., Wei H., Pan Y., Pan Z. Community detection in dynamic networks using constraint non-negative matrix factorization // Intelligent Data Analysis. 2020. V. 24. N 1. P. 119– 139. https://doi.org/10.3233/IDA-184432
- Lu H., Zhao Q., Sang X., Lu J. Community detection in complex networks using nonnegative matrix factorization and density-based clustering algorithm // Neural Processing Letters. 2020. V. 51. N 2. P. 1731–1748. https://doi.org/10.1007/s11063-019-10170-1
- Zachary W.W. An information flow model for conflict and fission in small groups // Journal of Anthropological Research. 1977. V. 33. N 4. P. 452–473. https://doi.org/10.1086/jar.33.4.3629752
- Lusseau D., Schneider K., Boisseau O.J., Haase P., Slooten E., Dawson S.M. The bottlenose dolphin community of doubtful sound features a large proportion of long-lasting associations // Behavioral Ecology and Sociobiology. 2003. V. 54. N 4. P. 396–405. https://doi. org/10.1007/s00265-003-0651-y
- McAuley J., Leskovec J. Learning to discover social circles in ego networks // Advances in Neural Information Processing Systems. 2012. V. 1. P. 539–547.

Авторы

Шафия Башир — научный сотрудник, Университет Кашмира, Срина́гар, 190006, Индия, 55 57210047446, https://orcid.org/0000-0002-5570-967X, imshafia@gmail.com

Мансур Ахмад Чачу — PhD, научный работник, Университет Кашмира, Срина́гар, 190006, Индия, № 56252797100, https://orcid. org/0000-0001-6702-6633, manzoor@kashmiruniversity.ac.in

Статья поступила в редакцию 17.04.2022 Одобрена после рецензирования 13.07.2022 Принята к печати 18.09.2022



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» Ι/ΙΤΜΟ

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИК

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-951-961 УДК 681.784.8

Система визуального отображения изменения физиологического состояния пациентов с хроническим нарушением сознания и передачи данных по беспроводной оптической связи Светлана Андреевна Вострикова^{1⊠}, Кира Олеговна Погорелова², Даниил Сергеевич Ширяев³, Екатерина Владимировна Ткачева⁴, Никита Александрович Беляков⁵, Яков Николаевич Ковач⁶, Юрий Сергеевич Андреев⁷, Ирина Геннадьевна Смирнова⁸, Екатерина Анатольевна Кондратьева⁹

1,2,3,4,5,6,7,8 Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

⁹ Российский научно-исследовательский нейрохирургический институт имени профессора А.Л. Поленова,

филиал ФГБУ «НМИЦ им. В.А. Алмазова», Санкт-Петербург, 191014, Российская Федерация

⁹ Военно-медицинская академия им. С.М. Кирова, Санкт-Петербург, 194044, Российская Федерация

⁹ Федеральный научно-клинический центр реаниматологии и реабилитологии, Москва, 107031, Российская Федерация

¹ svetlanadegtiareva@itmo.ru^{\overlines}, https://orcid.org/0000-0001-9539-8418

² pogorelovakira@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-4455-1117

³ dshiryaev@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0001-8612-0297

⁴ tkacheva@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0003-2774-0423

⁵ belykovna@rambler.ru, https://orcid.org/0000-0002-1271-0195

⁶ j-n-kovach@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0003-4858-4968

7 yura.andreev.98@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-7806-8652

⁸ igsmirnova@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0001-8357-3987

9 eak2003@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-4715-7585

Аннотация

Предмет исследования. Представлена система визуального отображения изменения физиологического состояния пациентов и передачи данных по беспроводной оптической связи. Существующие методы на основе прикроватных мониторов не предоставляют возможность визуального отображения информации вблизи объекта в условиях высокой загруженности персонала и позволяют осуществлять передачу данных по электрическому кабелю или дистанционно в радиочастотном диапазоне. Подобные недостатки снижают оперативность реагирования персонала и приводят к большому количеству ошибок в передаваемых данных. Более эффективна удаленная оперативная система мониторинга, обеспечивающая сбор данных с датчиков, отображение с минимальным временем задержки и передачу данных по помехозащищенному каналу связи в оптическом диапазоне. Простой и наглядный способ отображения информации позволяет оперативно, безошибочно и точно распознать критические ситуации. Метод. Предлагаемая система имеет два канала. По первому каналу осуществляется визуальное отображение изменения физиологического состояния на носимом устройстве в виде браслета. Второй канал передает данные об отклонении в состоянии пациента по беспроводной оптической связи в инфракрасном диапазоне спектра для последующего подробного отображения на компьютере. Визуальное отображение изменения физиологического состояния состоит в программируемом изменении цветности индикаторных светодиодов и изменении режимов их свечения. Полученные результаты. Представлена структурная схема и конструкция системы визуального отображения и передачи данных. В рамках оценки работоспособности системы выполнена оценка нагрева устройства визуального отображения в среде COMSOL Multiphysics. Показано, что средняя температура нагрева индикаторной части, соприкасающейся с кожей человека, не превышает 24 °С и безопасна для пациента. Предложена оптическая схема блока приема и передающего модуля. Оптическая модель модуля разработана в программе Zemax. Предложена оптическая схема

[©] Вострикова С.А., Погорелова К.О., Ширяев Д.С., Ткачева Е.В., Беляков Н.А., Ковач Я.Н., Андреев Ю.С., Смирнова И.Г., Кондратьева Е.А., 2022

блока приема и передающего модуля. Показано, что требуемая средняя оптическая мощность рабочей области спектра составляет 235 мкВт при наличии четырех инфракрасных светодиодов и фотодиодов, расположенных на расстоянии 1 м друг от друга. Рассмотрено описание рабочего макета устройства визуального отображения и передачи данных, включающего цифровой датчик пульса и уровня кислорода в крови, блок управления цветностью и обработки данных, устройство визуального отображения, блок передачи данных. Режимы работы светодиодов и их соответствие отклонению контролируемых параметров проверено специальной программой микроконтроллера. **Практическая значимость.** Внедрение разрабатываемой системы актуально при мониторинге состояния объекта наблюдения в случаях, когда применение радиочастотного диапазона ограничено, и важную роль играет устойчивость канала передачи данных к электромагнитным помехам.

Ключевые слова

система визуального отображения, беспроводная оптическая связь

Благодарности

Экспериментальное исследование выполнено в рамках гранта РФФИ 19-29-01066/2022. Авторы выражают благодарность Российскому научно-исследовательскому нейрохирургическому институту им. А.Л. Поленова (филиалу НМИЦ им В.А. Алмазова) за помощь и участие в формировании технического облика объекта визуального отображения.

Ссылка для цитирования: Вострикова С.А., Погорелова К.О., Ширяев Д.С., Ткачева Е.В., Беляков Н.А., Ковач Я.Н., Андреев Ю.С., Смирнова И.Г., Кондратьева Е.А. Система визуального отображения изменения физиологического состояния пациентов с хроническим нарушением сознания и передачи данных по беспроводной оптической связи // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 951–961. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-951-961

Visual display system of changes in physiological states for patients with chronic disorders and data transmission via optical wireless communication

Svetlana A. Vostrikova^{1⊠}, Kira O. Pogorelova², Daniil S. Shiryaev³, Ekaterina V. Tkacheva⁴, Nikita A. Belyakov⁵, Yakov N. Kovach⁶, Yurii S. Andreev⁷, Irina G. Smirnova⁸, Ekaterina A. Kondratieva⁹

1,2,3,4,5,6,7,8 ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

⁹ Polenov Neurosurgical Institute (Branch of Almazov National Medical Research Centre), Saint Petersburg, 191014, Russian Federation

⁹ The S.M. Kirov Military Medical Academy, Saint Petersburg, 194044, Russian Federation

⁹ Federal Research and Clinical Center of Intensive Care Medicine and Rehabilitology, Moscow, 107031, Russian Federation

¹ svetlanadegtiareva@itmo.ru^{\top}, https://orcid.org/0000-0001-9539-8418

² pogorelovakira@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0002-4455-1117

³ dshiryaev@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0001-8612-0297

⁴ tkacheva@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0003-2774-0423

⁵ belykovna@rambler.ru, https://orcid.org/0000-0002-1271-0195

⁶ j-n-kovach@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0003-4858-4968

⁷ yura.andreev.98@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-7806-8652

⁸ igsmirnova@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0001-8357-3987

9 eak2003@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-4715-7585

Abstract

A visual display system of changes in the physiological state of patients and their data transmission via optical wireless communication is presented. Existing methods such as bedside monitors do not provide the possibility of visual display of information near the object in conditions of high workload of personnel and allow transmitting data via an electric cable or remotely in the radio frequency range. Such disadvantages reduce the responsiveness of personnel and lead to numerous errors in the transmitted data. A remote operational monitoring system is more effective, providing data collection from sensors, display with minimal delay time and data transmission over an interference-free communication channel in the optical range. A simple and visual way of displaying information allows to quickly and accurately recognize critical situations. The proposed system has two channels. The first channel provides a visual representation of changes in the physiological state on the visual display device in the form of a bracelet. The second channel allows transmitting data about the deviation in the patient's condition via optical wireless communication in the infrared range of the spectrum for detailed display on a computer. The visual representation of changes in the physiological state is based on programmable change in the color of the LED indicators and on change in their operation modes. The block diagram and design of the visual display and data transmission system are presented. As part of the evaluation of the system operability, the heating of the visual display device in the COMSOL Multiphysics was evaluated. It is shown, that the average heating temperature of the indicator part in contact with human skin does not exceed 24 °C and is safe for the patient. The optical scheme of the receiving unit and the transmitting module is presented. The optical model of the module is presented in the Zemax program. It is shown, that the required average optical power of the working spectral region is 235 µW for the four infrared LEDs and four photodiodes located at a distance of 1 meter. A description of the working layout of a visual display and data transmission device is presented, including a digital pulse sensor and blood oxygen level, a color control and data processing unit, a visual display device, and a data transmission unit. The LEDs operation modes and its compliance with the deviation of the controlled parameters were checked by a special microcontroller program of practical significance. The implementation of the developed system is relevant when monitoring the condition of the object of observation in cases where the use of the radio frequency range is limited and the stability of the data transmission channel to electromagnetic interference plays an important role.

Keywords

visual display system, optical wireless communication

Acknowledgements

The experiment study was carried out under the RFBR grant 19-29-01066/2022. The authors express their gratitude to Polenov Neurosurgical Institute for participation in the formation of the technical appearance for the visual display device.

For citation: Vostrikova S.A., Pogorelova K.O., Shiryaev D.S., Tkacheva E.V., Belyakov N.A., Kovach Y.N., Andreev Y.S., Smirnova I.G., Kondratieva E.A. Visual display system of changes in physiological states for patients with chronic disorders and data transmission via optical wireless communication. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 951–961. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-951-961

Введение

Хроническое нарушение сознания — клиническое состояние, развивающееся после комы в результате различных видов травм (черепно-мозговой травмы, инсульта, переохлаждения или перегрева). Характеризуется восстановлением бодрствования при полном или почти полном отсутствии признаков сознательного поведения. К хроническому нарушению сознания относятся вегетативное состояние и состояние минимального сознания, отличающиеся между собой отсутствием или наличием отчетливых признаков сознания, целенаправленного поведения и реакций на внешние стимулы [1]. Любое из этих видов нарушенного сознания представляет угрозы для жизни пациента и требует постоянного контроля основных показателей жизнедеятельности организма в реабилитационный период.

В отделениях реанимации и интенсивной терапии требуется непрерывный мониторинг физиологического состояния пациентов, т. е. сбор данных физиологических параметров за определенный промежуток времени в соответствии со стандартом минимального мониторинга проведения наркоза, реанимационных мероприятий и интенсивной терапии. Датчики, закрепленные на теле пациента, подключаются к прикроватному монитору для отображения данных на экране. Традиционный метод отображения имеет ряд недостатков. Например, на прикроватных мониторах по графикам, численным значениям и символам требуется время на анализ данных, но для быстрого принятия решений в критической ситуации важно интуитивно понятное отображение. Непрерывное наблюдение в стационарных условиях медицинским персоналом у монитора не представляется возможным в связи с большим количеством пациентов, участием в обходах, рабочих совещаниях. Отдельное внимание уделяется исследованию уровня шума сигналов тревоги, используемые в прикроватных мониторах в критических ситуациях. Для передачи сигналов тревоги используются акустические сигналы, если параметр жизненно важных показателей превышает заданный порог. В реальном клиническом применении это приводит к проблемам в виде таких сигналов, которые перестают своевременно интерпретироваться персоналом. Их громкость приводит к постоянному шумовому фону, сравнимого с шумом городской улицы, около 80 дБ, а в некоторых случаях и вовсе превышает

порог более чем на 30 дБ [2, 3]. Персонал утрачивает способность выделять действительно важные сигналы, либо реагирует на них с опозданием. Вопрос отключения сигнала тревоги противоречит медицинской этике. В результате можно сделать вывод, что проблема больничного шума не может быть решена, но в то же время звуковые сигналы на прикроватном мониторе не могут служить первостепенным индикатором изменения состояния пациента. В связи с этим возникает сдвиг от традиционных способов отображения состояния к оперативным системам удаленного мониторинга с небольшим временем задержки между считыванием и передачей данных, или между считыванием и визуальным отображением критической ситуации. В отделениях реанимации и интенсивной терапии скорость передачи данных о пациентах может влиять напрямую на скорость принятия решений.

В настоящее время реализуются беспроводные системы мониторинга пациентов на основе Wi-Fi и протокола Zigbee, примеры систем рассмотрены в работах [4-7]. Отмечено, что беспроводные технологии передачи данных в радиочастотном диапазоне приводят к ограничениям и снижению точности данных, вызванным чувствительностью устройств мониторинга к электромагнитным помехам. Помехи от мобильных телефонов и компьютеров также могут блокировать сигналы от оборудования мониторинга [8]. Передача данных через светодиоды в отделениях медицинского назначения решает данную проблему. В 2015 году ученые продемонстрировали передачу неискаженного сигнала электроэнцефалограммы на расстоянии 50 см и измерили скорость передачи данных 10 Гбит/с [9]. В 2019 году беспроводная оптическая связь в видимом диапазоне представлена как безопасная связь при воздействии излучения на новорожденных с низкой иммунной системой [10].

За последние 5 лет проведены исследования в области устройств медицинского мониторинга, которые стали более разнообразными. Ученые из Швейцарии и Италии рассмотрели систему MindBEAGLE в виде электроэнцефалографической шапки как средства оценки и метода общения с пациентами [11]. Разработаны носимые устройства для реабилитации¹ и восстановле-

¹ BrainWatch Tech [Электронный ресурс]. URL: https:// www.brainwatch.tech/ (дата обращения: 29.03.2022).

ния мышечной активности¹, устройства на основе электронного текстиля [12–14], и системы, описывающие основные параметры жизнедеятельности организма [15, 16]. Несмотря на практическую значимость описанных устройств и систем, они не предназначены для отображения состояния пациента.

Таким образом, возникает задача ускорения принятия решений и помехоустойчивой передачи данных с помощью понятной визуализации изменения физиологического состояния пациента для мгновенного, однозначного и безошибочного считывания медицинским персоналом. Необходима разработка беспроводного высокоскоростного защищенного канала связи в оптическом диапазоне, что позволит добиться отсутствия электромагнитных помех по сравнению с уже используемыми технологиями.

Цель работы — разработка системы визуального отображения изменения физиологического состояния пациентов с хроническим нарушением сознания с возможностью передачи данных по технологии беспроводной оптической связи.

Описание системы визуального отображения и передачи данных

Разрабатываемая система предназначена для мониторинга изменения физиологического состояния пациентов с хроническим нарушением сознания и передачи данных о его ухудшении по технологии беспроводной оптической связи. Система осуществляет сбор и обработку полученных физиологических параметров, а также отображение изменения состояния пациентов посредством изменения цветности излучения светодиодов на устройстве визуального отображения. При изменении физиологического состояния пациента медицинский персонал должен получить визуально и удаленно информацию о больных, не находясь в непосредственной близости к пациенту.

Обоснование измеряемых сигналов и диапазоны нормальных значений рассмотрены в работе [17].

На рис. 1 представлена структурная схема системы визуального отображения и передачи данных с использованием одного датчика.

Блок-схема системы показана на рис. 2.

Медицинские датчики подключены по шине I2C к микроконтроллеру Блока управления цветностью и обработки данных: датчики температуры и пульсоксиметрии. Датчик пульсоксиметрии отвечает за два параметра: насыщение артериальной крови кислородом и частоту пульса. Параметры сравниваются в Микроконтроллере с диапазоном нормальных значений и в зависимости от состояния пациента (выше или ниже границы нормальных значений, состояние в норме) представляются на Устройстве визуального отображения в виде цветовых координат RGB и заданных режимов работы светодиодов для каждого параметра. Для осуществления функции визуального отображения изменений физиологического состояния пациентов



Рис. 1. Структура системы визуального отображения и передачи данных:

медицинский датчик; 2 — блок управления цветностью и обработки данных; 3 — устройство визуального отображения;
 4 — блок передачи данных; 5 — блок приема данных

Fig. 1. Structure of visual display and data transmission system, where l — medical sensor, 2 — color control and data processing module, 3 — visual display device, 4 — data transmission module, 5 — data receiving module

используется браслет, располагаемый на запястье пациента (подробное описание устройства представлено в разделе «Расчет основных элементов системы»). В случае отклонения значения состояния пациента от нормы сигнал тревоги с Микроконтроллера передается на Блок передачи данных, где формируются пакеты данных, которые отправляются по беспроводному каналу связи с помощью матрицы инфракрасных (ИК) светодиодов 2 × 2 на Блок приема данных в виде оптического информационного сигнала. Сигнал в фотоприемном модуле поступает на Усилитель, преобразовывающий фототок фотодиодов в напряжение информационного сигнала. Сигнал на выходе Усилителя — инвертированный. Далее сигнал от фотодиодов после Усилителя направляется на Сумматор, чтобы суммировать сигнал, а также компенсировать инверсию Усилителя. На выходе Сумматора находится фильтр высоких частот (ФВЧ) для исключения постоянной составляющей сигнала, а также фильтр низких частот (ФНЧ) для подавления в сигнале гармоник высокого порядка. Далее сигнал поступает на аналогово-цифровой преобразователь Микроконтроллера, после чего расшифрованные передаваемые данные от Блока приема данных с помощью преобразователя UART интерфейса в USB поступают на персональный компьютер или сервер. Отметим, что Устройство визуального отображения и Блок передачи данных реализуются раздельно. Блок передачи данных по беспроводному оптическому каналу связи предназначен для считывания данных в стационарных условиях наблюдения за пациентами. Устройство визуального отображения на основе браслета предназначено для оперативного мониторинга изменения состояния. К устройству предъявляются следующие требования: локальное размещение на теле пациента для минимального теплового воздействия, время начала визуального отображения после обнаружения изменения состояния пациента не более 5 секунд, суммарное время передачи пакета данных не более 2 секунд. Установленные значения соответствуют требованиям отделения реанимации

¹ TeslaSuit [Электронный ресурс]. URL: https://teslasuit.io/ (дата обращения: 24.03.2022).



Puc. 2. Блок-схема системы визуального отображения и передачи данных *Fig.* 2. Diagram of the visual display and data transmission system

и интенсивной терапии РНХИ им. А.Л. Поленова и обеспечат своевременное распознание критических ситуаций.

Способ передачи данных реализуется следующим образом. Исходные 32 бита хранят в себе значения насыщения крови кислородом, температуры и частоты пульса. После их кодирования с помощью кода Хэмминга и Манчестерского кодирования получается выходной пакет размером 84 бита. Данный пакет передается с помощью амплитудной модуляции (Onoff keying). Блок передачи данных включает матрицу ИК светодиодов для передачи логической единицы и выключает для передачи логического нуля на определенное время в зависимости от используемой частоты передачи данных. В зависимости от сигнала на Фотодетекторе, расположенном в Блоке приема данных, алгоритм восстанавливает отправленную последовательность и декодирует в исходную, т. е. в передаваемые данные. Подробное описание выбора формата пакета данных, схемы модуляции и выбора параметров передачи данных с последующей оценкой результатов будет рассмотрено авторами настоящей работы в последующих исследованиях.

Приведем примеры сценариев изменения цветности излучения светодиодов и их расшифровку (рис. 3). За основу возьмем цифровые значения, полученные с датчиков, которые сводятся к координатам цветности. Цвет дает представление о типе отклонения: при выходе значений за пределы нижней границы цветности светодиоды излучают в диапазоне холодных цветов, за пределы верхней границы — теплых цветов. Режим работы светодиодов дает представление о том, какой параметр отклоняется, при этом имитируется физиологическая реакция организма (частота пульса — медленная или быстрая частота мигания светодиодов, температура тела — изменение интенсивности излучения светодиодов, насыщение крови кислородом — последовательное включение светодиодов). Таким образом, изменение цветности и режим работы светодиодов представляет двухфакторный способ задания физиологического состояния пациента. Данный способ предотвращает ложное понимание отклонений.

Светодиодная лента задает базис в цветовом пространстве в виде треугольника (рис. 4), который ограничивает гамму цветов в следующих координатах: x = 0,7; *y* = 0,29; *x* = 0,16; *y* = 0,71; *x* = 0,13; *y* = 0,69. Выбранные цвета задаются программой на Микроконтроллере и являются оптимальными по энергопотреблению и эргономике. Спектр излучения светодиодов и координаты цветности для каждого режима работы были измерены спектрометром UPRTek MK305. Координаты цветности представлены на цветовом пространстве CIE 1931 и определены в соответствии с удаленными друг от друга центрами эллипсов Мак Адама. Согласно данному подходу, для понятного восприятия и однозначного различения наблюдателем оттенков цветов при изменении цветности излучения необходимо, чтобы координаты цветности излучения светодиодов находились как можно дальше друг от друга. В этом случае цветности для каждого измеряемого параметра будут различимы и дадут безошибочное представление о типе и характере отклонения.

Расчет основных элементов системы

Поскольку в разработке носимого устройства визуального отображения использованы светодиодные ленты, необходимо убедиться, что он будет безопасен



Puc. 3. Примеры сценариев изменения цветности излучения светодиодов на объекте визуального отображения данных для параметров: за пределами нижней границы значений (*a*); в норме (*b*); за пределами верхней границы значений (*c*)
 Fig. 3. Scenarios of light-emitting diodes on the visual display device: the values are below the normal range (*a*), the values are in the normal range (*b*), the values are above normal range (*c*)

для пациента. Устройство на основе светодиодных элементов в процессе работы выделяет некоторое количество теплоты, которое зависит от мощности и типа конструкции. Допустимый нагрев тканей человеческого



Рис. 4. Цветовое пространство с эллипсами Мак Адама, соответствующими цветовым координатам.

- Т температура тела; SpO₂ насыщение крови кислородом; ЧСС — частота сердечных сокращений; Н — нормальное состояние
- *Fig. 4.* Color space with Mac Adam ellipses corresponding to color coordinates.
- T body temperature, SpO_2 oxygen saturation, 4CC heart rate, H normal state

организма не должен превышать 43 °C [18]. Кроме светодиодных лент, значительные изменения в тепловое распределение вносит используемый материал браслета, который является границей между кожей пациента и светодиодной ленты.

Для предварительной оценки величины нагрева проведено моделирование системы в программном пакете COMSOL Multiphysics. В устройстве визуального отображения использована светодиодная лента со светодиодами типоразмера 5050, с плотностью светодиодов 60 шт/м. В расчете учтено значение тепловой мощности светодиодных лент, однако определить его однозначно невозможно, так как при изменении спектра излучения, изменится и соотношение полезной и тепловой мощности. Потому при моделировании примем среднее для светодиодных лент значение КПД 70 %, при котором значение тепловой мощности будет составлять 12,6 Вт/м. В состав устройства визуального отображения входит силиконовый браслет длиной 21 см. Для браслета такой длины используем ленту длиной 13 см. Выбор материала обусловлен основными требованиями: гибкость (возможность изменения формы браслета для размещения устройства визуального отображения на запястьях различных диаметров); прочность (устойчивость к механическим и вибрационным нагрузкам, прочность на разрыв); сниженный риск аллергической реакции (не должен вызывать раздражений на коже при длительном использовании, силикон является гипоаллергенным материалом и может быть использован людьми, страдающими сахарным диабетом и другими заболеваниями); простота в изготовлении (простота технологии производства браслетов, не требующей применения сложных технологических операций с применением нескольких единиц оборудования).

После создания геометрической модели зададим для каждого компонента материал и необходимые граничные условия. Основные граничные условия для модели, приближенной к реальной среде, в пакете COMSOL Multiphysics:

- температура окружающей среды $T_{\text{ext}} = 24 \text{ °C};$
- граничный источник тепла тепловая мощность светодиодов P₀ = 0,72 Вт, заданная для тонкого слоя рабочей области каждого светодиода;
- поток тепла теплопередача от верхней и нижней границ системы в соответствии с законом Ньютона– Рихмана

$$q_0 = h(T_{\text{ext}} - T),$$

где h = 25 Вт/(м²·К) — коэффициент теплоотдачи; q_0 — удельный тепловой поток, Вт; T — температура поверхности, °С.

Результат в виде температурного поля и значения максимальной температуры на нижней поверхности устройства, контактирующей с телом человека, представлен на рис. 5. При моделировании решалась стационарная задача теплопроводности.

Полученные значения максимальной температуры на нижнем слое устройства попадают в безопасный для человеческого организма диапазон. Отметим, что предложенная система является финальным техническим решением, ранние результаты по моделированию теплового распределения рассмотрены в работе [17], где устройство визуального отображения было также выполнено на основе аналогичной RGB светодиодной ленты в виде одеяла. Предлагаемое устройство отличается типом и свойствами материала, простотой конструкции. Характер теплового распределения незначительно отличается от результатов предыдущей работы. Финальное устройство согласовано с руководителем группы изучения минимального сознания при РНХИ им. А.Л. Поленова, с которым ведется сотрудничество.

Для подтверждения необходимости использования вторичной оптики в предлагаемой конструкции оптической схемы Блока передачи данных выполнено оптическое моделирование в программном комплексе Zemax. Модели светодиода и фотоприемника импортированы из Компаса-3D в Zemax. В качестве источника и приемника оптического излучения ближнего ИК диапазона выбраны светодиод ARPL-1W-EPL38 в диапазоне длин волн 930-940 нм и кремниевый фотодиод FDS100 фирмы Thorlabs, который обладает необходимой спектральной чувствительностью в соответствии с выбранными ИК светодиодами. На рассматриваемых фотодиодах установлена собирающая линза LA1576 компании Thorlabs, что учтено при построении оптической схемы. Начальная рассматриваемая оптическая система представлена на рис. 6, которая состоит из матрицы ИК светодиодов и фотодиодов 2 × 2.

В качестве источника излучения задан объект «Source Radial», которому присвоены характеристики, указанные в спецификации светодиода: оптическая мощность светодиода 65 мВт и диаграмма направленности, соответствующая глубокому типу кривой силы света с углом раскрытия светового потока 60°, а также длина волны 940 нм. В качестве квадратного кристалла ИК фотодиода использован объект «Detector Rectangle» с размером стороны 3,6 мм и количеством пикселов 1000×1000. Для линзы LA1576 использован материал N-BK7.

При начальном расстоянии между массивами светодиодов и фотодиодов 100 мм среднее значение опти-



Рис. 5. Распределение температуры по поверхности устройства визуального отображения: на верхнем (*a*) и нижнем (*b*) слоях. 31 °C и 24 °C — максимальные значения температуры на нижнем слое; 20·10^{−3} м — координата по оси *z*

Fig. 5. Temperature distribution over the surface of the visual display device: on the top layer (*a*), on the bottom layer (*b*). 31 °C and 24 °C are the maximum temperature on the bottom layers, $20 \cdot 10^{-3}$ is coordinate along the *z* axis



Рис. 6. Оптическая система приемопередатчика системы. *I* — матрица инфракрасных светодиодов; *2* — фотодиоды 2 × 2

Fig. 6. Optical system between receiver and transmitter l— matrix of IR LED, $2 - 2 \times 2$ photodiodes

ческой мощности, приходящей на фоточувствительную область фотодиода, составило 0,7 мВт. Отметим, что при последующем увеличении между источниками и приемниками излучения до 1 м излучение практически не достигает плоскостей детекторов. Так, при количестве расчетных лучей, равном 10 млн, плоскости каждого детектора достигает порядка 2,2 тыс. лучей.

В результате моделирования заметим, что для осуществления работы разрабатываемой системы требуется применение дополнительного оптического элемента, в качестве которого предложено использовать вторичную оптику для светодиодов.

При помощи алгоритма встроенной оптимизации Zemax (метод Левенберга–Марквардта) найдем требуемое фокусное расстояние параксиальной линзы, которое позволит значительно увеличить освещенность поверхности фотодиода FDS100. Поиск оптимального фокусного расстояния и расстояния между линзой и фокусирующей линзой вторичной оптики произведем методом оптимизации «Градиентный спуск». Выполним данным методом расчет значения оценочной функции:

$$MF^2 = \frac{\sum W_i (V_i - T_i)^2}{\sum W_i}$$

где W_i — абсолютное значение веса операнда; V_i и T_i — текущее и необходимое значения операнда.

В процессе оптимизации для операнда NSTR (Non-Sequential trace), который обращается к полной освещенности исследуемого фотодетектора, произведен итерационный расчет MF² при различных расстояниях между светодиодом и фокусирующей линзой. В результате найдем положение элементов, обеспечивающее максимальную освещенность чувствительной области фотодиода. Для случая оптимизации с одним операндом значение веса W = 1 значение T — полная оптическая мощность массива светодиодов — 260 мВт, когда текущее значение V рассчитывается при запуске оптимизации. Исходя из построения численной задачи возможно гарантировать, что у оценочной функции будет единственный максимум, который найдем в результате оптимизации. Таким образом, сходимость метода градиентного спуска гарантирована.

Использование предлагаемой по результатам численной оптимизации вторичной оптики позволит получить среднюю оптическую мощность на фоточувствительной области равную 235 мкВт (рис. 7), что достаточно для реализации системы. Флуктуации в распределении освещенности возможно связать со случайным характером численного моделирования, а увеличение освещенности по окружности — со сферической аберрацией.

Выполним аналогичные исследования для системы с единственным светодиодом и фотодиодом. Получим уменьшенное значение оптической мощности, которое объясняется тем, что в системе, рассмотренной ранее, на фотодиод в меньшей степени, попадают лучи от светодиодов, которые ему не соосны. Это происходит, если в настоящей системе существует излучение лишь от светодиода, расположенного соосно. Результатом численного моделирования соответствует оптическая мощность, равная 122 мкВт. Около половины приходящего на ИК фотодиод излучения относится к соосному светодиоду, а значит, при сборке системы требуется монтаж передающего и приемного модулей с высокой точностью.

Выполним расчет фототока, появившегося при поглощении оптической мощности на каждом из четырех фотодиодов. В результате получим, что при фоточувствительности, равной 0,61 А/Вт, получаемый фототок на одном фотодиоде составил 143,4 мкА. В оптической системе, где используется одиночные источник и приемник излучения, результирующий фототок — 74,4 мкА.

При протекании получаемого фототока I_{ph} через резистор с сопротивлением R рассчитаем падение напряжения:

$$U = I_{ph}R.$$

Таким образом, в системе, где использован одиночный фотодиод, падение напряжения на одном резисторе сопротивлением 5 кОм составит 372 мВ, а для системы,



Detector Image: Incoherent Irradiance

28.04.2022 Detector 29, NSCG Surface 1: Size 3.600 W X 3.600 H Millimeters, Pixels 1000 W X 1000 H, Total Hits = 361047 Peak Irradiance : 6.1441E-003 Watts/cm^2 Total Power : 2.3468E-004 Watts

Рис. 7. Распределение освещенности активной области фотодиода FDS100

Fig. 7. Illumination distribution of the active area of the photodiode FDS100
с расположенными в матрице фотодиодами, падение напряжения — 717 мВ.

Макет системы визуального отображения и передачи данных

На рис. 8 представлен макет системы визуального отображения и передачи данных. Макет состоит из цифрового датчика пульса и уровня SpO₂ MAX30102, блока управления цветностью и обработки данных, блока визуального отображения, блока передачи данных из матрицы ИК светодиодов и фотоприемного модуля. Блок управления цветностью и обработки данных представлен в виде корпуса с креплениями на горизонтальной поверхности, циркуляционными отверстиями для обеспечения эффективной конвекции и платы, основным компонентом которой является микроконтроллер STM32H7. Крепление основания и печатной платы устройства осуществлено с помощью винтов МЗ, а доступность печатной платы — в крышке, посаженной на винты с плоской головкой резьбой МЗ. Линейный стабилизатор выбран согласно питанию для микроконтроллера равное 3,3 В — модель LM1084IT-3.3/NOPB Texas Instruments в корпусе TO-220. Корпус для макета выполнен из пластмассы. В качестве драйвера ключа верхнего уровня в блоке передачи данных использована схема IR2110PBF.

С пульсоксиметра в цифровом виде считываются данные о пульсе и кислороде пациента, изменения отображаются на светодиодной ленте устройства визуального отображения. Проверка соответствия режима работы светодиодов с типом отклоняемых параметров осуществляется путем задания цифровых значений частоты в программе микроконтроллера. Для пониженного значения частоты пульса принята частота мигания светодиодов 2 Гц. Для различимости наблюдателем, для значений выше границы нормальных значений, частота мигания была задана в два раза больше 4 Гц.



Puc. 8. Макет системы *Fig. 8.* System layout

Заключение

Проведена предварительная оценка нагрева устройства визуального отображения, пороговое значение которого не превышает допустимый порог. Подтверждена безопасность устройства при контакте с кожей пациента. При эксплуатации системы температуру устройства визуального отображения можно снизить, изменяя электрическую мощность светодиодных лент для получения оптимального соотношения светового потока и выделяемой тепловой мощности. Отметим, что электрическая мощность будет минимальна благодаря импульсным сценариям отображения на устройстве визуального отображения, таким образом тепловой нагрев будет минимальным.

Проведен расчет основных элементов системы. На основе оптического моделирования выбрана конструкция приемопередающего модуля и показана необходимость использования вторичной оптики инфракрасных светодиодов. Оптимальное значение фокусного расстояния для системы с матрицами оптоэлектронных компонентов составило 9,8 мм при диаметре апертуры линзы 12 мм; для системы с одиночными компонентами — 10,8 мм с диаметром апертуры фокусирующей линзы 20 мм. Решение задачи увеличения оптической мощности, падающей на фоточувствительный элемент в системе, обуславливает актуальность настоящей работы и позволяет повысить стабильность и уменьшить PER (Packet Error Rate, пакетные ошибки) разрабатываемой системы передачи данных. Результаты работы позволили сформулировать рекомендации для систем передачи данных, основанных на инфракрасных светодиодах и применяемых для передачи данных на расстояния до 5 м. Одно из возможных решений для сохранения достаточного уровня мощности оптического сигнала — подбор светодиодов с меньшими углами раскрытия светового потока.

Создан макет и проведено тестирование отображения на примере сигнала с пульсоксиметра. Отметим, что микроконтроллер должен уметь работать с непрерывным потоком данных, безошибочно определяя состояние пациента и сравнивая с диапазоном нормальных значений. Для этого требуется добавить аппаратные прерывания — сигналы, по приходу которых выполнение программы останавливается и запускается функция обработки прерывания. Такой метод позволит микроконтроллеру работать с наибольшей скоростью и точностью, позволяя безошибочно передавать данные через инфракрасную светодиодную матрицу на приемник, а также визуализировать данные с помощью предустановленных режимов работы адресной светодиодной ленты.

Представленная система визуального отображения позволяет определять несколько параметров, отображающих физиологическое состояние пациента: частота сердечных сокращений, насыщение крови кислородом и температура тела. В системе использована технология беспроводной передачи данных (Optical Wireless Communication) с применением инфракрасных светодиодов.

Литература

- Бакулин И.С., Кремнева Е.И., Кузнецов А.В. и др. Хронические нарушения сознания / под ред. академика РАН М.А. Пирадова. М.: Горячая линия-Телеком, 2020. С. 1–12.
- Balogh D., Kittinger E., Benzer A., Hackl J. Noise in the ICU // Intensive Care Medicine. 1993. V. 19. N 6. P. 343–346. https://doi. org/10.1007/BF01694709
- Busch-Vishniac I., West J., Barnhill C., Hunter T., Orellana D., Chivukula R. Noise levels in Johns Hopkins Hospital // Journal of the Acoustical Society of America. 2005. V. 118. N 6. P. 3629–45. https:// doi.org/10.1121/1.2118327
- Chakole M., Jibhkate R., Choudhari A., Gawali S., Tule P. A healthcare monitoring system using wifi module // International Research Journal of Engineering and Technology (IRJET). 2017. V. 4. N 3. P. 1413–1417.
- Еременко А.А., Ростунова Н.В., Будагян С.А., Курносов А.В. Персональная телемедицинская система «Оберег» для дистанционного мониторинга пациентов // Вестник анастезиологии и реаниматологии. 2020. Т. 17. № 5. С. 87–94. https://doi. org/10.21292/2078-5658-2020-17-5-87-94
- Malika, Charu Rana. An indoor wireless Zigbee based patient monitoring system for hospitals // International Journal of Engineering Sciences Research-IJESR. 2013. V. 4. N 2. P. 792–795.
- Navya K., Murthy M.B.R. A Zigbee based patient health monitoring system // International Journal of Engineering Research and Applications. 2013. V. 3. N 5. P. 483–486.
- Mariappan P., Raghavan D., Abdel Aleem S., Zobaa A. Effects of electromagnetic interference on the functional usage of medical equipment by 2G/3G/4G cellular phones: A review // Journal of Advanced Research. 2016. V. 7. N 5. P. 727–38. https://doi. org/10.1016/j.jare.2016.04.004
- Dhatchayeny D., Sewaiwar A., Tiwari S., Chung Y. Experimental biomedical EEG signal transmission using VLC // IEEE Sensors Journal. 2015. V. 15. N 10. P. 5386–5387. https://doi.org/10.1109/ JSEN.2015.2453200
- Ali H., Ibtehaj Ahmad M.I., Malik A. Li-Fi based health monitoring system for infants // Proc. of the 2nd International Conference on Communication, Computing and Digital Systems (C-CODE). 2019. P. 69–72. https://doi.org/10.1109/C-CODE.2019.8681012
- Guger C., Allison B., Kammerhofer A., Guttmann F., Von Oertzen T.J., Spataro R., La Bella V., Annen J., Laureys S., Heilinger A., Ortner R., Cho W. MindBEAGLE — A new system for the assessment and communication with patients with disorders of consciousness and complete locked-in syndrom // Proc. of the IEEE International Conference on Systems, Man, and Cybernetics (SMC). P. 3008–3013. https://doi.org/10.1109/SMC.2017.8123086
- Wilheim F.H., Roth W.T., Sackner M.A. The LifeShirt: An advanced system for ambulatory measurement of respiratory and cardiac function // Behavior Modification. 2003. V. 27. N 5. P. 671–691. https://doi.org/10.1177/0145445503256321
- Zhang Y., Poon C.C.Y., Chan C., Tsang M.W.W., Wu K. A health-shirt using e-textile materials for the continuous and cuffless monitoring of arterial blood pressure // Proc. of the 3rd IEEE-EMBS International Summer School and Symposium on Medical Devices and Biosensors (ISSS-MDBS). 2006. P. 86–89. https://doi.org/10.1109/ ISSMDBS.2006.360104
- Chan C.H., Zhang Y.T. Continuous and long-term arterial blood pressure monitoring by using h-Shirt // Proc. of the 5th International Conference on Information Technology and Application in Biomedicine. 2008. P. 267–269. https://doi.org/10.1109/ ITAB.2008.4570615
- Lee B.-Ch., Kim J.Y., Choi S.H., Yoon Y.H. Use of an externalcooling device for the treatment of heat stroke // Clinical and Experimental Emergency Medicine. 2014. V. 1. P. 62–64. https://doi. org/10.15441/ceem.14.004
- Gogate U., Bakal J. Healthcare monitoring system based on wireless sensor network for cardiac patients // Biomedical and Pharmacology Journal. 2018. V. 11. N 3. P. 1681–1688. https://doi.org/10.13005/ bpj/1537
- 17. Вострикова С.А., Погорелова К.О., Ширяев Д.С., Полухин И.С., Андреев Ю.С., Смирнова И.Г., Кондратьева Е.А., Бугров В.Е. Система визуального отображения изменения физиологического состояния пациентов с хроническим нарушением сознания // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22. № 2. С. 401–409. https://doi. org/10.17586/2226-1494-2022-22-201-409

References

- Bakulin I.S., Kremneva E.I., Kuznetsov A.V. et al. *Chronic Disorders* of *Consciousness*. Ed. by M.A. Piradov. Moscow, Gorjachaja linija-Telekom Publ., 2020, pp. 1–12. (in Russian)
- Balogh D., Kittinger E., Benzer A., Hackl J. Noise in the ICU. Intensive Care Medicine, 1993, vol. 19, no. 6, pp. 343–346. https:// doi.org/10.1007/BF01694709
- B. Busch-Vishniac I., West J., Barnhill C., Hunter T., Orellana D., Chivukula R. Noise levels in Johns Hopkins Hospital. *Journal of the Acoustical Society of America*, 2005, vol. 118, no. 6, pp. 3629–45. https://doi.org/10.1121/1.2118327
- Chakole M., Jibhkate R., Choudhari A., Gawali S., Tule P. A healthcare monitoring system using wifi module. *International Research Journal of Engineering and Technology (IRJET)*, 2017, vol. 4, no. 3, pp. 1413–1417.
- Eremenko A.A., Rostunova N.V., Budagyan S.A., Kurnosov A.V. The personalized telemedical system of Obereg for remote patient's monitoring. *Messenger of Anesthesiology and Resuscitation*, 2020, vol. 17, no. 5, pp. 87–94. (in Russian). https://doi.org/10.21292/2078-5658-2020-17-5-87-94
- Malika, Charu Rana. An indoor wireless Zigbee based patient monitoring system for hospitals. *International Journal of Engineering Sciences Research-IJESR*, 2013, vol. 4, no. 2, pp. 792–795.
- Navya K., Murthy M.B.R. A Zigbee based patient health monitoring system. *International Journal of Engineering Research and Applications*, 2013, vol. 3, no. 5, pp. 483–486.
- Mariappan P., Raghavan D., Abdel Aleem S., Zobaa A. Effects of electromagnetic interference on the functional usage of medical equipment by 2G/3G/4G cellular phones: A review. *Journal of Advanced Research*, 2016, vol. 7, no. 5, pp. 727–38. https://doi. org/10.1016/j.jare.2016.04.004
- Dhatchayeny D., Sewaiwar A., Tiwari S., Chung Y. Experimental biomedical EEG signal transmission using VLC. *IEEE Sensors Journal*, 2015, vol. 15, no. 10, pp. 5386–5387. https://doi.org/10.1109/ JSEN.2015.2453200
- Ali H., Ibtehaj Ahmad M.I., Malik A. Li-Fi based health monitoring system for infants. Proc. of the 2nd International Conference on Communication, Computing and Digital systems (C-CODE), 2019, pp. 69–72. https://doi.org/10.1109/C-CODE.2019.8681012
- Guger C., Allison B., Kammerhofer A., Guttmann F., Von Oertzen T.J., Spataro R., La Bella V., Annen J., Laureys S., Heilinger A., Ortner R., Cho W. MindBEAGLE — A new system for the assessment and communication with patients with disorders of consciousness and complete locked-in syndrom. *Proc. of the IEEE International Conference on Systems, Man, and Cybernetics (SMC)*, pp. 3008–3013. https://doi.org/10.1109/SMC.2017.8123086
- Wilheim F.H., Roth W.T., Sackner M.A. The LifeShirt: An advanced system for ambulatory measurement of respiratory and cardiac function. *Behavior Modification*, 2003, vol. 27, no. 5, pp. 671–691. https://doi.org/10.1177/0145445503256321
- Zhang Y., Poon C.C.Y., Chan C., Tsang M.W.W., Wu K. A health-shirt using e-textile materials for the continuous and cuffless monitoring of arterial blood pressure. *Proc. of the 3rd IEEE-EMBS International Summer School and Symposium on Medical Devices and Biosensors* (*ISSS-MDBS*), 2006, pp. 86–89. https://doi.org/10.1109/ ISSMDBS.2006.360104
- Chan C.H., Zhang Y.T. Continuous and long-term arterial blood pressure monitoring by using h-Shirt. Proc. of the 5th International Conference on Information Technology and Application in Biomedicine, 2008, pp. 267–269. https://doi.org/10.1109/ ITAB.2008.4570615
- Lee B.-Ch., Kim J.Y., Choi S.H., Yoon Y.H. Use of an externalcooling device for the treatment of heat stroke. *Clinical and Experimental Emergency Medicine*, 2014, vol. 1, pp. 62–64. https:// doi.org/10.15441/ceem.14.004
- Gogate U., Bakal J. Healthcare monitoring system based on wireless sensor network for cardiac patients. *Biomedical and Pharmacology Journal*, 2018, vol. 11, no. 3, pp. 1681–1688. https://doi.org/10.13005/ bpj/1537
- Vostrikova S.A., Pogorelova K.O., Shiryaev D.S., Polukhin I.S., Andreev Y.S., Smirnova I.G., Kondratieva E.A., Bougrov V.E. Visual display system of changes in physiological state for patients with chronic disorders. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 2, pp. 401– 409. (in Russian). https://doi.org/10.17586/2226-1494-2022-22-401-409

 Lovik R.D., Abraham J.P., Sparrow E.M. Surrogate human tissue temperatures resulting from misalignment of antenna and implant during recharging of a neuromodulation device // Neuromodulation. 2011. V. 14. N 6. P. 501-511. https://doi. org/10.1111/j.1525-1403.2011.00396.x

Авторы

Вострикова Светлана Андреевна — младший научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0001-9539-8418, svetlanadegtiareva@ itmo.ru

Погорелова Кира Олеговна — инженер, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, https://orcid. org/0000-0002-4455-1117, pogorelovakira@itmo.ru

Ширяев Даниил Сергеевич — младший научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0001-8612-0297, dshiryaev@itmo.ru Ткачева Екатерина Владимировна — ментор, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, https://orcid. org/0000-0003-2774-0423, tkacheva@itmo.ru

Беляков Никита Александрович — младший научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0002-1271-0195, belykovna@rambler. ru

Ковач Яков Николаевич — инженер, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0003-4858-4968, j-n-kovach@itmo.ru

Андреев Юрий Сергеевич — инженер, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0001-7806-8652, yura.andreev.98@mail.ru

Смирнова Ирина Геннадьевна — кандидат технических наук, доцент, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, 557195684395, https://orcid.org/0000-0001-8357-3987, igsmirnova@itmo.ru

Кондратьева Екатерина Анатольевна — доктор медицинских наук, руководитель группы изучения минимального сознания, Российский научно-исследовательский нейрохирургический институт имени профессора А.Л. Поленова, филиал ФГБУ «НМИЦ им. В.А. Алмазова», Санкт-Петербург, 191014, Российская Федерация; старший преподаватель, Военно-медицинская академия им. С.М. Кирова, Санкт-Петербург, 194044, Российская Федерация; старший научный сотрудник, Федеральный научно-клинический центр реаниматологии и реабилитологии, Москва, 107031, Российская Федерация, 57191545581, https://orcid.org/0000-0003-4715-7585, eak2003@ mail.ru

Статья поступила в редакцию 11.06.2022 Одобрена после рецензирования 25.07.2022 Принята к печати 23.09.2022 Lovik R.D., Abraham J.P., Sparrow E.M. Surrogate human tissue temperatures resulting from misalignment of antenna and implant during recharging of a neuromodulation device. *Neuromodulation*, 2011, vol. 14, no. 6, pp. 501–511. https://doi. org/10.1111/j.1525-1403.2011.00396.x

Authors

Svetlana A. Vostrikova — Junior Researcher, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0001-9539-8418, svetlanadegtiareva@itmo.ru

Kira O. Pogorelova — Engineer, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0002-4455-1117, pogorelovakira@itmo.ru

Daniil S. Shiryaev — Junior Researcher, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0001-8612-0297, dshiryaev@itmo.ru

Ekaterina V. Tkacheva — Mentor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0003-2774-0423, tkacheva@itmo.ru

Nikita A. Belyakov — Junior Researcher, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0002-1271-0195, belykovna@rambler.ru

Yakov N. Kovach — Engineer, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0003-4858-4968, j-n-kovach@itmo.ru

Yurii S. Andreev — Engineer, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0001-7806-8652, yura.andreev.98@mail.ru

Irina G. Smirnova — PhD, Associate Professor, Associate Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, S 57195684395, https://orcid.org/0000-0001-8357-3987, igsmirnova@ itmo.ru

Ekaterina A. Kondratieva — D. Sc (Medicine), Head of MCS Study Group, Polenov Neurosurgical Institute (Branch of Almazov National Medical Research Centre), Saint Petersburg, 191014, Russian Federation; Senior Lecturer, The S.M. Kirov Military Medical Academy, Saint Petersburg, 194044, Russian Federation; Senior Researcher, Federal Research and Clinical Center of Intensive Care Medicine and Rehabilitology, Moscow, 107031, Russian Federation, 557191545581, https://orcid.org/0000-0003-4715-7585, eak2003@mail.ru

Received 11.06.2022 Approved after reviewing 25.07.2022 Accepted 23.09.2022



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» **VİTMO**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 No 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

университет итмо

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-962-969

Ice reconnaissance data processing under low quality source images Andrey V. Timofeev^{1⊠}, Denis I. Groznov²

1,2 LLP "EqualiZoom", Astana, 010000, Kazakhstan

¹ timofeev.andrey@gmail.com^{\Box}, https://orcid.org/0000-0001-7212-5230

² d.i.groznov@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0002-7874-7118

Abstract

A practically effective solution to the problem of automated processing of ice reconnaissance data in high latitudes is proposed. The intermediate result of ice reconnaissance is huge aerial survey data set consisting of images of low quality; this is a consequence of the difficult conditions of aerial survey in high latitudes. The goal of the study is to create a high-level method that can either efficiently process this pre-collected data set or perform real-time processing of similar images while ensuring high reliability in solving the problem of recognizing ice class distribution on the water surface with minimal computing resources. In particular, the problem of automatic classification of ice-floe size distribution (FSD) type for a three-class model based on aerial survey data is solved. The practically important case of low-quality images is considered, a common situation for the meteorological conditions of the Far North. The proposed approach is based on the use of machine learning methods, in particular on the well-known multi-class SVM (Support Vector Machine), which is extremely undemanding to computing resources and therefore can be implemented even by the onboard computer of an ice reconnaissance UAV. From the input images of low quality some numerical characteristics of the image are calculated which informatively characterize the image. These characteristics (features) are invariant to scaling, rotation and illumination as well as have a much smaller dimensionality than the original image. The main idea underlying the proposed method is to form an original set of features which are implemented in the original feature space. These features characterize large fragments of the analyzed image and are "stable", in contrast to the features that characterize small details. A new method of FSD type classification based on the processing of aerial survey data by using machine learning methods, which is sufficiently effective for processing low-quality images, has been proposed. Also, the original feature space for classification was proposed which ensured high practical efficiency of this method. The method has shown high efficiency when it is tested on a data set composed of low-quality real images (high blurriness, vagueness, presence of meteorological noises). The developed algorithm can be used for express analysis of ice reconnaissance data, including an ice reconnaissance UAV on-board software component.

Keywords

sea-ice floe size distribution, ice reconnaissance, image classification, multi-class SVM, image histogram, blurry images, sea-ice type classification

For citation: Timofeev A.V., Groznov D.I. Ice reconnaissance data processing under low quality source images. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 962–969. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-962-969

УДК 004.852

Обработка данных ледовой разведки при условии низкого качества исходных изображений Андрей Владимирович Тимофеев¹, Денис Игоревич Грознов²

1,2 ТОО «Эквализум», Астана, 010000, Казахстан

¹ timofeev.andrey@gmail.com^{\Box}, https://orcid.org/0000-0001-7212-5230

² d.i.groznov@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0002-7874-7118

Аннотация

Предмет исследования. Предложено практически эффективное решение задачи автоматизированной обработки данных ледовой разведки в высоких широтах. Промежуточный результат ледовой разведки — большой массив

© Timofeev A.V., Groznov D.I., 2022

данных аэрофотосъемки, состоящий из изображений низкого качества. Такой результат является следствием сложных условий аэрофотосъемки в высоких широтах. Цель работы — создание высокоэффективного метода, который при минимальных требованиях к вычислительным ресурсам способен или эффективно обработать предварительно собранный массив данных, или выполнить обработку подобных изображений в реальном масштабе времени. Метод должен обеспечить высокую надежность решения задачи по распознаванию класса распределения льдин на водной поверхности. Решена задача автоматической классификации типа распределения льдин по размерам для трехклассовой модели на основе данных аэрофотосъемки. Рассмотрен практически важный случай низкокачественных снимков, что является обычной ситуацией для метеорологических условий Крайнего Севера. Метод. Предложенный подход основан на использования методов машинного обучения, в частности на мультиклассовой машине опорных векторов, который является крайне нетребовательным к вычислительным ресурсам и поэтому может быть реализован даже бортовым вычислителем беспилотного летательного аппарата ледовой разведки. По входным изображениям низкого качества вычисляются многомерные числовые характеристики входного изображения, которые его информативно характеризуют. Характеристики (признаки) данного типа инвариантны к масштабу, повороту и освещению, а также имеют значительно меньшую размерность, чем исходное изображение. Основная идея, лежащая в основе предлагаемого метода, заключается в формировании оригинальной совокупности признаков. Признаки реализуются в оригинальном пространстве признаков, эффективно характеризуют крупные фрагменты анализируемого изображения и являются «устойчивыми», в отличие от признаков, характеризующих мелкие детали. Основные результаты. Предложен новый метод классификации типа распределения льдин на водной поверхности на основе обработки данных аэрофотосъемки с использованием методов машинного обучения, который эффективен для обработки низкокачественных изображений бортовым вычислителем беспилотного летательного аппарата ледовой разведки. Предложено оригинальное пространство признаков классификации, которое обеспечивает высокую практическую эффективность данного метода. Метод показал высокую эффективность при тестировании на наборе данных, составленном из реальных изображений низкого качества (высокая размытость, нечеткость, наличие метеорологических помех). Практическая значимость. Разработанный алгоритм может быть использован для экспресс-анализа данных ледовой разведки, в том числе и как компонент программного обеспечения бортовых вычислителей беспилотных летательных аппаратов ледовой разведки.

Ключевые слова

распределение размеров льдин, ледовая разведка, классификация изображений, мультиклассовая SVM, гистограмма изображения, размытые изображения, классификация типов морского льда

Ссылка для цитирования: Тимофеев А.В., Грознов Д.И. Обработка данных ледовой разведки при условии низкого качества исходных изображений // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 962–969 (на англ. яз.). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-962-969

Introduction

Shipping routes in the Northern latitudes, including the Northern Sea Route, do not have a permanent geographical reference and are formed based on a set of hydro-meteorological information which comes to the ship. As a rule, the total length of the route, in this case, is a variable value since throughout the route the vessel is under the influence of various ice conditions. In this case, the tortuosity coefficient always exceeds unity, and additional route length increase in old ice due to their circumvention is 10–30 % [1]. When laying routes in the Northern latitudes, the concept of a rational route that best meets some formal criterion (for example: route length, travel time along the route, fuel economy and others) plays an important role [2]. The main criterion used when constructing a rational route in the Northern latitudes is the total time spent on its passage time. A rational route is usually laid through the zones where: total ice cohesion is minimal, young ice forms prevail, and ice torsion is minimal. All this information can be obtained operatively only from ice reconnaissance data. Thus, without taking into account hydro-meteorological information, which is mainly the result of ice reconnaissance, the construction of a rational route is fundamentally impossible. Therefore, the role of ice reconnaissance in the set of tasks for providing logistics in northern latitudes is extremely important. The main navigational characteristic to be monitored during ice reconnaissance is the "ice cohesion" characteristic.

Ice cohesion is the ratio of the area of ice in area X to the total area of this area expressed in fractions or scores [3]. Let us denote this parameter by the symbol S(X). It is the parameter S(X) that cardinally affects the ability to navigate in a particular area of the sea [3]. More precisely: the resistance of broken ice increases in proportion to the value of $(2 - S(X))S^2(X)$ [3]. Somewhat different, but close in meaning, ice cohesion can be described by the concept of "floe size distribution" (FSD) [4]. There are many papers devoted to the study of FSD, e.g., [4–11], from which follows that this FSD is well approximated by the power law. At the same time, some works consider more complex models, such as mix of power law and Gaussian law or the mix of two power laws with different parameters. Depending on the type of FSD, the ice is classified into classes according to the N point system. That is, solid ice gets the maximum number of points (N), and sparse ice gets the minimum number of points. Different applications of the FSD concept imply different values of N. For example, in [12] N = 10, and in [4] N = 3. From a practical point of view, it is the ice cohesion score assigned to a particular area Ξ_i of the sea surface with an ice cohesion value $S[\Xi_i]$ that is important. Let's denote this value by γ_i , $\gamma_i = \{1, \dots, N\}$. In practice, the value of γ_i is calculated using the processing (manual or automatic) of some image $I(\Xi_i)$ of the surface area Ξ_i . The image $I(\Xi_i)$ can be made in one or another spectral range, this image can be obtained by one or another means of aerial photography. The data processing procedure D, which calculates the value γ_i based on $I(\Xi_i)$,

in fact, maps the set of all possible images of different parts of the sea surface (which form the set Ξ) onto the set $\{1, \dots, N\}$. That is:

$$\Xi \xrightarrow{D} \{1, \dots, N\}.$$

$$\gamma = D(I(\Xi_i)) \in \{1, \dots, N\}, I(\Xi_i) \in \Xi$$

In fact, *D* is a classifier. Depending on the value of γ_i , the decision is made to include or not to include the section Ξ_i in the ship's route. It follows from the definition that γ_i is a discrete (otherwise coarse) descriptor of the value $S[\Xi_i]$.

The efficiency of *D* classifier implementation directly affects the correctness of determining the value of γ , and consequently, the efficiency of ice reconnaissance data implementation. Many works are devoted to methods of construction of the classifier *D*, for example [13–25]. Different methods of image processing are traditionally used, but the main accent is made on studying the boundaries of elements of a scene which represents an image. In this direction, considerable progress has been made including the use of the fashionable concept of Deep Learning [19]. In this work, Deep Convolutional Neural Network is successfully used to process ice reconnaissance data.

Against the background of huge recent achievements in the field of ice reconnaissance data, it remains a problem to construct such a classifier D which would be able to work with images of very low quality. Namely, low-quality ice images are not uncommon when operating in the High Latitudes using UAVs equipped with visible range sensors due to the chronically difficult weather conditions of this region. The images that are practically used to determine γ are often very blurry and highly noisy. As a rule, traditional image processing methods based on the analysis of image element boundaries (in fact: local contrast gradients and hessians) proved to be ineffective when processing blurred images [26]. In addition, developers are often faced with the problem of a training corpus of small volume. Also relevant is the task of ensuring the processing of ice reconnaissance data directly on board the UAV which imposes additional requirements for optimizing the computational complexity of the algorithms for determining γ . Therefore, the main goal of this paper is to develop a classifier D that would be operable for low-quality image processing, will remain operable for training on a small volume image body, and will be adaptable for implementation in the onboard complex of a small UAV.

Materials and Method

Description of the Features Space used

For automatic classification of images, explicitly or implicitly, some numerical characteristics of the image are calculated informatively characterizing the image. Ideally, they are invariant to scaling, rotation and illumination, and also have a significantly smaller dimensionality than the original image. These characteristics are called features. Typical examples of features are: histograms, image pixel intensity, contrast gradient, contrast hessian, SIFTdescriptors (spatial histogram of the image gradients), HOG (histogram of oriented gradients) and so on. The main idea underlying the proposed method is to form such features that characterize large fragments of the analyzed image, avoiding the use of features that characterize small details. We will call the feature of the first type — global and the feature of the second type — local. The main task of ice reconnaissance is to estimate the FSD type for quite large fragments of sea surface. This problem can be solved by different methods that allow you to use both global and local features. For example, in [8, 11, 21] both types of features are considered, and in [4, 19, 24] preference is given to the study of local features. For the case of blurred, noisy images considered in this paper, the use of fine details of the image, for example, based on the calculation of contrast gradients and hessians, is problematic. In other words, in this case, computing local features involve unacceptable errors. Local features computed in this way are uninformative and therefore unsuitable for solving the problem of FSD classification or other concepts characterizing FSD, in particular, for determining the parameter γ . On the other hand, global features are less dependent on the parameters of image blurring (although such dependence exists). The stability of global features is largely determined by the correlation radius of the image: the larger this value is, the more stable the global features are to the effects of blurring and noisiness factor. That is why this paper focuses on the use of global features. Initially, a fairly wide set of features was considered: more than thirty. At subsequent stages, this set was reasonably narrowed down by selecting the most informative features. Several methods were used including three so-called "filtering" methods: chi-square, Pearson correlation and analysis of variance (ANOVA), as well as adaptive method of backward elimination. As a result, the following set of features was obtained:

$$f_{\Xi} = (\mathbb{E}[I(\Xi)], |\Xi|, ST[I(\Xi)], H_m[I(\Xi)], r_{\Xi},$$
$$E(A_{\Xi}|x \ge r_{\Xi}), st(A_{\Xi}|x \ge r_{\Xi})).$$

Here

 $I(\Xi) = \{i_x | x \in X_{i(\Xi)}\}\$ is image of Ξ , *x*-coordinates; $X_{I(\Xi)}$ is image $I(\Xi)$ coordinate set; and i_x is intensity in image point with coordinates *x*;

 $\mathbf{E}[I(\Xi)] = \sum_{\substack{x \in X_{I(\Xi)}}} i_x | X_{i(\Xi)} I^{-1}, \text{ hereinafter, the entry } |B| \text{ denotes}$

$$\begin{split} &|I(\Xi)| = \max_{x \in X_{l(\Xi)}} (i_x) - \min_{x \in X_{l(\Xi)}} (i_x); \\ &ST(\Xi) = \sqrt{\sum_{x \in X_{l(\Xi)}} (i_x - \mathbb{E}[I(\Xi)])^2 |X_{l(\Xi)}|^{-1}} \end{split}$$

 $H_m(\Xi)$ is histogram of $I(\Xi)$ with *m* bins;

 $A_{\Xi}(l)$ is autocorrelation function of the $I(\Xi)$ (averaged over different slices), $l \in (0, d)$ — pixel shift; *d* is determined by the size of the $I(\Xi)$;

 r_{Ξ} is correlation radius of the image (averaged over different slices);

$$E(A_{\Xi}(l)|l \in (r_{\Xi}, d)) = \sum_{l \ge r_{\Xi}} A_{\Xi}(l)(d - r_{\Xi})^{-1};$$

$$st(A_{\Xi}|x \ge r_{\Xi}) =$$

$$= \sqrt{\sum_{l \ge r_{\Xi}} A_{\Xi}(l) - E(A_{\Xi}(l)|l \ge r_{\Xi}))^2 ((d - r_{\Xi}) (d - r_{\Xi} - 1))^{-1}}$$

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2022, том 22, № 5 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no 5

In numerical studies it was assumed that m = 14. The features f_{Ξ} are defined in the corresponding feature space **F**, consisting of real vectors of length 20.

Description of the Data Set used

To set up and test the proposed classifier, we used a Data Set specially created for this purpose. This Data Set included, according to the classification from [4], images of three FSD distribution classes, namely: "Pack Ice", "Marginal Ice Zone" and "Open Ocean" (Fig. 1). When setting up the problem, the use case of so-called "background" class has been deliberately excluded. Images of all three classes were collected from open sources. Then, in order to simulate the influence of a complex meteorological situation, the images were subjected to the procedure of artificial noising by spatially correlated noise and smoothing by a Gaussian filter.

Data Set was obtained, in which class PI ("Pack Ice") corresponds to 96 samples, class MIZ ("Marginal Ice Zone") corresponds to 76 samples, class OO ("Open Ocean") corresponds to 192 samples. Fig. 2 shows information about the class "Open Ocean". Fig. 3 shows information about the class "Marginal Ice Zone", and Fig. 4 shows information about the class "Pack Ice". It can be seen from the figures that the video material is of very low quality: ice edges are very blurred, contrast is low. But it is images of such quality that are typical when using small UAVs in the difficult meteorological conditions of the High Latitudes.

Description of the *D*-classificator used

In practice, the amount of power available to developers and researchers for training Data Set with aerial survey data is affected by legal restrictions. In particular, special



Fig. 1. FSD types used in this study. This figure is taken from the article [4]

licenses are usually required to use high-resolution remote sensing data. A significant number of modern airborne video sensors fall under this limitation. Thus, the Data Set with aerial imagery data available to a particular developerresearcher may by no means always be of significant (more than a thousand samples per class) power. In the present work, we assume that for training classifier D researchers have access to a Data Set of relatively small power. Since the dimensionality of feature space is relatively small, and the images in Data Set have a relatively large correlation radius (8 or more pixels), the samples of the same class will relatively "smoothly" differ from each other by the metric of F-space. Under these conditions, it is logical to use a conventional and very computationally economical Multi-Class Support Vector Machine (MC-SVM) as a D-classifier [27]. For comparison, a DL-classifier was also used in ResNet20 [28]. During training, in order to ensure control of the generalization ability of the classifiers, the standard Cross Validation scheme was used, in the LOO (leave-oneout) variant. For the MC SVM classifier, given the multiclass formulation of the problem, a one-vs-rest strategy was used.







Fig. 3. Class "Marginal Ice Zone" (MIZ). Typical sample images from the MIZ-class (*a*). Intensity histogram plotted over the entire typical image from the MIZ-class (*b*). Typical autocorrelation function of MIZ-image (averaged over different slices) (*c*)



Fig. 4. Class "Pack Ice" (PI). Typical sample images from the PI-class (*a*). Intensity histogram plotted over the entire typical image from the PI-class (*b*). Typical autocorrelation function of PI-image (averaged over different slices) (*c*)

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2022, том 22, № 5 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no 5

Image Class	Method	Precision	recall	f1-score	Support
	MC-SVM	1.00	0.96	0.98	24
Open Space (OS)	Resnet20	0.96	1.00	0.98	24
	MC-SVM	0.96	1.00	0.98	24
Marginal Ice Zone (MIZ)	Resnet20	0.92	1.00	0.96	24
Deals Lee (DI)	MC-SVM	1.00	1.00	1.00	43
Pack Ice (PI)	Resnet20	1.00	0.93	0.96	43

Table 1. The basic metrics values on the test Data Set

Image Class	Method	OS	MIZ	PI
	MC-SVM	23	0	1
Open Space (OS)	ResNet20	24	0	0
Marginal Los Zono (MIZ)	MC-SVM	0	24	0
Marginar ice zone (MIZ)	ResNet20	0	24	0
Deals Lee (DI)	MC-SVM	0	0	42
	ResNet20	1	2	40

Test results

The results of the numerical studies are summarized in Tables 1, 2. The main information is contained in Table 1. Here we accumulate the results which were shown on the test Data Set by classifiers based on MC-SVM and Resnet20. A standard set of metrics was used to evaluate the classification results: precision, recall, and f1-score. The table shows that in the experiments exactly 24 samples from each class were used at the test stage.

Table 2 contains the so-called confusion matrix for classifier implementations by MC-SVM and Resnet20 schemes, respectively. In general, the classification results are quite good. A more detailed analysis of the results is given in the Discussion section.

Discussion

As follows from Tables 1, 2, the classifiers built according to different schemes, taking into account the low power of the Data Set, showed very decent results. At the same time, the classifier based on MC SVM is slightly superior in all parameters to the classifier based on ResNet20. This is due to the insufficient power of the Data Set to provide full training of the DL-classifier, ResNet20 in this case. It is known that the training of DL-classifiers, for example based on Deep Convolutional Neural Network, requires a Data Set of considerable power (more than 1000 instances for each class). This is due to the fact that DLclassifier is a very complex model which depends on tens of thousands (and more) parameters. From machine learning theory [29] follows that model complexity should grow "slowly" as the size of the training Data Set increases. Therefore, on small Data Sets, the DL-classifier simply does not have time to be trained due to the mismatch in the complexity of the classifier and the Data Set. Analysis of confusion matrixes shows that MC SVM made only 1 mistake, confusing classes PI and OO. This is probably

due to the fact that these classes, despite their numerous differences, have common features: a significant part of the surface, in both cases, may occupy a coherent, texturally homogeneous array, for example, a water surface (OO-class) or a solid ice slab (PI-class). The ResNet20-based classifier made three errors. All errors are related to incorrect classification of samples from the PI-class. The reason for the errors: insufficient capacity of the Data Set to fully train the ResNet20-based classifier.

Conclusions

The paper suggests a new method for classifying the sea-ice floe size distribution type based on the use of low-quality video footage. Low quality of video footage is quite typical for high latitude conditions where most of the year a set of complex meteorological factors negatively affects the quality of aerial photography. That is why ice reconnaissance data processing should be able to compensate the negative influence of meteorological factors on the quality of ice surface imagery. In other words, ice reconnaissance data processing should be able to estimate with high reliability the sea-ice floe size distribution type because this estimation is one of the main results of ice reconnaissance. The sea-ice floe size distribution type classification method proposed in the article has high robustness to noises and distortions of the source video material which makes it an effective means of overcoming the negative influence of a complex high latitude meteorological environment. The simulation results showed high reliability in solving the task of estimating the sea-ice floe size distribution type which the proposed method provides under the condition of highly noisy and distorted source data. The proposed method is economical in the computational sense and, therefore, it can be implemented in software on a medium- and lowpower computing platform placed on board a small-sized ice reconnaissance UAV.

References

- Pershin N.V. Rational creation of navigation routes taking into account hydrometeorological conditions. *Proceedings of the Russian State Hydrometeorological University*, 2018, vol. 52, pp. 61–66. (in Russian)
- Mironenko A.A. The Gradient Model of the Programmed Vessels Movement. *Navigation and Hydrography*, 2012, vol. 34, pp. 35–42. (in Russian)
- Kalinina N.V. Influence of the ice navigation characteristics on the ice-breaker performance. *Transport Systems*, 2017, vol. 3(6), pp. 37– 44. (in Russian). https://doi.org/10.46960/62045_2017_3_37
- Horvat C., Tziperman E. The evolution of scaling laws in the sea ice floe size distribution. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 2017, vol. 122, no. 9, pp. 7630–7650. https://doi. org/10.1002/2016JC012573
- Rothrock D., Thorndike A. Measuring the sea ice floe size distribution. *Journal of Geophysical Research*, 1984, vol. 89, no. C4, pp. 6477–6486. https://doi.org/10.1029/JC089iC04p06477
- Alberello A., Onorato M., Bennetts L., Vichi M., Eayrs C., MacHutchon K., Toffoli A. Brief communication: Pancake ice floe size distribution during the winter expansion of the Antarctic marginal ice zone. *Cryosphere*, 2019, vol. 13, no. 1, pp. 41–48. https://doi. org/10.5194/tc-13-41-2019
- Zhang J., Schweiger A., Steele M., Stern H. Sea ice floe size distribution in the marginal ice zone: Theory and numerical experiments. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 2015, vol. 120, no. 5, pp. 3484–3498. https://doi.org/10.1002/2015jc010770
- Lu P., Li Z.J., Zhang Z.H., Dong X.L. Aerial observations of floe size distribution in the marginal ice zone of summer Prydz Bay. *Journal* of Geophysical Research: Oceans, 2008, vol. 113, no. 2, pp. C02011. https://doi.org/10.1029/2006jc003965
- Toyota T., Takatsuji S., Nakayama M. Characteristics of sea ice floe size distribution in the seasonal ice zone. *Geophysical Research Letters*, 2006, vol. 33, no. 2, pp. L02616. https://doi. org/10.1029/2005gl024556
- Toyota T., Haas C., Tamura T. Size distribution and shape properties of relatively small sea-ice floes in the Antarctic marginal ice zone in late winter. *Deep-Sea Research Part II: Topical Studies in Oceanography*, 2011, vol. 58, no. 9-10, pp. 1182–1193. https://doi. org/10.1016/j.dsr2.2010.10.034
- Stern H.L., Schweiger A.J., Zhang J., Steele M. On reconciling disparate studies of the sea-ice floe size distribution. *Elementa*, 2018, vol. 6, pp. 49. https://doi.org/10.1525/elementa.304
- 12. Nautical Encyclopedic Reference Book. V. 2. Ed. by N. Isanin. Leningrad, Sudostroenie Publ., 1987, 520 c. (in Russia)
- Leshkevich G.A. Machine classification of freshwater ice types from Landsat — I digital data using ice albedos as training sets. *Remote Sensing of Environment*, 1985, vol. 17, no. 3, pp. 251–263. https:// doi.org/10.1016/0034-4257(85)90098-7
- Leshkevich G.A., Nghiem S.V. Satellite SAR remote sensing of Great Lakes ice cover, part 2. Ice classification and mapping. *Journal of Great Lakes Research*, 2007, vol. 33, no. 4, pp. 736–750. https://doi. org/10.3394/0380-1330(2007)33[736:SSRSOG]2.0.CO;2
- Nghiem S.V., Leshkevich G.A. Satellite SAR remote sensing of Great Lakes ice cover, part 1. Ice backscatter signatures at C band. *Journal* of Great Lakes Research, 2007, vol. 33, no. 4, pp. 722–735. https:// doi.org/10.3394/0380-1330(2007)33[722:SSRSOG]2.0.CO;2
- 16. Nghiem S.V., Leshkevich G.A. Advancing a satellite synthetic aperture radar (SAR) ice classification algorithm. 54th Annual Conference on Great Lakes Research. International Association for Great Lakes Research: Abstract Book, 2011, pp. 181.
- Schertler R.J., Mueller R.A., Jirberg R.J., Cooper D.W., Heighway J.E., Holmes A.D., Gedney R.T., Mark H. Great Lakes All-weather Ice Information System: NASA Technical Memorandum NASA TM X-71815.1975.
- Leshkevich G., Nghiem S.V. Great Lakes ice classification using satellite C-band SAR multi-polarization data. *Journal of Great Lakes Research*, 2013, vol. 39, pp. 55–64. https://doi.org/10.1016/j. jglr.2013.05.003
- 19. Kamangir H., Rahnemoonfar M., Dobbs D., John Paden D., Fox G. *Detecting ice layers in radar images with deep learning*, 2018.
- Birnbaum G., Lüpkes C. A new parameterization of surface drag in the marginal sea ice zone. *Tellus, Series A: Dynamic Meteorology and Oceanography*, 2002, vol. 54, no. 1, pp. 107–123. https://doi. org/10.3402/tellusa.v54i1.12121

Литература

- Першин Н.В. Рациональное построение маршрутов плавания с учетом гидрометеорологических условий // Ученые записки Российского государственного гидрометеорологического университета. 2018. Т. 52. С. 61–66.
- Мироненко А.А. Градиентная модель программного движения судна // Навигация и гидрография. 2012. Т. 34. С. 35–42.
- Калинина Н.В. Влияние навигационных характеристик льда на ходкость ледокола // Транспортные системы. 2017. № 3(6). С. 37– 44. https://doi.org/10.46960/62045_2017_3_37
- Horvat C., Tziperman E. The evolution of scaling laws in the sea ice floe size distribution // Journal of Geophysical Research: Oceans. 2017. V. 122. N 9. P. 7630–7650. https://doi.org/10.1002/2016JC012573
- Rothrock D., Thorndike A. Measuring the sea ice floe size distribution // Journal of Geophysical Research. 1984. V. 89. N C4. P. 6477–6486. https://doi.org/10.1029/JC089iC04p06477
- Alberello A., Onorato M., Bennetts L., Vichi M., Eayrs C., MacHutchon K., Toffoli A. Brief communication: Pancake ice floe size distribution during the winter expansion of the Antarctic marginal ice zone // Cryosphere. 2019. V. 13. N 1. P. 41–48. https://doi. org/10.5194/tc-13-41-2019
- Zhang J., Schweiger A., Steele M., Stern H. Sea ice floe size distribution in the marginal ice zone: Theory and numerical experiments // Journal of Geophysical Research: Oceans. 2015. V. 120. N 5. P. 3484–3498. https://doi.org/10.1002/2015jc010770
- Lu P., Li Z.J., Zhang Z.H., Dong X.L. Aerial observations of floe size distribution in the marginal ice zone of summer Prydz Bay // Journal of Geophysical Research: Oceans. 2008. V. 113. N 2. P. C02011. https://doi.org/10.1029/2006jc003965
- Toyota T., Takatsuji S., Nakayama M. Characteristics of sea ice floe size distribution in the seasonal ice zone // Geophysical Research Letters. 2006. V. 33. N 2. P. L02616. https://doi. org/10.1029/2005gl024556
- Toyota T., Haas C., Tamura T. Size distribution and shape properties of relatively small sea-ice floes in the Antarctic marginal ice zone in late winter // Deep-Sea Research Part II: Topical Studies in Oceanography. 2011. V. 58. N 9-10. P. 1182–1193. https://doi. org/10.1016/j.dsr2.2010.10.034
- Stern H.L., Schweiger A.J., Zhang J., Steele M. On reconciling disparate studies of the sea-ice floe size distribution // Elementa. 2018. V. 6. P. 49. https://doi.org/doi.org/10.1525/elementa.304
- Морской энциклопедический справочник. Т. 2 / под ред. Н.Н. Исанина. Ленинград: Судостроение, 1987. 520 с.
- Leshkevich G.A. Machine classification of freshwater ice types from Landsat - I digital data using ice albedos as training sets // Remote Sensing of Environment. 1985. V. 17. N 3. P. 251–263. https://doi. org/10.1016/0034-4257(85)90098-7
- Leshkevich G.A., Nghiem S.V. Satellite SAR remote sensing of Great Lakes ice cover, part 2. Ice classification and mapping // Journal of Great Lakes Research. 2007. V. 33. N 4. P. 736–750. https://doi. org/10.3394/0380-1330(2007)33[736:SSRSOG]2.0.CO;2
- Nghiem S.V., Leshkevich G.A. Satellite SAR remote sensing of Great Lakes ice cover, part 1. Ice backscatter signatures at C band // Journal of Great Lakes Research. 2007. V. 33. N 4. P. 722–735. https://doi. org/10.3394/0380-1330(2007)33[722:SSRSOG]2.0.CO;2
- Nghiem S.V., Leshkevich G.A. Advancing a satellite synthetic aperture radar (SAR) ice classification algorithm // 54th Annual Conference on Great Lakes Research. International Association for Great Lakes Research: Abstract Book. 2011. P. 181.
- Schertler R.J., Mueller R.A., Jirberg R.J., Cooper D.W., Heighway J.E., Holmes A.D., Gedney R.T., Mark H. Great Lakes All-weather Ice Information System: NASA Technical Memorandum NASA TM X-71815.1975.
- Leshkevich G., Nghiem S.V. Great Lakes ice classification using satellite C-band SAR multi-polarization data // Journal of Great Lakes Research. 2013. V. 39. P. 55–64. https://doi.org/10.1016/j. jglr.2013.05.003
- Kamangir H., Rahnemoonfar M., Dobbs D., John Paden D., Fox G. Detecting ice layers in radar images with deep learning. 2018.
- Birnbaum G., Lüpkes C. A new parameterization of surface drag in the marginal sea ice zone // Tellus, Series A: Dynamic Meteorology and Oceanography. 2002. V. 54. N 1. P. 107–123. https://doi. org/10.3402/tellusa.v54i1.12121
- 21. Zhang Q., Skjetne R. Image processing for identification of sea-ice floes and the floe size distributions // IEEE Transactions on

- Zhang Q., Skjetne R. Image processing for identification of sea-ice floes and the floe size distributions. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 2015, vol. 53, no. 5, pp. 2913–2924. https://doi. org/10.1109/tgrs.2014.2366640
- 22. Smith D., Barrett E., Scott J. Sea-ice type classification from ERS-1 SAR data based on grey level and texture information. *Polar Record*, 1995, vol. 31, no. 177, pp. 135–146. https://doi.org/10.1017/ S0032247400013632
- 23. Shen X., Zhang J., Meng J., Zhang J., Ke C. Sea ice type classification based on random forest machine learning with Cryosat-2 altimeter data. *Proc. of the International Workshop on Remote Sensing with Intelligent Processing (RSIP)*, 2017, pp. 7958792. https://doi. org/10.1109/rsip.2017.7958792
- Aksenov Y., Bateson A.W., Feltham D.L., Schröder D., Hosekova L., Ridley J.K., Impact of sea ice floe size distribution on seasonal fragmentation and melt of Arctic sea ice. *Cryosphere*, 2020, vol. 14, no. 2, pp. 403–428. https://doi.org/10.5194/tc-14-403-2020
- Johannessen O.M., Bobylev L.P., Shalina E.V., Sandven S. Sea Ice in the Arctic: Past, Present and Future. *Springer Polar Sciences*, 2020, X, 575 p. https://doi.org/10.1007/978-3-030-21301-5
- Timofeev A.V. Detection of a small target object in blurry images affected by affine distortions. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2021, vol. 21, no. 2, pp. 206–224 (in Russian). https://doi.org/10.17586/2226-1494-2021-21-2-206-224
- Cristianini N., Shawe-Taylor J. An Introduction to Support Vector Machines and Other Kernel-based Learning Methods. Cambridge University Press, 2000. https://doi.org/10.1017/CBO9780511801389
- He K., Zhang X., Ren S., Sun J. Deep residual learning for image recognition. Proc. of the 29th IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), 2016, pp. 770–778. https://doi. org/10.1109/cvpr.2016.90
- Hastie T., Tibshirani R., Friedman J. *The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference and Prediction*. Springer, 2009, XXII, 745 p. https://doi.org/10.1007/978-0-387-84858-7

Authors

Andrey V. Timofeev — D. Sc., CSO, LLP "EqualiZoom", Astana, 010000, Kazakhstan, 56689367600, https://orcid.org/0000-0001-7212-5230, timofeev.andrey@gmail.com

Denis I. Groznov — Software Developer, LLP "EqualiZoom", Astana, 010000, Kazakhstan, 57218385022, https://orcid.org/0000-0002-7874-7118, d.i.groznov@yandex.ru

Received 20.07.2022 Approved after reviewing 10.08.2022 Accepted 27.09.2022 Geoscience and Remote Sensing. 2015. V. 53. N 5. P. 2913–2924. https://doi.org/10.1109/tgrs.2014.2366640

- Smith D., Barrett E., Scott J. Sea-ice type classification from ERS-1 SAR data based on grey level and texture information // Polar Record. 1995. V. 31. N 177. P. 135–146. https://doi.org/10.1017/ S0032247400013632
- Shen X., Zhang J., Meng J., Zhang J., Ke C. Sea ice type classification based on random forest machine learning with Cryosat-2 altimeter data // Proc. of the International Workshop on Remote Sensing with Intelligent Processing (RSIP). 2017. P. 7958792. https://doi. org/10.1109/rsip.2017.7958792
- Aksenov Y., Bateson A.W., Feltham D.L., Schröder D., Hosekova L., Ridley J.K., Impact of sea ice floe size distribution on seasonal fragmentation and melt of Arctic sea ice // Cryosphere. 2020. V. 14. N 2. P. 403–428. https://doi.org/10.5194/tc-14-403-2020
- Johannessen O.M., Bobylev L.P., Shalina E.V., Sandven S. Sea Ice in the Arctic: Past, Present and Future. Springer Polar Sciences, 2020. X, 575 p. https://doi.org/10.1007/978-3-030-21301-5
- 26. Тимофеев А.В. Инвариантный к линейным конформным преобразованиям алгоритм обнаружения размытого изображения целевого объекта малого размера // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2021. Т. 2. № 2. С. 206–224. https://doi.org/10.17586/2226-1494-2021-21-2-206-224
- Cristianini N., Shawe-Taylor J. An Introduction to Support Vector Machines and Other Kernel-based Learning Methods. Cambridge University Press, 2000. https://doi.org/10.1017/CBO9780511801389
- He K., Zhang X., Ren S., Sun J. Deep residual learning for image recognition // Proc. of the 29th IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR). 2016. P. 770–778. https://doi. org/10.1109/cvpr.2016.90
- Hastie T., Tibshirani R., Friedman J. The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference and Prediction. Springer, 2009. XXII, 745 p. https://doi.org/10.1007/978-0-387-84858-7

Авторы

Тимофеев Андрей Владимирович — доктор технических наук, научный директор, ТОО «Эквалайзум», Астана, 010000, Казахстан, se 56689367600, https://orcid.org/0000-0001-7212-5230, timofeev.andrey@ gmail.com

Грознов Денис Игоревич — разработчик, ТОО «Эквалайзум», Астана, 010000, Казахстан, <u>57218385022</u>, https://orcid.org/0000-0002-7874-7118, d.i.groznov@yandex.ru

Статья поступила в редакцию 20.07.2022 Одобрена после рецензирования 10.08.2022 Принята к печати 27.09.2022



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» **I/İTMO**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 No 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

университет итмо

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-970-981 УДК 004.89

Прогнозирование летального исхода у пациентов с установленным диагнозом COVID-19

Игорь Николаевич Корсаков¹, Татьяна Леонидовна Каронова²⊠, Александра Олеговна Конради³, Аркадий Дмитриевич Рубин⁴, Дмитрий Ильич Курапеев⁵, Алёна Тимуровна Черникова⁶, Арина Алексеевна Михайлова⁷, Евгений Владимирович Шляхто⁸

1.2.3.4.5.6.7.8 Национальный медицинский исследовательский центр им. В.А. Алмазова, Санкт-Петербург, 197341, Российская Федерация

1 korsakov in@almazovcentre.ru, https://orcid.org/0000-0003-2343-9641

² karonova@mail.ru^{\overline{1}}, https://orcid.org/0000-0002-1547-0123

³ Konradi ao @almazovcenter.ru, https://orcid.org/0000-0001-8169-7812

⁴ rubin_ad@almazovcentre.ru, https://orcid.org/0000-0001-5469-5635

⁵ dkurapeev@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-2190-1495

⁶ arabicaa@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-4878-6909

7 armikhaylova@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0001-6066-3525

⁸ e.shlyakhto@almazovcentre.ru, https://orcid.org/0000-0003-2929-0980

Аннотация

Предмет исследования. Появление нового коронавируса SARS-CoV-2 является основой развития пандемии COVID-19. Пандемия привела к резкому росту нагрузки на системы здравоохранения высокой летальности и существенным трудностям в организации медицинской помощи. Для прогнозирования течения заболевания и определения показания к более агрессивному лечению предложено множество различных клинических и биологических маркеров. Однако не всегда клинико-лабораторная оценка состояния точно предсказывает развитие тяжелого течения болезни. В этом случае технологии, основанные на искусственном интеллекте, могут существенно влиять на оценку прогнозирования. Выполнен системный анализ факторов, влияющих на течение инфекционного заболевания у пациентов с диагностированным COVID-19, госпитализированных в стационар. Метод. Предложенный подход основан на применении машинного обучения для прогнозирования летального исхода у пациентов с установленным диагнозом COVID-19. В основе подхода лежит анамнез пациента и клинические, лабораторные и инструментальные данные, полученные в первые 72 часа нахождения пациента в стационаре. Основные результаты. Алгоритм машинного обучения для прогнозирования летального исхода у пациентов с COVID-19 в течение 72 часов госпитализации продемонстрировал высокую чувствительность (0,816) и специфичность (0,865). Практическая значимость. Созданный алгоритм может помочь улучшить оказание медицинской помощи пациентам, снизить смертность и свести к минимуму нагрузку на врачей во время пандемии COVID-19. При ограничении ресурсов в период пандемии, включая аппараты искусственной вентиляции легких, точное прогнозирование состояния пациентов с тяжелым течением и возможным летальным исходом может дать важные рекомендации для разделения групп пациентов и рационального распределении лечебных ресурсов.

Ключевые слова

машинное обучение, математическая модель, классификация, метрики модели, ROC-анализ, риск-фактор, COVID-19

Благодарности

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2022-301 от 20.04.2022).

Ссылка для цитирования: Корсаков И.Н., Каронова Т.Л., Конради А.О., Рубин А.Д., Курапеев Д.И., Черникова А.Т., Михайлова А.А., Шляхто Е.В. Прогнозирование летального исхода у пациентов с установленным диагнозом COVID-19 // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С.970–981. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-970-981

© Корсаков И.Н., Каронова Т.Л., Конради А.О., Рубин А.Д., Курапеев Д.И., Черникова А.Т., Михайлова А.А., Шляхто Е.В., 2022

Prediction of fatal outcome in patients with confirm COVID-19

Igor N. Korsakov¹, Tatiana L. Karonova²⊠, Alexandra O. Konradi³, Arkadii D. Rubin⁴, Dmitry I. Kurapeev⁵, Alena T. Chernikova⁶, Arina A. Mikhaylova⁷, Evgeny V. Shlyakhto⁸

1,2,3,4,5,6,7,8 Almazov National Medical Research Centre, Saint Petersburg, 197341, Russian Federation

- 1 korsakov_in@almazovcentre.ru, https://orcid.org/0000-0003-2343-9641
- ² karonova@mail.ru^{\overline}, https://orcid.org/0000-0002-1547-0123
- ³ Konradi_ao @almazovcenter.ru, https://orcid.org/0000-0001-8169-7812
- ⁴ rubin_ad@almazovcentre.ru, https://orcid.org/0000-0001-5469-5635
- ⁵ dkurapeev@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-2190-1495
- ⁶ arabicaa@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-4878-6909
- ⁷ armikhaylova@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0001-6066-3525
- ⁸ e.shlyakhto@almazovcentre.ru, https://orcid.org/0000-0003-2929-0980

Abstract

SARS-CoV-2, the new coronavirus underlying the development of the COVID-19 pandemic, has led to a sharp increase in the burden on healthcare systems, high mortality and significant difficulties in organizing medical care. The aim of the study was to conduct a systematic analysis of factors affecting the course of infectious disease in patients with diagnosed COVID-19 hospitalized. In order to predict the course of the disease and determine the indications for more aggressive treatment, many different clinical and biological markers have been proposed, however, clinical and laboratory assessment of the condition is not always simple and can clearly predict the development of a severe course. Technologies based on artificial intelligence (AI) have played a significant role in predicting the development of the disease. One of the main requirements during a pandemic is an accurate prediction of the required resources and likely outcomes. In the present study, a machine learning (ML) approach is proposed to predict the fatal outcome in patients with an established diagnosis of COVID-19 based on the patient's medical history and clinical, laboratory and instrumental data obtained in the first 72 hours of the patient's stay in the hospital. A machine learning algorithm for predicting the lethal outcome in patients with COVID-19 during 72 hours of hospitalization demonstrated high sensitivity (0.816) and specificity (0.865). Given the serious concerns about limited resources, including ventilators, during the COVID-19 pandemic, accurately predicting patients who are likely to require artificial ventilation can help provide important recommendations regarding patient triage and resource allocation among hospitalized patients. In addition, early detection of such persons may allow for routine ventilation procedures, reducing some of the known risks associated with emergency intubation. Thus, this algorithm can help improve patient care, reduce patient mortality and minimize the burden on doctors during the COVID-19 pandemic.

Keywords

machine learning, mathematical model, classification, model metrics, ROC analysis, risk factor, COVID-19

Acknowledgements

This work was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Agreement No. 075-15-2022-301).

For citation: Korsakov I.N., Karonova T.L., Konradi A.O., Rubin A.D., Kurapeev D.I., Chernikova A.T., Mikhaylova A.A., Shlyakhto E.V. Prediction of fatal outcome in patients with confirm COVID-19. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 970–981 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-970-981

Введение

Одно из основных требований во время пандемии — точное прогнозирование необходимых ресурсов и вероятных результатов лечения. Алгоритмы машинного обучения используются давно, в частности в работе [1] проведены исследования с целью применения моделей прогнозирования для уточнения потребности в медицинском кислороде. Разработана модель прогнозирования, которая определяет пациента с COVID-19, нуждающегося в кислороде. Авторы использовали информацию об уровне С-реактивного белка, наличии артериальной гипертензии, возрасте и параметрах клинического анализа крови в виде количества нейтрофилов и лимфоцитов у 221 пациента.

Для прогноза необходимости искусственной вентиляции легких в работе [2] использована группа из 1980 пациентов с COVID-19. Анализируемые параметры включали демографические данные, анамнез пациента, показатели жизнедеятельности в отделении неотложной помощи и лабораторные параметры. Их результаты показали, что возраст и высокая температура тела были связаны с повышенным риском перевода больного на искусственную вентиляцию легких (ИВЛ). Так, подход машинного обучения был использован для прогнозирования ИВЛ у 197 пациентов с COVID-19, где входные данные включали 12 клинических характеристик, собранных в больницах США [3]. Их модель предсказала потребность в ИВЛ, применяя показатели и другие переменные, такие как артериальное давление и частота сердечных сокращений (ЧСС). В работе [4] произведен систематический обзор роли использования машинных методов во время пандемии.

В настоящей работе предложен подход машинного обучения для прогнозирования летального исхода у пациентов с установленным диагнозом COVID-19 на основе анамнеза пациента и клинических, лабораторных и инструментальных данных, полученных в первые 72 часа нахождения пациента в стационаре. Одно из основных преимуществ полученных результатов работы по сравнению с ранее опубликованными — прогнозирование результата (летальный исход) в начальный момент поступления пациента в стационар путем оценки имеющихся симптомов и анамнеза пациента, не требуя длительного наблюдения за пациентом и дополнительной информации. Это может ускорить процесс планирования ресурсов, особенно во время пика заболевания, и избежать возникновения дефицита. Другое преимущество, имеющее важное значение с медицинской точки зрения — установление факторов риска, влияющих на смертность от COVID-19, используя данные, собранные в Национальном медицинском исследовательском центре (НМИЦ им. В.А. Алмазова) за период первых трех волн пандемии.

Полученные результаты могут помочь стационарам в прогнозировании потребности учреждения в необходимых лекарствах, оборудовании и эффективном управлении данными результатами.

Описание предложенного метода

Регистрация пациентов. В работе исследованы данные пациентов, госпитализированных в НМИЦ им. В.А. Алмазова в период с 13 мая 2020 года по конец августа 2021 года. Зарегистрированные пациенты включены в клиническое исследование при условии, что набор их жизненно важных показателей и лабораторных измерений выполнен в течение первых 72 часов после поступления в стационар, и, если подтвержден положительный результат на COVID-19, установленный с помощью полимеразной цепной реакции. В общей сложности проведен анализ данных 4071 пациента, госпитализированных в течение периода исследования (рис. 1), что соизмеримо с исследованиями в работе [5].

При поступлении пациента в отделение неотложной помощи или стационар автоматически начинается сбор данных о доступных жизненно важных показателях и лабораторных измерениях. Данные, полученные в первые 72 часа госпитализации, используются для создания алгоритма машинного обучения и расчета риска летального исхода. Все данные автоматически извлечены из электронной медицинской карты, не требуя вмешательства врача.

Отметим, что исследование представляет минимальный риск для людей, поскольку сбор данных был пассивным и не представлял угрозы для участвующих субъектов. Все данные о пациентах хранились в соответствии с Федеральным законом «О персональных данных». Обработка данных. Рассмотрим подробнее типы данных пациентов при поступлении в стационар.

Первый тип данных: информация о состоянии и хронических заболеваниях пациента, которые внесены в электронную историю болезни (табл. 1).

Второй тип данных: жизненно важные показатели, такие как диастолическое артериальное давление (ДАД, мм рт. ст.), систолическое артериальное давление (САД, мм рт. ст.), ЧСС (1/мин), температура (°С), частота дыхания (ЧД, 1/мин), насыщение кислородом (SpO₂, %), индекс массы тела (ИМТ, кг/м²), частота дыхательных движений (ЧДД, 1/мин), С-реактивный белок (СРБ, мг/л) (табл. 2).

Третий тип данных — данные лабораторных анализов. Некоторые анализы выполнялись только у части пациентов с хроническими заболеваниями и не вошли в конечную таблицу (табл. 2).

Проведенный корреляционный анализ выявил зависимости между признакми и их влияние на поставленный диагноз.

Практически не один из признаков не имеет явной зависимости с целевой функцией, что предполагает выполнение дальнейшего анализа переменных. С полной таблицей признаков можно ознакомиться по ссылке¹. В табл. З приведены основные категорийные признаки исследуемых пациентов для создания алгоритма.

Диагностика сопутствующих заболеваний, имевшихся во время пребывания пациента в стационаре, включая хронические заболевания бронхолегочной системы, хронические заболевания эндокринной системы и онкологические заболевания, оценена по МКБ-10.

В качестве целевой переменной, которая использована при обучении модели, применено понятие «Исход заболевания».

Из всех имеющихся признаков для уменьшения опибок при ручном вводе данных отобрано 11 наиболее значимых, которые вошли в разработанный алгоритм. В качестве методов отбора признаков использованы алгоритмы Boruta и Portable Instant Mining Platform (PIMP), финальные данные отображены в табл. 4. По данным: выписано — 2858 пациентов, из них летальный исход — 196. Из данных случайным образом отобрано 5 % пациентов — 153 (140 выписаны, 13 летальный исход), которые не были использованы ни в обучение, ни в тестировании модели.

Общее число пациентов за весь период 4071 Количество пациентов данными 3258 Количество пациентов в финальном датасете 3054

Puc. 1. Блок-схема включения пациентов *Fig. 1.* Flowchart of patients in the study

¹ Таблица корреляции признаков [Электронный реcypc]. Режим доступа: https://github.com/ikorsa/prediction_ lethal_COVID-19/blob/main/Correlation.png (дата обращения: 18.09.2022).

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2022, том 22, № 5 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no 5

Таблица 1. При	мер данных пациента и	из истории болезни,	которые были исп	тользованы при	разработке алгори	ттма
Table	21. An example of data	from the patient's me	dical history used i	n the algorithm d	levelopment	

Поле	Заполненность, %
Регистрационный номер (ID пациента)	100
Возраст	100
Пол	100
Дата постановки диагноза	99,3
Дата госпитализации пациента	100
Время госпитализации пациента	99,9
Дата появления клинических симптомов	78,3
Диагноз основного заболевания по Международной классификации болезней (МКБ-10) при посту- плении	99,3
Диагноз осложнения при поступлении	35,2
Подтвержден рентгенологически	100
Амбулаторное лечение	100
Вакцинация от гриппа	100
Вакцинация пневмококковой инфекции	100
Противовирусное лечение	100
Хронические заболевания бронхолегочной системы	82,4
Хронические заболевания сердечно-сосудистой системы	51,4
Хронические заболевания эндокринной системы	12,2
Онкологические заболевания	2,7
Болезнь, вызванная вирусом иммунодефицита человека	0,02
Туберкулез	0,07
Другие заболевания	22,7

Таблица 2. Значимые признаки, полученные в первые 72 часа госпитализации пациентов, для создания алгоритма машинного обучения

Table 2. Significant for the machine learning algorithm development features obtained in the first 72 hours of hospitalization

Признаки	Количество измерений	Среднее значение	Отклонение	Ошибка	Доверительный интервал (95 %)
Возраст, лет	3114	62	14	0,26	61,5
ИМТ, кг/м ²	3114	29,5	5,8	0,10	29,3
Ферритин, нг/л	3086	659	596	11	637,9
СРБ, мг/л	705	67,5	65,2	2,46	62,7
Протромбиновое время, с	2981	14	6,7	0,12	13,7
Гемоглобин, г/л	3113	133	18	0,32	133,1
Лейкоциты, 109 1/л	3113	7,8	8,9	0,16	7,5
Нейтрофилы, 109 1/л	2455	5,9	4,1	0,08	5,7
Лимфоциты, 10 ⁹ 1/л	3099	1,5	6,2	0,11	1,2
Соотношение нейтрофилы/лимфоциты	2455	6,4	7,7	0,16	6,1
Тромбоциты, 10 ⁹ 1/л	3113	221	99,9	1,79	217,6
Общий белок, г/л	1352	67,9	8,6	0,23	67,5
Креатинин, мкмоль/л	3110	89,1	52,6	0,94	87,3
Мочевина, ммоль/л	3078	6,4	4,2	0,08	6,3
ЧДД, 1/мин	3114	19	6	0,10	19,3
Пульсоксиметрия, %	3114	96	4	0,08	95,7
Процент поражения легочной ткани, %	3114	36	20	0,37	35,6
ЧСС, 1/мин	3114	78	15	0,27	77,2
САД, мм рт.ст.	3114	125	17	0,31	124,7
ДАД, мм рт.ст.	3114	76	11	0,20	75,9
Температура тела, °С	3114	37	0,7	0,01	36,9

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2022, том 22, № 5 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no 5

Таблица 3. Значимые категорийные признаки, полученные в первые 72 часа госпитализации пациентов, для создания алгоритма машинного обучения

Table 3. Significant for the machine learning algorithm development categorical features obtained in the first 72 hour
of hospitalization

Признаки	Значение	Описание	Количество	Доля, %
Пол	0	женский	1624	52,2
	1	мужской	1490	47,9
Исход заболевания	0	выписан	2915	93,6
	1	умер	199	6,4
Заболевания бронхолегочной системы	1	наличие	2591	83,2
	0	отсутствует	523	16,8
Сердечно-сосудистые заболевания	0	отсутствует	1570	50,4
	1	наличие	1544	49,6
Заболевания эндокринной системы	0	отсутствует	2736	87,9
	1	наличие	378	12,1
Онкологические заболевания	0	отсутствует	3054	98,1
	1	наличие	60	1,9
Сахарный диабет	0	отсутствует	2891	92,8
	1	наличие	223	7,2

Остальные данные разделены на два класса в соотношении 70/30 %: данные для обучения (2031 пациентов, из них с летальным исходом — 126) и данные для тестирования (870 пациентов, из них с летальным исходом — 57), которые вместе составили набор для финального обучения (табл. 4).

Модель машинного обучения. Модель создана с использованием библиотеки РуСагеt, которая позволила проверить несколько алгоритмов за одно обращение [6]. Результаты обучения представлены в табл. 5.

В табл. 6 и 7 приведены значения метрик RF и CatBoost (модели с лучшей чувствительностью (Recall)) при K-Fold валидации.

В приведенных сравнительных результатах (табл. 6) видно, что у исследуемых моделей наблюдается небольшой разброс значений метрик Точность и Чувствительность для значений K-Fold валидации. Полученные результаты свидетельствует о том, что представленный датасет практически однороден и не имеет выбросов.

Для прогнозирования летального исхода одна из важных метрик — чувствительность метода, в связи с важностью не пропустить пациентов с большим риском летального исхода. Для каждого метода построены графики чувствительности (рис. 2).

Результаты

Известно, что идеальная модель обладает 100 % чувствительностью и специфичностью. Однако на практике добиться этого невозможно, более того, невозможно одновременно повысить и чувствительность, и специфичность модели. Компромисс можно найти с помощью порога отсечения, который нужен для при-

Table 4. Statistical knowledge						
Признак	Количество	Среднее	Отклонение	Ошибка	Доверительный интервал (95 %)	
Возраст, лет	3054	62	14	0,26	61,37	
Процент поражения легочной ткани, %	3054	36	20	0,37	35,65	
Тромбоциты, 10 ⁹ 1/л	3053	222	100	1,82	217,99	
СРБ, мг/л	682	67,5	63	2,41	62,74	
Пульсоксиметрия, %	3054	96	4	0,08	95,66	
ЧДД, 1/мин	3054	19	6	0,10	19,28	
ЧСС, 1/мин	3054	78	15	0,28	77,21	
Креатинин, мкмоль/л	3050	89	52,7	0,95	87,11	
Мочевина, ммоль/л	3018	6,4	4,2	0,08	6,25	
Общий белок, г/л	1314	68	8,7	0,24	67,50	

Таблица 4. Статистические данные *Table 4.* Statistical knowledge

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2022, том 22, № 5 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no 5

Модель	Точность	AUC	Чувствительность	Специфичность
Random Forest Classifier	0,862	0,908	0,816	0,865
SVM — Linear Kernel	0,691	0,000	0,761	0,688
K Neighbors Classifier	0,715	0,692	0,617	0,720
CatBoost Classifier	0,906	0,896	0,616	0,920
Extreme Gradient Boosting	0,927	0,904	0,504	0,948
Light Gradient Boosting Machine	0,929	0,905	0,449	0,953
Decision Tree Classifier	0,908	0,655	0,376	0,934

Таблица 5. Результаты обучения *Table 5*. Machine learning results

Примечание: AUC (Area Under Curve, ROC-площадь под кривой).

Table 6. Metrics of RF Models						
Выборка	Точность	AUC	Чувствительность	Специфичность		
0	0,850	0,905	0,889	0,848		
1	0,891	0,926	0,778	0,897		
2	0,824	0,893	0,667	0,832		
3	0,850	0,887	0,778	0,853		
4	0,871	0,949	1,000	0,864		
5	0,865	0,906	0,778	0,870		
6	0,881	0,927	0,778	0,886		
7	0,860	0,962	1,000	0,853		
8	0,855	0,783	0,600	0,869		
9	0,875	0,944	0,889	0,874		
Среднее	0,862	0,908	0,816	0,865		
Стандартное отклонение	0,018	0,048	0,124	0,018		

Таблица 6. Метрики моделей RF *Table 6*. Metrics of RF Models

Таблица 7. Метрики моделей CatBoost *Table 7*. CatBoost Model Metrics

Выборка	Точность	AUC	Чувствительность	Специфичность
0	0,876	0,903	0,444	0,897
1	0,927	0,891	0,556	0,946
2	0,886	0,857	0,556	0,902
3	0,891	0,881	0,556	0,908
4	0,917	0,958	0,778	0,924
5	0,907	0,894	0,444	0,929
6	0,912	0,924	0,556	0,929
7	0,922	0,969	0,889	0,924
8	0,902	0,775	0,600	0,918
9	0,917	0,905	0,778	0,923
Среднее	0,906	0,896	0,616	0,920
Стандартное отклонение	0,016	0,051	0,142	0,014

Примечание: AUC (Area Under Curve, ROC-площадь под кривой).



 Рис. 2. Метрики методов для разных «точек отсечения» (threshold): Catboost (a) и Random Forest (b) Classifiers

 Fig. 2. Catboost method metrics for different cut-off points (threshold) (a). Random Forest Classifier method metrics for different cut-off points (threshold) (b)

менения модели на практике: относить новые примеры к одному из двух классов. С большими допущениями можно считать, что чем больше показатель AUC, тем лучшей прогностической силой обладает модель. Отметим, что показатель AUC предназначен для сравнительного анализа нескольких моделей и не содержит никакой информации о чувствительности и специфичности модели.

Согласно экспертной шкале для значений AUC, по которой можно судить о качестве модели, значения: 0,6–0,7 свидетельствуют о среднем качестве модели, 0,7–0,8 — хорошем качестве, 0,8–0,9 — очень хорошем качестве и 0,9–1,0 — отличном качестве. Значения ниже 0,6 принято принимать за неудовлетворительное качество.

Выполним оценку модели прогнозирования летального исхода на двух наборах данных: тестовых — 870 пациентов и 5 % набора — 153 пациента, который не использовался при обучении модели. Дополнительно применим внешние данные из другого медицинского учреждения. Всего для обучения модели использован 2901 пациент, у которых был подтвержден диагноз COVID-19.

При использовании алгоритма Catboost Classifier установлено, что он обладает хорошей дискретизацией на всех типах данных (чувствительность до 99,2 %), кроме внешних, что свидетельствует о преимуществах его использования только на той базе, на которой он составлялся и его низкой прогностической способностью на внешних базах (чувствительность 37,5 %). Вместе с этим алгоритм Random Forest Classifier характеризуется хорошим балансом и подлежит дальнейшему исследованию в качестве алгоритма для модели калькулятора (для AUC 0,90 чувствительность 0,816 и специфичность 0,865) (рис. 3).

На практике значения Точности и Полноты гораздо более удобней рассчитывать с использованием матрицы неточностей рис. 4, которая часто используется

для описания эффективности модели классификации на наборе тестовых данных с известными истинными значениями.

В итоге по проведенным тестам наиболее точным алгоритмом для задачи прогнозирования летального исхода при COVID-19 выбран Random Forest Classifier.

Интерпретация результатов. В настоящее время у медицинских работников сохраняется недоверие к использованию прогностических моделей в медицине. В первую очередь, это связано с тем, что не всегда понятно, почему модель предложила то или другое решение. В общем считается, что математические модели, используемые в медицине, являются «черным ящиком». Вторая проблема — интерпретация самого результата прогноза. В частности, прогнозные модели выдают вероятность наступления того или иного события. Врачам





Fig. 4. Confusion matrix

же более привычно получать результат в виде категорий рисков: низкий, средний или высокий. Распределение результатов плотности вероятности модели приведено на рис. 5. На графике видно, что при вероятности от 0,2 до 0,5 результаты могут быть как с летальным исходом, так и не с летальным исходом, в то время как при вероятности от 0 до 0,2 можно говорить о низком риске, а при вероятности с 0,5 до 1,0 — высоком риске.

В последнее время стали появляться алгоритмы, которые позволяют интерпретировать вклад в конечный результат каждого признака. Такие алгоритмы интерпретируют не само предсказание, а одну из следующих величин:

- 1) разницу между двумя предсказаниями;
- разницу между текущим и усредненным предсказаниями.



Рис. 5. Распределение вероятности летального исхода (нормированное)

Fig. 5. Probability distribution of lethal outcome (normalized)

Это означает, что алгоритм объясняет изменение в предсказании, вызванное изменением входных призна-ков (в первом случае) или появлением информации о входных признаках (во втором случае).

При этом возможно вычислить *вклад каждого* признака. Такой подход используется в методе SHAP (SHapley Additive explanation) [7] и [8].

Другой подход — LIME (Local Interpretable Model-Agnostic Explanations), суть которого в аппроксимации предсказания модели в окрестности тестового примера с более простой, легко интерпретируемой моделью, которая использует упрощенное представление. Например, если модель линейна, то каждому изменению сопоставляется некий вес. Если аппроксимация адекватна, то имеем наличие изменения, которое линейно влияет на предсказание модели. Отметим, что могут быть случаи, когда модель не сможет обучиться.

В данной работе для интерпретации результатов и оценки влияния признаков на результат модели использованы библиотеки SHAP и LIME.

Выбранный метод Random Forest Classifier показал следующий порядок значимости признаков: наиболее значимый — «Общий белок», наименее значимый — ЧСС (рис. 6).

График SHAP (рис. 6, *b*) позволяет оценить влияние признаков на прогноз модели, что является важной частью понимания врачом работы модели. Наиболее полно этот вопрос рассмотрен в работах [9, 10]. В первую очередь интерпретация модели помогает оценить ее качество. Если получить правила, которыми руководствуется модель при предсказании, то возможно оценить их правдоподобность.

Один из подходов для понимания работы модели — прогноз для конкретного пациента (рис. 7).

Как правило, при машинном обучении невозможно добиться полной интерпретируемости, но даже частичная интерпретация помогает оценить ее качество. Если мы выясним, как именно f(x) преобразует входные признаки в выходной результат и какими правилами E[f(x)] руководствуется при прогнозировании, то сможем оценить правдоподобность этих правил.

На рис. 7, *а* показан «Waterfall plot», объясняющий прогнозирование летального исхода у пациента №15 из представленного датасета. SHAP VALUES получены с помощью метода Tree SHAP. Схема читается снизу вверх, а признаки упорядочены по возрастанию их SHAP-значения (values). Например, SHAP VALUES +0,64 для признака «Общий белок» (имеющего значение 40,9) говорит о том, что это значение у данного пациента увеличивает величину предсказания модели, по сравнению с отсутствием признака «Общий белок» при произвольном наличии других признаков. Красный цвет свидетельствует об увеличении риска летального исхода при конкретных значениях показателей.

На рис. 7, *b* приведены данные пациента №12, также демонстрирующие вклад клинических и лабораторных признаков в риск развития летального исхода. Как видно, значения большинства признаков ассоциированы со снижением риска (обозначены синим цветом).

Библиотека PyCaret также позволяет построить график зависимости вклада признака в конечный ре-







Рис. 7. Графики «Waterfall plot» (SHAP) для пациентов №15 (*a*) и №12 (*b*). Размерности значений признаков представлены в табл. 2

Fig. 7. Waterfall plot (SHAP) charts for patients no.15 (*a*) and no.12 (*b*) The dimensions of the feature values are presented in Table 2



Puc. 8. Вклад признака «Возраст» в конечную модель и плотность распределения признака *Fig.* 8. The contribution of the feature "Age" to the final model and the distribution density of the feature

зультат, на рис. 8 показана зависимость результата от признака «Возраст».

Обсуждение

Проведенное исследование построено на данных, полученных при работе инфекционного стационара НМИЦ им. В.А. Алмазова с пациентами с COVID-19, использованных для прогнозирования летального исхода. Разработанный алгоритм и калькулятор, построенный на его использовании, с высокой чувствительностью и специфичностью предсказывают вероятность летального исхода у пациентов с COVID-19, что отличает его от ранее предложенных алгоритмов, учитывающих ретроспективные данные [11,12].

Высокая чувствительность и специфичность, достигнутые алгоритмом, демонстрируют, что он способен точно различать пациентов с COVID-19 с высоким и низким рисками летального исхода уже в первые 72 часа госпитализации. Высокая чувствительность, в частности, предполагает, что алгоритм маловероятно даст ложноотрицательные данные, и что пациенты, нуждающиеся в повышенном внимании со стороны медперсонала, скорей всего не будут пропущены. Кроме того, повышение чувствительности алгоритма по сравнению с традиционной системой подсчета очков показало, что алгоритм способен обнаружить больше пациентов, которым требуется повышенное внимание; что должно способствовать улучшению маршрутизации пациентов и распределению ресурсов.

Отметим, что алгоритм также имеет большую чувствительность при более высокой специфичности по сравнению с NEWS2 [13]. Для базовой модели («NEWS2 + возраст») дискриминация была умеренной при внутренней валидации (AUC = 0,764; 95 % доверительный интервал: 0,737, 0,794).

Точное и раннее прогнозирование риска ухудшения состояния пациента может улучшить процедуры сорти-

ровки и маршрутизации пациентов и распределение ресурсов.

Заметим, что предложенная модель предсказала вероятность летального исхода, используя только доступные лабораторные исследования и данные жизненно важных признаков. Демографические данные для расчета риска не требовались, что отличает ее от уже имеющихся [14, 15]. Модель способна генерировать прогноз в отсутствие определенных входных данных. В реальной клинической практике не всегда всем больным требуется проведение полного спектра обследования, что при построении моделей нередко может влиять на результат. Пропущенные в базе данных значения не вносили существенного вклада и не искажали результаты при расчете риска. Таким образом, разработанная модель может быть использована для оценки прогноза даже в отсутствие некоторых признаков.

Отметим следующие выявленные ограничения представленной модели. Несмотря на то, что в выборку было включено достаточно большое количество пациентов, и использовалась внешняя валидация на больных из других медицинских центров, конечная общая выборка представлена 3054 больными, где летальный исход был представлен в 6,42 % случаев. Все это диктует необходимость проведения дальнейшей апробации разработанного калькулятора на внешних данных с включением показателей тяжелых больных. Также необходимо отметить, что на основании полученных результатов нельзя сделать выводы о производительности алгоритма в новых условиях при изменении штамма вируса и различий в течение заболевания. Дополнительно, в связи с принятым ограничением пациентов с подтвержденным диагнозом COVID-19, невозможно сделать вывод о производительности алгоритма для прогнозирования летального исхода в проспективных условиях у пациентов, не страдающих COVID-19, и у пациентов с подозрением на COVID-19, не подтвержденный в последствии.

Заключение

Алгоритм машинного обучения для прогнозирования летального исхода у пациентов с COVID-19 в течение 72 часов госпитализации продемонстрировал высокую чувствительность (0,816) и специфичность (0,865), и превзошел обычно используемую систему оценки раннего предупреждения заболевания. Алгоритм способен обнаруживать на 11 % больше пациентов, чем модифицированный показатель раннего предупреждения при одновременном снижении ложноположительных результатов. Учитывая серьезные опасения по поводу ограниченных ресурсов, включая аппараты искусствен-

Литература

- Lee E.E., Hwang W., Song K.H., Jung J., Kang C.K., Kim J.H., Oh H.S., Kang Y.M., Lee E.B., Chin B.S., Song W., Kim N.J., Park J.K. Predication of oxygen requirement in COVID-19 patients using dynamic change of inflammatory markers: CRP, hypertension, age, neutrophil and lymphocyte (CHANeL) // Scientific Reports. 2021. V. 11. N 1. P. 13026. https://doi.org/10.1038/s41598-021-92418-2
- Yu L., Halalau A., Dalal B., Abbas A.E., Ivascu F., Amin M., Nair G.B. Machine learning methods to predict mechanical ventilation and mortality in patients with COVID-19 // PLoS ONE. 2021. V. 16. N 4. P. e0249285. https://doi.org/10.1371/journal.pone.0249285
- Burdick H., Lam C., Mataraso S., Siefkas A., Braden G., Dellinger R.P., McCoy A., Vincent J.L., Green-Saxena A., Barnes G., Hoffman J., Calvert J., Pellegrini E., Das R. Prediction of respiratory decompensation in Covid-19 patients using machine learning: The READY trial // Computers in Biology and Medicine. 2020. V. 124. P. 103949. https://doi.org/10.1016/j.compbiomed.2020.103949
- Syeda H.B., Syed M., Sexton K.W., Syed S., Begum S., Syed F., Prior F., Yu F. Role of machine learning techniques to tackle the COVID-19 crisis: systematic review // JMIR Medical Informatics. 2021. V. 9. N 1. P. e23811. https://doi.org/10.2196/23811
- Jehi L., Ji X., Milinovich A., Erzurum S., Merlino A., Gordon S., Young J.B., Kattan M.W. Development and validation of a model for individualized prediction of hospitalization risk in 4,536 patients with COVID-19 // PloS ONE. 2020. V. 15. N 8. P. e0237419. https://doi. org/10.1371/journal.pone.0237419
- Moez Ali. PyCaret: An open source, low-code machine learning library in Python // PyCaret version 2.1. 2020 [Электронный ресурс]. URL: https://www.pycaret.org (дата обращения: 21.07.2022).
- Lundberg S.M., Erion G., Chen H., DeGrave A., Prutkin J.M., Nair B., Katz R., Himmelfarb J., Bansal N., Lee S.-I. From local explanations to global understanding with explainable AI for trees // Nature Machine Intelligence. 2020. V. 2. N 1. P. 56–67. https://doi. org/10.1038/s42256-019-0138-9
- Chen H., Lundberg S.M., Lee S.I. Explaining models by propagating shapley values of local components // Studies in Computational Intelligence. 2021. V. 914. P. 261–270. https://doi.org/10.1007/978-3-030-53352-6 24
- Linardatos P., Papastefanopoulos V., Kotsiantis S. Explainable ai: A review of machine learning interpretability methods // Entropy. 2021. V. 23. N 1. P. 18. https://doi.org/10.3390/e23010018
- Li X., Xiong H., Li X., Wu X., Zhang X., Liu J., Bian J., Dou D. Interpretable deep learning: interpretation, interpretability, trustworthiness, and beyond // Knowledge and Information Systems. 2022. in press. https://doi.org/10.1007/s10115-022-01756-8
- Yang Y., Zhu X.F., Huang J., Chen C., Zheng Y., He W., Zhao L.H., Gao Q., Huang X.X., Fu L.J., Zhang Y., Chang Y.Q., Zhang H.J., Lu Z.J. Nomogram for prediction of fatal outcome in patients with severe COVID-19: a multicenter study // Military Medical Research. 2021. V. 8. N 1. P. 21. https://doi.org/10.1186/s40779-021-00315-6
- 12. Zarei J., Jamshidnezhad A., Haddadzadeh Shoushtari M., Mohammad Hadianfard A., Cheraghi M., Sheikhtaheri A. Machine learning models to predict in-hospital mortality among inpatients with COVID-19: Underestimation and overestimation bias analysis in

ной вентиляции легких, во время пандемии COVID-19, точное прогнозирование пациентов, которым, вероятно, потребуется искусственная вентиляция легких, может помочь дать важные рекомендации в отношении сортировки пациентов и распределения ресурсов среди госпитализированных больных. Кроме того, раннее выявление таких лиц позволит проводить плановые процедуры вентиляции легких, снижая известные риски, связанные с экстренной интубацией. В результате реализация представленного алгоритма сможет помочь улучшить оказание медицинской помощи пациентами, снизить смертность больных и свести к минимуму нагрузку на врачей во время пандемии COVID-19.

References

- Lee E.E., Hwang W., Song K.H., Jung J., Kang C.K., Kim J.H., Oh H.S., Kang Y.M., Lee E.B., Chin B.S., Song W., Kim N.J., Park J.K. Predication of oxygen requirement in COVID-19 patients using dynamic change of inflammatory markers: CRP, hypertension, age, neutrophil and lymphocyte (CHANeL). *Scientific Reports*, 2021, vol. 11, no. 1, pp. 13026. https://doi.org/10.1038/s41598-021-92418-2
- Yu L., Halalau A., Dalal B., Abbas A.E., Ivascu F., Amin M., Nair G.B. Machine learning methods to predict mechanical ventilation and mortality in patients with COVID-19. *PLoS One*, 2021, vol. 16, no. 4, pp. e0249285. https://doi.org/10.1371/journal.pone.0249285
- Burdick H., Lam C., Mataraso S., Siefkas A., Braden G., Dellinger R.P., McCoy A., Vincent J.L., Green-Saxena A., Barnes G., Hoffman J., Calvert J., Pellegrini E., Das R. Prediction of respiratory decompensation in Covid-19 patients using machine learning: The READY trial. *Computers in Biology and Medicine*, 2020, vol. 124, pp. 103949. https://doi.org/10.1016/j.compbiomed.2020.103949
- Syeda H.B., Syed M., Sexton K.W., Syed S., Begum S., Syed F., Prior F., Yu F. Role of machine learning techniques to tackle the COVID-19 crisis: systematic review. *JMIR Medical Informatics*, 2021, vol. 9, no. 1, pp. e23811. https://doi.org/10.2196/23811
- Jehi L., Ji X., Milinovich A., Erzurum S., Merlino A., Gordon S., Young J.B., Kattan M.W. Development and validation of a model for individualized prediction of hospitalization risk in 4,536 patients with COVID-19. *PloS ONE*, 2020, vol. 15, no. 8, pp. e0237419. https:// doi.org/10.1371/journal.pone.0237419
- Moez Ali. PyCaret: An open source, low-code machine learning library in Python. *PyCaret version 2.1. 2020*. Available at: https:// www.pycaret.org (accessed: 21.07.2022).
- Lundberg S.M., Erion G., Chen H., DeGrave A., Prutkin J.M., Nair B., Katz R., Himmelfarb J., Bansal N., Lee S.-I. From local explanations to global understanding with explainable AI for trees. *Nature Machine Intelligence*, 2020, vol. 2, no. 1, pp. 56–67. https:// doi.org/10.1038/s42256-019-0138-9
- Chen H., Lundberg S.M., Lee S.I. Explaining models by propagating shapley values of local components. *Studies in Computational Intelligence*, 2021, vol. 914, pp. 261–270. https://doi.org/10.1007/978-3-030-53352-6 24
- Linardatos P., Papastefanopoulos V., Kotsiantis S. Explainable ai: A review of machine learning interpretability methods. *Entropy*, 2021, vol. 23, no. 1, pp. 18. https://doi.org/10.3390/e23010018
- Li X., Xiong H., Li X., Wu X., Zhang X., Liu J., Bian J., Dou D. Interpretable deep learning: interpretation, interpretability, trustworthiness, and beyond. *Knowledge and Information Systems*, 2022, in press. https://doi.org/10.1007/s10115-022-01756-8
- Yang Y., Zhu X.F., Huang J., Chen C., Zheng Y., He W., Zhao L.H., Gao Q., Huang X.X., Fu L.J., Zhang Y., Chang Y.Q., Zhang H.J., Lu Z.J. Nomogram for prediction of fatal outcome in patients with severe COVID-19: a multicenter study. *Military Medical Research*, 2021, vol. 8, no. 1, pp. 21. https://doi.org/10.1186/s40779-021-00315-6
- Zarei J., Jamshidnezhad A., Haddadzadeh Shoushtari M., Mohammad Hadianfard A., Cheraghi M., Sheikhtaheri A. Machine learning models to predict in-hospital mortality among inpatients with COVID-19: Underestimation and overestimation bias analysis in subgroup populations. *Journal of Healthcare Engineering*, 2022, pp. 1644910. https://doi.org/10.1155/2022/1644910

subgroup populations // Journal of Healthcare Engineering. 2022. P. 1644910. https://doi.org/10.1155/2022/1644910

- Baker K.F., Hanrath A.T., van der Loeff I.S., Kay L.J., Back J., Duncan C.J. National early warning score 2 (NEWS2) to identify inpatient COVID-19 deterioration: a retrospective analysis // Clinical Medicine, Journal of the Royal College of Physicians of London. 2021. V. 21. N 2. P. 84–89. https://doi.org/10.7861/clinmed.2020-0688
- Kondapalli A.R., Koganti H., Challagundla S.K., Guntaka C., Biswas S. Machine learning predictions of COVID-19 second wave end-times in Indian states // Indian Journal of Physics. 2022. V. 96. N 8. P. 2547–2555. https://doi.org/10.1007/s12648-021-02195-x
- Mahdavi M., Choubdar H., Zabeh E., Rieder M., Safavi-Naeini S., Jobbagy Z., Ghorbani A., Abedini A., Kiani A., Khanlarzadeh V., Lashgari R., Kamrani E. A machine learning based exploration of COVID-19 mortality risk // Plos ONE. 2021. V. 16. N 7. P. e0252384. https://doi.org/10.1371/journal.pone.0252384

Авторы

Корсаков Игорь Николаевич — кандидат физико-математических наук, специалист по информационному обеспечению, Национальный медицинский исследовательский центр им. В.А. Алмазова, Санкт-Петербург, 197341, Российская Федерация, с 57189603967, https:// orcid.org/0000-0003-2343-9641, korsakov_in@almazovcentre.ru

Каронова Татьяна Леонидовна — доктор медицинских наук, доцент, главный научный сотрудник, заведующий научно-исследовательской лабораторией, профессор кафедры, Национальный медицинский исследовательский центр им. В.А. Алмазова, Санкт-Петербург, 197341, Российская Федерация, 55812730000, https://orcid.org/0000-0002-1547-0123, karonova@mail.ru

Конради Александра Олеговна — доктор медицинских наук, академик РАН, заместитель генерального директора по научной работе, Национальный медицинский исследовательский центр им. В.А. Алмазова, Санкт-Петербург, 197341, Российская Федерация, 50 7004144504, https://orcid.org/0000-0001-8169-7812, Konradi_ao@ almazovcenter.ru

Рубин Аркадий Дмитриевич — доктор медицинских наук, доцент, директор Лечебно-реабилитационного комплекса, Национальный медицинский исследовательский центр им. В.А. Алмазова, Санкт-Петербург, 197341, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0001-5469-5635, rubin_ad@almazovcentre.ru

Курапеев Дмитрий Ильич — кандидат медицинских наук, заместитель генерального директора по информационным технологиям, Национальный медицинский исследовательский центр им. В.А. Алмазова, Санкт-Петербург, 197341, Российская Федерация, 57225231263, https://orcid.org/0000-0002-2190-1495, dkurapeev@ gmail.com

Черникова Алёна Тимуровна — младший научный сотрудник, Национальный медицинский исследовательский центр им. В.А. Алмазова, Санкт-Петербург, 197341, Российская Федерация, https:// orcid.org/0000-0002-4878-6909, arabicaa@gmail.com

Михайлова Арина Алексеевна — ординатор кафедры, Национальный медицинский исследовательский центр им. В.А. Алмазова, Санкт-Петербург, 197341, Российская Федерация, https:// orcid.org/0000-0001-6066-3525, armikhaylova@yandex.ru

Шляхто Евгений Владимирович — доктор медицинских наук, академик РАН, генеральный директор, Национальный медицинский исследовательский центр им. В.А. Алмазова, Санкт-Петербург, 197341, Российская Федерация, se 16317213100, https://orcid.org/0000-0003-2929-0980, e.shlyakhto@almazovcentre.ru

Статья поступила в редакцию 18.07.2022 Одобрена после рецензирования 07.09.2022 Принята к печати 30.09.2022

- Baker K.F., Hanrath A.T., van der Loeff I.S., Kay L.J., Back J., Duncan C.J. National early warning score 2 (NEWS2) to identify inpatient COVID-19 deterioration: a retrospective analysis. *Clinical Medicine, Journal of the Royal College of Physicians of London*, 2021, vol. 21, no. 2, pp. 84–89. https://doi.org/10.7861/ clinmed.2020-0688
- Kondapalli A.R., Koganti H., Challagundla S.K., Guntaka C., Biswas S. Machine learning predictions of COVID-19 second wave end-times in Indian states. *Indian Journal of Physics*, 2022, vol. 96, no. 8, pp. 2547–2555. https://doi.org/10.1007/s12648-021-02195-x
- Mahdavi M., Choubdar H., Zabeh E., Rieder M., Safavi-Naeini S., Jobbagy Z., Ghorbani A., Abedini A., Kiani A., Khanlarzadeh V., Lashgari R., Kamrani E. A machine learning based exploration of COVID-19 mortality risk. *Plos ONE*. 2021, vol. 16, no. 7, pp. e0252384. https://doi.org/10.1371/journal.pone.0252384

Authors

Igor N. Korsakov — PhD (Physics & Mathematics), IT Specialist, Almazov National Medical Research Centre, Saint Petersburg, 197341, Russian Federation, S 57189603967, https://orcid.org/0000-0003-2343-9641, korsakov_in@almazovcentre.ru

Tatiana L. Karonova — D. Sc. (Medicine), Associate Professor, Chief Researcher, Head of Laboratory, Chair Professor, Almazov National Medical Research Centre, Saint Petersburg, 197341, Russian Federation, 55812730000, https://orcid.org/0000-0002-1547-0123, karonova@ mail.ru

Alexandra O. Konradi — D. Sc. (Medicine), Academician of the RAS, Deputy Director General for Research, Almazov National Medical Research Centre, Saint Petersburg, 197341, Russian Federation, 7004144504, https://orcid.org/0000-0001-8169-7812, Konradi_ao@ almazovcenter.ru

Arkadii D. Rubin — D. Sc. (Medicine), Associate Professor, Medical Director of the Treatment and Rehabilitation Facility, Almazov National Medical Research Centre, Saint Petersburg, 197341, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0001-5469-5635, rubin ad@almazovcentre.ru

Dmitry I. Kurapeev — PhD (Medicine), Deputy CEO for Information Technology, Almazov National Medical Research Centre, Saint Petersburg, 197341, Russian Federation, **5**7225231263, https://orcid.org/0000-0002-2190-1495, dkurapeev@gmail.com

Alena T. Chernikova — Junior Researcher, Almazov National Medical Research Centre, Saint Petersburg, 197341, Russian Federation, https:// orcid.org/0000-0002-4878-6909, arabicaa@gmail.com

Arina A. Mikhaylova — Department Resident, Almazov National Medical Research Centre, Saint Petersburg, 197341, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0001-6066-3525, armikhaylova@yandex.ru

Evgeny V. Shlyakhto — D. Sc. (Medicine), Academician of the RAS, Director General, Almazov National Medical Research Centre, Saint Petersburg, 197341, Russian Federation, **16317213100**, https://orcid. org/0000-0003-2929-0980, e.shlyakhto@almazovcentre.ru

Received 18.07.2022 Approved after reviewing 07.09.2022 Accepted 30.09.2022



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial»

I/İTMO

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 No 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

университет итмо

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-982-991 УДК 004.052.42

Генерация слабейших предусловий программ с динамической памятью в символьном исполнении

Александр Владимирович Мисонижник¹, Юрий Олегович Костюков²⊠, Михаил Павлович Костицын³, Дмитрий Александрович Мордвинов⁴, Дмитрий Владимирович Кознов⁵

1.2.3.4.5 Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, 199034, Российская Федерация

¹ misonijnik@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-5907-0324

² kostyukov.yurii@gmail.com[⊠], https://orcid.org/0000-0003-4607-039X

³ michael.kosticyn@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-9982-6571

⁴ mordvinov.dmitry@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-6437-3020

⁵ d.koznov@spbu.ru, https://orcid.org/0000-0003-2632-3193

Аннотация

Предмет исследования. Символьное исполнение — широко известный метод систематического исследования путей исполнения программ. Метод позволяет решить ряд важных задач, связанных с контролем корректности: поиск ошибок и уязвимостей, автоматическая генерация тестов и др. Основная идея символьного исполнения порождение и использование символьных логических выражений при анализе программ в прямом порядке, т. е. от входной точки к точкам интереса. Хорошо известен метод обратного символьного исполнения, когда условия попадания в точку интереса распространяются ко входной точке программы за счет итеративного вычисления слабейших предусловий. Реализовать этот метод, как правило, намного труднее, чем прямое символьное исполнение, так что даже артефакты последнего не удается использовать при реализации. Метод. Исследована связь между прямым и обратным символьными исполнениями на основе вычисления слабейших предусловий. В частности показано, как обратное исполнение может быть реализовано на базе прямого. Основные результаты. Приведено формальное описание процедуры символьного исполнения с ленивой инициализацией для программ с динамической памятью. Предложен алгоритм вычисления слабейших предусловий для произвольных ветвей исполнения программы. Механизм ленивой инициализации и алгоритм вычисления слабейших предусловий реализованы в символьной виртуальной машине КLEE, работающей на базе широко известной платформы LLVM. Практическая значимость. Представленный метод позволяет выполнять обратный символьный анализ при помощи прямого символьного исполнения. Это важно для реализации двунаправленного исполнения программ, которое может быть применено для верификации программ и автоматического порождения тестовых покрытий.

Ключевые слова

слабейшие предусловия, символьное исполнение, обратный символьный анализ, двунаправленный анализ, автоматическая генерация тестов

Благодарности

Данное исследование было поддержано грантом РНФ № 22-21-00697.

Ссылка для цитирования: Мисонижник А.В., Костюков Ю.О., Костицын М.П., Мордвинов Д.А., Кознов Д.В. Генерация слабейших предусловий программ с динамической памятью в символьном исполнении // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 982–991. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-982-991

[©] Мисонижник А.В., Костюков Ю.О., Костицын М.П., Мордвинов Д.А., Кознов Д.В., 2022

Generation of the weakest preconditions of programs with dynamic memory in symbolic execution

Aleksandr V. Misonizhnik¹, Yurii O. Kostyukov^{2⊠}, Michael P. Kostitsyn³, Dmitry A. Mordvinov⁴, Dmitry V. Koznov⁵

1,2,3,4,5 St. Petersburg State University (SPbSU), Saint Petersburg, 199034, Russian Federation

¹ misonijnik@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-5907-0324

² kostyukov.yurii@gmail.com^{\Box}, https://orcid.org/0000-0003-4607-039X

³ michael.kosticyn@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-9982-6571

⁴ mordvinov.dmitry@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-6437-3020

⁵ d.koznov@spbu.ru, https://orcid.org/0000-0003-2632-3193

Abstract

Symbolic execution is a widely used method for the systematic study of program execution paths; it allows solving a number of important problems related to verification of correctness: searching for errors and vulnerabilities, automatic test generation, etc. The main idea of symbolic execution is generation and use of symbolic expressions in the program analysis in direct order, i.e., from the entry point to the points of interest. At the same time, since the time of E.W. Dijkstra, the method of backward symbolic execution has been popular when the conditions for hitting the point of interest are extended to the entry point of the program due to the iterative calculation of the weakest preconditions. This method is usually much more difficult to implement than direct symbolic execution, so even the artifacts of the latter cannot be used in the implementation. In this paper, the relationship between direct and backward symbolic execution based on the calculation of the weakest preconditions is investigated. In particular, it is shown that the latter can be implemented using the former. A formal presentation of symbolic execution with lazy initialization for programs with dynamic memory is given. An algorithm for calculating the weakest preconditions for arbitrary symbolic executed program branches is proposed. The lazy initialization mechanism and the algorithm for calculating the weakest preconditions are implemented in KLEE, a symbolic virtual machine for the well-known LLVM platform. The proposed method allows performing backward symbolic analysis using direct symbolic execution. This is important for the implementation of bidirectional program execution which can be used both for program verification and for automatic test generation.

Keywords

weakest preconditions, symbolic execution, backward symbolic analysis, bidirectional analysis, automatic test generation

Acknowledgments

The work is supported by the grant of RNF No. 22-21-00697.

For citation: Misonizhnik A.V., Kostyukov Yu.O., Kostitsyn M.P., Mordvinov D.A., Koznov D.V. Generation of the weakest preconditions of programs with dynamic memory in symbolic execution. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 982–991 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-982-991

Введение

Символьное исполнение — известный метод статического исполнения программ. Данный метод основан на исполнении программ в рамках *символьной памяти*, в которой, в противовес адресному пространству программы, располагаются символьные, а не конкретные данные, т. е. термы некоторого формального языка. Символьное исполнение позволяет эффективно решать ряд задач, связанных с проверкой корректности программ: поиск ошибок и уязвимостей, автоматическая генерация тестов, и др. [1]. К настоящему времени зарубежными и российскими исследователями разработано большое количество систем символьного исполнения, например, KLEE [2], Angr [3], Crest [4], Pex [5], SPF [6], Manticore [7], DART [8], SAGE [9], S2E [10], Sydr [11] и др.

В научных работах встречаются два основных вида символьного исполнения: прямое и обратное [1]. Прямое осуществляет исполнение программы от входной точки (например, процедуры main в С-программе) к точкам интереса — тем строкам и операторам программы, выполнение которых интересует программистов и тестировщиков. Такое исполнение реализовано в подавляющем числе символьных виртуальных машин [1]. Однако данная техника имеет фундаментальное ограничение — комбинаторный взрыв путей исполнения программы, поскольку число символьных состояний программы растет экспоненциально от числа выполненных инструкций.

Один из способов частичного преодоления этого ограничения заключается в обратном исполнении инструкций программы [12]. Обратное исполнение позволяет эффективно находить входные данные, приводящие исполнение программы в точку интереса. При этом обратный шаг традиционно производится за счет вычисления *слабейших предусловий*, что, однако, оказывается труднореализуемым в существующих инструментах [13]: шаг исполнения представляет собой вычисление слабейшего предусловия относительно текущей инструкции [14]. Слабейшее предусловие такое слабейшее условие, которому должно удовлетворять состояние программы, чтобы после исполнения инструкции получилось состояние, удовлетворяющее постусловию.

В настоящей работе предложен способ вычисления слабейших предусловий при обратном символьном исполнении через прямое символьное исполнение. Это позволяет избавиться от необходимости разрабатывать отдельный модуль для обратного исполнения инструкций, что является очень трудоемкой задачей для программных платформ (JVM, LLVM, .NET и пр.) из-за большого количества инструкций со сложной семантикой.

Представленный способ рассчитан на программы с динамической памятью, что важно для неакадемического, практического применения символьного исполнения. Это оказывается возможным ввиду использования известной техники ленивой инициализации [15], позволяющей символьно исполнять программы со сложными входными структурами данных. В работе представлена также реализация предложенного подхода в рамках известной системы символьного исполнения КLEЕ [2], которая предназначена для символьного исполнения байт-кода платформы LLVM. В свою очередь, LLVM используется компиляторами более десяти различных языков, включая С, С++, Go, Kotlin и др. Представленная реализация имеет открытый исходный код и может служить основой для создания эффективных инструментов контроля качества на основе KLEE.

Таким образом, основными задачами данной работы является следующее.

- Формальное описание символьного исполнения с ленивой инициализацией.
- Алгоритм вычисления слабейших предусловий относительно произвольных ветвей программы.
- 3. Масштабирование подхода на случаи использования в программах динамической памяти.
- Реализация алгоритма вычисления слабейших предусловий в символьной виртуальной машине KLEE.

Обзор

Многие работы (например, [16–19]) направлены на улучшение символьного исполнения программ с динамической памятью путем применения абстракций для ускорения процесса символьного анализа программы, ведущих к потере информации о программе. Ленивая инициализация, используемая в настоящей работе, не является абстракцией такого рода. Предложенный подход оказывается ортогональным вышеупомянутым и может использоваться совместно с ними.

В [20–22] использована аналогичная основа, как и в настоящей работе. В работах [20] и [21] предложено отсекать пути в программе, которые могут быть поглощены с помощью резюме уже посещенных путей. В [21] резюме считается при помощи интерполяции, а в [20] — путем вычисления слабейшего предусловия пути. Вычисление слабейших предусловий в последнем случае полагается на трудно реализуемую трансформацию программ, которая должна быть нетривиально расширена для поддержки новых языковых конструкций. Такой проблемы нет в предложенном подходе, так как слабейшие предусловия порождаются из существующих артефактов символьного исполнения. В работе [21] при помощи интерполяции невыполнимой формулы, выражающей достижимость отдельного пути, вычислены аннотации, аппроксимирующие множество достижимых состояний программы сверху. Получаемый интерполянт в общем случае грубее слабейшего предусловия пути, а потому на практике целесообразно рассматривать символьные пути, которые можно было бы отсечь, пользуясь подходом настоящей работы. В [22] рассмотрены некоторые формальные аспекты ленивой инициализации и алгоритмы для ее вычисления. В представленной работе предложен способ применения ленивой инициализации для вычисления слабейших предусловий.

Слабейшие предусловия также используются в дедуктивной верификации программ, в методе обратного символьного анализа, основанного на идеях Э.В. Дейкстры [14]. Данный метод применен для доказательства корректности троек Хоара и позволяет порождать промежуточные логические аннотации, корректность которых затем проверена системой проверки доказательств. При этом циклы и рекурсивные вызовы можно аппроксимировать пользовательскими индуктивными инвариантами [23]. В некоторых случаях дедуктивная верификация способна доказывать корректность всех поведений программы, однако, как правило, она требует существенных усилий от пользователя. Отметим, что большинство дедуктивных верификаторов поддерживают лишь фрагменты языков программирования [24, 25]. В данной работе предложен альтернативный метод, который является полностью автоматическим, реализован в виртуальной машине КLEE и поддерживает все инструкции LLVM.

Демонстрационный язык

Опишем демонстрационный язык программирования с возможностью изменения динамически выделяемой памяти. В качестве примеров рассмотрим программы на этом языке программирования.

Синтаксис демонстрационного языка представлен на листинге 1. Программа — нумерованная последовательность инструкций. Инструкции *fail* и *halt* вызывают остановку программы с ошибкой и без ошибки соответственно. Демонстрационный язык не содержит функций и циклов, однако включает в себя условный переход на инструкцию *goto*. В условном переходе слева от стрелки записывается условие, а справа — номер инструкции, на которую будет осуществлен переход, если условие выполнено. Когда в программе веток условного перехода много, то они проверяются одна за

 $\begin{array}{l} Program ::= (\mathbb{N}: Statement)^* \\ Statement ::= fail | halt | Location := Expr | goto \{ Expr \rightarrow \mathbb{N} \}^+ \\ Expr ::= true | false | \mathbb{Z} | Expr BinOpExpr | UnOp Expr | Location | alloc \mathbb{N} \\ Location ::= ident | * Expr \end{array}$

Листинг 1. Синтаксис демонстрационного языка *List. 1*. Demo language syntax одной в том порядке, в котором они идут в тексте программы, и переход происходит только по одной из них. Если ни одно условие не было выполнено, исполняется следующая после условного перехода инструкция. Оператор присваивания := имеет ту же семантику, что и в языке C++. Другими словами, если слева от присваивания находится переменная, то запись ведется в память, выделенную под эту переменную, а если слева от присваивания стоит разыменование выражения, то сначала вычисляется именно оно, а затем происходит запись по адресу, соответствующему вычисленному выражению.

Демонстрационный язык содержит бинарные и унарные арифметические и булевы операторы *BinOp* и *UnOp*. Оператор *alloc* выделяет в памяти зануленный массив фиксированного размера, не пересекающийся с прежде выделенными массивами, а также возвращает указатель на его начало. Для обращения к памяти в массиве используем следующую нотацию, применяемую в C^{++} : p[e] = *(p + e).

В языке имеется два типа данных: булев и чисел. Рассмотрим только корректно типизированные программы: операторам, ожидающим числа/булевы значения, передаются, соответственно, только числа/булевы значения. Для любой ветки оператора *goto*, встречающегося в программе, всегда существует инструкция с соответствующим номером, а имена идентификаторов и ключевые слова языка не пересекаются. Запись по константным адресам, в том числе по нулю (например, * 42 := 1, * := 2), для простоты изложения будем считать корректной. Таким образом, имеется лишь один вид ошибок в программах — достижимость инструкции *fail*.

Язык предусловий и постусловий

Пусть $\Sigma \stackrel{\text{def}}{=} \langle \mathbb{Z}, \Sigma_f, \Sigma_p \rangle$ – сигнатура арифметики, расширенная функциональным символом разыменования $* : \mathbb{Z} \to \mathbb{Z}$, т. е.

$$\Sigma_f \stackrel{\text{def}}{=} \{+, \times, -, *\}, \Sigma_p \stackrel{\text{def}}{=} \{=, <, \leq, >, \geq\}.$$

Семантика арифметических функций и предикатов является стандартной; семантика функции разымено-

```
1. p[0] := 1
2. q[0] := 2
3. i := 0
4. goto { !(i < n) -> 9 }
5. goto { p[i] == q[i] -> 8 }
6. i := i + 1
7. goto { true -> 4 }
8. fail
9. halt
```

Листинг 2. Пример программы на демонстрационном языке, которая проверяет, что в двух массивах по индексу с одним и тем же номером лежат различные значения

List. 2. An example of a code snippet in the demo language. The code checks that all indices of two arrays contain different values вания * не фиксирована. Разыменование переменной запишем как * *x*, опуская скобки (как в языке C++). Символами ⊤ и ⊥ обозначим истину и ложь. Пред- и постусловия выразим бескванторными формулами в используемом языке. Для автоматической проверки выполнимости формул в этом языке могут быть использованы SMT-решатели, такие как Z3 [26].

Слабейшие предусловия

Согласно Дейкстре [14], часто важным оказывается не полная семантика программы, а лишь возможность обеспечить истинность конкретного постусловия, ради которого программа разработана. Так как вычисление слабейшего предусловия для всей программы сразу оказывается на практике слишком трудоемкой задачей [13], необходимо обеспечить истинность постусловия после исполнения конкретного пути в программе. Путем в программе будем называть конечную последовательность меток, следующих друг за другом в исходной программе инструкций, которые могут быть выполнены вычислителем в ходе исполнения программы. Заметим, что так как путь — конечная последовательность, его вычисление всегда завершится, а потому не нужно разделять понятия свободного и несвободного предусловия.

Тройка Хоара относительно пути в программе определяется аналогично классической тройке Хоара относительно всей программы [23]. А именно, тройка $\{P\}$ раth $\{R\}$ является корректной, когда каждое состояние программы, удовлетворяющее предусловию P, после исполнения на нем инструкций пути path дает состояние, удовлетворяющее постусловию R. Например, для программы с листинга 2 корректна следующая тройка Хоара: $\{n = 0 \land i \ge 42\}$ 3, 4, 9 $\{n \ge 0\}$. Заметим, что всякая тройка вида $\{\bot\}$ раth $\{R\}$ всегда является корректной, а значит, \bot является предусловием любого пути относительно любого постусловия, однако не несет в себе информации о программе. Потому на практике востребовано слабейшее предусловие пути.

Пусть имеется некоторый путь *path* в программе и желаемое постусловие R, тогда слабейшее предусловие этого пути относительно постусловия обозначим как wp(path, R). Оно должно удовлетворять двум ограничениям.

Во-первых, для любого пути *path* и постусловия *R* корректна тройка $\{wp(path, R)\}path\{R\}$, т. е. wp(path, R) действительно вычисляет предусловие пути. Например, для программы с листинга 2 можно проверить, какие начальные состояния после исполнения инструкций 3, 4, 9 дадут состояния, удовлетворяющие условию $n \ge 0$:

$$wp([3, 4, 9], n \ge 0) \equiv wp([3, 4], \neg (i < n) \land n \ge 0) \equiv \\ \equiv wp([3], \neg (i < n) \land n \ge 0) \equiv wp([], \neg (0 < n) \land n \ge 0) \equiv \\ \equiv \neg (0 < n) \land n \ge 0 \Leftrightarrow n = 0.$$

Другими словами, только если в начальном состоянии *п* было равно нулю, то после исполнения инструкций 3, 4, 9 значение *n* все еще будет неотрицательно.

Во-вторых, для любого предусловия P, если корректна тройка $\{P\} path\{R\}$, то $P \Rightarrow wp(path, R)$. При помощи слабейшего предусловия пути можно найти ошибки в программе и доказать их отсутствие. Например, для программы с листинга 2 проверим достижимость инструкции *fail*, рассчитав слабейшее предусловие пути из начала программы:

$$wp([1, 2, 3, 4, 5, 8], T) \equiv p = q \land 0 < n.$$

Это предусловие утверждает, что падение программы в инструкцию *fail* возможно, если изначально *p* и *q* указывали на одну и ту же память. Так как эта формула выполнима, то инструкция *fail* оказывается достижимой. С другой стороны, можно проверить, что нельзя достичь инструкции *fail* таким образом, чтобы размер массивов данных *n* оказался меньше i - 1:

$$wp([1, 2, 3, 4, 5, 8], n < i - 1) \equiv \bot.$$

Символьное исполнение программ с динамической памятью

Представим символьное исполнение с ленивой инициализацией программ с динамической памятью. Это широко известный подход, который применяется для автоматического поиска ошибок в программе. Основная идея символьного исполнения состоит в том, чтобы исполнять инструкции программы на *символьной памяти*.

Символьной памятью назовем конечное отображение из символьных локаций *loc* в символьные термы *term*, определенные на листинге 3. Пусть Σ — множество всех таких отображений, $\epsilon \in \Sigma$ — пустая символьная память (пустое отображение).

Символьное состояние памяти позволяет представлять (потенциально бесконечное) множество конкретных состояний программы. Например, после символьного исполнения программы с листинга 4 на пустой символьной памяти ϵ , символьная память будет выглядеть следующим образом:

$$\{ x \mapsto 42; y \mapsto z; p \mapsto * (z+10); r \mapsto 0; * (r+1) \mapsto u; * (r+2) \mapsto 0 \}.$$

Эта символьная память представляет бесконечное число конкретных состояний, которые могут быть получены из него, например, подстановкой конкретных чисел вместо *z* или *u*.

Чтобы иметь возможность символьно исполнять произвольные инструкции, требуются следующие операторы: _[[_]] : $\Sigma \times term \rightarrow term$ — подстановки в терм значений из символьной памяти; $read : \Sigma \times loc \rightarrow term$ — чтения из символьного памяти; $write : \Sigma \times loc \times term \rightarrow \Sigma$ — записи в символьную память по некоторой локации некоторого терма; $alloc : \Sigma \times loc \times \mathbb{N} \rightarrow \Sigma$ — выделения символьной памяти фиксированного размера по некоторой локации.

term ::= $true | false | \mathbb{N} | term BinOp term | UnOp term | loc loc ::= ident | * term$

Листинг 3. Грамматика символьных выражений *List. 3*. Symbolic expressions grammar

Листинг 4. Фрагмент программы, меняющей динамическую память

List. 4. A fragment of a program that changes dynamic memory

Эти операторы имеют естественные свойства. Например, для символьной памяти $\sigma \in \Sigma$, локаций $x, y \in loc$, идентификатора $z \in loc$, чисел $i, n \in \mathbb{N}$ и символьных термов $t, t_1, t_2 \in term$, справедливо следующее:

$$\begin{aligned} x \in dom(\sigma) \Rightarrow read(\sigma, x) = \sigma(x), \\ x \notin dom(\sigma) \Rightarrow read(\sigma, x) = x, \\ read(write(\sigma, x, t), x) = t, \\ x \neq y \Rightarrow read(write(\sigma, y, t), x) = read(\sigma, x), \\ \sigma[[x]] = read(\sigma, z), \\ \sigma[[t_1 BinOp t_2]] = \sigma[[t_1]]BinOp \sigma[[t_2]], \\ \sigma[[*t]] \Rightarrow read(\sigma, * \sigma[[t]]), \\ 0 \le i < n = read(alloc(\sigma, x, n), * (x + i)) = 0. \end{aligned}$$

На листинге 5 представлен алгоритм символьного исполнения. Цветом выделена модификация для исполнения выделенного пути в программе, которая будет использована в разделе «Слабейшие предусловия в символьном исполнении» для вычисления слабейшего предусловия. Алгоритм оперирует символьными *состояниями* — тройками (s, π, r) , где s — фрагмент символьной памяти, $\pi = c.pc$ — условие пути (англ. *path condition*) и r = c.path — список исполненных инструкций. Условие пути является, с одной стороны, формулой в языке пред- и постусловий, а с другой стороны — символьным термом булевого типа. В условии пути накапливаются логические ограничения из операторов ветвления goto, т. е. условия, которые должны быть выполнены для того, чтобы текущее состояния было достижимо.

Символьное исполнение работает следующим образом. Поддерживается очередь символьных состояний, которые требуется исполнить. Из этой очереди выбирается следующее символьное состояние согласно стратегии выбора, реализованной в searcher.pick (например, выбирать состояние с наименьшим или наибольшим числом пройденных инструкций). Для выбранного состояния исполняется следующая инструкция. Шаг символьного исполнения потенциально может породить больше одного символьного состояния. Например, когда исполняется оператор ветвления goto, то в отличии от обычного исполнения, где переход произойдет в одну инструкцию, в символьном исполнении будет выполнен переход по всем веткам исполнения сразу. Однако есть и другой потенциальный источник недетерминизма: инструкции, изменяющие динамическую память.

Например, несмотря на то, что в программе с листинга 6 отсутствуют конструкции ветвления, у нее есть два различных сценария поведения, зависящих от

```
function ExecuteSymbolically(state, path):
BBog: state — начальное символьное состояние
    path — список инструкций, которые нужно посетить
searcher.queue = {state}
while searcher.queue is not empty do
    s = searcher.pick(path)
    children = step(s)
    for all c in children do
        if c.pc is sat then
            if c.path = path then yield c
            else searcher.add(c)
```

Листинг 5. Алгоритм символьного исполнения с (выделенной цветом) модификацией для исполнения выделенного пути в программе

List. 5. Symbolic execution algorithm with a (highlighted) modification for specific program path execution

того, указывают ли р и q на одну и ту же память или нет. Потому, если символьно исполнить эту программу на пустом символьном состоянии, то исполнение первой инструкции даст одно новое состояние, а исполнение второй инструкции разветвит символьное исполнение, как показано на рисунке.

Корректная поддержка этой формы недетерминизма программ с динамической памятью возможна в символьном исполнении благодаря механизму ленивой инициализации. Он работает следующим образом. Пусть в символьном состоянии есть *n* символьных локаций. Тогда при доступе к новой символьной локации порождается n + 1 символьное состояние: в n из них новая символьная локация приравнена одной из старых локаций в условии пути, и в одном символьном состоянии новая локация принимается отличной от всех старых. Таким образом, например, получаются символьные состояния на рисунке, соответствующие листингу 6. Применяя механизм ленивой инициализации, можно обработать все возможные состояния памяти программы и только их. На практике ленивую инициализацию проводят с учетом типов данных, доступных ресурсов и т. п., чтобы уменьшить число перебираемых локаций.

1p[0] := 1 1q[0] := 2

Листинг 6. Линейный фрагмент программы с листинга 2, требующий разветвления символьного исполнения

List. 6. A linear fragment of the program from Listing 2, which requires symbolic execution branching

Для каждого состояния, порожденного шагом символьного исполнения, проведем проверку выполнимости условия пути. Если условие пути невыполнимо (как формула логики первого порядка), состояние недостижимо, и оно отбрасывается. Если условие пути выполнимо, состояние добавляется алгоритмом символьного исполнения в очередь обработки состояний. Проверку выполнимости условия пути можно проводить при помощи логического решателя, например SMT-решателя Z3 [26].

Таким образом, в ходе символьного исполнения получены символьные состояния, которые представляют классы различных сценариев поведения программы. Покажем, как это свойство символьных состояний может быть использовано для вычисления слабейших предусловий.

Слабейшие предусловия в символьном исполнении

Рассмотрим новый алгоритм вычисления слабейшего предусловия пути в программе. Он основан на простой модификации алгоритма символьного исполнения, выделенной цветом на листинге 5, позволяющей символьно исполнять отдельный путь в программе. Модификация превращает алгоритм в сопрограмму, дающую символьные состояния, чьи пути совпадают с требующимися. Для эффективной работы алгоритма следует также модифицировать searcher таким образом, чтобы метод ріск выбирал только те состояния, которые идут по требуемому пути (т. е. путь внутри которых является префиксом требуемого пути).

 $\langle \{*p \mapsto 1, *q \mapsto 2\}, \neg (p = q), [1, 2] \rangle$

$$\langle \epsilon, \mathsf{T}, [] \rangle$$

$$p[0] := 1$$

$$\langle \{*p \mapsto 1\}, \mathsf{T}, [1] \rangle$$

$$q[0] := 2$$

$$\langle \{*p \mapsto 2, q \mapsto p\}, p = q, [1, 2] \rangle$$

Рисунок. Граф разветвления символьного исполнения на программе с листинга 6

Figure. Symbolic execution graph for the program from Listing 6

List. 7. Algorithm for calculating the weakest precondition using symbolic execution

Полученный алгоритм вычисления слабейшего предусловия пути при помощи символьного исполнения представлен на листинге 7.

Этот алгоритм принимает список номеров инструкций программы и постусловие и возвращает слабейшее предусловие полученного пути относительно полученного постусловия. На первом шаге алгоритм, посредством вызова сопрограммы ExecuteSymbolically на пустом символьном состоянии $\langle \epsilon, \mathsf{T}, [] \rangle$ и входном пути, получает множество символьных состояний states. Данное множество представляет все возможные достижимые состояния программы, которые могут быть получены в результате обычного исполнения инструкций заданного пути. Далее алгоритм вычисляет дизьюнкцию по всем символьным состояниям $\langle s, \pi, _\rangle \in states$ конъюнкций из условия пути π и подстановки s $[\![R]\!]$ значений переменных из состояния *s* в постусловие *R*.

Например, вычисление функции *wpSE*([1,2,3,4,5,8], T) для примера с листинга 2 даст множество из одного символьного состояния *states* = { $\langle s, \pi [1,2,3,4,5,8] \rangle$ }, где

$$s \equiv \{*p \mapsto 2; q \mapsto p; i \mapsto 0\},\$$
$$\pi \equiv p = q \land 0 < n \land 2 = 2.$$

Тогда $wpSE([1,2,3,4,5,8], T) \equiv \pi \land s[[T]] \equiv \pi \land T \Leftrightarrow \pi$, где 2 = 2 и получено путем подстановки в условие p[i] = q[i] из кода значений состояния s:

$$s[[*(p+i) = *(q+i)]] \equiv s[[*(p+i)]] = s[[*(q+i)]] \equiv$$
$$\equiv s(*(s[[p]] + s[[i]])) = s(*(s[[q]] + s[[i]])) \equiv$$
$$\equiv s(*(p+0)) = s(*(p+0)) \equiv 2 = 2.$$

Таким образом, функция *wpSE* возвращает формулу, эквивалентную слабейшему предусловию $wp([1,2,3,4,5,8], \top) \equiv p = q \land 0 < n$.

При помощи того же символьного состояния *s* можно вычислить предусловие пути из другого примера:

$$wpSE([1,2,3,4,5,8], n < i-1) \equiv \pi \land s[[n < i-1]] \equiv$$
$$\equiv p = q \land 0 < n \land 2 = 2 \land n < 0 - 1 \Leftrightarrow \bot.$$

Таким образом, алгоритм *wpSE* вычисляет слабейшее предусловие пути программ с динамической памятью.

Теорема 1. Пусть *path* — последовательность меток кода и *R* — постусловие. Тогда алгоритм *wpSE* из

листинга 7 вычисляет слабейшее предусловие *path* относительно *R*. Другими словами,

$$wpSE(path, R) \Leftrightarrow wp(path, R)$$

Этот факт легко доказывается разбором случаев аналогично [27].

Простота алгоритма wpSE указывает на то, что вся содержательная часть вычислений осуществляется алгоритмом символьного исполнения. Это является главным преимуществом предлагаемого подхода по сравнению с подходами, реализующими вычисление слабейшего предусловия непосредственно по тексту программы. Алгоритм символьного исполнения для программ с динамической памятью проще реализовать, чем вычисление слабейшего предусловия напрямую, так как последний требует обратного исполнения программы, что весьма затруднительно реализовать для программ с динамической памятью. Символьное же исполнение подразумевает прямое исполнение инструкций, при этом все возможные поведения программы корректно отслеживаются при помощи механизма ленивой инициализации. Более того, если кроме работы с динамической памятью потребуется поддержать другие возможности языка, такие как работа со статической памятью, виртуальными вызовами, исключениями и т. п., реализация обратного анализа станет еще сложнее, в то время как символьное исполнение все еще будет легко расширяемо на эти случаи. Таким образом, предложенный алгоритм можно легко расширить на более сложные виды программ с динамической памятью, используя существующие расширения символьного исполнения.

Реализация в KLEE

КLEE — символьная виртуальная машина, построенная на основе инфраструктуры компилятора LLVM. Для реализации алгоритма вычисления слабейших предусловий в виртуальную машину KLEE внесем два ключевых изменения.

 Добавим возможность исполнять любую последовательность инструкций в изоляции. Для этого в КLEE реализована ленивая инициализация регистров и объектов в динамической памяти. Ленивая инициализация регистра вызывается, если при исполнении инструкции в изоляции в читаемом регистре еще нет значения, а ленивая инициализация объектов происходит при разыменовании символьного указателя. После перебора всех объектов в памяти проверяется выполнимость условия пути, при котором символьный указатель не может указывать ни на один из объектов в памяти. Если условие выполнимо, в память добавляется новый символьный объект с адресом, равным адресу указателя.

 Для вычисления слабейшего предусловия реализован оператор подстановки в терм значений из символьной памяти. В КLEE символьные значения регистров подставлены из значений регистров в символьном состоянии. Для подстановки символьных объектов из памяти необходимо сначала подставить значения в терм указателя на объект, а затем разыменовать этот указатель в символьном состоянии.

Заключение

В работе предложен алгоритм вычисления слабейшего предусловия пути в программе относительно заданного постусловия, построенный на базе символьного исполнения с ленивой инициализацией данных. Этот

Литература

- Baldoni R., Coppa E., D'Elia D.C., Demetrescu C., Finocchi I. A survey of symbolic execution techniques // ACM Computing Surveys. 2018. V. 51. N 3. https://doi.org/10.1145/3182657
- Cadar C., Dunbar D., Engler D. KLEE: unassisted and automatic generation of high-coverage tests for complex systems programs // Proc. of the 8th USENIX Conference on Operating Systems Design and Implementation. 2008. P. 209–224.
- Wang F., Shoshitaishvili Y. ANGR the next generation of binary analysis // Proc. of the IEEE Cybersecurity Development (SecDev). 2017. P. 8–9. https://doi.org/10.1109/SecDev.2017.14
- Burnim J., Sen K. Heuristics for scalable dynamic test generation // Proc. of the ASE 2008 — 23rd IEEE/ACM International Conference on Automated Software Engineering. 2008. P. 443–446. https://doi. org/10.1109/ASE.2008.69
- Tillmann N., Halleux J. Pex-white box test generation for .NET // Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics). 2008. V. 4966. P. 134–153. https://doi.org/10.1007/978-3-540-79124-9 10
- Păsăreanu C.S., Rungta N. Symbolic PathFinder: symbolic execution of Java bytecode // Proc. of the 25th IEEE/ACM International Conference on Automated Software Engineering. 2010. P. 179–180. https://doi.org/10.1145/1858996.1859035
- Mossberg M., Manzano F., Hennenfent E., Groce A., Grieco G., Feist J., Brunson T., Dinaburg A. Manticore: A user-friendly symbolic execution framework for binaries and smart contracts // Proc. of the 34th IEEE/ACM International Conference on Automated Software Engineering (ASE). 2019. P. 1186–1189. https://doi.org/10.1109/ ASE.2019.00133
- Godefroid P., Klarlund N., Sen K. DART: Directed automated random testing // Proc. of the 2005 ACM SIGPLAN conference on Programming Language Design and Implementation (PLDI). 2005. P. 213–223.
- Godefroid P., Levin M.Y., Molnar D. SAGE: whitebox fuzzing for security testing // Communications of the ACM. 2012. V. 55. N 3. P. 40–44. https://doi.org/10.1145/2093548.2093564
- Chipounov V., Kuznetsov V., Candea G. S2E: a platform for in-vivo multi-path analysis of software systems // ACM SIGPLAN Notices. 2011. V. 46. N 3. P. 265-278. https://doi. org/10.1145/1961296.1950396
- Vishnyakov A., Fedotov A., Kuts D., Novikov A., Parygina D., Kobrin E., Logunova V., Belecky P., Kurmangaleev S. Sydr: Cutting edge dynamic symbolic execution // Proc. of the 2020 Ivannikov

результат важен для реализации символьных машин, которые можно использовать на практике. Такая символьная машина может использовать как прямой, так и обратный анализ, так как последний позволяет анализировать программы, недоступные для прямого анализа. Например, обратный анализ хорошо зарекомендовал себя в решении задач автоматического тестирования и валидации ошибок.

Проблема обратного анализа заключается в том, что его тяжело реализовать так, чтобы он поддерживал реальные программы, так как сложно описать обратную семантику большинства существующих языковых конструкций, таких как, например, операции с динамической памятью. В результате работы сделан важный шаг для построения реалистичных символьных машин: показано, как осуществлять обратный анализ при помощи прямого символьного анализа программ.

В дальнейшем планируется исследование стратегий двунаправленного символьного исполнения путем совместного применения прямого и обратного символьного анализа. Эффективная стратегия позволит бороться с проблемой взрыва путей исполнения на практике.

References

- Baldoni R., Coppa E., D'Elia D.C., Demetrescu C., Finocchi I. A survey of symbolic execution techniques. *ACM Computing Surveys*, 2018, vol. 51, no. 3. https://doi.org/10.1145/3182657
- Cadar C., Dunbar D., Engler D. KLEE: unassisted and automatic generation of high-coverage tests for complex systems programs. *Proc. of the 8th USENIX Conference on Operating Systems Design and Implementation*, 2008, pp. 209–224.
- Wang F., Shoshitaishvili Y. ANGR the next generation of binary analysis. Proc. of the IEEE Cybersecurity Development (SecDev), 2017, pp. 8–9. https://doi.org/10.1109/SecDev.2017.14
- Burnim J., Sen K. Heuristics for scalable dynamic test generation. Proc. of the ASE 2008 – 23rd IEEE/ACM International Conference on Automated Software Engineering, 2008, pp. 443–446. https://doi. org/10.1109/ASE.2008.69
- Tillmann N., Halleux J. Pex-white box test generation for .NET. Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics), 2008, vol. 4966, pp. 134–153. https://doi.org/10.1007/978-3-540-79124-9_10
- Păsăreanu C.S., Rungta N. Symbolic PathFinder: symbolic execution of Java bytecode. Proc. of the 25th IEEE/ACM International Conference on Automated Software Engineering, 2010, pp. 179–180. https://doi.org/10.1145/1858996.1859035
- Mossberg M., Manzano F., Hennenfent E., Groce A., Grieco G., Feist J., Brunson T., Dinaburg A. Manticore: A user-friendly symbolic execution framework for binaries and smart contracts. *Proc. of the* 34th IEEE/ACM International Conference on Automated Software Engineering (ASE), 2019, pp. 1186–1189. https://doi.org/10.1109/ ASE.2019.00133
- Godefroid P., Klarlund N., Sen K. DART: Directed automated random testing. Proc. of the 2005 ACM SIGPLAN conference on Programming Language Design and Implementation (PLDI), 2005, pp. 213–223.
- Godefroid P., Levin M.Y., Molnar D. SAGE: whitebox fuzzing for security testing. *Communications of the ACM*, 2012, vol. 55, no. 3, pp. 40–44. https://doi.org/10.1145/2093548.2093564
- Chipounov V., Kuznetsov V., Candea G. S2E: a platform for in-vivo multi-path analysis of software systems. ACM SIGPLAN Notices, 2011, vol. 46, no. 3, pp. 265–278. https://doi. org/10.1145/1961296.1950396
- Vishnyakov A., Fedotov A., Kuts D., Novikov A., Parygina D., Kobrin E., Logunova V., Belecky P., Kurmangaleev S. Sydr: Cutting edge dynamic symbolic execution. *Proc. of the 2020 Ivannikov Ispras Open Conference (ISPRAS)*, 2020, pp. 46–54. https://doi.org/10.1109/ ISPRAS51486.2020.00014

Ispras Open Conference (ISPRAS). 2020. P. 46-54. https://doi. org/10.1109/ISPRAS51486.2020.00014

- Dinges P., Agha G. Targeted test input generation using symbolicconcrete backward execution // Proc. of the 29th ACM/IEEE International Conference on Automated Software Engineering. 2014. P. 31–36. https://doi.org/10.1145/2642937.2642951
- Chandra S., Fink S.J., Sridharan M. Snugglebug: a powerful approach to weakest preconditions // ACM SIGPLAN Notices. 2009. V. 44. N 6. P. 363–374. https://doi.org/10.1145/1543135.1542517
- Dijkstra E.W. A Discipline of Programming. Englewood Cliffs, N.J.: Prentice-Hall, 1976. XVII, 217 p.
 Khurshid S., Păsăreanu C.S., Visser W. Generalized symbolic
- Khurshid S., Păsăreanu C.S., Visser W. Generalized symbolic execution for model checking and testing // Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics). 2003. P. 553–568. https://doi.org/10.1007/3-540-36577-X_40
- Anand S., Păsăreanu C.S., Visser W. Symbolic execution with abstraction // International Journal on Software Tools for Technology Transfer. 2009. V. 11. N 1. P. 53–67. https://doi.org/10.1007/s10009-008-0090-1
- 17. Lin Y. Symbolic execution with over-approximation: Ph.D. Thesis. The University of Melbourne, 2017.
- Rungta N., Mercer E.G., Visser W. Efficient testing of concurrent programs with abstraction-guided symbolic execution // Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics). 2009. V. 5578. P. 174–191. https://doi.org/10.1007/978-3-642-02652-2_16
- Berdine J., Calcagno C., O'Hearn P.W. Symbolic execution with separation logic // Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics). 2005. V. 3780. P. 52–68. https://doi. org/10.1007/11575467 5
- Yi Q., Yang Z., Guo S., Wang C., Liu J., Zhao C. Postconditioned symbolic execution // Proc. of the 8th IEEE International Conference on Software Testing, Verification and Validation (ICST). 2015. P. 1–10. https://doi.org/10.1109/ICST.2015.7102601
- McMillan K.L. Lazy annotation for program testing and verification // Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics). 2010. V. 6174. P. 104–118. https://doi.org/10.1007/978-3-642-14295-6_10
- Deng X., Lee J., Robby. Efficient and formal generalized symbolic execution // Automated Software Engineering. 2012. V. 19. N 3. P. 233–301. https://doi.org/10.1007/s10515-011-0089-9
- Hoare C.A.R. An axiomatic basis for computer programming // Communications of the ACM. 1969. V. 12. N 10. P. 576–580. https:// doi.org/10.1145/363235.363259
- 24. Nepomniaschy V.A., Anureev I.S., Promskii A.V. Towards verification of C programs: axiomatic semantics of the C-kernel language // Programming and Computer Software. 2003. V. 29. N 6. P. 338–350. https://doi.org/10.1023/B:PACS.0000004134.24714.e5
- Blazy S., Leroy X. Mechanized semantics for the Clight subset of the C language // Journal of Automated Reasoning. 2009. V. 43. N 3. P. 263–288. https://doi.org/10.1007/s10817-009-9148-3
- De Moura L., Bjørner N. Z3: an efficient SMT solver // Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics). 2008. V. 4963. P. 337–340. https://doi.org/10.1007/978-3-540-78800-3 24
- Ball T., Daniel J. Deconstructing dynamic symbolic execution // Proc. of the 2014 Marktoberdorf Summer School on Dependable Software Systems Engineering. IOS Press, 2015.

Авторы

Мисонижник Александр Владимирович — студент, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, 199034, Российская Федерация, 557203100912, https://orcid.org/0000-0002-5907-0324, misonijniki@gmail.com

Костюков Юрий Олегович — аспирант, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, 199034, Российская Федерация, 557219623001, https://orcid.org/0000-0003-4607-039X, kostyukov.yurii@gmail.com

Костицын Михаил Павлович — инженер-исследователь, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург,

- Dinges P., Agha G. Targeted test input generation using symbolicconcrete backward execution. Proc. of the 29th ACM/IEEE International Conference on Automated Software Engineering, 2014, pp. 31–36. https://doi.org/10.1145/2642937.2642951
- Chandra S., Fink S.J., Sridharan M. Snugglebug: a powerful approach to weakest preconditions. ACM SIGPLAN Notices, 2009, vol. 44, no. 6, pp. 363–374. https://doi.org/10.1145/1543135.1542517
- Dijkstra E.W. A Discipline of Programming. Englewood Cliffs, N.J., Prentice-Hall, 1976, XVII, 217 p.
 Khurshid S., Păsăreanu C.S., Visser W. Generalized symbolic
- Khurshid S., Păsăreanu C.S., Visser W. Generalized symbolic execution for model checking and testing. *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics*), 2003, pp. 553–568. https://doi. org/10.1007/3-540-36577-X_40
- Anand S., Păsăreanu C.S., Visser W. Symbolic execution with abstraction. *International Journal on Software Tools for Technology Transfer*, 2009, vol. 11, no. 1, pp. 53–67. https://doi.org/10.1007/ s10009-008-0090-1
- 17. Lin Y. Symbolic execution with over-approximation. Ph.D. Thesis. The University of Melbourne, 2017.
- Rungta N., Mercer E.G., Visser W. Efficient testing of concurrent programs with abstraction-guided symbolic execution. *Lecture Notes* in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics), 2009, vol. 5578, pp. 174–191. https://doi.org/10.1007/978-3-642-02652-2 16
- Berdine J., Calcagno C., O'Hearn P.W. Symbolic execution with separation logic. Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics), 2005, vol. 3780, pp. 52–68. https://doi. org/10.1007/11575467 5
- Yi Q., Yang Z., Guo S., Wang C., Liu J., Zhao C. Postconditioned symbolic execution. Proc. of the 8th IEEE International Conference on Software Testing, Verification and Validation (ICST), 2015, pp. 1–10. https://doi.org/10.1109/ICST.2015.7102601
- McMillan K.L. Lazy annotation for program testing and verification. Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics), 2010, vol. 6174, pp. 104–118. https://doi.org/10.1007/978-3-642-14295-6 10
- Deng X., Lee J., Robby. Efficient and formal generalized symbolic execution. *Automated Software Engineering*, 2012, vol. 19, no. 3, pp. 233–301. https://doi.org/10.1007/s10515-011-0089-9
- Hoare C.A.R. An axiomatic basis for computer programming. *Communications of the ACM*, 1969, vol. 12, no. 10, pp. 576–580. https://doi.org/10.1145/363235.363259
- Nepomniaschy V.A., Anureev I.S., Promskii A.V. Towards verification of C programs: axiomatic semantics of the C-kernel language. *Programming and Computer Software*, 2003, vol. 29, no. 6, pp. 338– 350. https://doi.org/10.1023/B:PACS.0000004134.24714.e5
- Blazy S., Leroy X. Mechanized semantics for the Clight subset of the C language. *Journal of Automated Reasoning*, 2009, vol. 43, no. 3, pp. 263–288. https://doi.org/10.1007/s10817-009-9148-3
- De Moura L., Bjørner N. Z3: an efficient SMT solver. Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics), 2008, vol. 4963, pp. 337–340. https://doi.org/10.1007/978-3-540-78800-3_24
- Ball T., Daniel J. Deconstructing dynamic symbolic execution. Proc. of the 2014 Marktoberdorf Summer School on Dependable Software Systems Engineering. IOS Press, 2015.

Authors

Aleksandr V. Misonizhnik — Student, St. Petersburg State University (SPbSU), Saint Petersburg, 199034, Russian Federation, sc 57203100912, https://orcid.org/0000-0002-5907-0324, misonijnik@gmail.com

Yurii O. Kostyukov — PhD Student, St. Petersburg State University (SPbSU), Saint Petersburg, 199034, Russian Federation, so 57219623001, https://orcid.org/0000-0003-4607-039X, kostyukov.yurii@gmail.com

Michael P. Kostitsyn — Research Engineer, St. Petersburg State University (SPbSU), Saint Petersburg, 199034, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0001-9982-6571, michael.kosticyn@gmail.com

199034, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0001-9982-6571, michael.kosticyn@gmail.com

Мордвинов Дмитрий Александрович — кандидат физико-математических наук, доцент, доцент, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, 199034, Российская Федерация, 57199323753, https://orcid.org/0000-0002-6437-3020, mordvinov. dmitry@gmail.com

Кознов Дмитрий Владимирович — доктор технических наук, доцент, профессор, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, 199034, Российская Федерация, 💽 8885649400, https://orcid.org/0000-0003-2632-3193, d.koznov@spbu.ru

Статья поступила в редакцию 31.05.2022 Одобрена после рецензирования 19.08.2022 Принята к печати 23.09.2022 **Dmitry A. Mordvinov** — PhD (Physics & Mathematics), Associate Professor, Associate Professor, St. Petersburg State University (SPbSU), Saint Petersburg, 199034, Russian Federation, s 57199323753, https://orcid.org/0000-0002-6437-3020, mordvinov.dmitry@gmail.com

Dmitry V. Koznov — D. Sc., Associate Professor, Professor, St. Petersburg State University (SPbSU), Saint Petersburg, 199034, Russian Federation, Sci 8885649400, https://orcid.org/0000-0003-2632-3193, d.koznov@spbu.ru

Received 31.05.2022 Approved after reviewing 19.08.2022 Accepted 23.09.2022



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» **I/İTMO**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 No 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

MATEMATИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ MODELING AND SIMULATION

университет итмо

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-992-998 УДК 53.083.6

О возможности расширения исследуемых динамических диапазонов в термоанемометрии

Вячеслав Петрович Ходунков⊠

ФГУП «Всероссийский научно-исследовательский институт метрологии им. Д.И. Менделеева», Санкт-Петербург, 190005, Российская Федерация

walkerearth@mail.ru[⊠], https://orcid.org/0000-0001-9208-7462

Аннотация

Предмет исследования. Представлены результаты исследования возможности расширения динамических диапазонов термоанемометрических методов. Актуальность работы обусловлена востребованностью новых методов измерения теплогидродинамических параметров высокоскоростных газовых потоков для целей научного приборостроения. Новизна представляемого решения состоит в использовании двух термоанемометров с существенно различающейся тепловой инерцией для одновременного измерения скорости потока и коэффициента теплоотдачи. Метод. Предложенный метод основан на явлении инерционности отклика любой термодинамической системы при ступенчатом тепловом воздействии. Согласно методу в исследуемом потоке, размещают два одинаковых по форме и размерам тела, обладающие разной тепловой инерцией. На тела оказывают ступенчатое тепловое воздействие и выполняют регистрацию нестационарного температурного запаздывания тел друг относительно друга. Используя максимальное значение температурного запаздывания, расчетным путем находят значение коэффициента теплоотдачи тел с исследуемым потоком. Скорость потока определяют по величине момента времени, соответствующего максимальному температурному запаздыванию, при этом используют градуировочную характеристику, полученную предварительно на эталонном потоке. Основные результаты. Научно обоснован новый метод термоанемометрии, получено уравнение измерения метода, разработаны алгоритм измерений и обобщенная схема устройства, реализующего метод, дано значение ожидаемой неопределенности результатов измерений. Результаты моделирования показали, что относительная неопределенность, обеспечиваемая представленным методом, не превышает 1,5 %. Практическая значимость. Разработанный метод позволяет существенно повысить точность и расширить исследуемые динамические диапазоны искомых величин для широкой номенклатуры газовых потоков. Метод может найти применение в расходометрии газовоздушных потоков.

Ключевые слова

термоанемометрия, газовый поток, тепловая инерция, скорость, коэффициент теплоотдачи, ступенчатое воздействие, перегрев, запаздывание, сигнал

Ссылка для цитирования: Ходунков В.П. О возможности расширения исследуемых динамических диапазонов в термоанемометрии // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 992–998. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-992-998

On the possibility of expanding the studied dynamic ranges in thermal anemometry

Vyacheslav P. Khodunkov⊠

D.I. Mendeleyev Institute for Metrology (VNIIM), Saint Petersburg, 190005, Russian Federation walkerearth@mail.ru^{\Box}, https://orcid.org./0000-0001-9208-7462

Abstract

The paper presents the results of a study of the possibility of expanding the dynamic ranges of hot-wire methods. The relevance of the work is due to the demand in new methods for measuring the thermal and hydrodynamic parameters

© Ходунков В.П., 2022

of high-speed gas flows for the purposes of scientific instrumentation. The novelty of the presented technical solution lies in the use of two hot-wires anemometers with significantly different thermal inertia for simultaneous measurement of the flow velocity and the heat transfer coefficient in it. The theoretical basis of the proposed method is based on the phenomenon of the inertia of the response of any thermodynamic system under a stepwise thermal effect on it. The method consists in placing in the investigated flow two bodies of the same shape and size which have significantly different thermal inertia. The bodies are subjected to a stepped thermal effect, and the non-stationary temperature delay of the bodies relative to each other is recorded. Using the maximum value of the temperature delay, the value of the heat transfer coefficient of the bodies with the investigated flow can be evaluated by calculation. The flow rate is found from the value of the moment of time corresponding to the maximum temperature delay while using the calibration characteristic previously obtained on the reference flow. The new thermal anemometry method is scientifically substantiated, the measurement equation of the method is obtained, the measurement algorithm and the generalized scheme of the device implementing the method are developed, and the value of the expected uncertainty of the measurement results is given. The simulation results showed that the relative uncertainty provided by the presented method does not exceed 1.5 %. The developed method makes it possible to significantly increase the accuracy and expand the studied dynamic ranges of the required values for a wide range of gas flows. The method can be used in the flow measurement of gas-air flows.

Keywords

thermal anemometry, gas flow, thermal inertia, speed, heat transfer coefficient, step action, overheating, delay, signal **For citation:** Khodunkov V.P. On the possibility of expanding the studied dynamic ranges in thermal anemometry. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 992–998 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-992-998

Введение

При исследованиях тепло- и гидродинамических параметров газовых потоков в настоящее время широко используют термоанемометрические методы, которые имеют следующие достоинства: высокая чувствительность и достаточно простая вторичная аппаратура, применяемая для измерений сигналов первичных преобразователей.

Отметим, что данные методы обладают недостатками, среди которых наиболее ощутимые — недостаточная точность и ограничение по верхнему пределу скорости измеряемого газового потока. В связи с этим востребована разработка новых методов термоанемометрии, позволяющих повысить точность и скоростной предел. В настоящей работе рассмотрен новый метод, который является перспективным и имеет возможность решить перечисленные проблемы.

Обзор существующих решений

Рассмотрим наиболее известные термоанемометрические методы [1–14], которые имеют сходство с предложенным методом.

Метод измерения скорости газового потока. Измерение осуществляется путем регистрации изменения температуры нагреваемой электричеством металлической проволоки (преобразователя расхода), помещенной в контролируемый поток газа. Охлаждение преобразователя зависит от скорости протекающего потока, физических свойств газа (теплопроводности, температуры и плотности) и от разности температур преобразователя и газа [1]. Данный метод имеет две разновидности:

— метод постоянного тока, в котором ток, нагревающий проволоку, поддерживается постоянным и измеряется с помощью сопротивления. Параметры и питание мостовой схемы, в которую подключено сопротивление, подбираются так, чтобы при нулевой скорости газа она находилась в равновесии.

Отклонение стрелки гальванометра служит мерой скорости потока. Данный метод обладает достаточной чувствительностью только при малых скоростях контролируемых потоков и непригоден для измерения больших скоростей (*v* > 0,5 м/с);

— метод постоянной температуры [8, 13], в котором сопротивление преобразователя, охлаждаемого контролируемым потоком, поддерживается постоянным путем регулирования напряжения нагрева (напряжения питания мостовой схемы). Это напряжение или ток питания моста служит мерой скорости контролируемого потока. Основные недостатки метода сильная зависимость результатов измерений от температуры исследуемого потока, что влечет за собой необходимость индивидуальной градуировки термоанемометра для каждой отдельно взятой температуры потока; существенное снижение чувствительности термоанемометра с ростом скорости потока.

Метод термоанемометрических измерений. Измерение проводится с помощью пропускания через термочувствительный элемент импульсного тока, нагрева и охлаждения термочувствительного элемента до фиксированного температурного значения, регистрируют действующее значение импульсного тока, протекающего через термочувствительный элемент [2]. В данном методе контролируемым параметром при измерениях является действующее значение импульсного тока, протекающего через термочувствительных элемент, который позволяет устранить влияние помех на результаты измерений в виде быстроменяющихся температур окружающей термочувствительный элемент среды и обеспечить повышение точности измерений. Недостаток метода — невозможно измерить коэффициент теплоотдачи в газовом потоке, и определить связь требуемой амплитуды импульсного тока со скоростью газового потока, что существенно ограничивает применение метола.

Метод измерения скорости потока жидкости или газа. В потоке располагают термочувствительные преобразователи для измерения температуры и скорости потока (термоанемометр). Если разность температур термочувствительных преобразователей (перегрев) находится в пределах заданного диапазона, то мощность нагрева постоянна. Если перегрев термоанемометра выходит за пределы заданного диапазона, то мощность нагрева изменяют до попадания перегрева в заданный диапазон. Значение измеряемой скорости потока вычисляют по формуле с учетом измеренного перегрева и мощности нагрева [3].

Метод измерения параметров газовых и жидких сред. В исследуемую среду помещают термочувствительный электрический ток. При скачкообразном изменении тока регистрируют момент начала скачка и момент установления процесса изменения электрического сопротивления термочувствительного элемента. Далее определяют временной интервал между полученными моментами времени, по которым находят искомые параметры измеряемых сред [4]. Недостаток метода относительно низкая точность измерений, вызванная зависимостью показаний термочувствительного элемента от химического и структурного состава исследуемой среды, также метод не обеспечивает возможность измерения коэффициента теплоотдачи.

Метод определения скорости потока газа. В потоке газа размещают тепловыделяющий и термочувствительный элементы. Нагревают тепловыделяющий элемент, регистрируют изменение напряжения с термочувствительного элемента, по которому определяют скорость потока газа. При этом тепловыделяющий и следующий за ним термочувствительный элемент разносят в пространстве по направлению потока, при этом тепловыделяющий элемент нагревают в импульсном или частотно-импульсном режиме. В процессе прохождения потока газа последовательно регистрируют импульсы напряжения с нагретого тепловыделяющего и термочувствительного элементов и измеряют интервал времени между фронтами зарегистрированных импульсов, а скорость потока определяют с учетом измеренного интервала [5]. Недостаток метода — не предусмотрено измерение коэффициента теплоотдачи, и имеется ограничение по максимальной измеряемой скорости потока, которое оценивается значением 0,5 м/с.

Цель работы — разработка нового метода для совершенствования термоанемометричеких измерений, направленное на повышение точности с одновременным расширением номенклатуры исследуемых потоков за счет увеличения верхнего скоростного предела и устранения влияния температуры потока на результат измерений.

Описание нового метода

В качестве теоретической основы предложенного метода использовано явление инерционности отклика любой термодинамической системы при ступенчатом тепловом воздействии. Указанное явление возникает при разнице нестационарных температур двух тел в одноименные моменты времени и при одновременном ступенчатом тепловом воздействии на тела, которые обладают разными тепловыми инерциями. Различие температур тел напрямую связано с условиями теплообмена тел с окружающей средой, в частности — с коэффициентом теплоотдачи (α) и скоростью газового потока (v).

Возьмем два тела с существенно различающимися тепловыми инерциями и разместим в исследуемом газовом потоке (рис. 1). Ступенчатым тепловым воздействием нагреем тела до некоторой стационарной температуры, затем ступенчато прекратим нагрев и перейдем в режим охлаждения газовым потоком. В результате из-за различия в тепловых инерциях тел скорости их нагревания-охлаждения будут различны. Это приведет к температурному запаздыванию температуры одного тела относительно другого (рис. 2). Причем тело *1*, например, обладающее меньшей тепловой инерцией, будет быстрее изменять свою температуру, чем тело *2*, тепловая инерция которого значительно больше, и наоборот. Именно это положено в основу метода и обеспечивает необходимый технический результат.

Установим связь температурного различия с искомыми параметрами потока. Процесс нагревания-охлаждения любого тела при теплообмене его с окружающей средой при граничных условиях 3-го рода описывается известными температурными зависимостями из теории регулярного режима [15, 16].

Тогда в режиме нагрева нестационарные температуры тел I, 2 (рис. 1) описываются соотношениями:

$$T_1(\tau_1) = T_0 + (T_{m1} - T_0)(1 - \exp(-m_1\tau_1)), \qquad (1)$$

$$T_2(\tau_1) = T_0 + (T_{m2} - T_0)(1 - \exp(-m_2\tau_1)), \qquad (2)$$

где $T_1(\tau_1)$ и $T_2(\tau_1)$ — текущие температуры тел l, 2 в режиме нагрева соответственно; T_0 — начальная температура тел перед нагреванием (равна температуре исследуемого газового потока); T_{m1} и T_{m2} — стационарные температуры тел, достигнутые в результате нагревания; m_1 и m_2 — темпы нагревания-охлаждения тел (величина, обратная тепловой инерции); τ_1 — время, исчисляемое с момента начала нагревания.



- *Рис. 1.* Размещение термоанемометра в измеряемом газовом потоке: *1* тело 1; *2* тело 2; *3* держатель
- *Fig. 1.* Placement of thermoanemometer in the measured gas flow: *1* is body #1; *2* is body #2; *3* is holder for bodies

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2022, том 22, № 5 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no 5
Режим охлаждения тел начинается при достижении температуры конечного стационарного значения T_{m1} и T_{m2} . В этом случае тела начинают охлаждаться (нагрев тел прекращен). В стадии регулярного режима изменения температур тел 1 и 2 во времени описываются соотношениями:

$$T_1(\tau_2) = T_{m1} - (T_{m1} - T_0)(1 - \exp(-m_1\tau_2)), \qquad (3)$$

$$T_2(\tau_2) = T_{m2} - (T_{m2} - T_0)(1 - \exp(-m_2\tau_2)), \qquad (4)$$

где $T_1(\tau_2)$ и $T_2(\tau_2)$ — текущие температуры тел в режиме охлаждения; τ_2 — время, исчисляемое с момента начала охлаждения.

Выполним нагрев тел одинаковой мощностью P, при этом полученные температуры T_{m1} и T_{m2} будут всегда различаться. Получим окончательные уравнения измерения предложенного метода. С этой целью приведем уравнения (1)–(4) к нормализованному виду. Для этого из обеих частей уравнений (1) и (2) вычтем температуру газового потока T_0 , а из (3) и (4) — температуру нагрева T_{mi} (i = 1, 2). Далее определим разность температур нагрева T_{mi} и газового потока T_0 .

В результате получим массив нормализованных перегревов каждого тела для режимов нагрева $\Delta T_1^*(\tau)$ и охлаждения $\Delta T_2^*(\tau)$ (рис. 2). Найдем разность перегревов тел в одноименные моменты времени: $\Delta(\Delta T^*(\tau)) =$ $= \Delta T_1^*(\tau) - \Delta T_2^*(\tau).$

Общее уравнение для режимов нагрева (при $\tau = \tau_1$) и охлаждения (при $\tau = \tau_2$):

$$\Delta(\Delta T^*(\tau)) = \exp(-m_2\tau) - \exp(-m_1\tau).$$
 (5)

Найдем момент времени τ_{max} , при котором разница нормализованных перегревов тел будет максимальной, для этого определим частные производные от $\Delta(\Delta T^*(\tau))$ по времени. Из соотношения (5) следует:

$$\frac{\partial \Delta(\Delta T^*)}{\partial \tau} = m_1 \exp(-m_1 \tau) - m_2 \exp(-m_2 \tau). \tag{6}$$

Приравняем соотношение (6) к нулю и найдем экстремум функции $\Delta(\Delta T^*(\tau))$:

$$m_1 \exp(-m_1 \tau_{\max}) = m_2 \exp(-m_2 \tau_{\max}), \tag{7}$$

где τ_{max} — среднее арифметическое из двух моментов времени, соответствующих максимальной разнице нормализованных перегревов ΔT^*_{max} тел для режимов нагрева ($\tau_{1\text{max}}$) и охлаждения ($\tau_{2\text{max}}$) (рис. 2).

Для перехода к коэффициенту теплоотдачи α используем общеизвестное расчетное соотношение темпа нагревания-охлаждения любого тела, которое согласно теории регулярного теплового режима, имеет вид:

$$m = \frac{\alpha S}{C},\tag{8}$$

где а — коэффициент теплоотдачи от тела к газовому потоку; *S* — площадь теплообменной (наружной) поверхности тела; *C* — полная теплоемкость тела.



Рис. 2. Временная диаграмма, поясняющая теоретическую основу метода измерений: ступенчатое воздействие

мощности нагрева (*a*); динамика изменения температуры тел в режиме нагрева и последующего охлаждения (*b*); динамика нормализованных перегревов тел в режиме нагрева и охлаждения (*c*); динамика различия нормализованных перегревов тел (*d*)

Fig. 2. Timing diagram explaining the theoretical basis of the measurement method: *a*) is the step effect of the heating power;*b*) is the dynamics of changes in body temperature in the mode of heating and subsequent cooling; *c*) is dynamics of normalized overheating of bodies in the mode of heating and cooling;

d) is the dynamics of the difference in normalized overheating of bodies

Следуя (8), темп нагревания-охлаждения равен: — для тела *1*:

$$m_1 = \frac{\alpha_1 S_1}{C_1},\tag{9}$$

— для тела 2:

$$m_2 = \frac{\alpha_2 S_2}{C_2}.$$
 (10)

Отметим, что полные теплоемкости C_1 , C_2 и площади наружной поверхности S_1 , S_2 каждого тела заранее известны с заданной точностью.

Для устранения зависимости Nu = f(Re), которая определяет размер обтекаемого тела, необходимо обеспечить следующие условия для исследования тел: идентичность условий теплообмена и одинаковые формы и размеры (т. е. $S_1 = S_2 = S$).

При соблюдении данных условий, с учетом того, что тела находятся в одном и том же газовом пото-

ке, коэффициенты теплоотдачи также одинаковы (т. е. $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$).

Предположим, что в зоне измерения профиль скорости либо отсутствует (скорость одинакова), либо настолько незначителен, что им можно пренебречь одно из ограничений метода.

С учетом (9) и (10) получим отношение темпов нагревания-охлаждения тел:

$$\frac{m_2}{m_1} = \frac{C_1}{C_2}.$$
 (11)

Решим уравнение (7), подставив в него соотношения (9)–(11) относительно α. В результате получим уравнение измерения предложенного метода:

$$\alpha = \ln\left(\frac{C_1}{C_2}\right) \left(\tau_{\max}\left(\frac{S(C_1 - C_2)}{C_2 C_1}\right)\right)^{-1}.$$
 (12)

Из структуры уравнения измерения (12) следует, что для нахождения коэффициента теплоотдачи необходимо по экспериментально зарегистрированным температурам тел найти моменты времени τ_{1max} и τ_{2max} , при которых разница нормализованных перегревов тел максимальна, и затем найти среднеарифметическое значение указанных времен. Таким образом, задача нахождения (измерения) коэффициента теплоотдачи решена.

Второй измеряемый параметр — скорость газового потока (v).

Как известно, интенсивность теплообмена в газовом потоке пропорциональна скорости потока: чем выше скорость потока, тем интенсивнее теплообмен и выше коэффициент теплоотдачи, т. е. $\alpha \sim v$. Следовательно, скорости потока также пропорционально время τ_{max} , при котором наблюдается максимальная разница нормализованных перегревов тел. Из известных соотношений для критериальных чисел Рейнольдса (Re), Нуссельта (Nu) и соотношения (12) для газовых потоков следует, что время τ_{max} пропорционально следующим параметрам:

$$\tau_{\max} \sim \left(\frac{\mu^n}{\lambda}\right) v^{-n}$$

где μ — кинематическая вязкость газа; λ — теплопроводность газа; *n* — численная константа.

Заметим, что численное значение комплекса (μ^{n}/λ) будет различно для разных газов и для одного и того же газа для разных температур. Это необходимо учитывать при реализации метода.

Для нахождения скорости газового потока v достаточно иметь предварительно полученную градуировочную зависимость времени τ_{max} от скорости потока v, полученную на эталонном газовом потоке. Характерный вид такой зависимости $\tau_{max}(v)$ представлен на рис. 3.

Под эталонным газовым потоком в настоящей работе подразумевается воздушный или иной поток, скорость которого заранее известна с заданной точностью. Полученная зависимость $\tau_{max}(v)$ может быть распространена на газовые потоки и разные температуры одного и того же потока, для которых в пределах заданной точности близки значения отношения (v^n/λ). Для других потоков и температур требуется отдельная градуировка



Рис. 3. Характерная зависимость времени, соответствующего максимальной разнице нормализованных перегревов тел (τ_{max}), от скорости газового потока (v)

Fig. 3. Characteristic dependence of the time corresponding to the maximum difference in the normalized overheating of bodies vs. the gas flow rate

с использованием нового выбранного эталонного газа и диапазона температур.

Пример реализации метода

Рассмотрим работу и порядок использования предложенного метода на примере термоанемометра, обобщенная схема которого представлена на рис. 4. Отметим, что тела *1* и *2* размещены на специальном держателе и обладают существенно различающейся тепловой инерцией. В каждое тело встроено по



Рис. 4. Обобщенная структурная схема термоанемометра:
 1, 2 — тела одинаковой заданной формы и размеров;
 3, 4 — одинаковые малоинерционные
 термопреобразователи; 5, 6 — нагреватели; 7 — источник стабилизированного питания; 8 — блок управления и обработки сигналов; T₁, T₂ — температуры тел

Fig. 4. Common structural diagram for thermoanemometer: *1, 2* are bodies of the same specified shape and size; *3, 4* are identical low-inertia thermal converters; *5, 6* are heaters; *7* is a source of stabilized power supply; *8* is control and signal processing unit; T_1 , T_2 are body temperatures одному нагревателю 5, 6 и малоинерционному термопреобразователю 3, 4. Каждый нагреватель подключен к источнику стабилизированного питания 7. Термопреобразователи 3, 4 подключены к блоку управления и обработки сигналов 8.

Для удобства измерений электрические нагреватели выполнены одинакового номинала, а термопреобразователи — одного типа с одинаковой номинальной статической характеристикой, например, термопары типа XK₆₈ (хромель-копель).

В процессе измерений тела помещают в измеряемый газовый поток, при этом с помощью термопреобразователей непрерывно выполняется регистрация температуры. При достижении равенства температур $T_{m1} = T_{m2} = T_0$, одновременно начинается нагрев тел 1 и 2. Для этого на нагреватели 5, 6 одновременно с помощью управляющего сигнала от блока 8 подают электрическую мощность Р от источника стабилизированного питания 7 (рис. 2, а). Величину подаваемой мощности подбирают экспериментальным путем, руководствуясь тем, чтобы мощность была достаточной для обеспечения надежного измерения разности нормализованных перегревов тел. При этом продолжают регистрировать температуры исследуемых тел. После выхода тел на стационарный тепловой режим, их нагрев одновременно прекращают с помощью управляющего сигнала от блока 8 и источника стабилизированного питания 7 (рис. 2, b, c). Тела начинают охлаждаться газовым потоком — происходит режим охлаждения. При достижении обоими телами стационарной температуры, равной температуре измеряемого газового потока, управляющим сигналом от блока 8 прекращают регистрацию температуры тел. Процесс измерений на этом заканчивают и приступают к обработке результатов измерений, которую осуществляют согласно разделу настоящей работы «Описание нового метода» с помощью специальной компьютерной программы, заранее введенной в блок управления и обработки сигналов 8. С помощью программы по полученным температурным данным находят момент времени т_{max}, при котором имеет место максимальная разница нормализованных перегревов тел 1 и 2. Выполняется расчет искомых параметров, при этом используют уравнение измерения (12) и предварительно полученную градуировочную зависимость $\tau_{max}(v)$.

Пример расчетного моделирования

Исходные расчетные соотношения. Для расчета значения коэффициента теплоотдачи используется уравнение (12), для нахождения скорости потока — предварительно полученная градировочная зависимость $\tau_{max}(v)$, как показано на рис. 3.

Исходные данные. Пусть тела *l* и *2* выполнены в форме одинаковых сплошных цилиндров одинаковой длины $L = L_1 = L_2 = 0,02$ м и диаметром $d_1 = d_2 = 0,01$ м. При этом тело *l* изготовлено из алюминия с удельной теплоемкостью $c_1 = 920$ Дж/(кг·К) и плотностью $\rho_1 = 2712$ кг/м³, а тело *2* — из меди с удельной теплоемкостью $c_2 = 400$ Дж/(кг·К) и плотностью $\rho_2 = 8920$ кг/м³. Полная теплоемкость тела *l* равна $C_1 = c_1 \pi d_1^2 L_1 \rho_1 / 4 = 3,9$ Дж/К, тела *2* — $C_2 = c_2 \pi d_2^2 L_2 \rho_2 / 4 = 5,6$ Дж/К. Площади теплообменной поверхности обоих тел равны: $S = S_2 = S_1 = \pi d_1 L_1 + \pi d_1^2 / 2 = 7,85 \cdot 10^{-4}$ м². Рассчитаем отношения, входящие в уравнение измерения метода (12): $C_1/C_2 = 0,7$; $S(C_1 - C_2)/(C_2C_1) = -6,1 \cdot 10^{-5}$. Пусть, например, исследовался пылегазовый поток.

Результаты расчетов. В результате измерений и обработки данных получены следующие значения τ_{max} : — в режиме нагрева $\tau_{max1} = 122,3$ с;

— в режиме охлаждения $\tau_{max2} = 123,2$ с;

— среднеарифметическое значение $\tau_{max} = 122,7$ с.

Рассчитанное значение коэффициента теплоотдачи, согласно уравнению (12), составляет величину 47,6 Вт/(м²·К).

Согласно градуировочной зависимости $\tau_{max}(v)$ времени $\tau_{max} = 122,7$ с соответствует скорость v = 19,4 м/с. Метод реализован, искомые параметры измерены.

Подробный расчет ожидаемой неопределенности результатов измерений метода в работе не приведен из-за объемистости. Инструментальная относительная неопределенность, обеспечиваемая современными средствами измерений, по оценке не превышает 1,5 %.

Заключение

В предложенном методе расширена номенклатура измеряемых потоков, обеспечена возможность одновременного измерения сразу двух параметров потока. Значительно повышен верхний скоростной предел, который обеспечивается за счет подбора соотношений полных теплоемкостей первичных преобразователей (их материалов). Частично, в пределах заданной точности, устранена зависимость результатов измерений от температуры потока, что повышает точность и расширяет область применения метода. Созданы перспективы для широкого применения метода в расходометрии воздушно-газовых потоков с более высокими скоростями (до нескольких десятков метров в секунду), что, безусловно, является значимым достижением данной разработки.

Литература

- Измерения в промышленности: справочник. Т. 2 / под ред. П. Профоса. М.: Металлургия. 1990. С. 274–276.
- Романченко А.Ф., Раздымахо С.В. Способ термоанемометрических измерений. Патент RU 2217765. Бюл. 2003. № 14.
- 3. Купер В.Я., Рубцов М.Г., Хозинский Е.Ф., Шамихин А.Н. Способ измерения скорости потока жидкости или газа. Патент RU 2267790. Бюл. 2006. № 1.
- Романченко А.Ф. Способ измерения параметров газовых и жидких сред. Авторское свидетельство 637676. Бюл. 1978. № 46.
- 5. Корзенев А.Н., Гаранин А.В. Способ определения скорости и температуры потока газа и устройство для его осуществления. Патент RU 2347227. Бюл. 2009. № 5.
- Khamshah N., Abdalla A.N., Koh S.P., Rashag H.F. Issues and temperature compensation techniques for hot wire thermal flow sensor: A review // International Journal of the Physical Sciences. 2011. V. 6(14). P. 3270–3278. https://doi.org/10.5897/IJPS11.630
- Morris S.C., Foss J.F. Transient thermal response of a hot-wire anemometer // Measurement Science and Technology. 2003. V. 14. N 3. P. 251–259. https://doi.org/10.1088/0957-0233/14/3/302
- Palma J., Labbé R. Rugged constant-temperature thermal anemometer // Review of Scientific Instruments. 2016. V. 87. N 12. P. 125112. http://dx.doi.org/10.1063/1.4972585
- Kunkel G.J., Arnold C.B., Smits A.J. Development of NSTAP: nanoscale thermal anemometry probe // Collection of Technical Papers — 36th AIAA Fluid Dynamics Conference. 2006. V. 3. P. 1938–1945. https://doi.org/10.2514/6.2006-3718
- Fu M.K., Fan Y., Hultmark M. Design and validation of a nanoscale cross-wire probe (X-NSTAP) // Experiments in Fluids. 2019. V. 60. N 6. P. 99. https://doi.org/10.1007/s00348-019-2743-0
- Valiullin R., Sharafutdinov R., Fedotov V., Ramazanov A., Vakhitova G., Kosmylin D. A new radial-azimuth thermal anemometer for determining the direction and velocity of fluid flow in the wellbore // Proc. of the SPE Russian Petroleum Technology Conference (RPTC). 2018. P. SPE-191565-18RPTC-MS. https://doi. org/10.2118/191565-18RPTC-MS
- 12. Грек Г.Р., Бойко А.В., Гилев В.М., Зверков И.Д., Сорокин А.М. Автоматизированная система сбора термоанемометрической информации в аэрофизическом эксперименте // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. 2014. № 5-1. С. 11–14.
- Ligęza P. Advanced temperature compensation and correction techniques in thermal anemometry // Instrumentation Science & Technology. 2015. V. 43. N 1. P. 21–43. https://doi.org/10.1080/107 39149.2014.942915
- Arlit M., Schleicher E., Hampel U. Thermal anemometry grid sensor // Sensors (Basel). 2017. V. 17. N 7. P. 1663. https://doi.org/10.3390/ s17071663
- Кондратьев Г.М. Регулярный тепловой режим. М.: Гостехиздат, 1954. 408 с.
- Дульнев Г.Н. Теория тепло- и массообмена: учебное пособие. СПб.: НИУ ИТМО, 2012. 195 с.

Автор

Ходунков Вячеслав Петрович — кандидат технических наук, старший научный сотрудник, ФГУП «Всероссийский научно-исследовательский институт метрологии им. Д.И. Менделеева», Санкт-Петербург, 190005, Российская Федерация, 50 6504750914, https://orcid.org/0000-0001-9208-7462, walkerearth@mail.ru

Статья поступила в редакцию 01.06.2022 Одобрена после рецензирования 14.07.2022 Принята к печати 18.09.2022

References

- Handbuch der industriellen Messtechnik. Ed. by P. Profos. Essen, Vulkan-Verlag, 1987.
- Pomanchenko A.F., Razdymakho S.V. Method of thermal and anemometric measurements. *Patent RU 2217765*. 2003. (in Russian)
- Kuper V.J. Rubtsov M.G., Khozinskij E.F., Shamikhin A.N. Method of measuring of a gas or liquid flow speed. *Patent RU 2267790*. 2006. (in Russian)
- 4. Pomanchenko A.F. A method for measuring the parameters of the gas and liquid medium. *Patent* 637676. 1978. (in Russian)
- Korzenev A.N., Garanin A.V. Method of determination of velocity and temperature of gas stream and device for its realization. *Patent RU 2347227*. 2009. (in Russian)
- Khamshah N., Abdalla A.N., Koh S.P., Rashag H.F. Issues and temperature compensation techniques for hot wire thermal flow sensor: A review. *International Journal of the Physical Sciences*, 2011, vol. 6(14), pp. 3270–3278. https://doi.org/10.5897/IJPS11.630
- Morris S.C., Foss J.F. Transient thermal response of a hot-wire anemometer. *Measurement Science and Technology*, 2003, vol. 14, no. 3, pp. 251–259. https://doi.org/10.1088/0957-0233/14/3/302
- Palma J., Labbé R. Rugged constant-temperature thermal anemometer. *Review of Scientific Instruments*, 2016, vol. 87, no. 12, pp. 125112. http://dx.doi.org/10.1063/1.4972585
- Kunkel G.J., Arnold C.B., Smits A.J. Development of NSTAP: nanoscale thermal anemometry probe. *Collection of Technical Papers* — 36th AIAA Fluid Dynamics Conference. Vol. 3, 2006, pp. 1938–1945. https://doi.org/10.2514/6.2006-3718
- Fu M.K., Fan Y., Hultmark M. Design and validation of a nanoscale cross-wire probe (X-NSTAP). *Experiments in Fluids*, 2019, vol. 60, no. 6, pp. 99. https://doi.org/10.1007/s00348-019-2743-0
- Valiullin R., Sharafutdinov R., Fedotov V., Ramazanov A., Vakhitova G., Kosmylin D. A new radial-azimuth thermal anemometer for determining the direction and velocity of fluid flow in the wellbore. *Proc. of the SPE Russian Petroleum Technology Conference (RPTC)*, 2018, pp. SPE-191565-18RPTC-MS. https://doi. org/10.2118/191565-18RPTC-MS
- Grek G.R., Boyko A.V., Gilyov V.M., Zverkov I.D., Sorokin A.M. The automated system of hot-wire anemometer information acquisition in the aerophysical experiment. *International Journal of Applied and Fundamental Research*, 2014, no. 5-1, pp. 11–14. (in Russian)
- Ligęza P. Advanced temperature compensation and correction techniques in thermal anemometry. *Instrumentation Science & Technology*, 2015, vol. 43, no. 1, pp. 21–43. https://doi.org/10.1080/ 10739149.2014.942915
- Arlit M., Schleicher E., Hampel U. Thermal anemometry grid sensor. Sensors (Basel), 2017, vol. 17, no. 7, pp. 1663. https://doi. org/10.3390/s17071663
- Kondratev G.M. Regular Thermal Conditions. Moscow, Gostehizdat Publ., 1954, 408 p. (in Russian)
- Dulnev G.N. Theory of Heat and Mass Transfer. Tutorial. St. Petersburg, NIU ITMO, 2012, 195 p. (in Russian)

Author

Vyacheslav P. Khodunkov — PhD, Senior Researcher, D.I. Mendeleev Institute for Metrology, Saint Petersburg, 190005, Russian Federation, 6504750914, https://orcid.org/0000-0001-9208-7462, walkerearth@ mail.ru

Received 01.06.2022 Approved after reviewing 14.07.2022 Accepted 18.09.2022 νίτμο

HAУЧHO-TEXHИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКІ

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-999-1006 УДК 539.378:677.494

Эффект биений в одноосноориентированных полимерных материалах Виктория Владимировна Головина^{1⊠}, Павел Павлович Рымкевич², Ольга Васильевна Рымкевич³

1.2.3 Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург, 197198, Российская Федерация

¹ victoria gol@mail.ru^{\Box}, https://orcid.org/0000-0002-2691-7680

² romallaa@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0002-9362-0561

³ Olga.Rymkevich@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-8926-4552

Аннотация

Предмет исследования. Исследованы упруго-релаксационные свойства одноосноориентированных полимерных материалов при динамическом режиме деформирования. Предложено теоретическое объяснение явления возникновения биений. Приведено экспериментальное подтверждение полученных теоретических результатов. Метод. Используя метод барьерной теории и применяя уравнение баланса числа переходов кластеров через энергетический барьер с учетом времени перехода, получено уточненное определяющее уравнение вязкоупругости полимерного материала. Экспериментальные исследования в динамическом режиме проведены методом свободных продольных малоамплитудных колебаний. Основные результаты. Для полимерного материала с учетом времени перехода кластера через энергетический барьер получено уточненное определяющее уравнение. Данное уравнение является дифференциальным уравнением второго порядка и допускает периодическое решение. Рассмотрено применение полученного уравнения к исследованию свободных продольных малоамплитудных колебаний в одноосноориентированных полимерных материалах. Показано, что решение уравнения допускает два близких комплексных корня, существование которых приводит к эффекту наблюдаемых биений. Получены соотношения между параметрами колебательного процесса и вязкоупругими характеристиками. Эксперимент показал, что у исследуемых полимерных материалов в определенном интервале нагрузок наблюдается сложная форма колебательного процесса, аналогичная явлению биений. Зависимость тангенса угла механических потерь, рассчитанного по основной частоте, от напряжения имеет острый максимум в интервале напряжений, где наблюдаются биения. По полученным теоретическим соотношениям и определенным экспериментально коэффициенту затухания и основной частоте определено время перехода кластера через энергетический барьер или время жизни кластера в данном энергетическом состоянии. Использование дополнительной информации, полученной в ходе экспериментов в статических режимах, позволило определить время релаксации для данного материала. Расчет на примере нити из полиэтилентерефталата показал, что теория согласуется с экспериментом. Практическая значимость. На основании экспериментальных данных, получаемых при исследовании свободных продольных колебаний, и решения уточненного определяющего уравнения можно определить необходимые вязкоупругие характеристики, что дает возможность прогнозировать динамические процессы деформирования в полимерных материалах.

Ключевые слова

определяющее уравнение, вязкоупругость, высокоэластическая деформация, свободные продольные колебания, биения, одноосноориентированные полимерные материалы

Ссылка для цитирования: Головина В.В., Рымкевич П.П., Рымкевич О.В. Эффект биений в одноосноориентированных полимерных материалах // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 999–1006. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-999-1006

The beating effect in uniaxial oriented polymer materials

Victoria V. Golovina¹[∞], Pavel P. Rymkevich², Olga V. Rymkevich³

1,2,3 Mozhaisky Military Aerospace Academy, Saint Petersburg, 197198, Russian Federation

¹ victoria_gol@mail.ru[⊠], https://orcid.org/0000-0002-2691-7680

² romallaa@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0002-9362-0561

³ Olga.Rymkevich@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-8926-4552

© Головина В.В., Рымкевич П.П., Рымкевич О.В., 2022

Abstract

Elastic-relaxation properties of uniaxial oriented polymer materials under dynamic deformation mode are investigated. A theoretical explanation of the phenomenon of the occurrence of beats is proposed. Experimental confirmation of the obtained theoretical results is given. Using the barrier theory and applying the balance equation of the number of cluster transitions through the energy barrier, taking into account the transition time, a refined constitutive equation of the viscoelasticity of the polymer materials is obtained. Experimental studies in the dynamic mode were carried out by the method of the longitudinal low-amplitude oscillations. For a polymer material, taking into account the time of transition of the cluster through the energy barrier, a refined constitutive equation is obtained. The resulting equation is a second-order differential equation and admits a periodic solution. The application of the obtained equation to the study of free longitudinal low-amplitude oscillations in uniaxial oriented polymer materials is considered. It is shown that the solution of the equation admits two close complex roots, the existence of which leads to the effect of the observed beats. The relations between the parameters of the oscillatory process and viscoelastic characteristics are obtained. The experiment showed that the polymer materials under study have a complex form of the oscillatory process, similar to the phenomenon of beats, in a certain range of load. The dependence of the tangent of the mechanical losses angle calculated from the main frequency on the stress has an acute maximum in the stress range where beats are observed. According to the obtained theoretical ratios and experimentally determined attenuation coefficient and main frequency, the time of transition of the cluster through the energy barrier or the lifetime of the cluster in this energy state is determined. The use of additional information obtained during experiments in static modes made it possible to determine the relaxation time for this material. The calculation on the example of polyethyleneterephthalate (PET) filament showed that the theory is consistent with the experiment. Based on the experimental data obtained during the study of free longitudinal oscillations and the solution of the refined constitutive equation, it is possible to determine the necessary viscoelastic characteristics which makes it possible to predict dynamic deformation processes in polymer materials.

Keywords

constitutive equation, viscoelasticity, highly elastic deformation, free longitudinal oscillations, beating, uniaxial oriented polymers

For citation: Golovina V.V., Rymkevich P.P., Rymkevich O.V. The beating effect in uniaxial oriented polymer materials. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 999–1006 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-999-1006

Введение

Метод продольных свободных колебаний — один из динамических методов исследования вязкоупругих свойств полимерных материалов, который наиболее близко отражает реальные условия эксплуатации. Из механики известно, что в системе с одной степенью свободы может быть только одна мода продольных колебаний [1-3]. Примером такой системы является гармонический осциллятор в виде груза, подвешенного на невесомой длинной нити при условии, что масса нити много меньше массы груза. Отметим, что в ряде работ [4-7] в ходе экспериментальных исследований одноосноориентированных полимерных материалов в динамических режимах наблюдался факт наличия не одной, а двух мод колебаний. В некоторых случаях их можно интерпретировать как биения. Заметим, что не ясно, откуда берется энергия возбуждения собственных колебаний после того, как амплитуда биений становится равной нулю. Например, подобные эффекты известны в физике — эффект Ганна [8] и в химии — эффект Белоусова-Жаботинского [9, 10].

Несовпадение теоретических предпосылок с экспериментальными данными при рассмотрении колебательных процессов в ориентированных полимерах также связано с их сложным и многообразным надмолекулярным строением. При этом в научных работах содержится мало сведений, относящихся к свободным колебаниям в полимерных системах. Несмотря на то, что попытки описать явление возникновения биений в ряде полимерных материалах проводились [5, 6, 11], окончательно достоверного и убедительного теоретического доказательства предложено не было. Цель работы — теоретическое обоснование возникновения биений в одноосноориентированных полимерных системах в условиях динамической нагрузки. Также показать практическое применение результатов решения полученного уточненного определяющего уравнения полимерного материала.

Определяющее уравнение полимерного материала с учетом времени перехода через потенциальный барьер

Рассмотрим проблему теоретического описания возникновения биений в полимерных материалах с точки зрения барьерной теории [12–14]. В простейшем случае при наличии одного рабочего барьера (двухуровневая модель, рис. 1) определяющее уравнение для высокоэластичной части деформации имеет вид:

$$-\frac{d}{dt}\varepsilon_{\rm B3}(t) + p(x)\varepsilon_{\rm B3}(t) = q(x), \qquad (1)$$

где $\tau_{\rm p} = \tau_0 e^{H^*}$ — внутреннее время релаксации, определяемое высотой энергетического барьера H; τ_0 — константа времени релаксации для данного материала; $\varepsilon_{\rm B3} = \varepsilon - x$ — высокоэластическая часть деформации; $\varepsilon_{\rm B3} = \varepsilon - x$ — высокоэластическая часть деформации; $\varepsilon_{\rm B3} = \varepsilon - x$ — высокоэластическая часть деформации; $\varepsilon_{\rm B3} = \varepsilon - x$ — высокоэластическая часть деформации; $\varepsilon_{\rm B3} = \varepsilon - x$ — высокоэластическая часть деформации; $\varepsilon_{\rm B3} = \varepsilon - x$ — высокоэластическая часть деформации; $\varepsilon_{\rm B3} = \varepsilon - x$ — высокоэластическая часть деформации; σ — напряжение; E_0 — модуль упругости; $p(x) = e^{\gamma x^2} + A e^{-\gamma x^2}$ и $q(x) = q_0 {\rm sh}(\gamma x^2)$ — вспомогательные функции; γx^2 — упругая энергия; γ — структурно-чувствительный коэффициент; $q_0 = \frac{2m_0 A\delta}{1+A} = \frac{2m_0 \delta}{1+e^{-U^*}}$ константа материала; $A = e^{U^*}$ — больцмановский фактор; $H^* = \frac{H}{T}$ и $U^* = \frac{U}{T}$ — приведенные энергетические



Рис. 1. Энергетическая диаграмма активных конформационных элементов в зависимости от размера кластера *x*.

- энергетическое состояние, соответствующее модели складчатой структуры в свернутом виде;
- 2 энергетическое состояние, соответствующее модели складчатой структуры в распрямленном виде
- *Fig. 1.* Energy diagram of active conformational elements depending on the cluster size *x*.
- *l* the energy state corresponding to the folded structure model in the collapsed form; *2* the energy state

corresponding to the folded structure model in the straightened form

величины; *T* — абсолютная температура; *m*₀ — число кластеров на единицу длины; δ — квант деформации.

Отметим, что уравнение (1) — эволюционное уравнение первого порядка, которое носит релаксационный характер и к «биениям» не приводит. Необходимо обратить внимание на допущения [12-14], сделанные при выводе уравнения (1). Согласно допущениям, высокоэластическая составляющая деформации равна $\varepsilon_{\rm B9} = \delta \langle N_2 - N_2^0 \rangle$, где N_2^0 и N_2 — число кластеров на единицу длины в состоянии 2 в начальный и текущий моменты времени. Тогда є_{вэ} определяется числом квантов деформации б, образующихся при переходах кластеров из состояния 1 в состояние 2 (рис. 1). Поэтому по физической сути уравнение (1) представляет собой уравнение баланса. Тогда для числа переходов из состояния 1 в состояние 2 при постоянном полном числе кластеров на единицу длины ($N_0 = N_1 + N_2 = \text{const}$), меняющих свою конфигурацию, получим:

$$\frac{d}{dt}N_2(t) + P_{12}(t)N_2(t) + P_{21}(t)N_2(t) = N_0P_{12}(t), \quad (2)$$

где $P_{12}(t)$ и $P_{21}(t)$ — вероятности перехода в единицу времени t из состояния l в состояние 2 и наоборот, которые определяются приведенными высотами энергетических барьеров прямого H_{12}^* и обратного H_{21}^* переходов и, согласно принципу Больцмана, равны $P_{12}(t) =$ $= ve^{-H_{12}^*}$ и $P_{21}(t) = ve^{-H_{21}^*}$; v — частота подхода к барьеру.

Уравнение (2) получено в приближении, что временем перехода кластера, состоящего из макромолекул полимера, через энергетический барьер можно пренебречь. Другими словами, уравнение (2) локально во времени. Для большинства квазистатических процессов данное условие выполняется, и уравнение (1) верно описывает процессы деформирования в полимерных нитях [12, 13, 15–18]. Но все же на перестройку кластера полимерного тела требуется определенное время т. С учетом этого времени уравнение (2) перестает носить локальный характер и превращается в дифференциально-разностное уравнение:

$$\frac{d}{dt}N_2(t) + P_{12}(t)N_2(t) + P_{21}(t-\tau)N_2(t-\tau) = N_0P_{12}(t-\tau)$$

Сдвинув шкалу времени на величину τ и разложив в ряд числа заполнения $\frac{d}{dt}N_2(t+\tau)$ по времени перехода τ , получим в первом приближении уточненное уравнение (2) в виде:

$$\frac{d^2}{dt^2}N_2\tau + \frac{d}{dt}N_2 + (P_{12} + P_{21})N_2 = N_0P_{12}$$

или

1

$$\ddot{V}_2 \tau + \dot{N}_2 + (P_{12} + P_{21})N_2 = N_0 P_{12}.$$
 (3)

Выполним с уравнением (3) аналогичные действия [13, 14] и получим для полимерного материала уточненное определяющее уравнение с учетом времени перехода кластера через энергетический барьер:

$$\ddot{\varepsilon}_{B3}\tau\tau_{p} + \dot{\varepsilon}_{B3}\tau_{p} + p(x)\varepsilon_{B3} = q(x).$$
(4)

Уравнение (4) — уравнение второго порядка и, следовательно, допускает периодическое решение.

Применение уточненного определяющего уравнения к исследованию свободных продольных малоамплитудных колебаний в полимерных материалах

Рассмотрим применение уравнения (4) к исследованию малоамплитудных продольных колебаний. На рис. 2 схематически изображен объект исследования.



Рис. 2. Схема объекта исследования.

L₀ — длина изучаемого образца (база); *m* — масса подвешенного груза (нагрузка); θ — изучаемая динамическая часть полной деформации

Fig. 2. Scheme of the investigation object.

 L_0 is the length of the studied sample (base); *m* is the mass of the suspended load (load); θ is the dynamic part of the total deformation under study

Представим полную деформацию в виде: $\varepsilon = \varepsilon^p + \theta$, где ε^p — равновесное значение полной деформации.

При этом $\theta \ll e^p$. Аналогично упругую составляющую полной деформации можно записать как $x = x^p + y$, где y — упругая динамическая часть деформации. Тогда запишем уравнение движения тяжелого груза на длинной легкой нити:

$$\ddot{\theta} + \omega_0^2 y = 0, \tag{5}$$

где ω_0 — частота упругих колебаний имеет вид

$$\omega_0^2 = \frac{S_0 E_{\text{дин}}}{mL_0} = \frac{g}{L_0 x^{\text{p}}},$$

где S_0 — площадь поперечного сечения образца; $x^p = \frac{mg}{S_0 E_{дин}}$ — равновесная упругая часть деформации; $E_{дин}$ — инамический модуль упругости.

Линеаризуем уравнение (4) по степеням *у*. При этом учтем, что $\varepsilon_{B9} = \varepsilon - x = \varepsilon_{B9}^p + z$, где *z* — динамическая часть высокоэластической деформации, а полная динамическая деформация может быть представлена как сумма динамических частей упругой и высокоэластической деформаций:

$$\theta = y + z. \tag{6}$$

Линеаризованное уравнение имеет следующий вид

$$\tau \tau_{\rm p} \ddot{z} + \tau_{\rm p} \dot{z} + pz - ky = 0, \tag{7}$$

где коэффициенты $p = p(x^p) = \exp(\gamma(x^p)^2) + A\exp(-\gamma(x^p)^2)$ и $k = k(x^p) = \frac{4\gamma^* x^p q_0(1+A)}{p(x^p)}$.

Используя соотношение (6), исключим из уравнений (5) и (7) динамическую упругую деформацию у и получим систему двух линейных дифференциальных уравнений второго порядка, связанных друг с другом правыми частями:

$$\begin{array}{l} \ddot{\theta} + \omega_0^2 \theta = \omega_0^2 z \\ \tau \tau_{\rm p} \dot{z} + \tau_{\rm p} \dot{z} + (p+k) z = k \theta \end{array} \right\}.$$

$$(8)$$

Первое уравнение системы (8) — уравнение колебаний для полной динамической деформации, второе релаксационное колебательное уравнение для высокоэластической составляющей деформации с учетом инерционного слагаемого $\tau \tau_p \ddot{z}$. В первом уравнении левую часть вынуждает высокоэластичная часть динамической деформации $\omega_0^2 z$, во втором — высокоэластичная деформация возбуждается полной динамической деформацие $k\theta$.

Получим решения системы (8):

$$\theta = \theta_0 e^{\lambda t}$$
 и $z = z_0 e$

где λ — комплексная частота.

Характеристическое уравнение системы (8) имеет вид

$$\tau\tau_{\rm p}\lambda^4 + \tau_{\rm p}\lambda^3 + (p+k+\tau\tau_{\rm p}\omega_0{}^2)\lambda^2 + \omega_0{}^2\tau_{\rm p}\lambda + p\omega_0{}^2 = 0.$$
(9)

Уравнение (9) допускает решение двух близких комплексных корней. Отметим, что существование таких решений может привести к эффекту наблюдаемых биений.

В предельном случае, если частоты равны, то коэффициенты затухания близки, и выражение (9) должно представлять собой полный квадрат наблюдаемых корней:

$$(\lambda^2 + 2\beta\lambda + \Omega_0^2)^2 = 0,$$
 (10)

где β — коэффициент затухания обеих мод колебаний, близких по величине; Ω_0 — несущая частота при биениях (непосредственно наблюдаемая в ходе эксперимента).

Объединив уравнения (9) и (10), получим

$$\lambda^{4} + 4\beta^{2}\lambda^{2} + \Omega_{0}^{4} + 4\beta\lambda^{3} + 2\Omega_{0}^{2}\lambda^{2} + 4\beta\lambda\Omega_{0}^{2} \equiv \equiv \lambda^{4} + \frac{1}{\tau}\lambda^{3} + \left(\frac{p+k}{\tau\tau_{p}} + \omega_{0}^{2}\right)\lambda^{2} + \frac{\omega_{0}^{2}}{\tau}\lambda + \frac{p}{\tau\tau_{p}}\omega_{0}^{2}.$$
 (11)

Сопоставляя подобные множители равенства (11), приходим к следующим соотношениям:

$$\beta = \frac{1}{4\tau},\tag{12}$$

$$\frac{\omega_0^2}{\tau} = 4\beta\Omega_0^2,\tag{13}$$

$$\left(\frac{p+k}{\tau\tau_{\rm p}}+\omega_0^2\right) = 4\beta^2 + 2\Omega_0^2,\tag{14}$$

$$\Omega_0^4 = \frac{P}{\tau \tau_p} \omega_0^2.$$
 (15)

Из (12) и (13) следует, что

$$\Omega_0 = \omega_0. \tag{16}$$

С учетом (12) и (16) соотношение (15) примет вид:

$$\frac{p}{\tau_{\rm p}} = \frac{\Omega_0^2}{4\beta}.$$
(17)

Из (14) с учетом (16) получаем, что

$$\frac{k}{r_{\rm p}} = \beta. \tag{18}$$

Перемножив (17) и (18), получим $\frac{pk}{(x^p)^2} = \frac{\Omega_0^2}{4}$ или с учетом принятых обозначений $4\gamma x^p q_0 (1+A) = \frac{\Omega_0^2}{4} \tau_p^2$.

Таким образом, получая величины β и Ω_0 непосредственно из эксперимента, проводимого в динамическом режиме методом малоамплитудных продольных колебаний, можно определить такие параметры, как время релаксации τ_p и время перехода через энергетический барьер τ .

Экспериментальная проверка полученных теоретических результатов

С целью проверки полученных в работе теоретических результатов выполним экспериментальные исследования упруго-релаксационных свойств одноосноориентированных полимерных нитей при динамическом режиме деформирования методом свободных продольных малоамплитудных колебаний в сочетании с ползучестью. Измерения проведены на установке [19], в которой к образцу исследуемой полимерной нити сначала была приложена статическая нагрузка, обеспечивающая в нити процесс ползучести. Установлено, что интервал времени в 1 мин достаточен для максимальной реализации процесса ползучести изучаемых полимерных материалов, подготовки к записи колебаний и является рациональным с точки зрения длительности эксперимента. После выдержки образца под нагрузкой, в нем кратковременным импульсом ударного узла возбуждались свободные продольные колебания. С помощью датчика регистрировалась частота свободных продольных колебаний. Измерения выполнены с шагом нагрузки 0,5-1 Н в зависимости от исследуемого материала. Каждый образец подвергался только однократному испытанию. Все исследования проведены в изотермическом режиме при одинаковой для всех образцов температуре T = 293 К.

Погрешность схемы регистрации свободных продольных колебаний не превышала 5 % при достоверности 0,95, что допустимо для устройств и машин, предназначенных для динамических испытаний. Значение случайной погрешности определено на основании статистической обработки данных в предположении, что измеряемые величины образуют совокупность независимых случайных величин, и тем самым подчиняются закону нормального распределения Гаусса. Границы доверительного интервала определены по t-распределению Стьюдента. Вычислено, что значение случайной погрешности в определении динамической составляющей деформации не превышает 6 % при доверительной вероятности, равной 0,95, что, в свою очередь, на порядок больше инструментальной, которая согласно классу точности прибора составила $\Delta \varepsilon_{\text{ин}} = 2 \cdot 10^{-4}$.

В качестве объектов исследования выбраны синтетические нити, которые находят широкое применение в технике, имеют разное строение и обладают нелинейными свойствами, характерными для высокоориентированных полимеров: полиэтилентерефталат (ПЭТФ), синтетический высокопрочный материал (СВМ) и терлон (табл. 1).

Напряжение, действующее в образце, рассчитано по формуле:

$$\sigma = \frac{P\rho}{T} \cdot 10^3,$$

где *P* — нагрузка на образце; р — плотность материала; *T* — линейная плотность.

В ходе проведения экспериментов у рассматриваемых материалов в определенном диапазоне нагрузок наблюдалась сложная форма колебательного процесса, связанная с появлением второй моды колебаний. Такого вида колебания можно рассматривать как модулированные по амплитуде колебания или как результат сложения двух колебаний одинаковой амплитуды и близких частот — биения. В настоящей работе эти колебания определены как биения.

В таблице приведены диапазоны напряжений и деформаций, внутри которых для исследуемых полимерных материалов появляются и исчезают биения.

На рис. 3 приведены типичные зависимости динамической части деформации θ от времени *t* при различных значениях напряжения σ для ПЭТФ нити.

Из рис. 3 видно, как появляются (рис. 3, *b*), усиливаются, максимально проявляются (рис. 3, *c*), а затем ослабевают (рис. 3, *d*) и исчезают при некотором значении напряжения (рис. 3, *e*) наблюдаемые биения. Перед появлением биений на начальной стадии нагружения и после исчезновения биений при дальнейшем увеличении нагрузки наблюдаются только классические затухающие колебания (рис. 3, *a*, *e*). Колебания при различных значениях напряжения на этих стадиях отличаются только значением основной частоты $\omega_1 = \Omega_0$ (рис. 4).

Выполнена обработка экспериментальных данных, полученных с помощью осциллографа. На основе осциллограмм построены зависимости основной и дополнительной частот от приложенного напряжения.

На рис. 4 приведены численные зависимости для нити ПЭТФ. Видно, что основная частота ω_1 монотонно уменьшается с увеличением приложенного к образцу напряжения как в области биений, так и вне ее.

При этом дополнительная частота ω_2 (рис. 4) зависит от напряжения только в области биений, вне этой области — зависимость несущественна.

Тангенс угла механических потерь, рассчитанный по основной частоте как $tg\delta = \frac{\beta}{\Omega_0}$, в зависимости от нагрузки имеет острый максимум в интервале напряжений, где наблюдаются биения. На рис. 5 приведена зависимость тангенса угла механических потерь $tg\delta$ от напряжения σ для полимерной нити ПЭТФ.

Из рис. 4 и рис. 5 видно, что в интервале напряжений, где наблюдается сближение частот ω_1 и ω_2 , тангенс угла механических потерь имеет острый максимум.

Устойчивость появления и исчезновения биений подтверждена экспериментальными проверками влияния различных внешних факторов и причин возбуждения второй моды колебаний. Так, для проверки достоверности наблюдаемых биений, проведены контрольные испытания в меняющихся условиях.

Изменение внутренних параметров (внутренних частот) установки путем ступенчатого догружения верхней платформы показало, что диапазон частот, внутри

Габлица.	Области	появления	и и исче	зновения	биений
Table. A	reas of oc	currence ar	nd disap	pearance of	of beats

Материал	Линейная плотность, текс	Напряжение σ, МПа	Деформация є, %
CBM	29,4	390–520	0,40–0,50
Терлон	29,4	350-450	0,42–0,48
ΠЭΤΦ	114	60–75	0,47–0,58

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2022, том 22, № 5 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no 5



Рис. 3. Схематические зависимости динамической деформации θ от времени *t* для нити полиэтилентерефталата при различных уровнях приложенного напряжения σ : 50 МПа (*a*); 60 МПа (*b*); 65 МПа (*c*); 70 МПа (*d*); 75 МПа (*e*) *Fig.* 3. Schematic dependences of dynamic deformation θ vs. time *t* for PET filament at different level of applied stress σ : 50 MPa (*a*); 60 MPa (*b*); 65 MPa (*c*); 70 MPa (*d*); 75 MPa (*e*)



Рис. 4. Зависимости основной частоты $\omega_1 = \Omega_0$ и дополнительной частоты биений $\omega_2 = \Delta \omega$ от напряжения σ для нити полиэтилентерефталата

Fig. 4. Dependences of the main frequency $\omega_1 = \Omega_0$ and the additional beat frequency $\omega_2 = \Delta \omega$ vs. the stress σ for the PET filament

которого наблюдались биения, не изменяется. Влияние вынужденных поперечных колебаний на характер наблюдаемого явления биения легко проверить, рассчитав частоту этих колебаний. При зажимной длине образца 0,2 м частота поперечных колебаний составляет около 7 рад/с, а при длине 0,1 м – 10 рад/с, что значительно ниже частоты свободных продольных колебаний, при которых появляются биения как для нити ПЭТФ (около 110 рад/с, рис. 4), так и для других нитей [5, 6]. При этом наложение на свободные продольные колебания нити внешних поперечных и крутильных колебаний показало, что биения продолжали наблюдаться в том же диапазоне деформаций, при котором они проявлялись при обычном испытании.



Рис. 5. Зависимость тангенса угла механических потерь tgδ от напряжения σ для полимерной нити полиэтилентерефталата при температуре T = 293 K *Fig.* 5. Dependence of the tangent of the mechanical losses angle tgδ vs. the stress σ for the PET filament at temperature T = 293 K

Также установлено, что статическое напряженно-деформированное состояние полимера, частота свободных колебаний и масса груза, подвешенного к нити, не влияют на характер наблюдаемых биений. Однако диапазоны частот, внутри которых появляются и исчезают биения, различны для полимерных материалов различного химического строения.

Таким образом, причина возникновения сложной формы колебательного процесса в виде наблюдаемых биений не связана с внешними источниками происхождения второй моды колебаний, а заключается в особенностях надмолекулярного строения изучаемых полимерных материалов.

Применение полученных экспериментальных данных для вычисления параметров однобарьерной модели

Рассмотрим пример вычисления параметров однобарьерной модели для нити ПЭТФ.

1. Определим напряжение биения на основании рис. 3-5. Наиболее ярко биения наблюдаются при напряжении σ = 65 МПа. При этом основная частота $\Omega_0 = 92 \text{ c}^{-1}$, а тангенс угла механических потерь $tg\delta = 2,81 \cdot 10^{-2}$.

2. Определим коэффициент затухания: $\beta = \Omega_0 tg\delta =$ $= 92 \cdot 2.81 \cdot 10^{-2} = 2.59 \text{ c}^{-1}.$

3. Из соотношения (17) выразим время релаксации $\tau_{\rm p} = \frac{\frac{1}{4\beta p}}{4\beta p}$

 Ω_0^2

Значение коэффициента р определим согласно разработанной методике по экспериментальным данным, полученным в режиме ползучести. Для ПЭТФ нити он составляет p = 8,1 [14].

Тогда $\tau_{\rm p} = \frac{4.2,59\cdot8,1}{92^2} = 0,01$ с, что согласуется с данными, полученными согласно методике в работе [14] из эксперимента, проведенного в статическом режиме.

4. Оценим время жизни кластеров в возбужденном состоянии т согласно выражению (12): $\tau = \frac{1}{4\beta} = \frac{1}{4 \cdot 2,59} =$ $= 0.0965 c \approx 0.1 c.$

Таким образом, получив из эксперимента коэффициент затухания и основную частоту, можно опреде-

Литература

- 1. Мандельштам Л.И. Лекции по теории колебаний. М.: Наука, 1972. 470 c.
- 2. Работнов Ю.Н. Элементы наследственной механики твердых тел. М.: Наука, 1977. 384 с.
- 3 Пальмов В.А. Нелинейная механика деформируемых тел: учебное пособие. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2014. 793 c.
- Romanova A.A., Stalevich A.M., Rymkevich P.P., Gorshkov A.S., 4 Ginzburg B.M. A new phenomenon — amplitude-modulated free oscillations (beatings) in loaded, highly oriented fibers from semicrystalline polymers // Journal of Macromolecular Science. Part B: Physics. 2007. V. 46B. N 3. P. 467-474. https://doi. org/10.1080/00222340701257703
- 5. Романова А.А. Математическое моделирование деформационных свойств синтетических нитей при динамическом нагружении: диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук. Л., 1990. 231 с.
- 6. Горшков А.С. Динамическая вязкоупругость синтетических нитей в начальной стадии деформирования: диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук. СПб., 2004. 178 c.
- Romanova A.A., Rymkevich P.P., Gorshkov A.S., Stalevich A.M. 7. Dynamic relaxation of synthetic fibres // Fibre Chemistry. 2005. V. 37. N 4. P. 289-292. https://doi.org/10.1007/s10692-005-0097-2
- Gunn J.B. Microwave oscillations of current in III-V semiconductors // Solid State Communications. 1963. V. 1. N 4. P. 88-91. https://doi. org/10.1016/0038-1098(63)90041-3
- Белоусов Б.П. Периодически действующая реакция и ее механизм // Автоволновые процессы в системах с диффузией: сборник научных трудов. Горький: Изд-во ГГУ, 1951, с. 76.
- 10. Жаботинский А.М. Концентрационные колебания. М.: Наука, 1974. 179 c.
- 11. Горшков А.С., Романова А.А., Рымкевич П.П., Сталевич А.М. Амплитудная модуляция ориентированных полимеров в началь-

лить введенную величину т — время перехода через энергетический барьер или время жизни кластера в данном энергетическом состоянии, а также величину времени релаксации для случая одного барьера.

Заключение

В работе предложено теоретическое объяснение возможности наличия двух мод колебаний в полимерном материале на основе учета в уравнении баланса времени перехода кластеров из одного конформационного состояния в другое. На основе применения полученного уточненного определяющего уравнения к исследованию малоамплитудных продольных колебаний в полимерных материалах получены соотношения между параметрами колебательного процесса и вязкоупругими характеристиками. Показано, что у исследуемых полимерных материалов в определенном интервале приложенного напряжения наблюдается сложная форма колебательного процесса, аналогичная явлению биений. Для полиэтилентерефталатной нити приведены экспериментальные зависимости. Согласно экспериментальным данным и полученным соотношениям показан пример расчета времени жизни кластера в данном энергетическом состоянии и времени релаксации для нити из полиэтилентерефталата. Результаты обработки экспериментальных данных показали, что теория согласуется с экспериментом.

References

- 1. Mandelshtam L.I. Lectures on the Theory of Oscillations. Moscow, Nauka Publ., 1972, 470 p. (in Russian)
- 2. Rabotnov Iu.N. Elements of Hereditary Solid Mechanics. Moscow, Nauka Publ., 1977, 284 p. (in Russian)
- 3. Palmov V.A. Nonlinear Mechanics of Deformable Bodies. St. Petersburg, Polytechnic University Publ., 2014. 793 c. (in Russian)
- Romanova A.A., Stalevich A.M., Rymkevich P.P., Gorshkov A.S., Ginzburg B.M. A new phenomenon - amplitude-modulated free oscillations (beatings) in loaded, highly oriented fibers from semicrystalline polymers. Journal of Macromolecular Science. Part B: Physics, 2007, vol. 46B, no. 3, pp. 467-474. https://doi. org/10.1080/00222340701257703
- Romanova A.A. Mathematical modeling of the synthetic threads deformation properties under dynamic loading. Dissertation for the degree of candidate of technical sciences, Leningrad, 1990, 231 p. (in Russian)
- Gorshkov A.S. Dynamic viscoelasticity of the synthetic threads at the initial deformation stage. Dissertation for the degree of candidate of technical sciences. St. Petersburg, 2004, 178 p. (in Russian)
- Romanova A.A., Rymkevich P.P., Gorshkov A.S., Stalevich A.M. Dynamic relaxation of synthetic fibres. Fibre Chemistry, 2005, vol. 37, no. 4, pp. 289-292. https://doi.org/10.1007/s10692-005-0097-2
- Gunn J.B. Microwave oscillations of current in III-V semiconductors. Solid State Communications, 1963, vol. 1, no. 4, pp. 88-91. https:// doi.org/10.1016/0038-1098(63)90041-3
- 9 Belousov B.P. Intermittent reaction and its mechanism. Autowave processes in systems with diffusion. Gorky, State University of Gorky, 1951, pp. 76. (in Russian)
- 10. Zhabotinskii A.M. Concentration Oscillations. Moscow, Nauka Publ., 1974, 179 p. (in Russian)
- 11. Gorshkov A.S., Romanova A.A., Rymkevich P.P., Stalevich A.M. Amplitude Modulation of Oriented Polymers at the Initial Stage of Deformation. Fiziko-himija polimerov: Sintez, svojstva i primenenie, 2004, no. 10, pp. 111–112. (in Russian)

ной стадии деформирования // Физико-химия полимеров: Синтез, свойства и применение. 2004. № 10. С. 111–112.

- Rymkevich P.P., Romanova A.A., Golovina V.V., Makarov A.G. The energy barriers model for the physical description of the viscoelasticity of synthetic polymers: application to the uniaxial orientational drawing of polyamide films // Journal of Macromolecular Science. Part B: Physics. 2013. V. 52. N 12. P. 1829–1847. https://doi. org/10.1080/00222348.2013.808906
- Головина В.В. Моделирование и прогнозирование деформационных свойств полимерных текстильных материалов: диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук. СПб., 2013. 168 с.
- 14. Рымкевич П.П. Разработка научных основ и методов прогнозирования термовязкоупругих свойств полимерных материалов текстильной и легкой промышленности: диссертация на соискание ученой степени доктора технических наук. СПб.: СПбГУТД, 2018. 299 с.
- Головина В.В., Ляшенко В.А., Басенко В.Г., Рымкевич О.В. Прогнозирование механического поведения полимерных текстильных материалов с учётом их надмолекулярной структуры // Известия высших учебных заведений. Технология легкой промышленности. 2017. Т. 36. № 2. С. 36–40.
- 16. Головина В.В., Макаров А.Г., Романова А.А., Рымкевич О.В. Моделирование и прогнозирование ползучести полимерных текстильных материалов методом барьерной теории // Известия высших учебных заведения. Технология легкой промышленности. 2018. Т. 41. № 3. С. 5–9.
- 17. Горшков А.С., Макаров А.Г., Романова А.А., Рымкевич П.П. Моделирование деформационных процессов ориентированных полимеров на основе описания кинетики надмолекулярных структур, разделенных энергетическими барьерами // Инженерно-строительный журнал. 2013. № 9(44). С. 75–83. https://doi.org/10.5862/MCE.44.10
- Головина В.В., Шахова Е.А., Рымкевич П.П. Уравнение состояния полимерных нитей // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2020. Т. 20. № 6. С. 877–882. https://doi.org/10.17586/2226-1494-2020-20-6-877-882
- Горшков А.С., Сталевич А.М., Романова А.А., Рымкевич П.П. Устройство для определения динамических характеристик комплексных нитей. Патент на полезную модель RU33650U1. Бюл. 2003. № 30.

Авторы

Головина Виктория Владимировна — кандидат технических наук, доцент, доцент, Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург, 197198, Российская Федерация, 17434019700, https://orcid.org/0000-0002-2691-7680, victoria_gol@ mail.ru

Рымкевич Павел Павлович — доктор технических наук, доцент, профессор, Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург, 197198, Российская Федерация, 💀 6506856521, https://orcid.org/0000-0002-9362-0561, romallaa@yandex.ru

Рымкевич Ольга Васильевна — кандидат технических наук, доцент, Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург, 197198, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0001-8926-4552, Olga.Rymkevich@gmail.com

Статья поступила в редакцию 14.07.2022 Одобрена после рецензирования 04.09.2022 Принята к печати 29.09.2022



- Rymkevich P.P., Romanova A.A., Golovina V.V., Makarov A.G. The energy barriers model for the physical description of the viscoelasticity of synthetic polymers: application to the uniaxial orientational drawing of polyamide films. *Journal of Macromolecular Science. Part B: Physics*, 2013, vol. 52, no. 12, pp. 1829–1847. https://doi.org/10.1080/00222348.2013.808906
- Golovina V.V. Modeling and Prediction of Deformation Properties of Polymer Textile Materials. Dissertation for the degree of candidate of technical sciences. St. Petersburg, 2013, 168 p. (in Russian)
- Rymkevich P.P. Development of Scientific Foundations and Prediction Methods for the Thermoviscoelastic Properties of Polymeric Materials in the Textile and Consumer Industry. Dissertation for the degree of doctor of technical sciences. St. Petersburg, SPbSUITD, 2018, 299 p. (in Russian)
- Golovina V.V., Lyashenko V.A., Basenko V.G., Rymkevich O.V. Predicting the mechanical behavior of polymer textile materials taking into account their supermolecular structure. *Proceedings of the higher educational institutions. Light Industry Technology*, 2017, vol. 36, no. 2, pp. 36–40. (in Russian)
- Golovina V.V., Makarov A.G., Romanova A.A., Rymkevich O.V. Modeling and forecasting of the polymer textile creep by the barrier theory method. *Proceedings of the higher educational institutions*. *Light Industry Technology*, 2018, vol. 41, no. 3, pp. 5–9. (in Russian)
- Gorshkov A.S., Makarov A.G., Romanova A.A., Rymkevich P.P. Modelling of directed polymers deformation processes based on the description of the kinetics of supramolecular structures separated by energy barriers. *Magazine of Civil Engineering*, 2013, no. 9(44), pp. 75–83. (in Russian). https://doi.org/10.5862/MCE.44.10
- Golovina V.V., Shakhova E.A., Rymkevich P.P. Condition equation of polymer filaments. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2020, vol. 20, no. 6, pp. 877– 882. (in Russian). https://doi.org/10.17586/2226-1494-2020-20-6-877-882
- Gorshkov A.S., Stalevich A.M., Romanova A.A., Rymkevich P.P. Device for determining the dynamic characteristics of complex threads. *Patent RU33650U1*, 2003. (in Russian)

Authors

Victoria V. Golovina — PhD, Associate Professor, Associate Professor, Mozhaisky Military Aerospace Academy, Saint Petersburg, 197198, Russian Federation, Sci 17434019700, https://orcid.org/0000-0002-2691-7680, victoria_gol@mail.ru

Pavel P. Rymkevich — D. Sc., Associate Professor, Professor, Mozhaisky Military Aerospace Academy, Saint Petersburg, 197198, Russian Federation, **50** 6506856521, https://orcid.org/0000-0002-9362-0561, romallaa@yandex.ru

Olga V. Rymkevich — PhD, Associate Professor, Mozhaisky Military Aerospace Academy, Saint Petersburg, 197198, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0001-8926-4552, Olga.Rymkevich@gmail.com

Received 14.07.2022 Approved after reviewing 04.09.2022 Accepted 29.09.2022

Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» νίτμο

HAУЧHO-TEXHИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКІ

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-1007-1015 УДК 533.6

Численное моделирование характеристик высоконесущих профилей с энергетическими методами увеличения подъемной силы Павел Викторович Булат^{1⊠}, Антон Александрович Курнухин², Николай Васильевич Продан³

1.2.3 Севастопольский государственный университет, Севастополь, 299053, Российская Федерация 1.2.3 Балтийский государственный технический университет «ВОЕНМЕХ» им. Д.Ф. Устинова, Санкт-Петербург, 190005, Российская Федерация

¹ pavelbulat@mail.ru[™], https://orcid.org/0000-0003-0099-9953

² anton.kurnukhin@outlook.com, https://orcid.org/0000-0003-4851-6594

³ kolinti@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-6383-039X

Аннотация

Предмет исследования. Рассмотрена проблема создания высоконесущих профилей с энергетическими методами увеличения подъемной силы. Разработана методика математического моделирования профилей, построенных методом решения обратной задачи аэродинамики по заданным свойствам потока, омывающего профиль. Изучена зависимость несущих свойств профилей от расхода отбираемого с их поверхности воздуха. В качестве основы выбран профиль Гриффина/Голдшмида с отбором воздуха в верхней критической точке. Разработаны профили: первый — с плоским днищем для создания на взлете и посадке экранного эффекта, второй — с выбросом отбираемого воздуха через заднюю кромку, третий — модификация второго с увеличенной строительной высотой. Метод. Для построения аэродинамических профилей использовано решение обратной задачи аэродинамики в рамках модели идеального газа. Задано распределение давления на верхней части профиля, его строительная высота и диапазон изменения углов атаки от 0° до 16°, а также степень разрежения до 0,5 атм в щели, через которую отбирался воздух. Для профилей с выбросом воздуха через заднюю кромку в пределах от 50 до 200 % варьировалось отношение расхода выбрасываемого воздуха к расходу отбираемого воздуха. Для каждого полученного варианта выполнены численные расчеты с помощью чисел Рейнольдса в диапазоне от 1,5 10⁵ до 1,5 10⁶ с использованием моделей турбулентности Спаларта-Алмараса, Transition Shear Stress Transport (SST) и Ленгтри, настройка которых производилась по известным эталонным результатам. Основные результаты. Расчеты показали, что профили имеют высокий коэффициент подъемной силы $C_v \approx 3-3,4$, который достигается при разрежении в щели 0,5 атм. C_v зависит от угла атаки практически линейно вплоть до максимальных значений. Выброс воздуха через заднюю кромку профиля при степени разрежения 0,5 атм приводит к росту C_{ν} , значение которого зависит от увеличения расхода воздуха. Практическая значимость. Исследованные профили имеют большую строительную высоту и несущую способность, создают тягу даже при отсутствии выдува через заднюю кромку. Эти свойства позволяют их использовать в конструкции воздушных судов, для которых важным является объем внутренних отсеков, необходимых, например для размещения водородного топлива.

Ключевые слова

аэродинамический профиль, математическое моделирование, оптимизация, численный эксперимент, энергетические методы увеличения подъемной силы

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в ходе реализации проекта «Фундаментальные основы механики, систем контроля и управления беспилотных авиационных систем с формообразующими конструкциями, глубоко интегрированными с силовыми установками, и уникальными свойствами, не применяемыми сегодня в пилотируемой авиации», No FEFM-2020-0001.

Ссылка для цитирования: Булат П.В., Курнухин А.А., Продан Н.В. Численное моделирование характеристик высоконесущих профилей с энергетическими методами увеличения подъемной силы // Научнотехнический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 1007–1015. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-1007-1015

© Булат П.В., Курнухин А.А., Продан Н.В., 2022

Numerical simulation of propulsive aerodynamic profiles

Pavel V. Bulat¹, Anton A. Kurnukhin², Nikolay V. Prodan³

1,2,3 Sevastopol State University, 299053, Sevastopol, Republic of Crimea

1.2.3 Baltic State Technical University "VOENMEH" named after D.F. Ustinov, Saint Petersburg, 190005, Russian Federation

rederation

¹ pavelbulat@mail.ru[⊠], https://orcid.org/0000-0003-0099-9953 ² anton.kurnukhin@outlook.com, https://orcid.org/0000-0003-4851-6594

 2 anion.kurnuknin@outiook.com, nups://orcid.org/0000-0003-4851-65

³ kolinti@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-6383-039X

Abstract

The problem of creating high-lift propulsive aerodynamic is considered. A method was developed for constructing an aerodynamic profile by solving the inverse problem of aerodynamics. The dependence of the lifting force of this profile on the volume of air sucked from its upper surface and from the angle of attack is studied. The profile under study was developed on the basis of the well-known Griffin/Goldschmid profile with air suction at the upper critical point. Three aerodynamic profiles have been developed. The first profile has a flat lower surface to obtain the ground effect. The second profile is similar to the first but has a slit nozzle near the trailing edge. The third profile is similar to the second but has a non-flat bottom surface and increased thickness. The solution of the inverse problem of aerodynamics was used to construct aerodynamic profiles within the model of an ideal gas. The pressure distribution on the upper part of the profile, its construction height and the range of angles of attack are from 0° to 16°, as well as the degree of rarefaction up to 0.5 atm in the gap through which the air was taken were set. For the second and third profiles, the ratio of the amount of air ejected through the nozzle to the amount of air taken from the upper surface of the profile was set. This ratio ranged from 50 % to 200 %. Numerical calculations were performed for each variant using the Spalart-Allmaras turbulence models and the Transition Shear Stress Transport (SST) and Langtry model. The parameters of the turbulence models were adjusted according to known reference data. The Reynolds number was in the range of 1.5 · 10⁵ – 1.5 · 10⁶. The profiles have a high lift coefficient $C_v = 3-3.4$ which is achieved when creating a vacuum in the air intake of 0.5 atm. C_{ν} depends on the angle of attack almost linearly up to the maximum values. The greater the air flow through the slot nozzle, the greater is the C_v at a vacuum in the air intake of 0.5 atm. Significance for practical application. The developed profiles have a large thickness and create traction. These profiles are convenient to use in aircraft with large internal volumes, for example, those running on hydrogen fuel.

Keywords

aerodynamic profile, high-lift aerodynamic profile, mathematical modeling, numerical experiment, optimization, power aerodynamics, propulsive wing concept

Acknowledgements

This work was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation in the course of the project "Fundamental bases of mechanics, control and management systems for unmanned aircraft systems with shaping structures deeply integrated with propulsion systems and unique properties not used today in manned aviation", No FEFM-2020-0001.

For citation: Bulat P.V., Kurnukhin A.A., Prodan N.V. Numerical simulation of propulsive aerodynamic profiles. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 1007–1015 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-1007-1015

Введение

Цель исследования — разработка метода проектирования аэродинамических профилей с высокой несущей способностью, использующих энергетические методы увеличения подъемной силы. Существует рыночная потребность в транспортных беспилотных летательных аппаратах (БЛА), способных выполнять региональные перевозки грузов, людей или целевой нагрузки с достаточно высокой скоростью. При этом базироваться БЛА должны на минимально подготовленных площадках. Целевое назначение таких БЛА может быть различным: доставка срочных грузов, почты, скоропортящихся продуктов питания. В ряде задач, таких как обработка сельско-хозяйственных угодий, спасание на воде, поиск в лесу и т. п., требуется способность устойчиво выполнять длительный полет на высоте 1-2 м от поверхности (в случае поиска в лесу — над верхней кромкой леса) со скоростью не менее 250 км/ч. Следовательно, рациональным представляется также использование экранного эффекта вблизи поверхности земли, который активно исследуется в последнее время [1].

Для БЛА большой проблемой является посадка на неровную поверхность. Как показала практика эксплуатации, БЛА часто получают повреждения как при посадке с парашютом, там и при горизонтальной посадке. Одна из ключевых причин — большое удлинение крыла. Для обеспечения возможности короткого взлета и посадки БЛА должен иметь умеренное удлинение крыла, а для достижения транспортной эффективности, сравнимой с обычными грузовыми самолетами, необходимо одновременно обеспечить высокое крейсерское аэродинамическое качество и большой объем грузового отсека умеренной длины.

Удовлетворить этим противоречивым требованиям можно, применив аэродинамическую схему «летающее крыло» с оптимальным толстым профилем [2]. За счет отсоса воздуха из верхней критической точки профиля и его выброса через заднюю кромку обеспечивается активное управление суперциркуляцией крыла [3]. Критические точки профиля — точки полного торможения потока, в которых скорость падает до нуля. Одновременно, благодаря большой строительной высоте центроплана, появляется возможность разместить силовую установку и движители внутри центроплана без ущерба для размеров грузового отсека.

Предмет исследований

Для получения оптимальных обводов профилей с учетом отбора газа с его поверхности и выдува через заднюю кромку применена методика решения обратной задачи аэродинамики — проектирования формы профиля по заданным параметрам течения около аэродинамического профиля [4]. В последние 20 лет в нашей стране уделяется большое внимание вопросам проектирования специальных профилей с отбором воздуха с поверхности. Изучены случаи точечного и распределенного отбора [5, 6] воздуха и его выброса через заднюю кромку [7], а также влияние на характеристики профиля особенностей в потоке, в том числе вихрей [8].

Одним из первых такие расчеты выполнил в 1937 г. Жуковский [9], получив толстый профиль с оптимальными для малых скоростей свойствами. Позднее в 1947 г. Некрасов обобщил решение Жуковского на случай профиля с источниками и стоками [10]. Аналогичные работы по прямому проектированию аэродинамических профилей [11] за рубежом вел Лайтхилл (Lighthill). Основываясь на его работах, Гриффин (Griffith) разработал толстый (более 30 %) профиль с отсосом газа в верхней критической точке [12], что позволило получить экстремально высокое значение $C_{y \text{ max}}$.

Работы были продолжены Глауэртом (Glauert), который дополнительно реализовал условие кусочно-постоянного распределения давления на верхней половине профиля, при этом были получены необычно толстый профиль с отбором газа в верхней критической точке [13], а также более тонкий профиль с отсосом из критической точки на задней кромке [14]. Особенностью профиля Глауэрта стало наличие на верхней поверхности участка, создающего тягу, что позволило при определенном расходе отсасываемого газа уменьшить коэффициент лобового сопротивления С_х до нуля. Расчеты показали, что затраты энергии при этом оказываются примерно на 30 % меньше, чем при компенсации сопротивления силой тяги двигателя. Эксперименты [15] в целом подтвердили теоретические результаты Лайтхилла и Глауэрта.

Позднее, опираясь на работы Лайтхилла, Гриффинна и Глауэрта, Кюхеман разработал несколько типов профилей с энергетическими принципами увеличения подъемной силы и эффекта создания профилем силы тяги [16]. Способность профиля крыла создавать тягу привела к термину пропульсивное крыло, т. е. крыло, создающее тягу за счет управления циркуляцией потока. Работы Гриффина были обобщены Голдшмидом (Goldschmied) на трехмерные тела и тела вращения, после чего толстый профиль с отсосом газа в верхней критической точке стал называться профилем Гриффина/ Голдшмида. Голдшмид сформулировал в 1967 г. концепцию толстого крыла для транспортного самолета [17, 18], а позднее идею самолета с пропульсивным фюзеляжем [19] (рис. 1), которая сегодня весьма попу-





Рис. 1. Концепция пропульсивного фюзеляжа на основе тела вращения Гриффина/Голдшмида с отсосом газа через кольцевую щель и большим грузовым отсеком: трехмерная модель концептуального фюзеляжа (*a*); эскиз с основными элементами пропульсивного фюзеляжа (*b*)

Fig. 1. The concept of a propulsive fuselage based on the Griffin/Goldschmid body of revolution with gas suction through an annular slot and a large cargo bay: three-dimensional model of the conceptual fuselage (a); sketch with the main elements of the propulsive fuselage (b)

лярна среди разработчиков концепций перспективных транспортных и пассажирских самолетов.

Развитие численных методов в 90-е годы XX века привело к активизации работ в данном направлении и созданию ряда концепций сверхбольших транспортных и пассажирских самолетов с пропульсивным крылом и фюзеляжем Гриффина/Голдшмида [20, 21]. При этом для трансзвуковых скоростей разработаны усовершенствованные профили Гриффина с уменьшенной до 18 % относительной толщиной. Большой вклад в разработку данного класса профилей внес в 90-е годы Селиг (Selig) [22–24], который разработал эффективные численные алгоритмы построения профилей обратным многоточечным методом комфорных отображений [25, 26]. Применение перечисленных методик позволяет создавать необычные аэродинамические формы летательных аппаратов [27], которые могут отличаться сверхбольшой вместимостью, низким уровнем шума за счет размещения движителей внутри планера, сочетать свойства самолетов и вертолетов.

В настоящей работе использован профиль Гриффина/Голдшмида, и выполнена компоновка гипотетического экраноплана (рис. 2, *a*) с пропорциями грузового отсека, соответствующими геометрии стандартных авиационных контейнеров (рис. 2, *с–е*).

На основе рассмотренных в работе [4] методик разработаны и исследованы три пропульсивных профиля, предназначенных для применения в конструкции пла-



Puc. 2. Компоновка гипотетического беспилотного летательного аппарата (*a*) и поле давления около профиля Гриффина/ Голдшмида с относительной толщиной 38 % (*b*), которыми набран фюзеляж, на крейсерском режиме с отсосом газа через щель на верхней поверхности при скорости полета $u_0 = 50$ м/с на угле атаки $\alpha = 0^\circ$, пропорции грузового отсека спроектированы с учетом размещения одного (*c*), двух (*d*) и четырех стандартных авиационных грузовых контейнеров (*e*) *Fig.* 2. The configuration of the hypothetical unmanned aerial vehicle (*a*) and the pressure field near the Griffin/Goldschmid profile with a relative thickness of 38 % (*b*), with which the fuselage is assembled, in cruising mode with gas suction through a gap on the upper surface at a flight speed of $u_0 = 50$ m/s at an angle of attack $\alpha = 0^\circ$; the cargo bay proportions are designed taking into account the placement of one (*c*), two (*d*) and four standard aviation cargo containers (*e*)

нера БЛА с объемным внутренним отсеком полезной нагрузки. Определены зависимости коэффициента подъемной силы C_y от угла атаки α , а также от степени разрежения в щели отбора воздуха.

Модели и методы

Выполним исследование исходного профиля Гриффина/Голдшмида (рис. 2, *b*), а также трех разработанных профилей, показанных на рис. 3.

Профиль 1 (рис. 3, *a*) выбран на основании характеристик, приведенных в работе [4] в диапазоне углов атаки $\alpha = 0^{\circ}-10^{\circ}$. Изменена только геометрия щели отбора воздуха, а также участок от щели до хвостовой кромки. Модернизация потребовалась по итогам численных расчетов с учетом наличия пограничного слоя, так как течение около щели отбора в исходном профиле сопровождалось отрывом потока.

Профиль 2 (рис. 3, *b*) оснащен щелевым соплом на задней кромке с выдвинутой по потоку нижней пластиной для компенсации кабрирующего момента, который у щелевого сопла оказался слишком большим. Эта поверхность может служить рулем высоты и использоваться для управления по тангажу.

Профиль 3 (рис. 3, *c*) представляет собой модификацию профиля 2 с увеличенной строительной высотой и измененной передней верхней частью. Цель модификации — обеспечить совместимость компоновки гипотетического транспортного БЛА с геометрией стандартных авиационных грузовых контейнеров (рис. 2, *c*-*e*). Нижняя поверхность спрофилирована для обеспечения наибольшего увеличения подъемной силы



Рис. 3. Исследуемые профили: без выдува (профиль 1) (*a*) и с выдувом (профиль 2) (*b*) через заднюю кромку и плоской нижней поверхностью; с увеличенной строительной высотой (относительная толщина 38 %), выдувом через заднюю кромку и профилированной нижней поверхностью (профиль 3) (*c*)

Fig. 3. The profiles studied: without blowing (profile 1) (*a*) and with blowing (profile 2) (*b*) through the trailing edge and flat bottom surface; with increased construction height (relative thickness of 38 %), blowing through the trailing edge and profiled bottom surface (profile 3) (*c*)

за счет экранного эффекта при угле атаки $\alpha = 4^{\circ}$ и расстоянии от земли $\Delta = 10{-}30$ % хорды профиля. Площадь сопла увеличена по сравнению с исходным профилем на 50 %, для уменьшения скорости истечения струи и увеличения пропульсивного коэффициента полезного действия. Сопло в задней кромке на нулевом угле атаки создает реактивную силу, направленную под углом минус 4° и параллельно вектору скорости.

С целью проведения эксперимента были изготовлены аэродинамические модели всех профилей, при этом длина сегмента крыла 1 м и равна длине хорды исследуемого профиля (рис. 4).

Модели расчетной области соответствуют геометрии экспериментальных моделей.

Выполним численные расчеты с использованием чисел Рейнольдса в диапазоне от 1,5·10⁵ до 1,5·10⁶ для профиля Miley M06-13-128, экспериментальные данные которого по распределению параметров вдоль поверхности представлены в работе [28]. В ходе расчетов из шести моделей турбулентности были выбраны лучшие, а также отработаны настройки параметров расчетной модели. Наилучшее соответствие экспериментальным данным показали модели, имеющие механизм учета ламинарно-турбулентного перехода. Это однопараметрическая модель турбулентности Спаларта-Алмараса (SA) [29] и четырехпараметрическая Transition Shear Stress Transport (SST) $\operatorname{Re}_{\theta-\gamma}$ модель Ленгтри (tSST) [30]. Проведено сравнение моделей с выводами работ [31, 32], в которых также была изучена проблема моделирования ламинарно-турбулентного перехода.

В настоящей работе для SA модели в пристеночной области на основании рекомендаций в [33] параметр сетки задан y^+ порядка 2 (безразмерный параметр, зависящий от величины сдвигового напряжения, а также расстояния между стенкой и первым узлом ячейки, характеризующий разрешающую способность сетки у стенки), что позволило полностью разрешить пограничный слой. SA в своей формулировке содержит внутренний механизм переключения с ламинарной модели на турбулентную. Если точка перехода известна, то ее можно задавать явно. Если нет, то при числе Рейнольдса Re> 10⁵ параметр кинематической вязкости v на входе в расчетную область задается в диапазоне 0,1–5 [33]. По результатам тестирования для даль-



Рис. 4. Аэродинамическая модель для исследования профиля Гриффина/Голдшмида



нейших расчетов принято v = 0,35. С таким значением v результаты SA оказывались близкими к результатам tSST. Для tSST модели принято y^+ порядка 0,5, так как данная модель внутри пограничного слоя использует переменные $k - \omega$ (k — кинетическая энергия турбулентности, ω — удельная скорость диссипации турбулентности) и данный параметр должен быть меньше 1 [34, 35]. При выбранных настройках tSST модель должна с приемлемой точностью моделировать течение на докритических углах атаки α [31], но с переходом к отрывным течениям надежность результатов падает [36].

Расчеты выполнены до достижения сеточной сходимости. Минимальный размер ячеек 0,00009 м. Количество ячеек — 33 тыс. Интегрирование по времени выполнено методом Рунге–Кутты 3-го порядка. Дискретизация невязких потоков произведена с помощью схемы MUSCL (Monotonic Upstream Schemes for Conservation Laws, монотонная противопоточная схема для законов сохранения), удовлетворяющей условию TVD (Total Variation Diminishing), а для вязких потоков использована центральная схема 2-го порядка точности.

Скорость набегающего потока 70 м/с выбрана на основании типичной величины крейсерской скорости у самолетов местных линий. Выполненное тестирование в диапазоне чисел Рейнольдса 1,5·10⁵–1,5·10⁶ позволило определить пределы применимости разработанной методики по скорости — от 50 до 70 м/с.

В щели отбора воздуха задано давление по формуле

$$p = p_s - r_s$$

где p_s — давление на кромке щели; r — степень разрежения равная значениям 0, -0,1, -0,2, -0,3, -0,4 и -0,5 атм.

Для каждого значения давления в щели и угла атаки вычислен расход отбираемого воздуха *Q*, м³/с.

Результаты и их обсуждение

Отметим, что расход отбираемого воздуха (рис. 5) при заданной степени разрежения *r* остается постоянным до наступления срывного режима течения. Далее



Рис. 5. Зависимость расхода Q отбираемого воздуха от задаваемой степени разрежения r при различных углах атаки α



значение расхода воздуха падают. Это вызвано образованием на тяговом участке профиля отрывного пузыря с циркуляционным течением, давление в котором ниже, чем при безотрывном течении. Видно, что при уменьшении перепада давления, уменьшается и расход *Q*.

С увеличением степени разрежения r коэффициент подъемной силы C_y у профиля 1 растет, соответственно увеличивается предельный угол атаки безотрывного течения (рис. 6). Линии зависимости при r = -0.4и -0.5 атм практически совпадают, поэтому можно считать, что при r = -0.5 атм достигаются предельные характеристики профиля 1.

На рис. 7 приведено сравнение C_y для профилей 1 и 2. Для профиля 2 количество выбрасываемого воздуха принято равным количеству отбираемого через щель. Видно, что выброс струи затягивает наступление срывных закритических режимов, а значение $C_{y \max}$ больше почти на 10 %.

На рис. 8 приведено сравнение C_y для профилей 1, 2 и 3 при различных степенях разрежения r. Для профилей 2 и 3 количество выбрасываемого через сопло воздуха принято равным количеству отбираемого через щель. Отметим, что модернизированный профиль 3 незначительно уступает профилю 2 по $C_{y \text{ max}}$.

Заметим, что профиль 3 имеет сопло, установленное под углом минус 4°. Таким образом, подъемная сила несколько уменьшается. Для профиля 3 исследовано влияние расхода воздуха, выбрасываемого через сопло в задней кромке профиля, на подъемную силу. При r = -0,5 атм увеличение расхода воздуха с 50 % до 200 % от расхода отбираемого через щель воздуха C_y монотонно увеличивается, начиная с угла атаки 4°, т. е. с момента, когда вертикальная составляющая вектора тяги становится равной нулю. При меньших степенях разрежения r эффект менее выражен.

Расчеты всех профилей выполнены при помощи моделей турбулентности SA и tSST в сравнении с моделью идеального газа и вязкого ламинарного течения. Модели SA и tSST на линейном участке зависимости $C_{\nu}(\alpha)$ дают практически идентичные результаты,





Fig. 6. Dependence of the lift coefficient C_y of rarefaction *r* at different angles of attack α



Рис. 7. Сравнение зависимости коэффициента подъемной силы С_у от угла атаки α для профилей 1 и 2. Пунктиром показана зависимость при отсутствии отбора и выброса воздуха

Fig. 7. Comparison of the dependence of the lift coefficient C_y of attack α for profile No. 1 and No. 2; the dotted line shows the dependence in the absence of air intake and exhaust

превосходя остальные модели по точности в разы. Поскольку SA примерно в 6-8 раз менее требователь-



Рис. 8. Сравнение зависимости коэффициента подъемной силы *С_у* от угла атаки и степени разрежения *r* (атм) для профилей: 1 (*a*), 2 (*b*) и 3 (*c*)

Fig. 8. Comparison of the dependence of the lift coefficient C_y vs. the angle of attack α and the degree of rarefaction r (atm) for profiles No. 1 (*a*), No. 2 (*b*), and No. 3 (*c*)

на к вычислительным ресурсам, чем tSST, то ее можно рекомендовать для численного моделирования БЛА с энергетическими методами увеличения подъемной силы, начиная с числа Рейнольдса Re равного 10⁵.

Таким образом, разработанные профили обладают чрезвычайно высокими потребительскими качествами с точки зрения применения на транспортных БЛА. $C_{y \text{ max}}$ почти в 1,5 раза выше, чем у крыла с полностью выпущенными трехщелевыми закрылками (предельно достижимое значение $C_{y \text{ max}} = 2,5$), при этом профили не имеют подвижных частей. Профили имеют большую строительную высоту и тяговый участок, который создает тягу больше, чем лобовое сопротивление. Поскольку площадь тягового участка профиля весьма велика, то пропульсивный коэффициент полезного действия такого движителя оказывается в разы больше, чем у любого традиционного двигателя.

Заключение

Методом решения обратной задачи аэродинамики спроектированы три вида аэродинамических профилей, использующих отбор воздуха в верхней критической точке для увеличения подъемной силы. Численные расчеты выполнены при помощи модели турбулентности Спаларта–Алмараса и четырехпараметрической Transition SST модели. Модели были отобраны путем предварительного тестирования на эталонных результатах среди шести моделей для чисел Рейнольдса, находящихся в диапазоне 10⁵–10⁶. Этого достаточно для надежного исследования целевого диапазона ско-

Литература

- Li Y., Pan Z., Zhang N. Numerical analysis on the propulsive performance of oscillating wing in ground effect // Applied Ocean Research. 2021. V. 114. P. 102772. https://doi.org/10.1016/j. apor.2021.102772
- Panagiotou P., Yakinthos K. Aerodynamic efficiency and performance enhancement of fixed-wing UAVs // Aerospace Science and Technology. 2020. V. 99. P. 105575. https://doi.org/10.1016/j. ast.2019.105575
- Петров А.В. Аэродинамика транспортных самолетов короткого взлета и посадки с энергетическими методами увеличения подъемной силы. М.: Инновационное машиностроение, 2018. 736 с.
- Ильинскиий Н.Б., Абзалилов Д.Ф. Математические проблемы проектирования крыловых профилей: усложненные схемы течения; построение и оптимизация формы крыловых профилей. Казань: Казанский университет, 2011. 284 с.
- Абзалилов Д.Ф., Ильинский Н.Б., Марданов Р.Ф. Усовершенствование аэродинамических характеристик крылового профиля путем введения распределенного отсоса пограничного слоя // Известия вузов. Авиационная техника. 2004. № 2. С. 34–39.
- Гайфутдинов Р.А. Максимизация коэффициента подъемной силы крыловых профилей с устройствами активного управления потоком // Известия вузов. Авиационная техника. 2009. № 3. С. 28– 32.
- Абзалилов Д.Ф., Марданов Р.Ф. Расчет и оптимизация аэродинамических характеристик крылового профиля с выдувом реактивной струи при наличии в потоке вихря // Известия вузов. Авиационная техника. 2016. № 3. С. 58–63.
- Варсегова Е.В., Ильинский Н.Б. Построение крылового профиля при наличии в потоке особенности // Известия вузов. Авиационная техника. 2009. № 2. С. 36–40.
- Жуковский Н.Е. О реакции вытекающей и втекающей жидкости: полное собрание сочинений. Т. 4. М.–Л.: Главная редакция авиационной литературы, 1937. С. 7–21.

ростей полета 50-70 м/с, наиболее характерного для региональной авиации. Исследование, выполненное с помощью численных методов, показало, что данные профили имеют высокие несущие характеристики. Участок верхней поверхности профилей от щели для отбора воздуха до задней кромки создает тягу, причем даже в том случае, когда щель в задней кромке для выброса воздуха отсутствует. В типичных случаях тяга превосходит лобовое сопротивление, поэтому исследованные профили получили название пропульсивных. Вплоть до угла атаки 12° коэффициент подъемной силы С_v растет практически линейно, достигая величины $C_v = (3-3,3)$. Подъемная сила увеличивается с ростом степени разрежения, создаваемой в щели для отбора воздуха, приближаясь к предельному значению при разрежении 0,5 атм. При максимальном разрежении выброс воздуха через заднюю кромку увеличивает подъемную силу тем сильнее, чем больше расход. При малых разрежениях ситуация носит неоднозначный характер, в частности выхлопная струя может и уменьшать подъемную силу. Большая относительная толщина профилей c = 38 % позволяет использовать их для построения конструкций планера летательных аппаратов с большими внутренними объемами. Это могут быть транспортные воздушные суда или летательные аппараты, использующие в качестве горючего водород. Щель для отбора воздуха может служить воздухозаборником, так как расход отбираемого в верхней критической точке воздуха соотносится по порядку величин с расходом газотурбинных двигателей.

References

- Li Y., Pan Z., Zhang N. Numerical analysis on the propulsive performance of oscillating wing in ground effect. *Applied Ocean Research*, 2021, vol. 114, pp. 102772. https://doi.org/10.1016/j. apor.2021.102772
- Panagiotou P., Yakinthos K. Aerodynamic efficiency and performance enhancement of fixed-wing UAVs. *Aerospace Science and Technology*, 2020, vol. 99, pp. 105575. https://doi.org/10.1016/j. ast.2019.105575
- Petrov A.V. Aerodynamics of Short Take-Off and Landing Transport Aircraft Using Energy Powered-Lift Methods. Moscow, Innovacionnoe Mashinostroenie Punl., 2018, 736 p. (in Russian)
- Ilinskiii N.B., Abzalilov D.F. Mathematical Problems of Airfoils Designing: Complicated Flow Models; Construction and Optimization of the Airfoil Shapes. Kazan, Kazan University, 2011, 284 p. (in Russian)
- Abzalilov D.F., Il'insky N.B., Mardanov R.F. Improvement of aerodynamic char acteristics of an airfoil by introduction of homogeneous boundary-layer suction. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedenii. Aviatsionnaya Tekhnika*, 2004, no. 2. pp. 34–39. (in Russian)
- Gaifutdinov R.A. Maximization of the lift coefficient of airfoils equipped with active flow control devices. *Russian Aeronautics*, 2009, vol. 52, no. 3, pp. 302–309. https://doi.org/10.3103/S1068799809030076
- Abzalilov D.F., Mardanov R.F. Calculation and optimization of aerodynamic characteristics of airfoils with jet blowing in the presence of vortex in the flow. *Russian Aeronautics*, 2016, vol. 59, no. 3, pp. 358–363. https://doi.org/10.3103/S1068799816030107
- Varsegova E.V., Il'inskii N.B. Construction of an airfoil with an irregularity in the flow. *Russian Aeronautics*, 2009, vol. 52, no. 2, pp. 184–192. https://doi.org/10.3103/S1068799809020093
- Zhukovskii N.E. On the Reaction Of Outflowing and Inflowing Liquid. Vol. 4. Moscow–Leningrad, Glavnaja redakcija aviacionnoj literatury Publ., 1937, pp. 7–21. (in Russian)

- Некрасов А.И. Обтекание профиля Жуковского при наличии на профиле источника и стока // Прикладная математика и механика. 1947. Т. 11. № 1. С. 41–54.
- Lighthill M.J. A New Method of Two-Dimensional Aerodynamic Design: Aeronautical Research Council Reports and Memoranda N 2112 (April, 1945).
- Richards E.J., Walker W.S., Taylor C.R. Wind-tunnel tests on a 30 per cent. suction wing: Aeronautical Research Council Reports and Memoranda N 2149 (July,1945). 23 p.
- Glauert M.B. The Design of Suction Aerofoils with a Very Large CL-Range: Aeronautical Research Council Reports and Memoranda N 2111 (November, 1945).
- Glauert M.B. The Application of the Exact Method of Aerofoil Design: Aeronautical Research Council Reports and Memoranda N 2683 (October, 1947).
- Keeble T.S., Atkins. Tests of Williams Class II Profile using a twodimensional three-foot chord model. ARC Aero Note 100.1951.
- Küchemann D. Some aerodynamic properties of a new type of aerofoil with reversed flow through an internal duct: Report RAE TN Aero 2297. 1954.
- Goldschmied F.R. Integrated hull design, boundary-layer control, and propulsion of submerged bodies // Journal of Hydronautics. 1967. V. 1. N 1. P. 2–11. https://doi.org/10.2514/3.62746
- Goldschmied F.R. Thick-wing spanloader all-freighter: A design concept for tomorrow's air cargo // Proc. of the Aircraft Design, Systems and Operations Conference. 1990. P. 90-3198. https://doi. org/10.2514/6.1990-3198
- Goldschmied F.R. Fuselage self-propulsion by static-pressure thrust: Wind-tunnel verification // Proc. of the Aircraft Design, Systems and Operations Meeting. 1987. P. 87-2935. https://doi.org/10.2514/6.1987-2935
- McMasters J.H, Paisley D.J., Hubert R.J., Kroo I., Bofah K.K., Sullivan J.P., Drela M. Advanced Configurations for Very Large Subsonic Transport Airplanes: NASA Contractor Report 198351. 56 p.
- Perry A.T. Experimental evaluation of a propulsive wing concept: Thesis Submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science in Aerospace Engineering in the Graduate College of the University of Illinois at Urbana-Champaign, 2016. 81 p.
- Selig M.S., Guglielmo J.J., Broeren A.P., Giguère P. Summary of Low-Speed Airfoil Data. V. 1. Virginia Beach, Virginia: SoarTech Publications, 1995.
- Selig M.S., Lyon C.A., Giguère P., Ninham C.N., Guglielmo J.J. Summary of Low-Speed Airfoil Data, V. 2. Virginia Beach, Virginia: SoarTech Publications, 1996.
- Lyon C.A., Broeren A.P., Giguère P., Gopalarathnam A., Selig M.S. Summary of Low-Speed Airfoil Data. V. 3. Virginia Beach, Virginia: SoarTech Publications, 1998.
- Selig M.S., Maughmert M.D. Multipoint Inverse Airfoil Design Method Based on Conformal Mapping // AIAA Journal. 1992. V. 30. N 5. P. 1162–1170. https://doi.org/10.2514/3.11046
- Saeed F., Selig M.S. Multipoint inverse airfoil design method for slot-suction airfoils // Journal of Aircraft. 1996. V. 33. N 4. P. 708– 715. https://doi.org/10.2514/3.47005
- Bravo-Mosquera P.D., Catalano F.M., Zingg D.W. Unconventional aircraft for civil aviation: A review of concepts and design methodologies // Progress in Aerospace Sciences. 2022. V. 131. P. 100813. https://doi.org/10.1016/j.paerosci.2022.100813
- Mueller T.J. The influence of laminar separation and transition on low reynolds number airfoil hysteresis // Proc. of the AIAA 17th Conference on Fluid Dynamics, Plasma Dynamics and Lasers. 1984. https://doi.org/10.2514/6.1984-1617
- Spalart P.R., Allmaras S.R. A one-equation turbulence model for aerodynamic flows // Proc. of the AIAA 30th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit Paper. 1992. https://doi.org/10.2514/6.1992-439
- Menter F.R., Langtry R., Völker S. Transition modelling for general purpose CFD codes // Flow, Turbulence and Combustion. 2006. V. 77. N 1-4. P. 277–303. https://doi.org/10.1007/s10494-006-9047-1
- Liu Y., Li P., Jiang K. Comparative assessment of transitional turbulence models for airfoil aerodynamics in the low Reynolds number range // Journal of Wind Engineering & Industrial Aerodynamics. 2021. V. 217. P. 104726. https://doi.org/10.1016/j. jweia.2021.104726
- Дудников С.Ю., Кузнецов П.Н., Мельникова А.И., Вокин Л.О. Моделирование течений при малых числах Рейнольдса приме-

- Nekrasov A.I. Airflow around the Zhukovsky airfoil in the presence of flow source and discharge on the aerofoil. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 1947, vol. 11, no. 1, pp. 41–54. (in Russian)
- Lighthill M.J. A New Method of two-Dimensional Aerodynamic Design: British Aeronautical Research Council Reports and Memoranda N 2112 (April, 1945).
- Richards E.J., Walker W.S., Taylor C.R. Wind-tunnel test on a 30 per cent. suction wing: Aeronautical Research Council Reports and Memoranda N 2149 (July, 1945), 23 p.
- Glauert M.B. *The Design of Suction Aerofoils with a Very Large C_L-Range*: Aeronautical Research Council Reports and Memoranda N 2111 (November, 1945).
- Glauert M.B. *The Application of the Exact Method of Aerofoil Design*: Aeronautical Research Council Reports and Memoranda N 2683 (October, 1947).
- Keeble T.S., Atkins. Tests of Williams Class II Profile using a twodimensional three-foot chord model. ARC Aero Note 100,1951.
- Küchemann D. Some aerodynamic properties of a new type of aerofoil with reversed flow through an internal duct: Report RAE TN Aero 2297, 1954.
- Goldschmied F.R. Integrated hull design, boundary-layer control, and propulsion of submerged bodies. *Journal of Hydronautics*, 1967, vol. 1, no. 1, pp. 2–11. https://doi.org/10.2514/3.62746
- Goldschmied F.R. Thick-wing spanloader all-freighter: A design concept for tomorrow's air cargo. *Proc. of the Aircraft Design, Systems and Operations Conference*, 1990, pp. 90-3198. https://doi. org/10.2514/6.1990-3198
- Goldschmied F.R. Fuselage self-propulsion by static-pressure thrust: Wind-tunnel verification. Proc. of the Aircraft Design, Systems and Operations Meetin, 1987, pp. 87-2935. https://doi. org/10.2514/6.1987-2935
- McMasters J.H, Paisley D.J., Hubert R.J., Kroo I., Bofah K.K., Sullivan J.P., Drela M. Advanced Configurations for Very Large Subsonic Transport Airplanes: NASA Contractor Report 198351, 56 p.
- Perry A.T. Experimental evaluation of a propulsive wing concept. Thesis Submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science in Aerospace Engineering in the Graduate College of the University of Illinois at Urbana-Champaign, 2016, 81 p.
- Selig M.S., Guglielmo J.J., Broeren A.P., Giguère P. Summary of Low-Speed Airfoil Data. V. 1. Virginia Beach, Virginia, SoarTech Publications, 1995.
- Selig M.S., Lyon C.A., Giguère P., Ninham C.N., Guglielmo J.J. Summary of Low-Speed Airfoil Data, V. 2. Virginia Beach, Virginia, SoarTech Publications, 1996.
- Lyon C.A., Broeren A.P., Giguère P., Gopalarathnam A., Selig M.S. Summary of Low-Speed Airfoil Data. V. 3. Virginia Beach, Virginia, SoarTech Publications, 1998.
- Selig M.S., Maughmert M.D. Multipoint Inverse Airfoil Design Method Based on Conformal Mapping. *AIAA Journal*, 1992, vol. 30, no. 5, pp. 1162–1170. https://doi.org/10.2514/3.11046
- Saeed F., Selig M.S. Multipoint inverse airfoil design method for slot-suction airfoils. *Journal of Aircraft*, 1996, vol. 33, no. 4, pp. 708– 715. https://doi.org/10.2514/3.47005
- Bravo-Mosquera P.D., Catalano F.M., Zingg D.W. Unconventional aircraft for civil aviation: A review of concepts and design methodologies. *Progress in Aerospace Sciences*, 2022, vol. 131, pp. 100813. https://doi.org/10.1016/j.paerosci.2022.100813
- Mueller T.J. The influence of laminar separation and transition on low reynolds number airfoil hysteresis. *Proc. of the AIAA 17th Conference* on Fluid Dynamics, Plasma Dynamics and Lasers, 1984. https://doi. org/10.2514/6.1984-1617
- Spalart P.R., Allmaras S.R. A one-equation turbulence model for aerodynamic flows. Proc. of the AIAA 30th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit Paper, 1992. https://doi.org/10.2514/6.1992-439
- Menter F.R., Langtry R., Völker S. Transition modelling for general purpose CFD codes. *Flow, Turbulence and Combustion*, 2006, vol. 77, no. 1-4, pp. 277–303. https://doi.org/10.1007/s10494-006-9047-1
- Liu Y., Li P., Jiang K. Comparative assessment of transitional turbulence models for airfoil aerodynamics in the low Reynolds number range. *Journal of Wind Engineering & Industrial Aerodynamics*, 2021, vol. 217, pp. 104726. https://doi.org/10.1016/j. jweia.2021.104726

нительно к проектированию несущих аэродинамических поверхностей беспилотных летательных аппаратов // Известия вузов. Авиационная техника. 2021. № 4. С. 39–48.

- Соломатин Р.С., Семенов И.В., Меньшов И.С. К расчету турбулентных течений на основе модели Спаларта-Аллмараса с применением LU-SGS–GMRES алгоритма // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2018. № 119. С. 1–30. https://doi.org/10.20948/ prepr-2018-119
- Liu K., Wang Y., Song W.-P., Han Z.-H. A two-equation localcorrelation-based laminar-turbulent transition modeling scheme for external aerodynamics // Aerospace Science and Technology. 2020. V. 106. P. 106128. https://doi.org/10.1016/j.ast.2020.106128
- 35. Malan P., Suluksna K., Juntasaro E. Calibrating the gamma-Re_theta transition model for commercial CFD // Proc. of the 47th AIAA Aerospace Sciences Meeting including The New Horizons Forum and Aerospace Exposition. 2009. https://doi.org/10.2514/6.2009-1142
- Wauters J., Degroote J. On the study of transitional low-Reynolds number flows over airfoils operating at high angles of attack and their prediction using transitional turbulence models // Progress in Aerospace Sciences. 2018. V. 103. P. 52–68. https://doi.org/10.1016/j. paerosci.2018.10.004

Авторы

Булат Павел Викторович — доктор физико-математических наук, кандидат экономических наук, главный научный сотрудник, Севастопольский государственный университет, Севастополь, 299053, Российская Федерация; главный научный сотрудник, Балтийский государственный технический университет «ВОЕНМЕХ» им. Д.Ф. Устинова, Санкт-Петербург, 190005, Российская Федерация, 55969578400, https://orcid.org/0000-0003-0099-9953, pavelbulat@ mail.ru

Курнухин Антон Александрович — младший научный сотрудник, Севастопольский государственный университет, Севастополь, 299053, Российская Федерация; младший научный сотрудник, Балтийский государственный технический университет «ВОЕНМЕХ» им. Д.Ф. Устинова, главный научный сотрудник, Санкт-Петербург, 190005, Российская Федерация, 57223276960, https://orcid.org/0000-0003-4851-6594, anton.kurnukhin@outlook.com

Продан Николай Васильевич — кандидат технических наук, старший научный сотрудник, Севастопольский государственный университет, Севастополь, 299053, Российская Федерация; старший научный сотрудник, Балтийский государственный технический университет «ВОЕНМЕХ» им. Д.Ф. Устинова, Санкт-Петербург, 190005, Российская Федерация, 56177927100, https://orcid.org/0000-0002-6383-039X, kolinti@mail.ru

Статья поступила в редакцию 06.06.2022 Одобрена после рецензирования 14.07.2022 Принята к печати 18.09.2022

- Dudnikov S.Yu., Kuznetsov P.N., Mel'nikova A.I., Vokin L.O. Simulation of flows at low Reynolds numbers as applied to the design of aerodynamic surfaces for unmanned aerial vehicles. *Russian Aeronautics*, 2021, vol. 64, no. 4, pp. 620–629. https://doi. org/10.3103/S1068799821040061
- Solomatin R.S., Semenov I.V., Men'shov I.S. Towards calculating turbulent flows with the Spalart-Allmaras model by using the LU-SGS-GMRES algorithm. *Keldysh Institute Preprints*, 2018, no. 119, pp. 1–30. (in Russian). https://doi.org/10.20948/prepr-2018-119
- Liu K., Wang Y., Song W.-P., Han Z.-H. A two-equation localcorrelation-based laminar-turbulent transition modeling scheme for external aerodynamics. *Aerospace Science and Technology*, 2020, vol. 106, pp. 106128. https://doi.org/10.1016/j.ast.2020.106128
- 35. Malan P., Suluksna K., Juntasaro E. Calibrating the gamma-Re_theta transition model for commercial CFD. Proc. of the 47th AIAA Aerospace Sciences Meeting including The New Horizons Forum and Aerospace Exposition, 2009. https://doi.org/10.2514/6.2009-1142
- Wauters J., Degroote J. On the study of transitional low-Reynolds number flows over airfoils operating at high angles of attack and their prediction using transitional turbulence models. *Progress in Aerospace Sciences*, 2018, vol. 103, pp. 52–68. https://doi. org/10.1016/j.paerosci.2018.10.004

Authors

Pavel V. Bulat — D. Sc. (Physics and Mathematics), PhD (Economics), Chief Researcher, Sevastopol State University, 299053, Sevastopol, Republic of Crimea; Chief Researcher, Baltic State Technical University "VOENMEH" named after D.F. Ustinov, Saint Petersburg, 190005, Russian Federation, Sci 55969578400, https://orcid.org/0000-0003-0099-9953, pavelbulat@mail.ru

Anton A. Kurnukhin — Junior Reseacher, Sevastopol State University, 299053, Sevastopol, Republic of Crimea; Junior Reseacher, Baltic State Technical University "VOENMEH" named after D.F. Ustinov, Saint Petersburg, 190005, Russian Federation, S 57223276960, https://orcid.org/0000-0003-4851-6594, anton.kurnukhin@outlook.com

Nikolay V. Prodan — PhD (Technology), Senior Researcher, Sevastopol State University, 299053, Sevastopol, Republic of Crimea; Senior Reseacher, Baltic State Technical University "VOENMEH" named after D.F. Ustinov, Saint Petersburg, 190005, Russian Federation, 56177927100, https://orcid.org/0000-0002-6383-039X, kolinti@mail.ru

Received 06.06.2022 Approved after reviewing 14.07.2022 Accepted 18.09.2022



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial»

I/İTMO

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ сентябрь–октябрь 2022 Том 22 № 5 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS September–October 2022 Vol. 22 No 5 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

университет итмо

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-1016-1024 УДК 629.7.036.5

Численная методика расчета тяги сопла широкодиапазонного ракетного двигателя Алёна Андреевна Киршина^{1⊠}, Артём Алексеевич Левихин², Антон Юрьевич Киршин³

^{1,2,3} Балтийский государственный технический университет «ВОЕНМЕХ» им. Д.Ф. Устинова, Санкт-Петербург, 190005, Российская Федерация

¹ kirshina aa@voenmeh.ru^{\overline}, https://orcid.org/0000-0001-7564-6672

² levikhin aa@voenmeh.ru, https://orcid.org/0000-0001-8231-2179

³ kirshin aiu@voenmeh.ru, https://orcid.org/0000-0001-8917-8195

Аннотация

Предмет исследования. Разработана численная методика расчета тяги сопла широкодиапазонного ракетного двигателя. Данный тип двигателя оснащен кольцевым соплом с плоским центральным телом и предназначен для работы в верхних слоях атмосферы и в вакууме. Сопло формирует струю, сходящуюся к оси симметрии, за счет которой образуется более компактный факел рабочего тела. Сопла подобного типа имеют важные конструктивные преимущества, по сравнению с обычными соплами внешнего расширения. Они компактнее и проще с точки зрения охлаждения, но имеют повышенные потери в донной области из-за наличия плоского днища у центрального тела. Следовательно, конструкция подобных двигателей нуждается в параметрической оптимизации. В настоящее время для двигателей, оснащенных кольцевым соплом с плоским центральным телом, отсутствуют валидизированные методики, которые бы позволяли производить параметрическую оптимизацию. Характеристики струи, потери удельного импульса и величина тяги у данного типа сопла зависят от трех основных параметров: площади донной области центрального тела, площади критического сечения и угла разворота внутренней кромки сопла к оси симметрии. Течение газа в донной области сопровождается сложными ударно-волновыми процессами, требующими большого времени для численных расчетов. Для оптимизации конструкции сопла необходима простая инженерная методика расчета тяги сопла по основным его параметрам. Метод. Расчет тяги сопла построен на основании интегрального распределения сил давления по его поверхности, полученного путем выполнения численных расчетов в широком диапазоне внешнего давления. Решены осредненные по Рейнольдсу уравнения Навье-Стокса, замкнутые SST-модификацией k-ю модели турбулентности. На основании результатов численного моделирования определены расчетные коэффициенты для одномерных инженерных зависимостей, позволяющих вычислить скорость и давление в произвольном сечении камеры сгорания и сопла двигателя. Основные результаты. Разработана простая инженерная методика расчета тяги сопла камеры широкодиапазонного ракетного двигателя. Методика верифицирована путем сравнения с результатами численного эксперимента. Практическая значимость. Решена проблема параметрической оптимизации камеры сгорания ракетного двигателя, способной работать в широком диапазоне высот, что представляет интерес для космической отрасли. Разработанная методика расчета позволяет провести в широком диапазоне анализ влияния соотношения геометрических размеров, режимных параметров на тягу камеры сгорания и сопла широкодиапазонного ракетного двигателя, оценить величину тяги на различных высотах работы двигателя.

Ключевые слова

широкодиапазонный ракетный двигатель, тяга, сопло, численное моделирование

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в ходе реализации проекта «Создание опережающего научно-технического задела в области разработки передовых технологий малых газотурбинных, ракетных и комбинированных двигателей сверхлегких ракет-носителей, малых космических аппаратов и беспилотных воздушных судов, обеспечивающих

[©] Киршина А.А., Левихин А.А., Киршин А.Ю., 2022

приоритетные позиции российских компаний на формируемых глобальных рынках будущего», № FZWF-2020-0015.

Ссылка для цитирования: Киршина А.А., Левихин А.А., Киршин А.Ю. Численная методика расчета тяги сопла широкодиапазонного ракетного двигателя // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 1016–1024. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-1016-1024

Numerical method for calculating the nozzle thrust of a wide-range rocket engine Alyona A. Kirshina¹, Artyom A. Levikhin², Anton Yu. Kirshin³

1,2,3 Baltic State Technical University "VOENMEH", Saint Petersburg, 190005, Russian Federation

¹ kirshina aa@voenmeh.ru^{\boxdot}, https://orcid.org/0000-0001-7564-6672

² levikhin aa@voenmeh.ru, https://orcid.org/0000-0001-8231-2179

³ kirshin_aiu@voenmeh.ru, https://orcid.org/0000-0001-8917-8195

Abstract

A numerical method for calculating the thrust of a wide-range rocket engine nozzle has been developed. This type of engine is equipped with an annular nozzle with a flat central body and is designed to operate in the upper atmosphere and in vacuum. The nozzle forms a jet converging to the axis of symmetry due to which a more compact torch of the working fluid is formed. Nozzles of this type have important design advantages over conventional external expansion nozzles. They are more compact, simpler in terms of cooling, but they have increased losses in the bottom region due to the presence of a flat bottom near the central body. Therefore, the design of such engines needs parametric optimization. Currently, for engines equipped with an annular nozzle with a flat central body, there are no validated methods that would allow parametric optimization. The characteristics of the jet, the loss of specific impulse, and the magnitude of thrust for a given type of nozzle depend on three main parameters: the area of the bottom region of the central body, the area of the throat section, and the angle of rotation of the inner edge of the nozzle to the axis of symmetry. The gas flow in the bottom region is accompanied by complex shock-wave processes that require a lot of time for numerical calculations. To optimize the design of the nozzle, it is required a simple engineering method to calculate the thrust of the nozzle according to its main parameters. The calculation of the nozzle thrust is based on the integral distribution of pressure forces over its surface obtained by performing numerical calculations in a wide range of external pressure. The Reynolds-averaged Navier-Stokes equations closed by the SST-modification of the k- ω turbulence model are solved. Based on the results of numerical simulation, the calculated coefficients for one-dimensional engineering dependencies are determined; they make it possible to calculate the speed and pressure in a random section of the combustion chamber and engine nozzle. A simple engineering method for calculating the thrust of the chamber nozzle of a wide-range rocket engine has been developed. The technique is verified by comparison with the results of a numerical experiment. The problem of parametric optimization of the rocket engine combustion chamber, capable to operate in a wide range of altitudes, was solved, and it is of interest to the space industry. The developed method of calculation makes it possible to carry out a wide range analysis of the influence of the ratio of geometric dimensions, regime parameters on the thrust of the combustion chamber and nozzles of a wide-range rocket engine, and to estimate the thrust value at different engine operating heights.

Keywords

wide-range rocket engine, thrust, nozzle, numerical simulation

Acknowledgements

This work was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation during the implementation of the project "Creating a leading scientific and technical reserve in the development of advanced technologies for small gas turbine, rocket and combined engines of ultra-light launch vehicles, small spacecraft and unmanned aerial vehicles that provide priority positions for Russian companies in emerging global markets of the future", No. FZWF-2020-0015.

For citation: Kirshina A.A., Levikhin A.A., Kirshin A.Yu. Numerical method for calculating the nozzle thrust of a wide-range rocket engine. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 1016–1024 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-1016-1024

Введение

Совершенствование реактивных двигателей неразрывно связано с поиском путей более эффективного преобразования химической энергии топлива в кинетическую энергию струи, в том числе за счет вовлечения запасов массы и энергии из окружающей среды, а также обеспечения расчетного режима работы сопла в широком диапазоне высот. Один из способов совершенствования ракетных двигателей — применение перспективных схем сопел, таких как сопло с внешним расширением (штыревое, aerospike) [1], с внешним расширением и управляемой подачей/отбором продуктов сгорания в донную область (штыревое аэродинамическое), тарельчатые, щелевые сопла и другие [2].

Сопла с внешним расширением обладают свойством саморегулирования за счет наличия свободной внешней границы. Это позволяет исключить работу двигателя на режиме перерасширения рабочего тела при полете космической ракеты-носителя в нижних слоях атмосферы, особенно это актуально для перспективных одноступенчатых средств выведения [3]. Часто используют многокамерную схему, когда множество малоразмерных камер сгорания расположены по периметру профилированного центрального тела. Такая компоновка упрощает решение задачи управления вектором тяги путем небольшого дросселирования отдельных камер сгорания [4]. Несмотря на известные достоинства сопел типа aerospike они не нашли широкого применения. Центральное тело полной длины имеет проблемы с охлаждением и весит больше, чем обычное сопло Лаваля, поэтому часто его стремятся укоротить. В результате образуется донная область за плоским срезом, в которой могут протекать сложные газодинамические процессы, сопровождающиеся низкочастотными колебаниями [5, 6]. Методики численного моделирования подобных отрывных течений очень требовательны к машинным ресурсам [7] и требуют тщательной настройки моделей турбулентности [8].

Поскольку сопло типа aerospike наряду с достоинствами имеет и очевидные недостатки, существует потребность в оптимизации их конструкции в каждом отдельном случае. Применение для этого методик вычислительного эксперимента чрезвычайно трудоемко и требует выполнения большого количества вычислений [9]. Как следствие, имеется потребность в разработке простых инженерных методик, которые бы обеспечивали качественно верное предсказание тяги и удельного импульса сопел типа aerospike при изменении внутренних и внешних параметров.

Задача настоящей работы — исследование кольцевого сопла с плоским центральным телом, которое напоминает по схеме известное сопло Тарасова-Левина с резонаторным усилителем тяги [10], но отличается принципом работы¹. Вместо профилированного центрального тела сопло имеет плоский срез, а настройка режимов течения и оптимальных параметров осуществляется варьированием трех параметров: площади кольцевого критического сечения, площади донной области центрального тела и угла разворота внутренней кромки сопла к оси симметрии. По сравнению с соплом aerospike, имеющим центральное тело полной длины, кольцевое сопло с плоским центральным телом имеет повышенные потери полного давления в струе за счет образования отрывного циркуляционного течения в донной области. Этот недостаток компенсируется важными конструктивными преимуществами. Такое сопло компактнее, легче, чем aerospike, не имеет проблем с охлаждением, формирует компактную струю, за счет того, что на его кромках поток развернут к оси. В результате понятно, что оптимизация геометрии кольцевого сопла с плоским центральным телом даже более важна, чем для aerospike. Цель работы — разработка простой инженерной методики, которая позволит вычислять значения скорости и давления в любом сечении двигателя и сопла по одномерным зависимостям.

Определение основных размеров профиля камеры широкодиапазонного ракетного двигателя

Введем следующие обозначения: *k* — камера сгорания; *kk* — начальное сечение сужающейся части внешней обечайки; *vx* — входное сечение; * — критическое сечение; min — минимальное сечение; *out* — докритическая часть внешнего контура сопла; *a* — выходное сечение; *in_ct1* — входное сечение центрального тела; *in_ct2* — начальное сечение участка с постоянной площадью кольцевого зазора, образованного внешней обечайкой и центральным телом; *ct* — центральное тело.

Все размерные физические величины представлены в системе СИ.

Профиль геометрии камеры широкодиапазонного ракетного двигателя показан на рис. 1.

Для формирования облика камеры широкодиапазонного ракетного двигателя введем допущение о равенстве площадей минимального сечения f_{\min} и критического сечения. Определим минимальное сечение сопла:

$$f_{\min} = \pi D_a h_{*},$$

где D_a — диаметр выходного сечения сопла.

Зазор между внешней обечайкой и центральным телом $F_{yx} - F_{ct}$ (рис. 1) должен соответствовать условию:

$$\frac{F_{vx} - F_{ct}}{f_{\min}} = 1,1$$

Данное условие справедливо при следующих размерных ограничениях:

$$D_{ct} \ge 1, 1D_a, D_{vx} - D_{ct} \ge h_*, D_{vx} \le h_*,$$
(1)

где D_k — диаметр камеры сгорания, который определяется по рекомендациям, представленным в работе [2].

При условии выполнения ограничений (1) введем следующие обозначения (рис. 1, *b*):

$$F_{out1} = F_{vx} - F_{ct}, F_{ct2} = F_a, F_{out2} = F_{ct} - F_a \bowtie F_{ct1} = F_{out2}.$$

Вывод расчетно-аналитических зависимостей тяги камеры широкодиапазонного ракетного двигателя

Вывод формулы тяги широкодиапазонного ракетного двигателя с кольцевым соплом с плоским центральным телом основан на определении тяги — равнодействующих сил, действующих на внутренние и внешние стенки камеры, за исключением сил аэродинамического сопротивления:

$$P = \int_{S} p \cos(\widehat{nx}) dS, \qquad (2)$$

где *р* — давление; *n* — нормаль к поверхности; *x* — ось камеры; *S* — полная (внутренняя и внешняя) поверхность камеры.

Применим формулу (2). Для этого разделим камеру на две составляющие: внешняя обечайка и центральное тело. Для каждой составляющей найдем равнодействующие сил. Для внешней обечайки — равнодействующая сил, приложенных к смесительной головке камеры сгорания, к сужающейся части и выходному сечению

¹ Завершен проект по разработке ШРД по схеме «Тарасов-Левина» с соплом внешнего расширения и резонаторным усилителем тяги [Электронный ресурс]. URL: http://nti-aeronet.ru/ blog/2019/09/06/zavershen-proekt-po-razrabotke-shrd-po-shemetarasova-levina-s-soplom-vneshnego-rasshirenija-i-rezonatornymusilitelem-tjagi/ (дата обращения: 12.07.2022).

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2022, том 22, № 5 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no 5



Рис. 1. Схема определения профиля камеры: основные размеры камеры (*a*); выходное сечение сопла (*b*). *h** — щелевой зазор; *D_i* — диаметр соответствующего сечения; *L_i* — длина соответствующего сечения; *F_i* — площадь соответствующего сечения; *F_{out1}*, *F_{out2}* — площади стенок выходного сечения сопла; *F_{ct1}*, *F_{ct2}* — площади стенок центрального тела

Fig. 1. Chamber profile definition scheme: the main chamber sizes (*a*), exit section of nozzle (*b*) (h^* — slot gap, D_i — the corresponding section diameter, L_i — the corresponding section length, F_i — area of the corresponding section, f_{\min} — minimum section area, F_{out1} , F_{out2} — wall areas of the nozzle outlet section, F_{ct1} , F_{ct2} — wall areas of the central body)

сопла. Для центрального тела рассчитаем равнодействующую сил, действующую на входное и выходное сечения центрального тела. На рис. 2 представлена расчетная схема, на которой показано распределение сил, действующих на стенки камеры.

Вычислим интеграл (2), при этом разделим тягу на составляющие, которые совпадают по направлению с вектором скорости истечения (ось *X*) и принимаются положительными, а в случае несовпадения — отрицательными:

$$-P = -P_1 + P_2 + P_3 + P_4 - P_5,$$

где равнодействующие сил, приложенные к: P_1 — смесительной головке камеры сгорания (сечение k); P_2 — суживающейся части камеры сгорания (kk–vx), P_3 — докритической и критической частям внешнего контура сопла (*out*); P_4 , P_5 — сечениям центрального тела (in_ct1 - in_ct2 , ct).

Составляющие силы тяги на соответствующих участках могут быть представлены зависимостями: — сечение *k*:

$$P_1 = (p_k - p_n)F_k + m_{\Sigma}W_k;$$
(3)





section, p_i — pressure in the corresponding sections)

— сечение kk-vx:

$$P_2 = p_k F_k - p_{vx} F_{vx} + m_{\Sigma} (W_k - W_{vx}) - p_n (F_k - F_{vx}); \quad (4)$$

— сечение *out*:

$$P_3 = (p_{out} - p_n)F_{out} + m_{\Sigma}W_{out};$$
(5)

— сечение in_ct1-in_ct2:

$$P_{4} = p_{in_ct2}F_{in_ct2} - p_{in_ct1}F_{in_ct1} + + m_{\Sigma}(W_{in_ct2} - W_{in_ct1});$$
(6)

— сечение *ct*:

$$P_5 = p_{ct}F_{ct} + m_{\Sigma}W_{ct} + p_nF_a, \tag{7}$$

где F_i — площадь поверхности, на которую действует давление p_i и скорость W_i в соответствующем сечении; m_{Σ} — суммарный массовый расход; F_a — площадь выходного сечения сопла; p_n — давление окружающей среды.

Разделим площади выходного сечения обечайки F_{out} и центрального тела F_{ct} на составляющие F_{out1} , F_{out2} , F_{ct1} , F_{ct2} (рис. 1, b). Разбиение площади F_{ct} на составляющие позволяет произвести оценку влияния внешней среды на величину давления, воздействующего на площадь центрального тела F_{ct1} и на скорость потока в данном сечении.

С учетом разбиения площади на участки уравнения (5), (7) принимают вид:

$$P_{3} = p_{out1}F_{out1} + p_{out2}F_{out2} + + m_{\Sigma}(W_{out1} + W_{out2}) - p_{n}F_{out};$$
(8)

$$P_5 = p_{ct1}F_{ct1} + p_{ct2}F_{ct2} + m_{\Sigma}(W_{ct1} + W_{ct2}) + p_nF_a.$$
 (9)

Значение параметров потока *p*, *W*, действующих на центральное тело и на внешнюю обечайку в *i*-ом

сечении, оценивается через численное моделирование потока.

Численное моделирование потока

Решим двумерную задачу в стационарной осесимметричной постановке в расчетном пакете программ ANSYS Fluent. В рамках математической модели применим осредненные по Рейнольдсу уравнения Навье– Стокса для идеального газа. Система уравнений дополнена SST (Shear Stress Transport — модель переноса сдвиговых напряжений) — модификацией *k*- ω модели турбулентности [3, 4, 7]. Модель турбулентности *k*- ω SST показала хорошую сходимость с результатами экспериментов [4, 11, 12].

Для связи давления и скорости используем алгоритм Coupled. Для аппроксимации по давлению применим уравнения второго порядка. Для аппроксимации по плотности, скорости, турбулентно-кинетической энергии, удельной скорости диссипации и энергии используем схему третьего порядка MUSCL.

Для проведения расчета построим тетраэдрическую неструктурированную сетку. Размеры двумерных ячеек сетки: минимальная сторона — 1,66 · 10⁻⁶ м², максимальная сторона — 1,36 · 10⁻² м². Количество расчетных ячеек — 760 359 и узлов — 383 897. Для повышения качества расчета пограничного слоя сетка сгущается к внутренним стенкам камеры. Высота первого слоя — 1,7 · 10⁻⁶ м, скорость роста — 1,2. Количество слоев — 10. Размер сеточных элементов у стенки обеспечивает у+ ≈1, где у+ это безразмерное расстояние от первого узла сетки до стенки [11].

При расчете используем следующие типы граничных условий: «Symmetry» для боковых стенок сектора; «Wall» без скольжения потока для стенок камеры; «Inlet mass flow» с заданием массового расхода, статического давления, температуры торможения и с интенсивностью турбулентности 5 % для торца камеры сгорания. «Pressure outlet» с заданием полного давления и температуры окружающей среды для торцов выходной области с интенсивностью турбулентности 5 %.

Выполним расчет для экспериментальной точки, при этом: суммарный массовый расход равен 0,268 кг/с, избыточное давление в камере сгорания — 810 600 Па, температура потока — 1086 К [13].

На выходе из расчетной области установим статическое давление и температуру, соответствующую параметрам атмосферы в наземных условиях и на высоте 100 000 м над уровнем моря. Получено изменение параметров от 101 325 Па/288,15 К до 0,0319 Па/196 К¹.

Проведем валидацию численного метода расчета на примере геометрии стендового сопла де Лаваля² [13], при помощи сравнения результатов расчета тяги

¹ ГОСТ 4401–81 Атмосфера стандартная. Параметры. Введен 01.07.82. М.: Изд-во стандартов, 1981. 181 с.

в программной среде с результатами расчета тяги по аналитическим зависимостям [2]:

$$P = P_{\text{pacy}} + F_a(p_a - p_n),$$
$$P_{\text{pacy}} = \dot{m}_{\Sigma} \sqrt{\frac{2n}{(n-1)RT_k \left[1 - (p_a/p_k)^{\frac{n-1}{n}}\right]}}$$

где p_k и p_a — давления в камере сгорания и на срезе сопла; n — показатель процесса; R — газовая постоянная в камере; T_k — температура в камере сгорания.

Расчетный режим работы сопла де Лаваля осуществим при давлении $p_a = p_n = 50\ 000$ Па. Расчет тяги на нерасчетном режиме проведем при значении давления окружающей среды $p_n = 101\ 325\ Па.$

Результат сравнения значений тяги в программной среде и по аналитическим зависимостям (табл. 1) показал сходимость значений. Таким образом, расчет численным моделированием может считаться достоверным и применимым для моделирования процессов в камере широкодиапазонного ракетного двигателя.

Результаты моделирования

В результате численного моделирования камеры широкодиапазонного ракетного двигателя получены эпюры распределения скорости и статического давления. На рис. 3 показано качественное распределение искомых параметров на расчетном режиме работы сопла.

Численное распределение искомых параметров построим графически, как распределение относительных параметров скорости \overline{W} и давления \overline{p} по координатам профиля развертки центрального тела и внешней обечайки \overline{X} :

$$\overline{W} = W_i / W_*,$$

$$\overline{p} = p_i / p_k,$$

$$\overline{X} = X_i / X_{\text{max}},$$

где W_i и p_i — значения скорости и давления в *i*-ом сечении; X_{\max} — длина профиля; p_k — давление в камере сгорания; W_* — критическое значение скорости, которое вычислим по формуле:

$$W_* = \sqrt{\frac{2n}{n+1}RT},\tag{9}$$

где *п* — показатель процесса; *R* — газовая постоянная в камере; *T* — температура в камере сгорания.

Полученное распределение показано на рис. 4.

Таблица 1. Сравнение тяги сопла де Лаваля *Table 1*. De Laval nozzle thrust comparison

	Значение тяги, Н		
Условие истечения, Па	Результат численного эксперимента	Результат расчета по аналитическим зависимостям	
$p_n = 101 \ 325$	268	267	
$p_n = p_a = 50\ 000$	307	306	

² Завершен проект по разработке ШРД по схеме «Тарасова-Левина» с соплом внешнего расширения и резонаторным усилителем тяги [Электронный ресурс]. URL: http:// nti-aeronet.ru/blog/2019/09/06/zavershen-proekt-po-razrabotkeshrd-po-sheme-tarasova-levina-s-soplom-vneshnego-rasshirenijai-rezonatornym-usilitelem-tjagi/ (дата обращения: 12.07.2022).



Рис. 3. Распределение скорости течения (*a*) и статического давления рабочего тела (*b*) по соплу (давление окружающей среды $p_n = 50\ 000\ \Pi a$)

Fig. 3. Distribution of the flow velocity (*a*) and the static pressure of the fuel component (*b*) through the nozzle (environment pressure $p_n = 50\ 000\ Pa$)

Внедрение результатов моделирования в методику расчета

Полученное распределение относительных параметров легло в основу определения скорости и давления: $p_{out1}, p_{out2}, W_{out1}, W_{out2}, p_{ct1}, p_{ct2}, W_{ct1}, W_{ct2}$ для сечений, представленных в уравнениях (3)–(9). Значения определяются методом численного интегрирования искомых параметров по сечению.

Для удобства расчетов искомые параметры представлены через давление в камере сгорания и критическую скорость. Связь между искомыми параметрами и давлением в камере сгорания получим через коэффициенты, значения которых определим на основании распределения значений относительных параметров давления и скорости, в соответствии с рис. 4.

$$W_{out1} = ccW_*, \tag{11}$$

$$W_{out2} = cW_*,\tag{12}$$

$$W_{ct1} = ggW_*, \tag{13}$$

$$W_{ct2} = gW_*, \tag{14}$$

$$p_{ct1} = ffp_k, \tag{15}$$

$$p_{ct2} = fp_k, \tag{16}$$

$$p_{out1} = bbp_k, \tag{17}$$

$$p_{out2} = bp_k. \tag{18}$$

Изменение значений коэффициентов (11)–(18) в зависимости от давления внешней среды в логарифмических координатах $lg(p_n)$ представлено на рис. 5. Отметим, что влияние на тягу оказывают параметры давления и скорости, соответствующие центральному телу, площади F_{ct2} , в диапазоне давления среды от 101 325 Па до 5000 Па.

Расчетные коэффициенты проверим на принадлежность к газодинамическим функциям. Определим приведенную скорость для случайной координаты \overline{X}



Рис. 4. Распределение значений относительных параметров давления \overline{p} , скорости \overline{W} от координаты \overline{X} : центральное тело (*a*), внешняя обечайка (*b*).

А* — критическое сечение сопла

Fig. 4. Distribution of values of pressure \overline{p} relative parameters, velocity \overline{W} vs. coordinate \overline{X} : (a) central body, (b) outer shell

дозвуковой зоны, закритической области и в критическом сечении:

$$\lambda_i = W_i / W_*.$$

По приведенной скорости λ выполнен расчет функций приведенного давления $\pi(\lambda_i)$ и произведено сравнение их значений с расчетными коэффициентами: *ff*, *f*, *bb*, *b* из формул (15)–(18).

$$\pi(\lambda_i) = \frac{p_i}{p_k} = \left[1 - \frac{n-1}{n+1} \cdot \lambda_i^2\right]^{\frac{n}{n-1}},$$

где *W*^{*} определена по формуле (10).

В результате проверки расчетных коэффициентов на принадлежность к газодинамическим функциям установлено, что они являются газодинамическими функциями для докритической и критической областей сопла. В закритической области (площадь F_{ct2}) расчетные коэффициенты газодинамическими функциями не являются: значения давлений, полученные по расчетным коэффициентам и газодинамическим функциям, не совпадают. Данное утверждение может быть обоснова-

но формированием донной зоны, исследования которой представлены в [14].

Верификация расчетно-аналитической методики

Верификация расчетно-аналитической методики проведена сравнением расчетных значений тяги со значениями, вычисленными в программной среде.

Численный расчет тяги сопла в программном комплексе ANSYS FLUENT осуществлен методом численного интегрирования давления, распределенного по стенкам сопла (за исключением сил аэродинамического сопротивления). Полученное значение суммировано со значением давления, действующего на торец камеры сгорания.

Аналитический расчет тяги осуществлен по формулам (3), (4), (6), (8), (9), значения параметров давления и скорости площади F_{out} сечения *out* определены по формулам (11), (12), (17), (18), для площади F_{ct1} сечения *ct* — по формулам (13), (15), для площади F_{ct2} сечения *ct* — по формулам (14), (16).

Условия течения, Па		Значение тяги, Н		
P_k	p_n	Результат численного эксперимента	Результат расчета по аналитическим зависимостям	
810 600	101 325	267	262	
	50 000	280	280	
	5000	308	307	
	1000	311	310	
	0,0319	312	311	

Таблица 2. Сравнение тяги *Table 2*. Nozzle thrust comparison



Рис. 5. Изменение коэффициентов давления и скорости от внешнего давления $lg(p_n)$

Fig. 5. Change in pressure and velocity coefficients vs. external pressure $lg(p_n)$

Сравнение значений тяги камеры, определенных численным моделированием и по предложенным аналитическим зависимостям представлено в табл. 2.

Литература

- 1. Ваулин С.Д., Хажиахметов К.И. Жидкостные ракетные двигатели с центральным телом: состояние и перспективы // Известия высших учебных заведений. Машиностроение. 2021. № 10. С. 74–83. https://doi.org/10.18698/0536-1044-2021-10-74-83
- Добровольский М.В. Жидкостные ракетные двигатели. Основы проектирования: учебник / под ред. Д.А. Ягодникова. 4-е изд. М.: МГТУ им. Баумана, 2020. 472 с.
- Кольцова Т.А. Численное моделирование течения в донной области многоразовой одноступенчатой ракеты-носителя в полете с учетом работающего двигателя внешнего расширения с центральным телом // Известия Тульского государственного университета. Технические науки. 2019. № 5. С. 392–398.
- Hakim K., Toufik H., Mouloudj Y. Study and simulation of the thrust vectoring in supersonic nozzles // Journal of Advanced Research in Fluid Mechanics and Thermal Sciences. 2022. V. 93. N 1. P. 13–24. https://doi.org/10.37934/arfmts.93.1.1324

Отмечена сходимость результатов тяги в диапазоне давлений внешней среды от 50 000 Па до 0,0319 Па. В условиях работы сопла при высоких противодавлениях среды сходимость значений составляет 3 %.

Заключение

Предложена простая инженерная методика, позволяющая вычислять по одномерным зависимостям давление и скорость в широкодиапазонном ракетном двигателе с кольцевым соплом с плоским центральным телом, которое предназначено для работы в верхних слоях атмосферы в широком диапазоне изменения внешнего давления. Методика содержит ряд эмпирических коэффициентов, которые получены в ходе вычислительного эксперимента. Сравнение с тестовыми расчетами, выполненными численным метолом, показало, что разработанная инженерная методика позволяет получить результаты с погрешностью, не превышающей 3 %. Во внутреннем тракте двигателя методика выдает данные, близкие к результатам, полученным по газодинамическим функциям для изоэнтропического течения. В донной области из-за больших потерь полного давления отличие существенное. Для сопла с плоским центральным телом особое значение имеет возможность оптимизации его параметров для компенсации потерь в донной области. Наличие простых алгебраических зависимостей, предоставляемых разработанной инженерной методикой, позволяют включать их в эффективные оптимизационные алгоритмы.

References

- Vaulin S.D., Khazhiakhmetov K.I. The state-of-the-art and prospects of aerospike engines. *Proceedings of Higher Educational Institutions*. *Machine Building*, 2021, no. 10, pp. 74–83. (in Russian). https://doi. org/10.18698/0536-1044-2021-10-74-83
- 2. Dobrovolskii M.V. *Liquid Rocket Engines*. Ed. by D.A. Iagodnikov. Moscow, BMSTU, 2020, 472 c. (in Russian)
- Koltsova T.A. Numerical simulation of flowin the bottom of a reusable one-stage launch vehicle in flight with a running externally expanded cruise engine with a central body and gas intaken in the bottom. *Izvestiya Tula State University*, 2019, no. 5, pp. 392–398. (in Russian)
- Hakim K., Toufik H., Mouloudj Y. Study and simulation of the thrust vectoring in supersonic nozzles. *Journal of Advanced Research in Fluid Mechanics and Thermal Sciences*, 2022, vol. 93, no. 1, pp. 13– 24. https://doi.org/10.37934/arfmts.93.1.1324
- Bulat P.V., Zasukhin O.N., Upyrev V.V., Silnikov M.V., Chernyshov M.V. Base pressure oscillations and safety of load

- Bulat P.V., Zasukhin O.N., Upyrev V.V., Silnikov M.V., Chernyshov M.V. Base pressure oscillations and safety of load launching into orbit // Acta Astronautica. 2017. V. 135. P. 150–160. https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2016.11.042
- Bulat P., Komar K., Prodan N., Volkov K. Oscillatory and transient flow modes in block nozzle arrangements with a base region // Acta Astronautica. 2022. V. 194. P. 532–543. https://doi.org/10.1016/j. actaastro.2021.11.022
- Sreerag V.N., Mohammad F., Nandan V., Pramod A., Subhajayan K.P., Jash S. Parametric study on a method to control flow separation in rocket nozzles // Materials Today: Proceedings. 2021. V. 46. N 19. P. 9950–9955. https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.03.291
- Nair P.P., Suryan A., Kim H.D. Computational study on flow through truncated conical plug nozzle with base bleed // Propulsion and Power Research. 2019. V. 8. N 2. P. 108–120. https://doi.org/10.1016/j. jppr.2019.02.001
- Balaji G., Navin Kumar B., Vijayarangam J., Vasudevan A., Pandiyarajan R. Numerical investigation of expansion Fan optimization of truncated annular aerospike nozzle // Materials Today: Proceedings. 2021. V. 46. N 9. P. 4283–4288. https://doi. org/10.1016/j.matpr.2021.03.124
- Богданов В.И., Ханталин Д.С. Выходные устройства с резонаторами-усилителями тяги для реактивных двигателей // Инженерно-физический журнал. 2022. Т. 95. № 2. С. 448–458.
- Chaudhuri A., Hadjadj A. Numerical investigations of transient nozzle flow separation // Aerospace Science and Technology. 2016. V. 53. P. 10–21. https://doi.org/10.1016/j.ast.2016.03.006
- Menter F.R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications // AIAA Journal. 1994. V. 32. N 8. P. 1598– 1605. https://doi.org/10.2514/3.12149
- 13. Киршина А.А., Галаджун А.А., Кравченко Д.Г. Расчётноэкспериментальное определение параметров стендовой трёхкомпонентной камеры жидкостного ракетного двигателя // Молодёжь и будущее авиации и космонавтики: аннотации конкурсных работ 11-го Всероссийского межотраслевого молодёжного конкурса научно-технических работ и проектов. М.: МАИ, 2019. С. 83–84.
- 14. Донное давление: сборник научных статей Международного научного подразделения Университета ИТМО «Механики и энергетических систем» / ЦТТ «КУЛОН»; БГТУ «ВОЕНМЕХ»; Университет ИТМО; под редакцией П.П. Булата. Краснодар: Издательский дом — ЮГ, 2016. 196 с.

Авторы

Киршина Алёна Андреевна — аспирант, старший преподаватель, Балтийский государственный технический университет «BOEHMEX» им. Д.Ф. Устинова, Санкт-Петербург, 190005, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0001-7564-6672, kirshina_aa@voenmeh.ru Левихин Артём Алексеевич — кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедрой, Балтийский государственный технический университет «BOEHMEX» им. Д.Ф. Устинова, Санкт-Петербург, 190005, Российская Федерация, © 7205366327, https://orcid.org/0000-0001-8231-2179, levikhin_aa@voenmeh.ru

Киршин Антон Юрьевич — преподаватель, Балтийский государственный технический университет «ВОЕНМЕХ» им. Д.Ф. Устинова, Санкт-Петербург, 190005, Российская Федерация, https://orcid. org/0000-0001-8917-8195, kirshin_aiu@voenmeh.ru

Статья поступила в редакцию 07.07.2022 Одобрена после рецензирования 02.08.2022 Принята к печати 23.09.2022



launching into orbit. Acta Astronautica, 2017, vol. 135, pp. 150-160. https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2016.11.042

- Bulat P., Komar K., Prodan N., Volkov K. Oscillatory and transient flow modes in block nozzle arrangements with a base region. *Acta Astronautica*, 2022, vol. 194, pp. 532–543. https://doi.org/10.1016/j. actaastro.2021.11.022
- Sreerag V.N., Mohammad F., Nandan V., Pramod A., Subhajayan K.P., Jash S. Parametric study on a method to control flow separation in rocket nozzles. *Materials Today: Proceedings*, 2021, vol. 46, no. 19, pp. 9950–9955. https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.03.291
- Nair P.P., Suryan A., Kim H.D. Computational study on flow through truncated conical plug nozzle with base bleed. *Propulsion and Power Research*, 2019, vol. 8, no. 2, pp. 108–120. https://doi.org/10.1016/j. jppr.2019.02.001
- Balaji G., Navin Kumar B., Vijayarangam J., Vasudevan A., Pandiyarajan R. Numerical investigation of expansion Fan optimization of truncated annular aerospike nozzle. *Materials Today: Proceedings*, 2021, vol. 46, no. 9, pp. 4283–4288. https://doi. org/10.1016/j.matpr.2021.03.124
- Bogdanov V.I., Khantalin D.S Exit devices with resonators-thrust amplifiers for jet engines. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 2022, vol. 95, no. 2, pp. 441–451. https://doi. org/10.1007/s10891-022-02498-8
- Chaudhuri A., Hadjadj A. Numerical investigations of transient nozzle flow separation. *Aerospace Science and Technology*, 2016, vol. 53, pp. 10–21. https://doi.org/10.1016/j.ast.2016.03.006
- Menter F.R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. *AIAA Journal*, 1994, vol. 32, no. 8, pp. 1598–1605. https://doi.org/10.2514/3.12149
- 13. Kirshina A.A., Galadzhun A.A., Kravchenko D.G. Calculation and experimental determination of the bench three-component chamber parameters of a liquid rocket engine. Youth and the future of aviation and astronautics: abstracts of competitive works of the 11th All-Russian Intersectoral Youth Competition of Scientific and Technical Works and Projects. Moscow, MAI, 2019, pp. 83–84. (in Russian)
- Ground pressure: collection of scientific articles of the International scientific division of ITMO University «Mechanics and power systems». Center of a transfer of technologies «KULON»; BGTU «MILITARY MECHANICAL INSTITUTE»; ITMO University; under P.V. Bulat's edition. Krasnodar, Publishing house – South, 2016, 196 p. (in Russia)

Authors

Alyona A. Kirshina — PhD Student, Senior Lecturer, Baltic State Technical University "VOENMEH" named after D.F. Ustinov, Saint Petersburg, 190005, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0001-7564-6672, kirshina_aa@voenmeh.ru

Artyom A. Levikhin — PhD, Head of Department, Baltic State Technical University "VOENMEH" named after D.F. Ustinov, Saint Petersburg, 190005, Russian Federation, <u>57</u> 7205366327, https://orcid.org/0000-0001-8231-2179, levikhin_aa@voenmeh.ru

Anton Yu. Kirshin — Lecturer, Baltic State Technical University "VOENMEH" named after D.F. Ustinov, Saint Petersburg, 190005, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0001-8917-8195, kirshin_aiu@ voenmeh.ru

Received 07.07.2022 Approved after reviewing 02.08.2022 Accepted 23.09.2022

Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial»

ТРЕБОВАНИЯ К ОФОРМЛЕНИЮ СТАТЕЙ

Журнал публикует научные обзоры, полнотекстовые статьи и краткие сообщения.

Полнотекстовая статья должна иметь четкую структуру, включающую в себя аннотацию, ключевые слова, введение, несколько содержательных разделов и заключение.

В аннотации, рассчитанной на самый широкий круг читателей, необходимо в объеме 200–400 слов в форме краткого реферата (Abstract) изложить научное содержание статьи: предмет, цель работы, метод или методология проведения работы, краткое описание эксперимента, полученные результаты, рекомендации по их применению.

Ключевые слова должны отражать информацию, представленную в статье. Основное ключевое слово указывается первым.

Во введении необходимо представить содержательную постановку рассматриваемого вопроса, провести краткий анализ известных из научной литературы решений (со ссылками на источники), дать критику их недостатков, показать научную новизну и преимущество (особенности) предлагаемого подхода.

В основном тексте статьи должна быть представлена строгая постановка решаемой задачи, изложены и обстоятельно разъяснены (доказаны) полученные утверждения и выводы, приведены результаты экспериментальных исследований или математического моделирования, иллюстрирующие сделанные утверждения. Основной текст статьи должен быть разбит на содержательные разделы (2–3 раздела).

В заключении необходимо кратко сформулировать основные результаты, прокомментировать их и, если возможно, указать направления дальнейших исследований и области применения.

Пристатейный список литературы (рекомендуется): для обзорной статьи — не менее 50, для полнотекстовой статьи — не менее 15, для краткого сообщения — не менее 8 литературных источников.

Ссылки на стандарты и иные нормативные документы, а также на неперсонифицированные интернет-ресурсы в список литературы не вносятся, а оформляются в виде сносок.

Объем обзорной статьи предварительно согласовывается с редакцией.

Объем полнотекстовой статьи, включая иллюстрации, таблицы и список литературы, не должен превышать 8 страниц машинописного текста (с рисунками и таблицами), шрифт 12 pt, один интервал.

Объем краткого сообщения — до 3 страниц, шрифт 12 pt, один интервал. Рубрикация текста не требуется. Статьи принимаются в электронном виде (ntvitmo@itmo.ru). В распечатанном виде с подписями авторов материалы представляются в редакцию по запросу редакции после прохождения процедуры рецензирования. Комплект документов должен включать:

текст статьи с заверстанными рисунками и таблицами;

- формы сведений об авторах (на каждого автора); допускается
- указание нескольких мест работы автора;
 файлы с рисунками к статье в оригинальном формате (предпочтительно JPEG) с максимальным разрешением; допускается представление цветных рисунков, если в черно-белом варианте теряется полезная информация;
- лицензионное соглашение;
- согласие на обработку персональных данных.

REQUIREMENTS FOR EXECUTION OF PAPERS

Scientific reviews, full-text and brief papers are published.

A full-text paper should have a well-defined structure, including an abstract, keywords, introduction, several substantive chapters and a conclusion.

An abstract is intended for general public. It is necessary to set forth the scientific content of the paper limited by 200–400 words in the form of a brief abstract: the subject, the work objective, the method or methodology of work, a brief description of the experiment, obtained results, recommendations for their application.

Keywords should be connected with the information presented in the paper. The main keyword is given first.

The introduction should contain a meaningful statement of the issue in question, a brief analysis of the solutions known from scientific literature (with references to sources), a criticism of their shortcomings, scientific novelty and advantages (features) of the proposed approach.

The main body of the paper should represent exact statement of the problem being solved, obtained assertions and conclusions are to be set forth and explained in detail (proved), the results of experimental studies or mathematical modeling should be given to illustrate the statements made. The main text of the paper needs to be split up into meaningful sections (2–3 sections).

In conclusion it is necessary to summarize the main results, comment on them and, if possible, to indicate the areas of future research and application.

A list of references is recommended: for a review paper — at least 50 items, for full-text paper — not less than 15, for a brief paper — at least 8 references. References to standards and other regulatory documents, as well as to Internet resources, are not included in a reference list and are documented as footnotes.

The length of a review paper is coordinated with the editorial board beforehand.

The length of a full-text paper, including illustrations, tables and references, should not exceed 8 pages of typewritten text (figures and tables included), font 12 pt, single-spaced.

The length of a brief paper is up to 3 pages, font 12 pt, single-spaced.

No rubrication is required.

Papers are accepted in electronic form (ntvitmo@itmo.ru).

Materials are submitted to the editors on request after the procedure of reviewing in a printed form signed by the authors. A set of documents should include:

- The text of the paper with make-up figures and tables;
- The forms with information about the authors (for each author), several employers can be specified by the author;
- Files with pictures to the paper in their original format (preferably JPEG) with the maximum resolution; should useful information is lost in the black and white variant, color drawings are permitted;
- Publishers license agreement;
- · Consent to the processing of personal data.

SCIENTIFIC AND TECHNICAL IOURNAL OF ITMO UNIVERSITY FORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AN 2022, VOLUME 22, NUMBER 5 (SEPTEMBER-OCTOBER) ISSN 2226-1494 (PRINT), 2500-0373 (ONLINE)

PROCEEDINGS OF THE XXXII SCHOOL ON HOLOGRAPHY Part I

Influence of the dimension, geometry, and orientation of nanostructures on the distribution of the electric field in matters of enhancing of Raman scattering Optical properties of planar plasmon active surfaces modified with gold nanostars

Implementation of digital holographic interferometry for pulsed plasma studies Application of bioradiophotonics methods for the processing of bioelectric signals

Polychromic light source for the realization of multispectral processing method of skin malignant lesions images

Automatic recognition of internal structures in translucent objects based on hologram-moire interferometry

Application of neural network and computer vision technologies for image analysis of skin lesion

OPTICAL ENGINEERING

Application of additional high-frequency modulation to reduce influence of residual amplitude modulation LiNbO3 phase modulator on fiber optical gyroscope signal Optimization of the optical scheme of a photodetector module operating in the spectral range of 1.3-1.6 µm

Residue feature analysis with empirical mode decomposition for mining spatial sequential patterns from serial remote sensing images (in English)

AUTOMATIC CONTROL AND ROBOTICS

Adaptive nonlinear motion parameters estimation algorithm for digital twin of multilink mechanism motion trajectory synthesis

MATERIAL SCIENCE AND NANOTECHNOLOGIES

Investigation of spectral-luminescent properties of cesium CsPb(BrCl)₃ quantum dots in fluorophosphate glasses Investigation of optical phenomena in multispectral matrix photodetector based on silicon

The impact of yttrium aluminum garnet stoichiometry deviation on the conversion efficiency of tetravalent chromium ions

Influence of low temperatures and thermal annealing on the optical properties of InGaPAs quantum dots

Pressure control in material extrusion additive manufacturing

COMPUTER SCIENCE

An enforced non-negative matrix factorization based approach towards community detection in dynamic networks (in English)

Visual display system of changes in physiological states for patients with chronic disorders and data transmission via optical wireless communication

Ice reconnaissance data processing under low quality source images (in English) Prediction of fatal outcome in patients with confirm COVID-19

Generation of the weakest preconditions of programs with dynamic memory in symbolic execution

MODELING AND SIMULATION

On the possibility of expanding the studied dynamic ranges in thermal anemometry The beating effect in uniaxial oriented polymer materials Numerical simulation of propulsive aerodynamic profiles

Numerical method for calculating the nozzle thrust of a wide-range rocket engine

Matveeva K.I., Zyubin A.Yu., Kon I.I., Samusev I.G.	818
Zyubin A.Yu., Kon I.I., Kundalevich A.A., Demishkevich E.A., Matveeva K.I., Zozulya A.S., Evtifeev D.O., Poltorabatko D.A., Samusev I.G.	824
Kozhevnikova A.M., Ivankov A.S., Schitz D.V., Alekseenko I.V.	832
Zaichenko K.V., Gurevich B.S., Rogov S.A., Kordyukova A.A., Kuzmin M.S.	839
Zaichenko K.V., Gurevich B.S., Svyatkina V.I.	846
Lyakhov K.A., Grigoriev V.A., Tsiplakova E.G.	854
Milantev S.A., Kordyukova A.A., Shevyakov D.O., Logachev E.P.	859
Vostrikov E.V., Umnova A.V., Aleinik A.S., Pogudin G.K., Stringlay V.F. Maschkovskii I.K.	866
Kovach Y.N., Andryushkin V.V., Kolodeznyi E.S., Novikov I.I., Petrenko A.A., Kamarchuk A.V., Rochas S.S., Bauman D.A.	873
Angelin Preethi R., Anandharaj G.	881
Meshkov A.V., Gromov V.S.	889
Makurin A.A., Kolobkova E.V.	896
Zhbanova V.L., Parvulusov Yu.B.	903
Malyavin F.F., Kravtsov A.A., Tarala V.A., Chikulina I.S., Vakalov D.S., Lapin V.A., Nikova M.S., Khoroshilova S.E., Medvanik E.V., Kuleshov D.S.	912
Andryushkin V.V., Dragunova A.S., Komarov S.D., Nadtochiy A.M., Gladyshev A.G., Babichev A.V., Uvarov A.V., Novikov I.I., Kolodeznyi E.S., Karachinsky L.Ya., Kryzhanovskaya N.V., Nevedomskii V.N., Egorov A.Yu.,	921
Bougrov V.E. Zimenko K.V., Afanasev M.Ya., Kolesnikov M.V.	929
Bashir S., Chachoo M.A.	941
Vostrikova S.A., Pogorelova K.O., Shiryaev D.S., Tkacheva E.V., Belyakov N.A., Kovach Y.N., Andreev Yu.S., Smirnova I.G., Kondratieva E.A.	951
Timofeev A.V., Groznov D.I.	962
Korsakov I.N., Karonova T.L., Konradi A.O., Rubin A.D., Kurapeev D.I., Chernikova A.T., Mikhaylova A.A., Shlvakhto E.V.	970
Misonizhnik A.V., Kostyukov Yu.O., Kostitsyn M.P., Mordvinov D.A., Koznov D.V.	982
Khadunkay VP	007
Golovina V.V., Rymkevich P.P., Rymkevich O.V.	999
····, , ······ · · , , /···············	

Golovina V.V., Rymkevich P.P., Rymkevich O.V.	999
Bulat P.V., Kurnukhin A.A., Prodan N.V.	1007
Kirshina A.A., Levikhin A.A., Kirshin A.Yu,	1016