

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

2024, ТОМ 24, НОМЕР 4 (ИЮЛЬ–АВГУСТ)

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

ОПТИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ И ТЕХНОЛОГИИ

Органо-неорганические светопоглощающие композиты для ближней инфракрасной области спектра

Евстропьев С.К., Волынкин В.М., Булыга Д.В.,
Островский В.А., Макаров К.Н., Дукельский К.В.,
Полищук Г.С. 529

Исследование пьезоэлектрического эффекта и создание модифицированной конструкции фазового модулятора на основе ниобата лития

Шулепова А.В., Шулепов В.А., Стригалева В.Е. 538

ФОТОНИКА И ОПТОИНФОРМАТИКА

Изменение контраста изображения объекта наблюдения при однопиксельной и матричной визуализации через рассеивающую среду

Опарин Е.Н., Лаппо-Данилевская А.К.,
Черных А.В., Цыпкин А.Н. 548

АВТОМАТИЧЕСКОЕ УПРАВЛЕНИЕ И РОБОТОТЕХНИКА

Синтез адаптивного наблюдателя для нелинейных нестационарных систем

Нгуен Х.Т., Власов С.М., Пыркин А.А.,
Калинин К.Ю., Нгуен М.Х., Нгуен В.В., Буй В.Х. 554

НОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ И НАНОТЕХНОЛОГИИ

Автоматизация поиска оптимальных значений параметров процесса олигомеризации этилена

Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф. 563

Электролюминесценция новых координационных соединений ионов европия с β -дикетонами, уксусной и масляной кислотами

Осадченко А.В., Амброзевич С.А., Захарчук И.А.,
Ващенко А.А., Дайбаге Д.С., Рыжов А.В.,
Певцов Д.Н., Певцов Н.В., Селюков А.С. 571

КОМПЬЮТЕРНЫЕ СИСТЕМЫ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Метод формирования мультимедийных файлов для задач лицевой биометрии и ее приложений

Казиева Н.М., Кухарев Г.А., Мауленов К.С. 578

Продвинутое методы внедрения знаний в больших языковых моделях (на англ. яз.)

Кулин Н.И., Муравьев С.Б. 588

Предсказание связей «ген-болезнь» с помощью гетерогенной графовой нейронной сети

Сидоренко Д.А., Шалыто А.А. 594

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Компьютерное моделирование взаимодействия ударной волны со стенкой, экранированной неоднородным слоем газозвеси

Садин Д.В. 602

Моделирование многомерных данных с помощью композитных байесовских сетей

Деева И.Ю., Шахкян К.А., Каминский Ю.К. 608

Метод получения двухкомпонентных композиционных материалов с заданной теплопроводностью

Заричняк Ю.П., Ходунков В.П. 615

Компьютерное моделирование тепломассообменных процессов при конденсации водяных паров из продуктов сгорания природного газа на поверхности гладких цилиндрических труб

Брызгунов П.А., Рогалев А.Н., Киндра В.О.,
Комаров И.И., Злышко О.В. 620

Потеря устойчивости заземленной по контуру прямоугольной нанопластины

Сухотерин М.В., Сосновская А.А. 629

Использование генетических алгоритмов для решения задачи поиска оптимального состава реакционной смеси

Мифтахов Э.Н., Кашиникова А.П., Иванов Д.В. 637

Конфигурируемые модели горения в камере сгорания микротурбинного двигателя с возможностью подключения различных физико-химических процессов

Булат П.В., Вокин Л.О., Волков К.Н.,
Никитенко А.Б., Продан Н.В., Ренев М.Е. 645

Многоуровневое расщепление в методе Монте-Карло для оценки вероятностей редких событий в пермутационных тестах

Сухов В.Д., Короткевич Г.В., Сергушичев А.А. 654

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Метод сегментации мышечной ткани на снимках компьютерной томографии на базе предобработанных трехканальных изображений

Теплякова А.Р., Шершнев Р.В., Старков С.О. 661

Модель адсорбции на эпитаксиальном графене: аналитические результаты

Давыдов С.Ю., Лебедев А.А. 665

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

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

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. — д.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)
Матвеев Ю.Н. — д.т.н. профессор (Россия)
Никоноров Н.В. — д.ф.-м.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: Университет 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
Сайт — К.В. Малькова

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.

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 — D.Sc., 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)
Iuri N. Matveev — D.Sc., Professor (Russia)
Nikolay V. Nikonorov — D.Sc., Professor (Russia)
Grigori 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 — Dr. habil. Sc. (Kazakhstan)
Mayya V. Uspenskaya — D.Sc., Professor (Russia)
Anton N. Tsyppkin — 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".

Transliterated title is "Nauchno-Tekhnicheskii 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
Website — Kseniia V. Malkova

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

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



Подписано к печати 01.08.2024 Тираж 350 экз. Заказ № 100 (152)

Издание Университета ИТМО

Отпечатано в ООО «Университетские телекоммуникации»

Адрес: 199034, Санкт-Петербург, Биржевая линия, д. 16

© Университет ИТМО

ОПТИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ И ТЕХНОЛОГИИ OPTICAL ENGINEERING

doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-529-537

УДК 535.92; 535.34; 535.399

Органо-неорганические светопоглощающие композиты для ближней инфракрасной области спектра

Сергей Константинович Евстропьев¹, Валерий Михайлович Волюнкин²,
Дмитрий Владимирович Булыга³✉, Вячеслав Александрович Островский⁴,
Константин Николаевич Макаров⁵, Константин Владимирович Дукельский⁶,
Григорий Сергеевич Полищук⁷

^{1,2,3,6,7} АО «НПО ГОИ им. С.И. Вавилова», Санкт-Петербург, 192171, Российская Федерация

^{4,5} АО «Государственный научный центр Российской Федерации Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований», Троицк, 108840, Российская Федерация

¹ evstropiev@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0160-8443>

² vvolyunkin@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6325-1507>

³ dmbulyga@yandex.ru ✉, <https://orcid.org/0000-0001-8861-2527>

⁴ ostrovskiy@triniti.ru, <https://orcid.org/0009-0000-9114-2116>

⁵ makarov@triniti.ru, <https://orcid.org/0009-0004-3280-3489>

⁶ kdukel@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1627-7499>

⁷ g.polishchuk@optrotech.ru, <https://orcid.org/0009-0005-9358-6040>

Аннотация

Введение. В работе выполнен синтез и проведено исследование структуры и свойств органо-неорганических оксида меди (CuO) и магнетит (Fe₃O₄)-содержащих эпоксидных композитов, поглощающих излучение в ближней инфракрасной области спектра. **Метод.** Синтез композитов осуществлен введением микропорошков CuO и Fe₃O₄ в жидкую эпоксидную композицию с последующей гомогенизацией смеси и ее полимеризацией. Исследование структуры и свойств органо-неорганических композитов проведено методами оптической микроскопии, инфракрасной спектроскопии, оптической спектроскопии, исследованием микротвердости материалов. **Основные результаты.** По данным, полученным на основании инфракрасных спектров поглощения, введение оксидных частиц снижает степень отверждения эпоксидного полимера на 20–28 %. Fe₃O₄-содержащие композиты демонстрируют относительно низкое (до 4,2 %) отражение света в спектральном диапазоне 1000–1100 нм, что соответствует проведенным оценочным расчетам. При введении микропорошков CuO и Fe₃O₄ в состав эпоксидного полимера его микротвердость может быть увеличена от 120 до 160 МПа. **Обсуждение.** Полученные в работе экспериментальные результаты могут служить основой для разработки органо-неорганических композиционных материалов для лазерной техники, поглощающих излучение в ближней инфракрасной области спектра.

Ключевые слова

поглощение света, композит, эпоксидная смола, микропорошок

Ссылка для цитирования: Евстропьев С.К., Волюнкин В.М., Булыга Д.В., Островский В.А., Макаров К.Н., Дукельский К.В., Полищук Г.С. Органо-неорганические светопоглощающие композиты для ближней инфракрасной области спектра // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2024. Т. 24, № 4. С. 529–537. doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-529-537

Organic-inorganic light-absorbing composites for near infrared part of spectrum

Sergey K. Evstropiev¹, Valery M. Volynkin², Dmitry V. Bulyga³✉, Vyacheslav A. Ostrovskii⁴,
Konstantin N. Makarov⁵, Konstantin V. Dukelskii⁶, Grigoriy S. Polishchuk⁷

^{1,2,3,6,7} JSC “Research and Production Corporation S.I. Vavilova”, Saint Petersburg, 192171, Russian Federation

^{4,5} AO “GNTs RF TRINITI”, Troitsk, 108840, Russian Federation

¹ evstropiev@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0160-8443>

² vvolynkin@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6325-1507>

³ dmbulyga@yandex.ru✉, <https://orcid.org/0000-0001-8861-2527>

⁴ ostrovskiy@triniti.ru, <https://orcid.org/0009-0000-9114-2116>

⁵ makarov@triniti.ru, <https://orcid.org/0009-0004-3280-3489>

⁶ kdukkel@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1627-7499>

⁷ g.polishchuk@optrotech.ru, <https://orcid.org/0009-0005-9358-6040>

Abstract

Synthesis and study on structure and properties of organic-inorganic composites based on epoxy resin, CuO and Fe₃O₄ absorbing light in infrared part of spectrum was performed. The composites synthesis was performed by introduction of CuO and Fe₃O₄ micropowders into liquid epoxy composition with subsequent homogenization of the mixture and polymerization. The study on structure and properties of organic-inorganic composites was performed by methods of optical microscopy, infrared and visible spectroscopy, study on microhardness. According to the IR spectroscopy data, introduction of oxide particles leads to decrease in epoxy polymer degree of calcification. The composites containing Fe₃O₄ show relatively low light reflection until 4.2 % in the spectral range of 1000–1100 nm that corresponds to the theoretical estimation data. Incorporation of CuO and Fe₃O₄ micropowders into the epoxy polymer leads to an increase in microhardness from 120 to 160 MPa. Obtained experimental data can serve as the base for development of IR-absorbing organic-inorganic composites for laser technology.

Keywords

light absorption, composite, epoxy resin, micropowder

For citation: Evstropiev S.K., Volynkin V.M., Bulyga D.V., Ostrovskii V.A., Makarov K.N., Dukelskii K.V., Polishchuk G.S. Organic-inorganic light-absorbing composites for near infrared part of spectrum. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 4, pp. 529–537 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-529-537

Введение

Органо-неорганические композиты на основе органических полимеров используются в различных оптических приложениях [1–7]. Композиции на основе эпоксидных полимеров обладают высокими механическими свойствами [3, 8–11], демонстрируют высокую адгезию к поверхности различных материалов [9, 12] и могут быть модифицированы различными функциональными компонентами [1–5]. Различные органо-неорганические композиции на основе эпоксидных полимеров были использованы в работах [2–5] для создания светопоглощающих оптических материалов.

Известными недостатками органических полимеров, существенно ограничивающими их применение в мощных лазерных системах, являются низкие термостабильность и теплопроводность [6], а также небольшая микротвердость, существенно затрудняющая обработку их поверхности. Для устранения перечисленных недостатков и других функциональных характеристик органических полимерных материалов в их состав вводят различные модифицирующие неорганические компоненты [1–8, 13–15].

Одними из наиболее термостойких и твердых органических полимеров являющиеся материалы на основе эпоксидных смол [16]. Термостойкость и микротвердость эпоксидных полимеров может быть дополнительно повышена при введении в их состав оксидных модификаторов. Так, введение оксида меди (CuO) в состав композитов на основе эпоксидных полимеров используется для улучшения их функциональных ха-

рактеристик [12, 13, 17, 18]. В работе [12] показано, что добавки CuO повышают механическую прочность на сжатие композитов и их термостабильность. В [13] отмечено, что при введении в эпоксидный полимер 5 масс.% CuO температура термического разложения материала увеличивается на 28 °C. Значительное (более чем в три раза) увеличение теплопроводности эпоксидного материала наблюдалось в работе [18] при введении в его состав 25 масс.% CuO. Кроме того, известно, что CuO обладает высоким поглощением в видимом диапазоне электромагнитного спектра [19–21]. Ширина запрещенной зоны этого материала составляет около 1,45 эВ [19, 20]. В [19, 22] исследованы спектральные свойства кристаллов CuO различной дисперсности и показано, что этот оксид может быть использован в качестве поглотителя солнечной энергии [19] или насыщаемого поглотителя в лазерных системах [22].

Другим оксидным светопоглощающим материалом, используемым в оптических приложениях, является магнетит (Fe₃O₄) [3, 23–25]. Спектральные свойства коллоидных растворов Fe₃O₄ в спектральном диапазоне 400–1050 нм исследованы в [23]. В этой работе по экспериментальным данным оптической анизотропии магнитных коллоидов проведено определение комплексного показателя преломления наноразмерного Fe₃O₄ и осуществлено сопоставление полученных результатов с данными известных научных работ. Приведенные в [23] результаты свидетельствуют о существенном разбросе исследованных данных о показателях преломления и поглощения Fe₃O₄.

Цель работы — синтез и исследование спектральных и механических свойств органо-неорганических композитов, обладающих существенным светопоглощением в ближней инфракрасной (ИК) области электромагнитного спектра. В работе использован эпоксидный полимер с различным содержанием добавок микропорошков CuO и Fe_3O_4 .

Материалы и методы

В настоящей работе использована эпоксидная смола марки ЭД-22¹ (Химэкс Лимитед, Россия) как полимерная основа композитов. В качестве отвердителя эпоксидной смолы применен полиоксипропиленамин (Джеффамин Д-230) (альфа-(2-аминометилэтил)-омега-(2-аминометилэтокси) поли[окси-(метил-1,2-этан-диил)] (Huntsman Holland BV, Netherlands). В состав полимерной матрицы введен трибутилфосфат в качестве пластификатора. Выбор этих исходных материалов для синтеза полимерной матрицы обусловлен их высокой чистотой, однородностью и воспроизводимостью свойств получаемого материала. Используемая в работе эпоксидная полимерная композиция включала: ЭД-22 — 72 масс.%; Джеффамин Д-230 — 23 масс.%; трибутилфосфат — 5 масс. %.

Для создания композитов, поглощающих излучение в ближней ИК области спектра, в состав полимерной композиции были введены добавки порошков CuO и Fe_3O_4 . На микрофотографиях порошков (рис. 1) видно, что они состоят из частиц неправильной формы, имеющих размер несколько десятков микрон.

Полученные композиты представляли собой твердые монолитные материалы черного цвета с гладкой, зеркально отражающей свет поверхностью. Данные оптической микроскопии (рис. 1, с) свидетельствуют о наличии на поверхности композитов тонкой пленки эпоксидного полимера.

На первом этапе синтеза выполнено изготовление полимерной композиции путем добавления Джеффамина ДТ-230 и трибутилфосфата к ЭД-22. Полимерные композиции перемешивались вручную в течение 10 мин, затем в них добавлялись порошки оксидов. После тщательного ручного перемешивания в течение 5 мин композиция заливалась в силиконовые формы и выдерживалась при температуре 20 °С в течение трех суток для полного завершения процессов полимеризации. Химический состав синтезированных композитов приведен в табл. 1. Было синтезировано по одному образцу каждого состава.

Выполнено исследование спектров отражения полученных композитов с помощью спектрофотометра Perkin Elmer 900 UV/VIS/NIR (PerkinElmer, inc., США). ИК спектры поглощения композитов определены на фурье-спектрометре Bruker Alpha (Bruker Optik GmbH, Германия).

Измерение микротвердости композитов по Виккерсу осуществлено на микротвердомере ПМТ-3. При

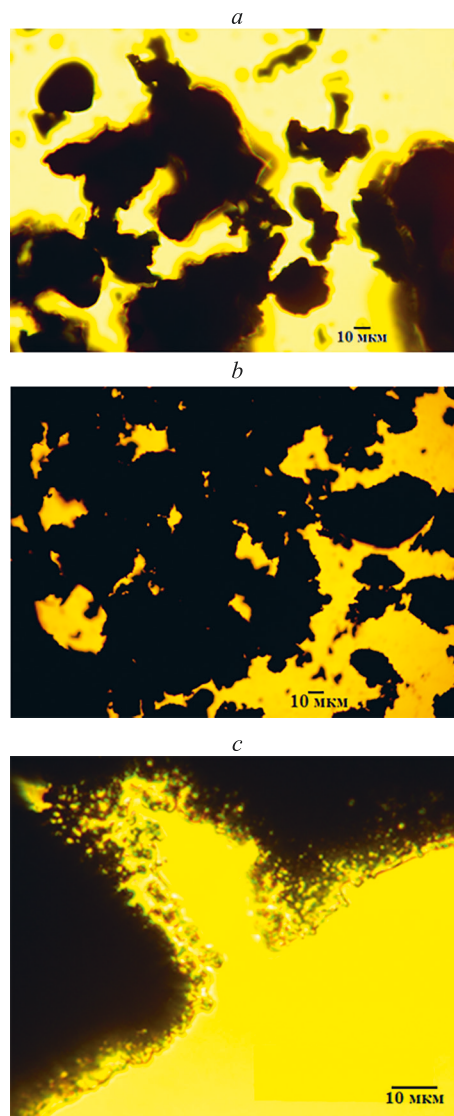


Рис. 1. Микрофотографии порошков CuO (a); Fe_3O_4 (b) и скола Fe_3O_4 -содержащего эпоксидного композита (c)

Fig. 1. CuO (a); Fe_3O_4 (b) and Fe_3O_4 -containing epoxy composite chip (c) micrographs

Таблица 1. Химический состав композитов на основе эпоксидной смолы, содержащих добавки порошков CuO и Fe_3O_4

Table 1. Chemical composition of epoxy-based composites containing CuO and Fe_3O_4 powders additions

Наименование образца	Компоненты, масс. %		
	Эпоксидная полимерная композиция	CuO	Fe_3O_4
CuO -1	96,8	3,2	—
CuO -2	91,7	8,3	—
CuO -3	75,0	25,0	—
CuO -4	55,6	44,4	—
Fe_3O_4 -1	97,7	—	2,3
Fe_3O_4 -2	97,1	—	2,9
Fe_3O_4 -3	93,5	—	6,5
Fe_3O_4 -4	90,0	—	10,0
Fe_3O_4 -5	56,2	—	43,8

¹ ГОСТ 10587-84. Смолы эпоксидно-диановые не отвержденные. Технические условия. Введен 01.01.1989. М.: Издательство стандартов, 1989. 20 с.

измерениях продолжительность приложения нагрузки составила 10 с, а определение размеров отпечатка индентора выполнено сразу после снятия нагрузки. Микротвердость материалов рассчитана по формуле:

$$H_V = 1,854 \cdot P/d^2,$$

где P — нагрузка на индентор; d — длина диагонали остаточного отпечатка индентора.

Результаты и обсуждения

Исследованы спектры ИК поглощения CuO- и Fe₃O₄-содержащих эпоксидных композитов (рис. 2). Спектры были зарегистрированы с использованием модуля нарушенного полного внутреннего отражения, который не позволяет получить абсолютные значения коэффициента поглощения. Полученные значения интенсивности полос зависят от силы прижатия образца к призме, поэтому величина, отложенная по оси Y дана в относительных единицах.

При анализе спектров видно, что наблюдаются многочисленные пики, характерные для эпоксидных полимеров. Данные по идентификации пиков в спектрах ИК поглощения ЭД-22 и композитов на ее основе описаны во многих научных работах [26, 27]. В спектральном диапазоне 2900–3600 см⁻¹ наблюдаются пики, соответствующие колебаниям OH-групп (около 3470 см⁻¹), СН в эпоксидном (оксиановом) цикле (3057 см⁻¹) и СН в алифатических и ароматических углеводородах (2870–2970 см⁻¹) [26, 27]. Также в спектрах наблюдаются характеристические пики деформационных колебаний связей оксианового цикла C–O при 916 см⁻¹, C–O–C при 824 см⁻¹, –C–H при 3057 см⁻¹ [19]. В области 500–1000 см⁻¹ заметны также пики, соответствующие колебаниям СН₂ групп (около 767 см⁻¹) [1] и связи Fe–O в Fe₃O₄ (552 см⁻¹) и Cu–O (521 см⁻¹) в CuO [3, 4, 19].

Общий вид спектров ИК поглощения исследуемых композитов соответствует известным спектрам эпоксидных полимеров [27] и эпоксидных композитов, содержащих добавки Fe₃O₄ [28]. Отметим небольшое

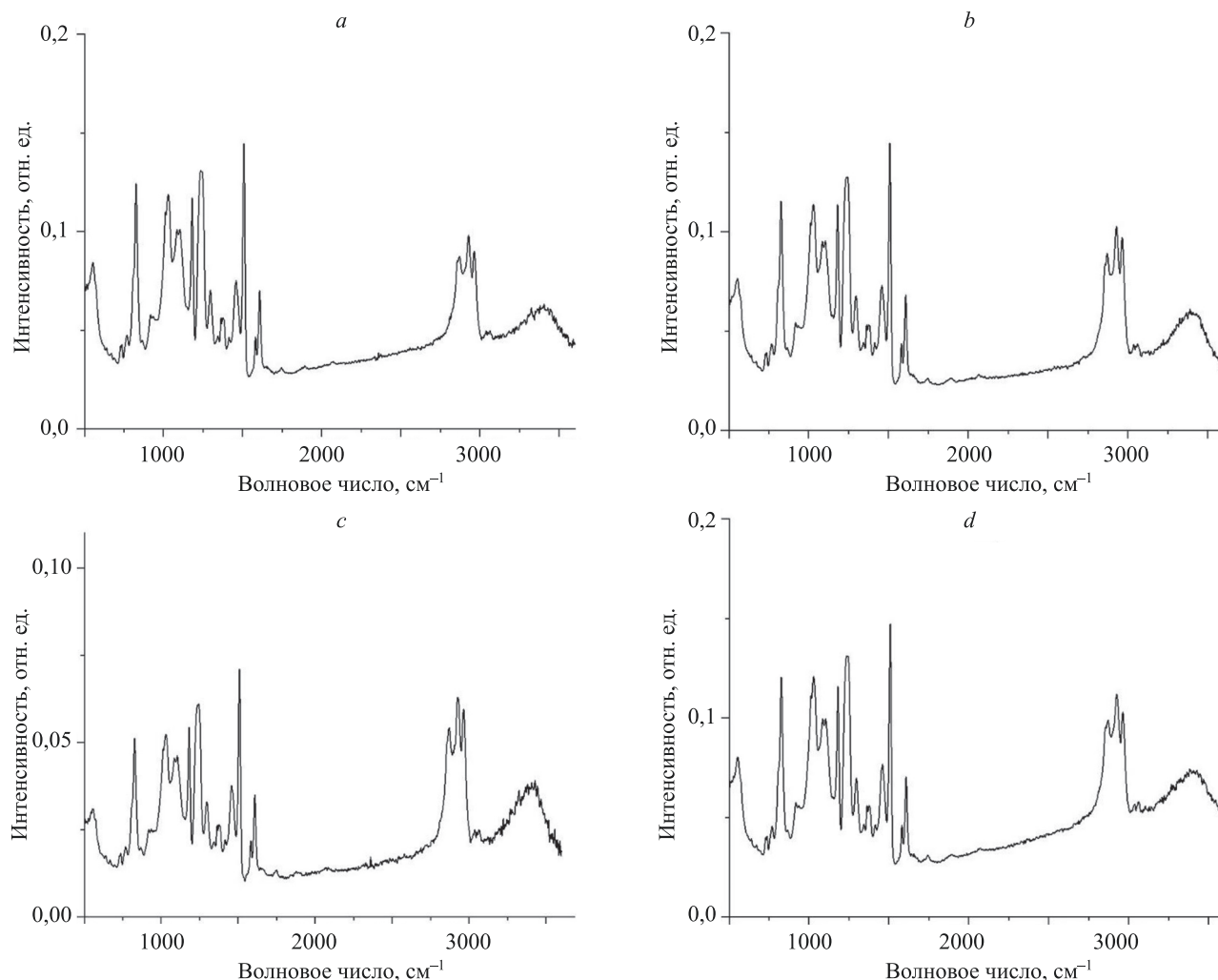


Рис. 2. Спектры инфракрасного поглощения композитов: Fe₃O₄-содержащие эпоксидные композиты, включающие 10 масс.% Fe₃O₄ (а) и 2,3 масс.% Fe₃O₄ (б); CuO-содержащие эпоксидные композиты, имеющих в составе 3,2 масс.% CuO (с) и 25,0 масс.% CuO (д)

Fig. 2. Infrared absorption spectra of composites: Fe₃O₄-containing epoxy composites with 10 mass % of Fe₃O₄ (a) and 2.3 mass % of Fe₃O₄ (b); CuO-containing epoxy composites with 3.2 mass % of CuO (c) and 25 mass % of CuO (d)

отличие в относительной интенсивности отдельных пиков на спектрах поглощения эпоксидного полимера и композитов на его основе. Соотношение пиков, характерных для колебаний различных структурных групп в полимерном материале, может быть использовано для оценки особенностей его строения. Так, соотношение интенсивностей ($K = I_{915}/I_{1362}$) полос поглощения колебаний связи С–О в эпоксидном цикле при 915 см^{-1} (I_{915}) и алифатического фрагмента $-\text{CH}_2-$ при 1362 см^{-1} (I_{1362}) использовалось в работе [27] в качестве оценочного критерия степени отверждения ЭД-22.

В неотвержденной ЭД-22 значение K составило около 1,27 и при полимеризации материала эта величина уменьшилась до 0,5–0,92, в зависимости от типа использованного аминного отвердителя [27]. Полученные в настоящей работе экспериментальные результаты показали, что после полимеризации смолы без модифицирующих добавок при применении в качестве отвердителя Джеффамина Д-230 величина K равна 0,83. Значения K в синтезированных CuO- и Fe_3O_4 -содержащих эпоксидных композитах после их полимеризации при комнатной температуре варьировались в диапазоне 0,92–1,07, что заметно больше, чем для смолы без модификаторов. Это явление может объясняться тем, что микрочастицы оксидов, распределенные в объеме материала, пространственно разделяют компоненты полимеризующегося материала и, таким образом, несколько снижают степень отверждения ЭД-22.

На рис. 3 приведены спектры полного отражения CuO- и Fe_3O_4 -содержащих эпоксидных композитов. Видно, что в видимой части спектра (длина волны $\lambda = 600\text{--}700\text{ нм}$) величина измеренного коэффициента отражения R от CuO-содержащих композитов со-

ставляет 5–9 % и уменьшается при увеличении содержания CuO. В области длин волн порядка 850 нм наблюдается существенное увеличение отражения света от поверхности композитов, что определяется границей оптической прозрачности CuO (ширина запрещенной зоны микронных частиц CuO составляет 1,43–1,45 эВ [20]). В ближней ИК области спектра значения R CuO-содержащих композитов увеличиваются до 14,5–25 %. В диапазоне 1150–1200 нм на спектрах видны два небольших пика поглощения эпоксидного полимера.

Синтезированные Fe_3O_4 -содержащие эпоксидные композиты характеризуются существенно более низким отражением света (4,3–5,0 %) во всем исследованном спектральном диапазоне, чем CuO-содержащие композиты. При этом при возрастании содержания Fe_3O_4 до 10,0 масс.% наблюдается уменьшение значений R , а при дальнейшем увеличении содержания Fe_3O_4 до 43,8 масс.% отражение света от поверхности композита возрастает.

На основании экспериментальных данных о показателях преломления и поглощения монокристаллического Fe_3O_4 в спектральном диапазоне 1000–1050 нм, приведенных в [23] (показатели преломления и поглощения Fe_3O_4 : $n_M = 2,5$; $\kappa_M = 0,4$), проведены оценочные расчеты величин зеркального отражения света от поверхности композитов [29]:

$$R = \frac{(n_k - n_{cp})^2 + \kappa^2}{(n_k + n_{cp})^2 + \kappa^2}, \quad (n_k = \text{Re}(n'_k), \kappa = \text{Im}(n'_k)),$$

где n'_k — комплексный показатель преломления композитов; Re — действительная часть комплексного числа; Im — мнимая часть комплексного числа. Оценка значе-

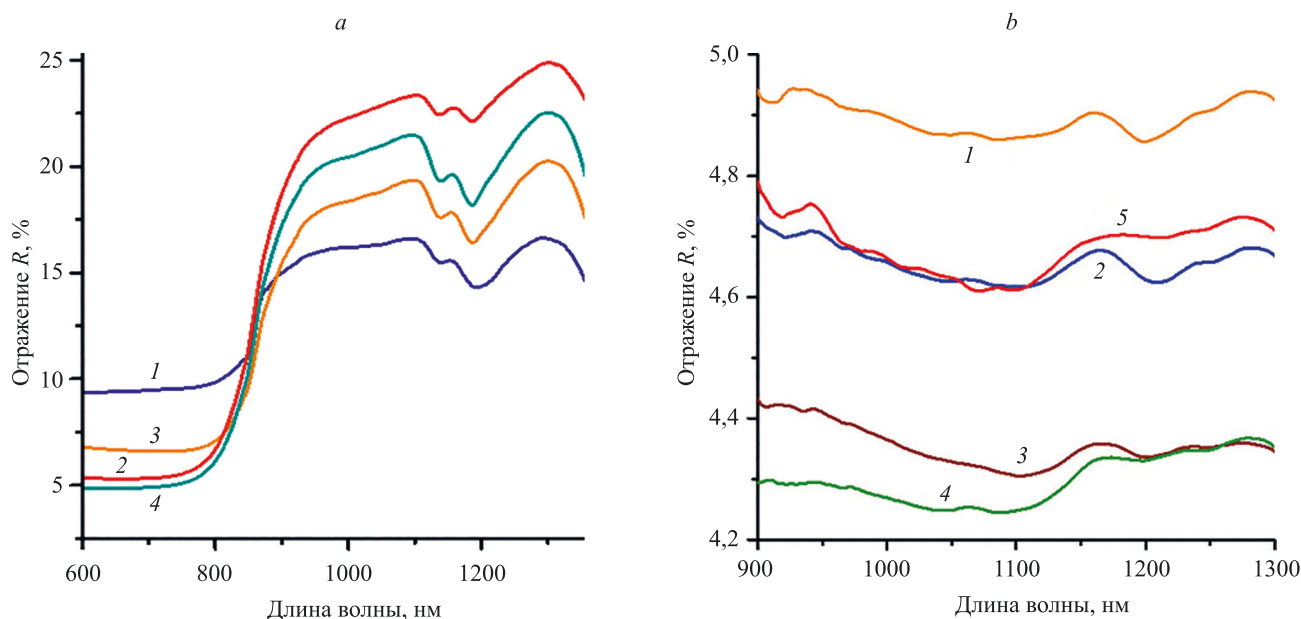


Рис. 3. Спектры отражения CuO-содержащих композитов, масс.‰: 3,2 (кривая 1); 8,3 (кривая 2); 25,0 (кривая 3); 44,4 (кривая 4) (a) и Fe_3O_4 -содержащих эпоксидных композитов, масс.‰: 2,3 (кривая 1); 2,9 (кривая 2); 6,5 (кривая 3); 10,0 (кривая 4); 43,8 (кривая 5) (b)

Fig. 3. Reflection spectra of CuO-containing composites, wt.%: 3.2 (curve 1); 8.3 (curve 2); 25.0 (curve 3); 44.4 (curve 4) (a) and Fe_3O_4 -containing epoxy composites, wt.%: 2.3 (curve 1); 2.9 (curve 2); 6.5 (curve 3); 10.0 (curve 4); 43.8 (curve 5) (b)

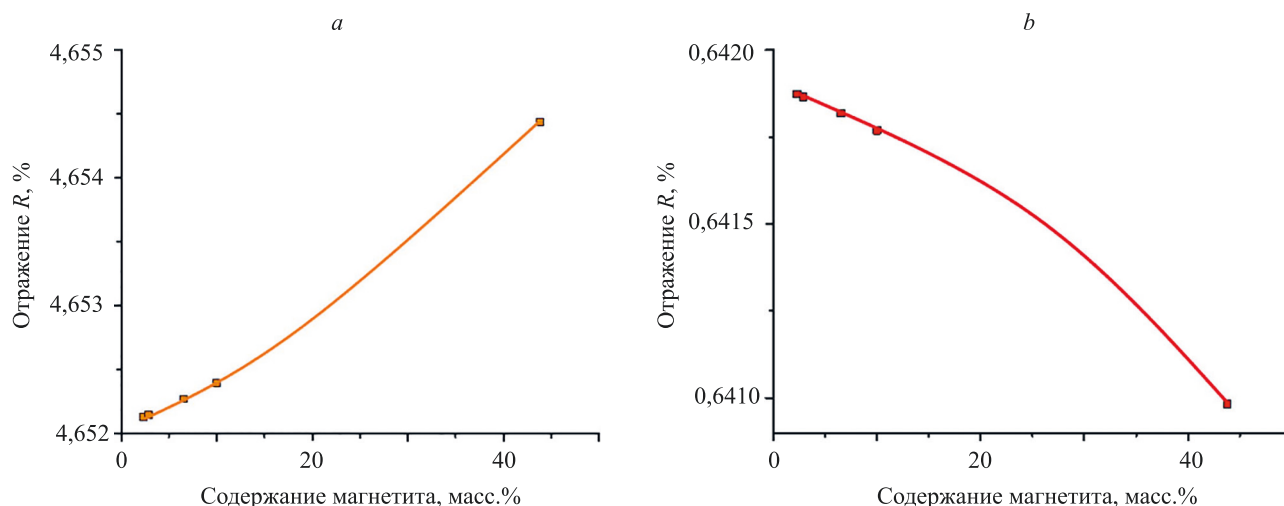


Рис. 4. Оценочные расчетные зависимости коэффициента зеркального отражения света R на границах Fe_3O_4 -содержащих композит–воздух (а) и композит–АИГ (б) в зависимости от содержания в композите Fe_3O_4

Fig. 4. Estimated calculated dependences of the specular light reflection coefficient R at the Fe_3O_4 -containing composite-air (a) and Fe_3O_4 -containing composite-YAG (b) interfaces as a function of the Fe_3O_4 content in the composite

ний n'_k композитов выполнена в предположении объемной аддитивности показателя преломления [29]:

$$n'_k = (n_M - i\kappa_M)\omega + n_3(1 - \omega),$$

где n_3 — показатель преломления ЭД-22 ($n_3 = 1,55$); ω — объемная доля Fe_3O_4 в композите.

На рис. 4 приведены результаты оценочных расчетов зависимостей коэффициента зеркального отражения света R ($\lambda = 1040$ нм) на границах Fe_3O_4 -содержащих композит–воздух (рис. 4, а) и композит–АИГ (алюмоиттриевый гранат) в зависимости от содержания в композите Fe_3O_4 . Наблюдаемые на рисунке небольшие изменения значений R невелики. Сопоставление расчетных величин R (рис. 4, а) на границе композит–воздух с экспериментальными данными (рис. 3, б) показывает их близость. Отметим, что получены относительно невысокие расчетные значения R на границе раздела композит–АИГ, составляющие величину порядка 0,64 %.

Напомним, что экспериментальные данные (рис. 3) по отражению света от поверхности CuO - и Fe_3O_4 -содержащих эпоксидных материалов получены для композитов, в которые оксидные модификаторы вводились в форме коммерческих порошков с довольно крупными частицами микронного размера. Можно предположить, что при использовании оксидных нанопорошков возможно дополнительное уменьшение отражения света как за счет введения в состав композитов большего содержания этих компонентов, так и при изменении их спектральных свойств при возрастании дисперсности. Так, например, в работе [19] показано, что поглощение света нанокристаллическим CuO в спектральной области 1000–1100 нм значительно выше, чем у крупных частиц.

Исследования микромеханических свойств полученных композитов показали, что введение оксидных порошков в эпоксидную композицию привело к заметному возрастанию микротвердости композитов.

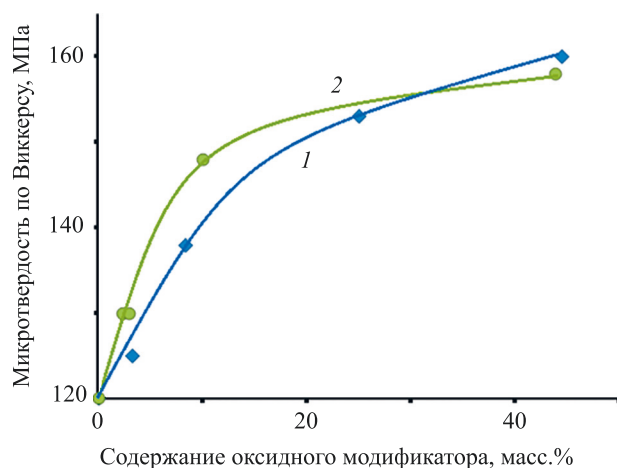


Рис. 5. Зависимость микротвердости по Виккерсу композитов от содержания оксидного модификатора CuO (кривая 1); Fe_3O_4 (кривая 2). Погрешность — 1 МПа

Fig. 5. Dependence of Vickers microhardness of composites on the content of oxide modifier CuO (curve 1); Fe_3O_4 (curve 2). The estimated error is about 1 MPa

Микротвердость эпоксидного полимера без добавок получена 120 МПа и увеличивалась до 158–160 МПа при введении в композит до 44 масс.% оксидов (рис. 5). Значения микротвердости в синтезированных в настоящей работе композитов близки к значениям других органо-неорганических материалов на основе эпоксидных полимеров, полученных в [3].

Заключение

При введении микропорошков оксида меди и оксида железа в эпоксидные полимеры сформированы композиты, обладающие существенным светопоглощением в ближней инфракрасной области спектра и повышенной, по сравнению с чистым полимером, микротвердостью, достигающей 160 МПа. По данным, полученным на

основании инфракрасных спектров поглощения, введение оксидных частиц снижает степень отверждения эпоксидного полимера на 20–28 %. Относительно низкое (до 4,2 %) отражение света демонстрируют в спектральном диапазоне 1000–1100 нм композиты, содер-

жащие оксид железа, что соответствует проведенным оценочным расчетам. Полученные в работе органо-неорганические композиты могут быть перспективны в качестве светопоглощающих в ближней инфракрасной области материалов для лазерной техники.

Литература

1. Ting T.H. Synthesis, characterization of Fe_3O_4 /polymer composites with stealth capabilities // *Results in Physics*. 2020. V. 16. P. 102975. <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2020.102975>
2. Kulagina A.S., Sandulenko A.V., Volynkin V.M., Evstropiev S.K. Synthesis and nonlinear optical properties of vanadium-doped plasticized epoxy polymer composites // *Advanced Composites and Hybrid Materials*. 2021. V. 4. N 2. P. 324. <https://doi.org/10.1007/s42114-021-00227-y>
3. Волынкин В.М., Евстропьев С.К., Булыга Д.В., Морковский А.В., Пашин С.С., Дукельский К.В., Бурдин А.В., Бондаренко И.Б. Оптический композиты на основе органических полимеров и полупроводниковых пигментов // *Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики*. 2022. Т. 22. № 1. С. 10–17. <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2022-22-1-10-17>
4. Киселев В.М., Бурчинов А.А., Волынкин В.М., Евстропьев С.К., Матвеевцев А.В. Светопоглощающие композиционные покрытия на основе оксидных полых микросфер и сульфида свинца // *Оптический журнал*. 2015. Т. 82. № 12. С. 60–64.
5. Belousova I.M., Videnichev D.A., Volynkin V.M., Evstropiev S.K., Kislyakov I.M., Murav'ova T.D., Rakov E.G. Nonlinear optical limiters of pulsed laser radiation based on carbon-containing nanostructures in viscous and solid matrices // *Polymers for Advanced Technologies*. 2014. V. 25. N 9. P. 1008–1013. <https://doi.org/10.1002/pat.3343>
6. Безродный В.И., Тихонов Е.А. Полимерный пассивный модулятор добротности // *Квантовая электроника*. 1986. Т. 13. № 12. С. 2486.
7. Mironov L.Yu., Evstropiev S.K. Temperature-sensitive luminescent photopolymer activated by europium β -diketonate complexes // *Optical Engineering*. 2019. V. 58. N 2. P. 027113. <https://doi.org/10.1117/1.OE.58.2.027113>
8. Нацик В.Д., Фоменко Л.С., Лубенец С.В. Исследование ползучести и стеклования эластомеров методом микроиндентирования: эпоксидная смола и нанокompозиты на ее основе // *Физика твердого тела*. 2013. Т. 55. № 5. С. 940–952.
9. Farzanehfard N., Taheri A., Rafiemanzelat F., Jazani O.M. High-performance epoxy nanocomposite adhesives with enhanced mechanical, thermal and adhesion properties based on new nanoscale ionic materials // *Chemical Engineering Journal*. 2023. V. 471. P. 144428. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2023.144428>
10. Usay Ş., Yaykaşlı H., Acer D.C. Microhardness and thermal resistance of epoxy composites reinforced with graphene nanoparticle doped carbon nanotubes // *Journal of NanoScience in Advanced Materials*. 2022. V. 1. N 1. P. 6–11. <https://doi.org/10.5281/zenodo.7464972>
11. Sun T., Fan H., Wang Z., Liu X., Wu Z. Modified nano Fe_2O_3 -epoxy composite with enhanced mechanical properties // *Materials & Design*. 2015. V. 87. P. 10–16. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2015.07.177>
12. Nazarzade S., Ghorbani H.R. Synthesis of CuO /Epoxy nanocomposites for the preparation of antifungal coating // *Nanomedicine Journal*. 2019. V. 6. N 2. P. 142–146. <https://doi.org/10.22038/NMJ.2019.06.0009>
13. Mahadeva Raju G.K., Madhu G.M., Dinesh Sankar Reddy P., Karthik K.V. Mechanical and thermal properties of epoxy polymer composites reinforced with CuO // *YMER*. 2021. V. 20. N 12. P. 272–280.
14. Chen Y., Zhang D., Wu X., Wang H., Zhang C., Yang W., Chen Y. Epoxy/ α -alumina nanocomposite with high electrical insulation performance // *Progress in Natural Science: Materials International*. 2017. V. 27. N 5. P. 574–581. <https://doi.org/10.1016/j.pnsc.2017.09.003>
15. Singh S.K., Singh S., Kumar A., Jain A. Thermo-mechanical behavior of TiO_2 dispersed epoxy composites // *Engineering Fracture Mechanics*. 2017. V. 184. P. 241–248. <https://doi.org/10.1016/j.engfractmech.2017.09.005>

References

1. Ting T.H. Synthesis, characterization of Fe_3O_4 /polymer composites with stealth capabilities. *Results in Physics*, 2020, vol. 16, pp. 102975. <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2020.102975>
2. Kulagina A.S., Sandulenko A.V., Volynkin V.M., Evstropiev S.K. Synthesis and nonlinear optical properties of vanadium-doped plasticized epoxy polymer composites. *Advanced Composites and Hybrid Materials*, 2021, vol. 4, no. 2, pp. 324. <https://doi.org/10.1007/s42114-021-00227-y>
3. Volynkin V.M., Evstropiev S.K., Bulyga D.V., Morkovsky A.V., Pashin S.S., Dukelskiy K.V., Bourdine A.V., Bondarenko I.B. Optical composites based on organic polymers and semiconductor pigments. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 1, pp. 10–17. (in Russian). <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2022-22-1-10-17>
4. Kiselev V.M., Burchinov A.A., Volynkin V.M., Matveentsev A.V., Evstropiev S.K. Composite light-absorbent coatings based on hollow oxide microspheres and lead sulfide. *Journal of Optical Technology*, 2015, vol. 82, no. 12, pp. 824–826. <https://doi.org/10.1364/jot.82.000824>
5. Belousova I.M., Videnichev D.A., Volynkin V.M., Evstropiev S.K., Kislyakov I.M., Murav'ova T.D., Rakov E.G. Nonlinear optical limiters of pulsed laser radiation based on carbon-containing nanostructures in viscous and solid matrices. *Polymers for Advanced Technologies*, 2014, vol. 25, no. 9, pp. 1008–1013. <https://doi.org/10.1002/pat.3343>
6. Bezrodny V.I., Tikhonov E.A. Polymer passive Q switch. *Soviet Journal of Quantum Electronics*, 1986, vol. 16, no. 12, pp. 1642–1645. <https://doi.org/10.1070/QE1986v01n12ABEH008515>
7. Mironov L.Yu., Evstropiev S.K. Temperature-sensitive luminescent photopolymer activated by europium β -diketonate complexes. *Optical Engineering*, 2019, vol. 58, no. 2, pp. 027113. <https://doi.org/10.1117/1.OE.58.2.027113>
8. Natsik V.D., Fomenko L.S., Lubenets S.V. Investigation of the creep and glass transition of elastomers by the microindentation method: epoxy resin and related nanocomposites. *Physics of the Solid State*, 2013, vol. 55, no. 5, pp. 1020–1033. <https://doi.org/10.1134/s1063783413050260>
9. Farzanehfard N., Taheri A., Rafiemanzelat F., Jazani O.M. High-performance epoxy nanocomposite adhesives with enhanced mechanical, thermal and adhesion properties based on new nanoscale ionic materials. *Chemical Engineering Journal*, 2023, vol. 471, pp. 144428. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2023.144428>
10. Usay Ş., Yaykaşlı H., Acer D.C. Microhardness and thermal resistance of epoxy composites reinforced with graphene nanoparticle doped carbon nanotubes. *Journal of NanoScience in Advanced Materials*, 2022, vol. 1, no. 1, pp. 6–11. <https://doi.org/10.5281/zenodo.7464972>
11. Sun T., Fan H., Wang Z., Liu X., Wu Z. Modified nano Fe_2O_3 -epoxy composite with enhanced mechanical properties. *Materials & Design*, 2015, vol. 87, pp. 10–16. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2015.07.177>
12. Nazarzade S., Ghorbani H.R. Synthesis of CuO /Epoxy nanocomposites for the preparation of antifungal coating. *Nanomedicine Journal*, 2019, vol. 6, no. 2, pp. 142–146. <https://doi.org/10.22038/NMJ.2019.06.0009>
13. Mahadeva Raju G.K., Madhu G.M., Dinesh Sankar Reddy P., Karthik K.V. Mechanical and thermal properties of epoxy polymer composites reinforced with CuO . *YMER*, 2021, vol. 20, no. 12, pp. 272–280.
14. Chen Y., Zhang D., Wu X., Wang H., Zhang C., Yang W., Chen Y. Epoxy/ α -alumina nanocomposite with high electrical insulation performance. *Progress in Natural Science: Materials International*, 2017, vol. 27, no. 5, pp. 574–581. <https://doi.org/10.1016/j.pnsc.2017.09.003>
15. Singh S.K., Singh S., Kumar A., Jain A. Thermo-mechanical behavior of TiO_2 dispersed epoxy composites. *Engineering Fracture Mechanics*, 2017, vol. 184, pp. 241–248. <https://doi.org/10.1016/j.engfractmech.2017.09.005>

16. Чурсова Л.В., Панина Н.Н., Гребенева Т.А., Кутергина И.Ю. Эпоксидные смолы, отвердители, модификаторы и связующие на их основе. СПб.: Профессия, 2020. 576 с.
17. Ong H.R., Khan Md.M.R., Ramli R., Yunus R.M. Effect of CuO nanoparticle on mechanical and thermal properties of palm oil based alkyd/epoxy resin blend // *Procedia Chemistry*. 2015. V. 16. P. 623–631. <https://doi.org/10.1016/j.proche.2015.12.101>
18. Bindal P., Shrivastava A. Study of thermal conductivity enhancement of epoxy with copper oxide(CuO) // *International Journal for Research in Engineering Application & Managemen*. 2018. V. 4. N 8. P. 81. <https://doi.org/10.18231/2454-9150.2018.1057>
19. Сухоруков Ю.П., Гижевский Б.А., Мостовщикова Е.В., Ермаков А.Е., Тугушев С.Н., Козлов Е.А. Нанокристаллический CuO-материал для селективных поглотителей солнечной энергии // *Письма в Журнал технической физики*. 2006. Т. 32. № 3. С. 81–89.
20. Сухоруков Ю.П., Лoshkareva Н.Н., Москвин А.С., Самохвалов А.А. Спектры поглощения монокристаллов CuO в области фундаментальной полосы и природа оптической щели в оксидах меди // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 1995. Т. 108. № 5. С. 1821–1830.
21. Welegergs G.G., Akoba R., Sackey J., Nuru Z.Y. Structural and optical properties of copper oxide (CuO) nanocoatings as selective solar absorber // *Materials Today: Proceedings*. 2021. V. 36. N 2. P. 509–513. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.05.298>
22. Al-Masoodi A.H.H., Abdulghafoor O.B., Alani I.A.M., Ahmed M.H.M., Al Masoodi Ab.H.H., Harun S.W. Passively Q-switched pulses from ytterbium-doped fiber laser (YDFL) using copper oxide (CuO) nanoparticles as a saturable absorber // *Optical Materials Express*. 2020. V. 10. N 11. P. 2896–2908. <https://doi.org/10.1364/OME.403713>
23. Ерин К.В. Определение комплексного показателя преломления наноразмерного магнетита по данным оптической анизотропии магнитных коллоидов // *Неорганические материалы*. 2022. Т. 58. № 4. С. 421–431. <https://doi.org/10.31857/S0002337X22040042>
24. Wang X., Wang Y.G., Mao D., Li L., Chen Z.D. Passively Q-switched Nd:YVO₄ laser based on Fe₃O₄ nanoparticles saturable absorber // *Optical Materials Express*. 2017. V. 7. N 8. P. 2913–2921. <https://doi.org/10.1364/OME.7.002913>
25. Chen G., Yang Y., Tian M., Li C., Huang Y., Lv M. Passively Q-switched mode-locked ytterbium-doped fiber laser based on an Fe₃O₄-nanoparticle saturable absorber // *Optical Materials Express*. 2020. V. 10. N 2. P. 588–596. <https://doi.org/10.1364/OME.383188>
26. González M.G., Cabanelas J.C., Baselga J. Applications of FTIR on epoxy resins — identification, monitoring the curing process, phase separation and water uptake // *Infrared Spectroscopy — Materials Science, Engineering and Technology*. InTech, 2012. P. 261–284. <https://doi.org/10.5772/36323>
27. Рудаков О.Б., Хорохордина Е.А., Глазков С.С., Хорохордин А.М., Губин А.С. Контроль отверждения эпоксидной смолы по содержанию свободного бисфенола А методом ТСХ // *Аналитика и контроль*. 2017. Т. 21. № 2. С. 135–143. <https://doi.org/10.15826/analitika.2017.21.2.004>
28. Wu Z., Chen J., Li Q., Xia D.-H., Deng Y., Zhang Y., Qin Z. Preparation and thermal conductivity of epoxy resin/graphene-Fe₃O₄ composites // *Materials*. 2021. V. 14. N 8. P. 2013. <https://doi.org/10.3390/ma14082013>
29. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М.: Наука, 1970. С. 57.
16. Chursova L.V., Panina N.N., Grebeneva T.A., Kutergina I.Iu. *Epoxy Resins, Hardeners, Modifiers and Binding Agents Based on Them*. Saint Petersburg, Professija Publ., 2020, 576 p. (in Russian)
17. Ong H.R., Khan Md.M.R., Ramli R., Yunus R.M. Effect of CuO nanoparticle on mechanical and thermal properties of palm oil based alkyd/epoxy resin blend. *Procedia Chemistry*, 2015, vol. 16, pp. 623–631. <https://doi.org/10.1016/j.proche.2015.12.101>
18. Bindal P., Shrivastava A. Study of thermal conductivity enhancement of epoxy with copper oxide(CuO). *International Journal for Research in Engineering Application & Managemen*, 2018, vol. 4, no. 8, pp. 81. <https://doi.org/10.18231/2454-9150.2018.1057>
19. Sukhorukov Yu.P., Gizhevskii B.A., Mostovshchikova E.V., Yermakov A.Ye., Tugushev S.N., Kozlov E.A. Nanocrystalline copper oxide for selective solar energy absorbers. *Technical Physics Letters*, 2006, vol. 32, no. 2, pp. 132–135. <https://doi.org/10.1134/s1063785006020131>
20. Sukhorukov Yu.P., Loshkareva N.N., Samokhvalov A.A., Moskvina A.S. Absorption spectra of CuO single crystals near the absorption edge and the nature of the optical gap in copper oxides. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 1995, vol. 81, no. 5, pp. 998–1002.
21. Welegergs G.G., Akoba R., Sackey J., Nuru Z.Y. Structural and optical properties of copper oxide (CuO) nanocoatings as selective solar absorber. *Materials Today: Proceedings*, 2021, vol. 36, no. 2, pp. 509–513. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.05.298>
22. Al-Masoodi A.H.H., Abdulghafoor O.B., Alani I.A.M., Ahmed M.H.M., Al Masoodi Ab.H.H., Harun S.W. Passively Q-switched pulses from ytterbium-doped fiber laser (YDFL) using copper oxide (CuO) nanoparticles as a saturable absorber. *Optical Materials Express*, 2020, vol. 10, no. 11, pp. 2896–2908. <https://doi.org/10.1364/OME.403713>
23. Yerina K.V. Determination of the complex refractive index of nanoparticulate magnetite from optical anisotropy data for magnetic colloids. *Inorganic Materials*, 2022, vol. 58, no. 4, pp. 403–413. <https://doi.org/10.1134/s0020168522040045>
24. Wang X., Wang Y.G., Mao D., Li L., Chen Z.D. Passively Q-switched Nd:YVO₄ laser based on Fe₃O₄ nanoparticles saturable absorber. *Optical Materials Express*, 2017, vol. 7, no. 8, pp. 2913–2921. <https://doi.org/10.1364/OME.7.002913>
25. Chen G., Yang Y., Tian M., Li C., Huang Y., Lv M. Passively Q-switched mode-locked ytterbium-doped fiber laser based on an Fe₃O₄-nanoparticle saturable absorber. *Optical Materials Express*, 2020, vol. 10, no. 2, pp. 588–596. <https://doi.org/10.1364/OME.383188>
26. González M.G., Cabanelas J.C., Baselga J. Applications of FTIR on epoxy resins — identification, monitoring the curing process, phase separation and water uptake. *Infrared Spectroscopy — Materials Science, Engineering and Technology*. InTech, 2012, pp. 261–284. <https://doi.org/10.5772/36323>
27. Rudakov O.B., Khorokhordina E.A., Glazkov S.S., Khorokhordin A.M., Gubin A.S. Control of the epoxy resin curing process according to the free bisphenol A content by TLC. *Analytics and Control*, 2017, vol. 21, no. 2, pp. 135–143. (in Russian). <https://doi.org/10.15826/analitika.2017.21.2.004>
28. Wu Z., Chen J., Li Q., Xia D.-H., Deng Y., Zhang Y., Qin Z. Preparation and thermal conductivity of epoxy resin/graphene-Fe₃O₄ composites. *Materials*, 2021, vol. 14, no. 8, pp. 2013. <https://doi.org/10.3390/ma14082013>
29. Born M., Wolf E. *Principles of Optics*. Cambridge University Press, 1959.

Авторы

Евстропьев Сергей Константинович — доктор химических наук, начальник отдела, АО «НПО ГОИ им. С.И. Вавилова», Санкт-Петербург, 192171, Российская Федерация, <https://orcid.org/0000-0002-0160-8443>, evstropiev@bk.ru

Волынкин Валерий Михайлович — кандидат химических наук, старший научный сотрудник, АО «НПО ГОИ им. С.И. Вавилова», Санкт-Петербург, 192171, Российская Федерация, <https://orcid.org/0000-0002-6325-1507>, vvolyнкиn@yandex.ru

Булыга Дмитрий Владимирович — младший научный сотрудник, АО «НПО ГОИ им. С.И. Вавилова», Санкт-Петербург, 192171, Российская Федерация, <https://orcid.org/0000-0001-8861-2527>, dmbulyga@yandex.ru

Authors

Sergey K. Evstropiev — D.Sc. (Chemistry), Head of Department, JSC “Research and Production Corporation S.I. Vavilova”, Saint Petersburg, 192171, Russian Federation, <https://orcid.org/0000-0002-0160-8443>, evstropiev@bk.ru

Valery M. Volynkin — PhD (Chemistry), Senior Researcher, JSC “Research and Production Corporation S.I. Vavilova”, Saint Petersburg, 192171, Russian Federation, <https://orcid.org/0000-0002-6325-1507>, vvolyнкиn@yandex.ru

Dmitry V. Bulyga — Junior Researcher, JSC “Research and Production Corporation S.I. Vavilova”, Saint Petersburg, 192171, Russian Federation, <https://orcid.org/0000-0001-8861-2527>, dmbulyga@yandex.ru

Островский Вячеслав Александрович — начальник лаборатории, АО «Государственный научный центр Российской Федерации Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований», Троицк, 108840, Российская Федерация, <https://orcid.org/0009-0000-9114-2116>, ostrovskiy@triniti.ru

Макаров Константин Николаевич — кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, АО «Государственный научный центр Российской Федерации Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований», Троицк, 108840, Российская Федерация, [sc 7006042620](https://orcid.org/0009-0004-3280-3489), <https://orcid.org/0009-0004-3280-3489>, makarov@triniti.ru

Дукельский Константин Владимирович — доктор технических наук, заместитель генерального директора, АО «НПО ГОИ им. С.И. Вавилова», Санкт-Петербург, 192171, Российская Федерация, [sc 6602633236](https://orcid.org/0000-0002-1627-7499), <https://orcid.org/0000-0002-1627-7499>, kdukel@mail.ru

Полищук Григорий Сергеевич — кандидат технических наук, временный генеральный директор, АО «НПО ГОИ им. С.И. Вавилова», Санкт-Петербург, 192171, Российская Федерация, [sc 25926044900](https://orcid.org/0009-0005-9358-6040), <https://orcid.org/0009-0005-9358-6040>, g.polishchuk@optrotech.ru

Vyacheslav A. Ostrovskii — Head of Laboratory, AO “GNTs RF TRINITI”, Troitsk, 108840, Russian Federation, <https://orcid.org/0009-0000-9114-2116>, ostrovskiy@triniti.ru

Konstantin N. Makarov — PhD (Physics & Mathematics), Leading Researcher, AO “GNTs RF TRINITI”, Troitsk, 108840, Russian Federation, [sc 7006042620](https://orcid.org/0009-0004-3280-3489), <https://orcid.org/0009-0004-3280-3489>, makarov@triniti.ru

Konstantin V. Dukelskii — D.Sc., Deputy General Director, JSC “Research and Production Corporation S.I. Vavilova”, Saint Petersburg, 192171, Russian Federation, [sc 6602633236](https://orcid.org/0000-0002-1627-7499), <https://orcid.org/0000-0002-1627-7499>, kdukel@mail.ru

Grigoriy S. Polishchuk — PhD, Acting General Director, JSC “Research and Production Corporation S.I. Vavilova”, Saint Petersburg, 192171, Russian Federation, [sc 25926044900](https://orcid.org/0009-0005-9358-6040), <https://orcid.org/0009-0005-9358-6040>, g.polishchuk@optrotech.ru

Статья поступила в редакцию 16.05.2024

Одобрена после рецензирования 04.06.2024

Принята к печати 18.07.2024

Received 16.05.2024

Approved after reviewing 04.06.2024

Accepted 18.07.2024



Работа доступна по лицензии
Creative Commons
«Attribution-NonCommercial»

doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-538-547

УДК 535.015, 537.226.82

Исследование пьезоэлектрического эффекта и создание модифицированной конструкции фазового модулятора на основе ниобата лития

Алена Викторовна Шулепова¹✉, Владимир Андреевич Шулепов²,
Владимир Евгеньевич Стригалеv³

^{1,2,3} Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

¹ 79213040490@ya.ru✉, <https://orcid.org/0000-0001-6898-3400>

² shulepov_vladimir@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2168-8046>

³ vstrglv@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7151-9235>

Аннотация

Введение. В работе рассмотрено явление пьезоэлектрического эффекта и показано его влияние на возникновение дополнительного фазового сдвига проходящей световой волны в волноводной структуре фотонных интегральных схем, сформированных на подложке кристалла ниобата лития X-среза. **Метод.** Измерения проводились интерферометрическим способом в схеме волоконно-оптического интерферометра Маха–Цендера с использованием модуляции излучения в опорном плече, позволяющего выполнять непрерывное измерение фазы в плече с исследуемым образцом. Проведен расчет временных параметров каждого из элементов экспериментальной схемы для определения времени релаксации пьезоэлектрических зарядов.

Основные результаты. Выполнен анализ влияния пьезоэлектрического дрейфа фазы, его величины и временных характеристик релаксации зарядов, вызывающих дрейф. Предложена модель и исследована конструкция фазового модулятора на основе кристалла ниобата лития с дополнительными обратно Z-ориентированными пластинами, расположенными на электродах модулятора. **Обсуждение.** Предложенный способ решения проблемы способен компенсировать пьезоэлектрическое поле и, как следствие, уменьшить паразитный сдвиг фазы.

Ключевые слова

ниобат лития, фазовый модулятор, пьезоэлектрический эффект, пьезоэлектрическое поле

Благодарности

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FSER-2024-0006).

Ссылка для цитирования: Шулепова А.В., Шулепов В.А., Стригалеv В.Е. Исследование пьезоэлектрического эффекта и создание модифицированной конструкции фазового модулятора на основе ниобата лития // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2024. Т. 24, № 4. С. 538–547. doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-538-547

Study of pyroelectric effect and creation of modified design of phase modulator based on lithium niobate

Alena V. Shulepova¹✉, Vladimir A. Shulepov², Vladimir E. Strigalev³

^{1,2,3} ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

¹ 79213040490@ya.ru✉, <https://orcid.org/0000-0001-6898-3400>

² shulepov_vladimir@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2168-8046>

³ vstrglv@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7151-9235>

Abstract

The study explores the phenomenon of the pyroelectric effect and demonstrates its influence on the emergence of an additional phase shift of the passing light wave in waveguide structures of photonic integrated circuits formed on a lithium niobate crystal X-cut substrate. Measurements were carried out using interferometric methods in a Mach-Zehnder

© Шулепова А.В., Шулепов В.А., Стригалеv В.Е., 2024

fiber-optic interferometer configuration with radiation modulation in the reference arm allowing for continuous phase measurement in the arm with the sample under study. The calculation of the temporal parameters of each element of the experimental setup was performed to determine the relaxation times of pyroelectric charges. An analysis of the contribution of pyroelectric phase drift, its magnitude, and the temporal characteristics of charge relaxation causing the drift was conducted. A model was proposed and the design of a phase modulator based on a lithium niobate crystal with additional back Z-oriented plates located on the modulator electrodes was investigated. The proposed solution method is capable of compensating for the pyroelectric field and, as a result, reducing parasitic phase shift.

Keywords

lithium niobate, phase modulator, pyroelectric effect, pyroelectric field

Acknowledgments

The research was carried out within the state assignment of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (project No. FSER-2024-0006).

For citation: Shulepova A.V., Shulepov V.A., Strigalev V.E. Study of pyroelectric effect and creation of modified design of phase modulator based on lithium niobate. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 4, pp. 538–547 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-538-547

Введение

Кристалл ниобата лития (НЛ), благодаря уникальному набору электрооптических и оптических свойств, нашел широкое применение при создании устройств интегральной оптики, включая электрооптические амплитудные и фазовые модуляторы. Интенсивное развитие телекоммуникаций на основе волоконно-оптических компонентов усилило требования к снижению потерь оптической мощности и сохранению одномодового состава распространения излучения [1]. В результате изучения возможности создания одномодовых волноводных структур в НЛ разработаны две основные технологии: титан-диффузионная и протонно-обменная [2–6]. Данные технологии позволяют получать волноводы с низкими оптическими потерями в диапазоне длин волн в области 1,55 мкм и эффективным согласованием с оптическими волокнами. Таким образом, уникальные свойства НЛ и развитие технологий способствовали широкому распространению этого материала в интегральной оптике и волоконно-оптических устройствах [7–11].

Известно, что НЛ имеет множество преимуществ для использования в интегрально-оптических модуляторах [12, 13]. Однако существуют и недостатки, некоторые из которых до сих пор не имеют решения. Например, проблема кратко- и долговременного дрейфов фазы остается нерешенной для фазовых модуляторов на X- и Z-срезах кристалла [14, 15]. Кратковременный дрейф фазы можно объяснить ограниченностью передаточной амплитудно-частотной характеристики, действующей как фильтр нижних частот. Долговременный дрейф представляет собой медленную стабилизацию фазового значения в установившемся режиме длительностью от нескольких часов до нескольких дней [16]. В работе [17] отмечено, что дрейф фазы связан с особенностями электрических характеристик материала, проводящих слоев электродов и адгезионного подслоя. Таким образом, анализ дрейфа фазы можно свести к переходной характеристике эквивалентных RC-цепей.

Еще одним недостатком кристалла НЛ является его сегнетоэлектрическая природа, которая приводит к пирозлектрическому эффекту. Анализ данного явления в кристалле НЛ широко представлен в научных работах.

Пирозлектрический эффект характеризуется изменением величины спонтанной поляризации кристалла от изменения значения температуры. При этом на полярных гранях кристалла НЛ формируются свободные заряды, что приводит к возникновению внешнего электрического поля. После определенного периода времени (от нескольких часов до нескольких дней) происходит релаксация зарядов за счет рекомбинации зарядов вследствие объемной и поверхностной проводимостей кристалла.

Заряды на поверхности образуются за счет свободных носителей в окружающей среде, которые притягиваются к поверхности кристалла при изменении температуры, увеличивая внутреннее поле поляризации домена. После компенсации напряженности электрического поля наступает зарядовое равновесие и внешнее электрическое поле исчезает. При нагреве сегнетоэлектрика внутренняя поляризация ослабевает, и на поверхности часть зарядов, не требуемых для компенсации поляризации, становятся свободными. Далее эти заряды могут сформировать электрическое поле и взаимодействовать с окружающей средой. Цикл возникновения зарядов и их последующая релаксация повторяются при каждом нагревании и охлаждении сегнетоэлектрика (рис. 1).

Пирозлектрический коэффициент p характеризует плотность зарядов на полярной поверхности кристалла НЛ при изменении его температуры на 1 °С. Анализ ряда научных работ позволяет утверждать, что величина

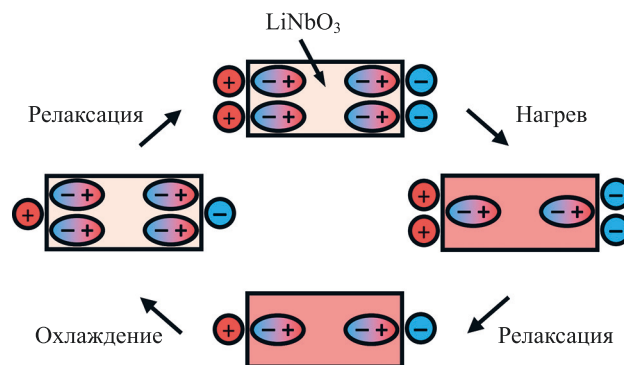


Рис. 1. Пирозлектрический эффект в кристалле ниобата лития (LiNbO_3)

Fig. 1. Pyroelectric effect in lithium niobate (LiNbO_3) crystal

на пирозлектрического коэффициента может изменяться от -4 до -11 мКл/(м²·К) за счет структуры (степень отклонения от стехиометрического состава) [18–20], а также от методов измерения (статические, динамические, оптические) [18] и температурного диапазона.

Актуальность проблемы явления пирозлектрического эффекта для интегрально-оптических модуляторов высока по той причине, что образование свободных зарядов на поверхности кристалла НЛ способно вносить существенный вклад в искажение картины распределения напряженности электрического поля в сечении кристалла параллельно полярной оси. Также эффект может вызывать локальное изменение показателя преломления волновода в кристалле НЛ от незначительного сдвига фазы вплоть до нарушения условий волноводного распространения и выхода оптической моды в подложку.

Методы защиты и подавления пирозлектрического эффекта

Традиционным методом подавления влияния пирозлектрического эффекта для интегрально-оптических модуляторов на X -срезе кристалла НЛ является нанесение на грани токопроводящей композиции [21]. Полярные грани модулятора, на поверхности которых формируются заряды, промазываются токопроводящей композицией и объединяются в единую электрическую цепь. В таком случае не образуется свободных зарядов, которые формируют поле, и пирозлектрическое затухание оптической волны не наблюдается. Другой способ для модуляторов на Z -срезе подразумевает перед нанесением электродов и последующим закорачиванием формирование оксидом кремния слоя [22–24] на верхней и нижней поверхностях кристалла НЛ. За счет диэлектрического слоя с электропроводностью величиной порядка 10^{-10} , что в сравнении с объемной проводимостью кристалла 10^{-14} – 10^{-16} 1/(Ом·м) при комнатной температуре [25, 26] является достаточной величиной для обеспечения повышенной проводимости. Также известен способ повышения проводимости кристалла НЛ путем проведения восстановительного отжига, который описан в работах [27–30]. Проведение отжига кристалла может уменьшить пирозлектрический эффект, что связано с оксидизацией его приповерхностных слоев. Это происходит из-за изменения электрических свойств кристалла НЛ, вызванного восстановительной обработкой.

С другой стороны, несмотря на кажущуюся очевидность решения проблемы пирозлектрического эффекта, необходимо учитывать наличие в сегнетоэлектриках особого поверхностного диэлектрического слоя [26, 31]. Даже в случае полного промазывания поверхности кристалла НЛ проводящим материалом, диэлектрический слой приводит к снижению эффективности экранирования внутреннего поля спонтанной индукции кристалла. В результате часть зарядов, находящихся между сегнетоэлектрической и диэлектрической зонами кристалла, остаются некомпенсированными и создают остаточное электрическое поле в кристалле. В электрооптических модуляторах такое поле может

внести часть паразитного вклада в оптическую мощность и фазу световой волны.

В настоящей работе представлены результаты исследования пирозлектрического эффекта в титан-диффузионных волноводах кристалла НЛ, сформированных на подложке X -среза, являющихся основой для создания модуляторов фазы. Выполнен анализ влияния пирозлектрического эффекта на дрейф фазы, его величины и временных характеристик релаксации зарядов. Измерения проводились интерферометрическим способом в схеме волоконно-оптического интерферометра Маха–Цендера. В опорном плече использована модуляция излучения для непрерывного и высокоточного измерений фазы в плече с исследуемым образцом. Приведены результаты исследования впервые предложенной методики подавления пирозлектрического эффекта в фотонной интегральной схеме, основанной на кристалле НЛ.

Объект исследования

В работе исследованы образцы фотонных интегральных схем (ФИС), изготовленные в Физико-техническом институте имени А.Ф. Иоффе РАН. Фазовый модулятор представляет собой кристалл НЛ на X -срезе, в котором методом диффузии титана создан канальный волновод. С двух сторон от него для обеспечения фазовой модуляции светового сигнала нанесены сформированные пленки электродов из золота путем напыления через адгезионный слой хрома. Рабочая длина волны оптического излучения 1550 нм.

Новая конструкция фазового модулятора на основе ниобата лития

Предложена оригинальная конструкция ФИС, предполагающая добавление пластин из материала подложки на области электродов. Данное конструктивное решение направлено на уменьшение влияния пирозлектрического эффекта. На рис. 2 представлены два образца ФИС двух конструкций: стандартной (конструкция 1) и модифицированной (конструкция 2). В конструкции 2 добавленные пластины из кристалла НЛ имеют оптическую ось Z , ориентированную противоположно направлению оптической оси подложки. Это позволяет осуществить компенсацию пирозлектрического поля, возникающего вследствие изменения температуры, что подтверждено экспериментальными данными.

Материалы и методика эксперимента

Детектирование фазового сдвига осуществлялось с помощью волоконно-оптического интерферометра Маха–Цендера. Исследуемый образец был размещен в верхнем плече интерферометра, а фазовый модулятор в нижнем плече, который позволяет управлять фазой оптического излучения (рис. 3). Элементы интерферометра имели соосную стыковку по «быстрой» поляризационной оси. В схеме использован узкополосный (менее 1 кГц) лазер ORION Laser Module с длиной

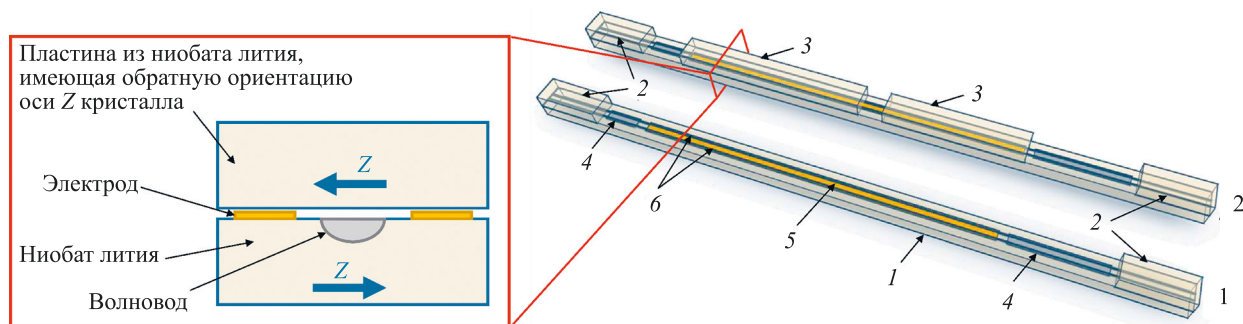


Рис. 2. Схема фотонных интегральных схем на основе ниобата лития (НЛ) стандартной (конструкция 1) и модернизированной (конструкция 2) конструкций: 1 — кристалл НЛ; 2 — крышечки из кристалла НЛ для осуществления стыковки; 3 — крышечки из НЛ, обратно ориентированные по оси Z; 4 — поляризаторы; 5 — электроды; 6 — волноводы

Fig. 2. Scheme of photonic integrated circuits based on lithium niobate of standard (design 1) and upgraded (design 2), where 1 — lithium niobate crystal; 2 — lithium niobate caps for coupling; 3 — back Z-oriented lithium niobate caps; 4 — polarizers; 5 — electrodes; 6 — waveguides

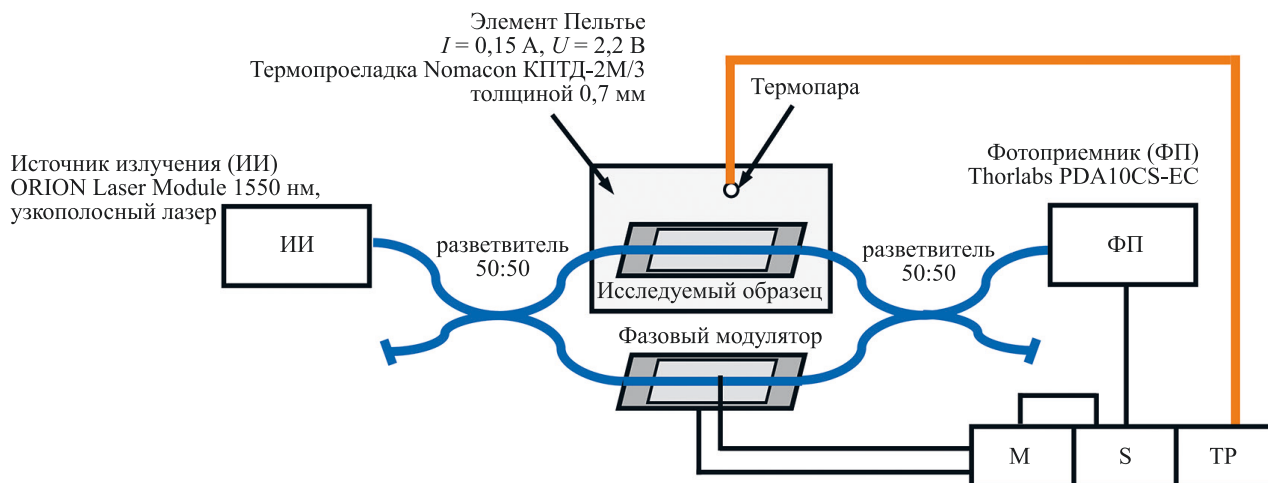


Рис. 3. Схема волоконно-оптического интерферометра Маха-Цендера

Fig. 3. Schematic of the fiber-optic Mach-Zehnder interferometer

волны 1550 нм. В ходе экспериментов система сбора данных (Data Acquisition, DAQ), оснащенная оборудованием National Instruments cDAQ-9188, синхронно регистрировала модуляционный сигнал «М» и данные с фотодетектора Thorlabs PDA10CS-EC «S», тогда как преобразователь напряжения NI 9211 учитывал информацию о температуре, поступающую от термопары «ТР».

Управление температурными циклами нагрева и остывания осуществлено посредством крепления образца на термоэлектрическом модуле Пельтье, разделенного с образцом 0,7 мм термопрокладкой Nomason KPTD-2M/3 (рис. 4), где одновременно размещается горячий спай термопары, что дает возможность измерения температуры верхнего сегмента прокладки. Во избежание температурных флуктуаций модулятора, обеспечивающего фазовую модуляцию в нижнем плече интерферометра, все компоненты термоизолированы в корпусе, состоящем из двух отсеков. При этом в первом отсеке находятся разветвители и модулятор, а второй предназначен для размещения исследуемого образца вместе с термоэлектрическим модулем Пельтье.

В экспериментах нагрев образца при токе $I = 0,15$ А и напряжении $U = 2,2$ В, подаваемых на элемент Пельтье, привел к температурному росту на $\Delta T \approx 3-4$ °С (рис. 5). В результате нагрева образца произошло изменение фазы светового потока, проходящего по волноводу модулятора. Вычисление сигнала фазы осуществлено на основе данных от фотоприемника. Задание периодиче-

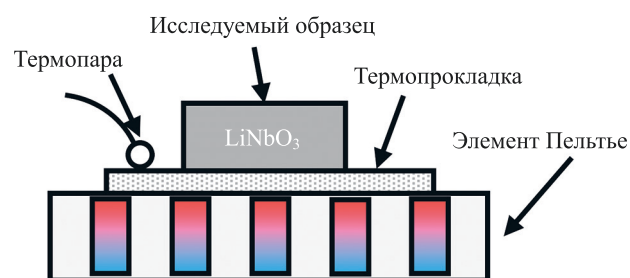


Рис. 4. Схематичное представление расположения горячего спая термопары

Fig. 4. Schematic representation of thermocouple hot junction location

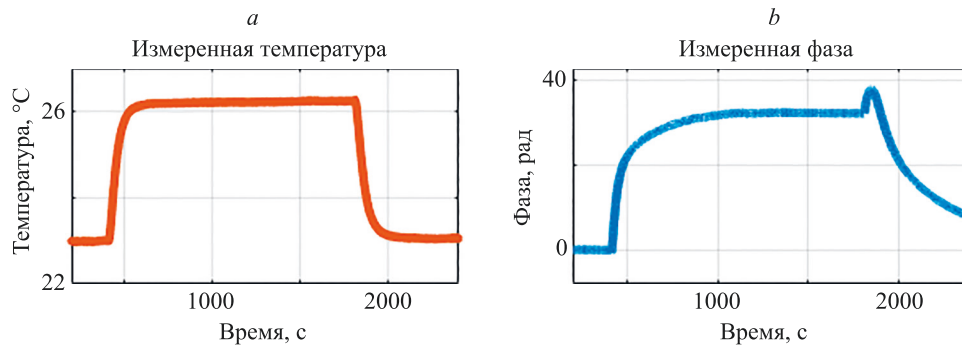


Рис. 5. Измеренные температура (а), регистрируемая термопарой при подаче на элемент Пельтье тока $I = 0,15$ А, и сигнал фазы (б)

Fig. 5. Temperature readings registered by thermocouple when current $I = 0.15$ A is applied to Peltier element (a) and measured phase signal (b)

ской модуляции в виде косинуса позволило определить амплитуды первой и второй гармоник результирующего оптического сигнала и вычислить функции арктангенса. Это обеспечило точный расчет значения текущей рабочей точки интерферометра.

Расчет передаточных характеристик методами автоматического регулирования

Рассмотрим этапы процесса нагрева образца. Сначала с определенной скоростью нагревается элемент Пельтье в сборе с керамическими пластинами и полупроводниковыми нагревателями. Затем повышение температуры доходит до термопрокладки, которая приводит к затягиванию процесса нагрева образца. Следует учесть, что профиль изменения температуры в эксперименте получен для термопрокладки, а не

для образца, находящегося на ней. В результате был применен подход к разделению элементов системы на элементарные звенья [32, 33]. Каждый процесс описан определенной функцией с соответствующими коэффициентами, чтобы соответствовать экспериментальному температурному сигналу (рис. 6).

В предложенной системе [27, 28] управляемым элементом выступает модуль Пельтье. Сбор данных осуществлен по двум основным каналам: температура термопары и сдвиг фаз. Элемент динамической системы регулирования отражает переходный процесс, характеризующийся преобразованием тепловой энергии в оптическое изменение фазы, наблюдаемое во времени. Например, переходная функция, соответствующая позиционному аperiodическому звену 1-го порядка, может описать нагрев твердого тела с помощью переменной X , определяющей название процесса

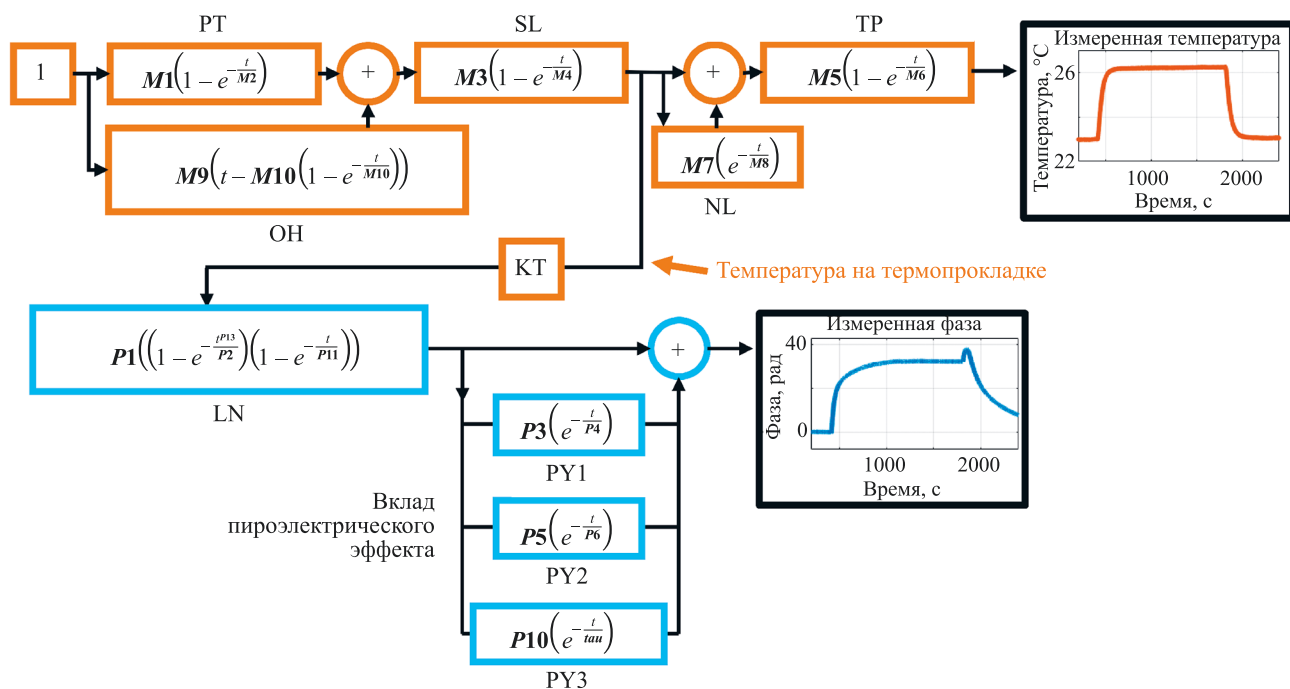


Рис. 6. Блок-схема системы нагрева и реакции

Fig. 6. Block diagram of the heating system with sample

(например, нагрев Пельтье, термопрокладки, образца кристалла НЛ и горячего спая термопары):

$$X = k \left(1 - \exp \left(-\frac{t}{\tau} \right) \right), \quad (1)$$

где k — коэффициент передачи звена; t — время; τ — постоянная времени.

Таким образом, в уравнении (1) вместо переменных k и τ подобраны коэффициенты для описания определенных температурных процессов. Исходя из этого, для блока РТ подобран коэффициент $M1$ вместо k и $M2$ вместо τ , который отвечает за прогрев элемента Пельтье и представляет позиционное апериодическое звено 1-го порядка. Аналогичный подбор коэффициентов выполнен с остальными блоками. Блок ОН отвечает за прогрев элемента Пельтье, когда температура продолжает незначительно расти после достигнутого значения, и имеет вид интегрирующего звена с замедлением. Следующий блок SL контролирует прогрев термопрокладки, расположенной на элементе Пельтье, и имеет вид позиционного апериодического звена 1-го порядка. NL определяет нелинейную зависимость прогрева. За прогрев термопары, которая помещена на термопрокладку, отвечает блок ТР, представленный позиционным апериодическим звеном 1-го порядка.

Температурные флуктуации вызывают фазовый сдвиг, который может быть описан с помощью четырех компонент.

Рассмотрим блок LN, отражающий фазовый сдвиг, обусловленный термооптическим и эффектом термического расширения кристалла НЛ. Блоки PY1, PY2, PY3 определяются дифференцирующим звеном с замедлением и связаны со способностью пьезоэлектрических зарядов к релаксации и рассеиванию через объем образца.

$$PY3 = P10 \left(\exp \left(-\frac{t}{\tau} \right) \right), \quad (2)$$

где $\tau = P7 \exp \left(\frac{-DF^{P9}}{P8} \right)$ и $DF = \frac{dT(LN)}{dt}$.

Отметим, что звено PY3 (2) включает временную константу (τ). В зависимости от градиента скорости профиля температуры данное значение будет изменяться. Переменная τ оказывает влияние на динамику увеличения электрической проводимости в зазоре между электродами, что непосредственно воздействует на ускорение релаксации электрических зарядов в условиях повышения электрического поля.

Подбор коэффициентов звеньев ($M1, M2, \dots, M10, P1, P2, \dots, P11$) произведен методом регрессного анализа по экспериментальным данным (рис. 5). В рассматриваемой системе все приводится к размерности фазы. В связи с этим введен дополнительный коэффициент $P11$. Данный коэффициент учитывает изменение показателя преломления и коэффициент термического расширения при изменении температуры кристалла НЛ. Дополнительный коэффициент определяет изменение фазы при нагреве исследуемого образца на 1°C и учитывает только температурные эффекты.

В результате расчета всех коэффициентов, представленных на рис. 6, рассчитаны временные характеристики релаксации заряда вследствие пьезоэлектрического эффекта.

Результаты и обсуждение

На рис. 7 показаны временные профили сдвига фазы. Эксперимент с исследуемым образцом конструкции 1 выявил, что изменение температуры приводит к аномальному изменению фазы. Кривая сдвига фазы интерферометра имеет более сложный характер, чем сдвиг фазы, обусловленный только температурными эффектами (рис. 7, «сдвиг фазы от нагрева»). Данный факт указывает на то, что одновременно с термооптическим и эластоупругим эффектами существует третий эффект, описывающий функцию изменения пьезоэлектрического сдвига фазы.

Также для образца конструкции 1 замечено, что при изменении температуры или в состоянии ее покоя присутствуют мгновенные скачки фазы (рис. 8). Наблюдается изменение фазы до $0,15$ рад со скоростью до $1,11$ рад/с. Данный эффект может быть вызван микроразрядом на поверхности кристалла НЛ [34].

При анализе полученных фазовых кривых обнаружено, что при повышении температуры образца конструкции 1 сдвиг фазы интерферометра сначала растет в противофазе, а затем разворачивается и начинает стремиться к равновесному положению (рис. 9). Однако для образца конструкции 2 с увеличением температуры фаза изменяется пропорционально, а при возвращении температуры в исходное значение набег фазы пропадает. Таким образом, изменение фазы имеет температурную зависимость, близкую к линейной, и позволяет снизить вклад пьезоэлектрического эффекта, возникающего в кристалле НЛ.

На рис. 10 представлены рассчитанные функциональные зависимости влияния пьезоэлектрического эффекта на основании блоков PY1, PY2, PY3, представленных в блок-схеме (рис. 6). Получено, что конструкция 2 в большей степени повлияла на уменьшение постоянной времени PY2. Рассчитанное время релаксации пьезоэлектрических зарядов сократилось с 960 до 396 с. Отметим, что вклад от блока PY3 стал равен 0. В первые секунды нагрева производная изменения температуры максимальна, а блок PY3 — экспоненциальная постоянная затухания, зависящая от силы воздействия

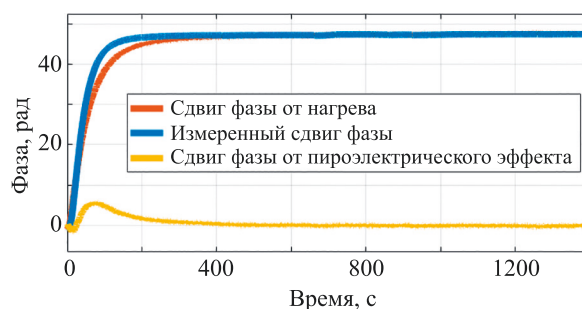


Рис. 7. Сдвиг фазы при нагреве образца на 3°C
Fig. 7. Phase shift when the sample is heated by 3°C

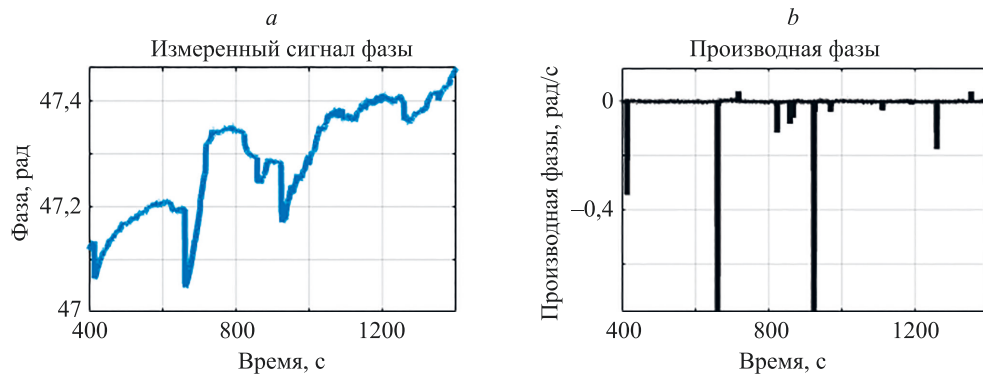


Рис. 8. Измеренный сигнал фазы (a) и производная мгновенных скачков фазы (b) для образца конструкции 1 без воздействий
Fig. 8. Measured phase signal (a) and derivative of instantaneous phase jumps (b) for design 1 without influences

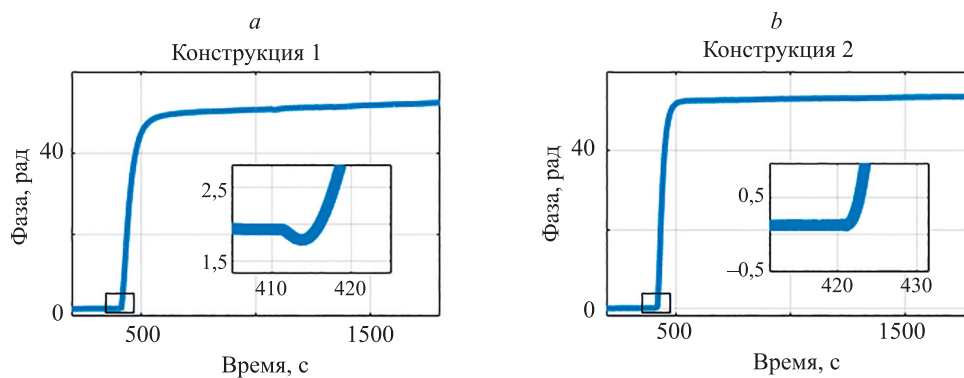


Рис. 9. Экспериментально измеренный сдвиг фазы для образцов конструкций 1 (a) и 2 (b)
Fig. 9. Experimentally measured phase shift for samples of design 1 (a) and design 2 (b)

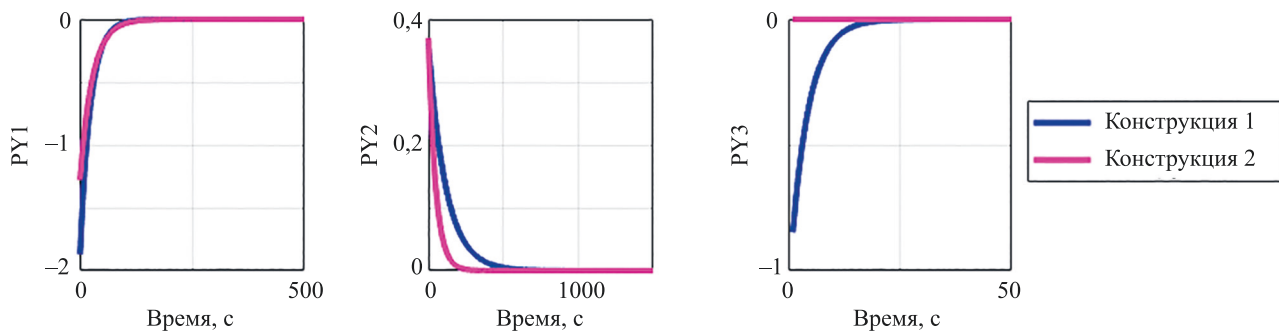


Рис. 10. Функциональные зависимости влияния пьезоэлектрического эффекта для образцов конструкций 1 и 2
Fig. 10. Functional dependence of the pyroelectric effect for samples of design 1 and 2

на образец, т. е. от скорости нагрева. В конструкции 1 при напряженности электрического поля (256 кВ/м) существует большее значение поверхностного заряда на полярных гранях, чем в конструкции 2 при меньшей напряженности электрического поля (138 кВ/м). Температурное воздействие в экспериментах с образцом конструкции 2 не приводит к столь сильному нарушению зарядового равновесия и тем самым «развороту фазы» (рис. 9).

Функциональные зависимости (рис. 10) образца конструкции 2 достигают уровня 0 за более короткое время, чем для образца конструкции 1. Это говорит об отсутствии длительной релаксации зарядов и быстром

перераспределении зарядов внутри образца за счет скомпенсированного поля в межэлектродном зазоре образца. Примененная в работе конструкция 2 приводит к минимизации воздействия пьезоэлектрического эффекта, а также исчезновению мгновенных скачков фазы.

Заключение

Исследован пьезоэлектрический эффект в фазовых модуляторах на основе кристалла ниобата лития. Установлено, что нагрев образца приводит к возникновению пьезоэлектрического поля, которое вызывает перераспределение свободных зарядов внутри кри-

сталла. Это пьезоэлектрическое поле, в свою очередь, вызывает паразитный сдвиг фазы сигнала. Однако для образца модифицированной конструкции 2 изменение температуры оказало существенно меньшее влияние на сдвиг фазы по сравнению со стандартной конструкцией 1. Применение методов систем автоматического регулирования позволило представить измерительную установку в виде динамических звеньев. Расчеты передаточных функций каждого звена в среде MATLAB определили временные параметры всех элементов установки. В результате для конструкции 2 время релаксации пьезоэлектрических зарядов и восстановления

свойств сократилось более чем в два раза. Кроме того, для конструкции 1 обнаружены мгновенные скачки фазы в состоянии покоя, которые связаны с частичной миграцией свободных электронов с боковых граней фазового модулятора на электроды, что ухудшает стабильность работы устройства. Данные скачки отсутствовали в модифицированной конструкции 2. Таким образом, модернизация конструкции 2 позволила достичь сниженной напряженности пьезоэлектрического поля, что обеспечило стабилизацию оптических характеристик и корректную работу фазового модулятора.

Литература

1. Ильичев И.В., Тогузов Н.В., Шамрай А.В. Оптимальная конфигурация пленочного интегрально-оптического поляризатора на подложках ниобата лития // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки. 2009. № 3(83). С. 103–107.
2. Minakata M., Saito S., Shibata M. Two-dimensional distribution of refractive-index changes in Ti-diffused LiNbO₃ strip waveguides // Journal of Applied Physics. 1979. V. 50. N 5. P. 3063–3067. <https://doi.org/10.1063/1.326383>
3. Bazzan M., Sada C. Optical waveguides in lithium niobate: Recent developments and applications // Applied Physics Reviews. 2015. V. 2. N 4. P. 040603. <https://doi.org/10.1063/1.4931601>
4. Korkishko Y.N., Fedorov V.A., Feoktistova O.Y. LiNbO₃ optical waveguide fabrication by high-temperature proton exchange // Journal of Lightwave Technology. 2000. V. 18. N 4. P. 562–568. <https://doi.org/10.1109/50.838131>
5. Becker R.A. Comparison of guided wave interferometric modulators fabricated on LiNbO₃ via Ti indiffusion and proton exchange // Applied Physics Letters. 1983. V. 43. N 2. P. 131–133. <https://doi.org/10.1063/1.94280>
6. Courjal N., Bernal M.-P., Caspar A., Ulliac G., Bassignot F., Gauthier-Manuel L., Suarez M. Lithium niobate optical waveguides and microwaveguides // Emerging Waveguide Technology. InTech, 2018. <https://doi.org/10.5772/intechopen.76798>
7. Lefevre H.C. The Fiber-Optic Gyroscope / third ed. Boston: Artech House, 2022. 500 p.
8. Кузьминов Ю.С. Электрооптический и нелинейнооптический кристалл ниобата лития. М.: Наука, 1987. 263 с.
9. Zhang M., Wang C., Kharel P., Zhu D., Lončar M. Integrated lithium niobate electro-optic modulators: when performance meets scalability // Optica. 2021. V. 8. N 5. P. 652–667. <https://doi.org/10.1364/optica.415762>
10. Chen G., Li N., Ng J.D., Lin H.-L., Zhou Y., Fu Y.H., Lee L.Y.T., Yu Y., Liu A.-Q., Danner A.J. Advances in lithium niobate photonics: development status and perspectives // Advanced Photonics. 2022. V. 4. N 3. P. 034003. <https://doi.org/10.1117/1.ap.4.3.034003>
11. Deppe O., Dörner G., König S., Martin T., Voigt S., Zimmermann S. MEMS and FOG technologies for tactical and navigation grade inertial sensors—recent improvements and comparison // Sensors. 2017. V. 17. N 3. P. 567. <https://doi.org/10.3390/s17030567>
12. Петров А.Н., Тронева А.В., Лебедев В.В., Ильичев И.В., Величко Е.Н., Шамрай А.В. Повышение коэффициента передачи радиочастотной волоконнооптической линии за счет управления рабочей точкой внешнего модулятора // Журнал технической физики. 2015. Т. 85. № 5. С. 131–136.
13. Wooten E.L., Kissa K.M., Yi-Yan A., Murphy E.J., Lafaw D.A., Hallemeier P.F., Maack D., Attanasio D.V., Fritz D.J., McBrien G.J., Bossi D.E. A review of lithium niobate modulators for fiber-optic communications systems // IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics. 2000. V. 6. N 1. P. 69–82. <https://doi.org/10.1109/2944.826874>
14. Yamada S., Minakata M. DC drift phenomena in LiNbO₃ optical waveguide devices // Japanese Journal of Applied Physics. 1981. V. 20. N 4. P. 733. <https://doi.org/10.1143/jjap.20.733>

References

1. Ilyichev I.V., Toguzov N.V., Shamray A.V. Optimal configuration of integrated optical thin film polarizer on lithium niobate substrate. *St. Petersburg Polytechnic University Journal: Physics and Mathematics*, 2009, no. 3(83), pp. 103–107. (in Russian)
2. Minakata M., Saito S., Shibata M. Two-dimensional distribution of refractive-index changes in Ti-diffused LiNbO₃ strip waveguides. *Journal of Applied Physics*, 1979, vol. 50, no. 5, pp. 3063–3067. <https://doi.org/10.1063/1.326383>
3. Bazzan M., Sada C. Optical waveguides in lithium niobate: Recent developments and applications. *Applied Physics Reviews*, 2015, vol. 2, no. 4, pp. 040603. <https://doi.org/10.1063/1.4931601>
4. Korkishko Y.N., Fedorov V.A., Feoktistova O.Y. LiNbO₃ optical waveguide fabrication by high-temperature proton exchange. *Journal of Lightwave Technology*, 2000, vol. 18, no. 4, pp. 562–568. <https://doi.org/10.1109/50.838131>
5. Becker R.A. Comparison of guided wave interferometric modulators fabricated on LiNbO₃ via Ti indiffusion and proton exchange. *Applied Physics Letters*, 1983, vol. 43, no. 2, pp. 131–133. <https://doi.org/10.1063/1.94280>
6. Courjal N., Bernal M.-P., Caspar A., Ulliac G., Bassignot F., Gauthier-Manuel L., Suarez M. Lithium niobate optical waveguides and microwaveguides. *Emerging Waveguide Technology*. InTech, 2018. <https://doi.org/10.5772/intechopen.76798>
7. Lefevre H.C. *The Fiber-Optic Gyroscope*. Third Ed. Boston, Artech House, 2022, 500 p.
8. Kuzminov Iu.S. *Electro-Optical and Non-Linear Optical Lithium Niobate Crystal*. Moscow, Nauka Publ., 1987, 263 p. (in Russian)
9. Zhang M., Wang C., Kharel P., Zhu D., Lončar M. Integrated lithium niobate electro-optic modulators: when performance meets scalability. *Optica*, 2021, vol. 8, no. 5, pp. 652–667. <https://doi.org/10.1364/optica.415762>
10. Chen G., Li N., Ng J.D., Lin H.-L., Zhou Y., Fu Y.H., Lee L.Y.T., Yu Y., Liu A.-Q., Danner A.J. Advances in lithium niobate photonics: development status and perspectives. *Advanced Photonics*, 2022, vol. 4, no. 3, pp. 034003. <https://doi.org/10.1117/1.ap.4.3.034003>
11. Deppe O., Dörner G., König S., Martin T., Voigt S., Zimmermann S. MEMS and FOG technologies for tactical and navigation grade inertial sensors—recent improvements and comparison. *Sensors*, 2017, vol. 17, no. 3, pp. 567. <https://doi.org/10.3390/s17030567>
12. Petrov A.N., Velichko E.N., Shamrai A.V., Tronev A.V., Lebedev V.V., Il'ichev I.V. An increase in the transmission efficiency of an rf fiber-optic line using the working point of an external modulator. *Technical Physics*, 2015, vol. 60, no. 5, pp. 761–766. <https://doi.org/10.1134/S1063784215050217>
13. Wooten E.L., Kissa K.M., Yi-Yan A., Murphy E.J., Lafaw D.A., Hallemeier P.F., Maack D., Attanasio D.V., Fritz D.J., McBrien G.J., Bossi D.E. A review of lithium niobate modulators for fiber-optic communications systems. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2000, vol. 6, no. 1, pp. 69–82. <https://doi.org/10.1109/2944.826874>
14. Yamada S., Minakata M. DC drift phenomena in LiNbO₃ optical waveguide devices. *Japanese Journal of Applied Physics*, 1981, vol. 20, no. 4, pp. 733. <https://doi.org/10.1143/jjap.20.733>
15. Kostritskii S.M., Korkishko Yu.N., Fedorov V.A., Yatsenko A.V. Pyroelectric drift of integrated-optical LiNbO₃ modulators.

15. Kostritskii S.M., Korkishko Yu.N., Fedorov V.A., Yatsenko A.V. Pyroelectric drift of integrated-optical LiNbO₃ modulators // *Ferroelectrics*. 2021. V. 574. N 1. P. 170–178. <https://doi.org/10.1080/00150193.2021.1888062>
16. Hollinger W.P., Kovacs R.A. Tuned integrated optic modulator on a fiber optic gyroscope. Patent US5504580A. 1996.
17. Salvestrini J.P., Guilbert L., Fontana M., Abarkan M., Gille S. Analysis and control of the DC drift in LiNbO₃-based mach–zehnder modulators // *Journal of Lightwave Technology*. 2011. V. 29. N 10. P. 1522–1534. <https://doi.org/10.1109/jlt.2011.2136322>
18. Popescu S.T., Petris A., Vlad V.I. Interferometric measurement of the pyroelectric coefficient in lithium niobate // *Journal of Applied Physics*. 2013. V. 113. N 4. P. 043101. <https://doi.org/10.1063/1.4788696>
19. Parravicini J., Safioui J., Degiorgio V., Minzioni P., Chauvet M. All-optical technique to measure the pyroelectric coefficient in electro-optic crystals // *Journal of Applied Physics*. 2011. V. 109. N 3. P. 033106. <https://doi.org/10.1063/1.3544069>
20. Евдокимов С.В., Шостак Р.И., Яценко А.В. Аномалии пьезоэлектрических свойств кристаллов LiNbO₃ конгруэнтного состава // *Физика твердого тела*. 2007. V. 49. N 10. P. 1866–1870.
21. Bulmer C.H., Burns W.K., Hiser S.C. Pyroelectric effects in LiNbO₃ channel waveguide devices // *Applied Physics Letters*. 1986. V. 48. N 16. P. 1036–1038. <https://doi.org/10.1063/1.96640>
22. Nagata H. Activation energy of DC-drift of x-cut LiNbO₃ optical intensity modulators // *IEEE Photonics Technology Letters*. 2000. V. 12. N 4. P. 386–388. <https://doi.org/10.1109/68.839027>
23. Skeath P., Bulmer C.H., Hiser S.C., Burns W.K. Novel electrostatic mechanism in the thermal instability of z-cut LiNbO₃ interferometers // *Applied Physics Letters*. 1986. V. 49. N 19. P. 1221–1223. <https://doi.org/10.1063/1.97419>
24. Seino M., Nakazawa T., Kubota Y., Doi M., Yamane T., Hakogi H. A low DC-drift Ti:LiNbO₃ modulator assured over 15 years // *Proc. of the Optical Fiber Communication Conference*. 1992. P. 325–328. <https://doi.org/10.1364/ofc.1992.pd3>
25. Yatsenko A.V., Pritulenko A.S., Evdokimov S.V., Palatnikov M.N., Sidorov N.V. Specific features of electrical conductivity of LiTaO₃ and LiNbO₃ crystals in the temperature range of 290–450 K. *Physics of the Solid State*, 2015, vol. 57, no. 8, pp. 1547–1550. <https://doi.org/10.1134/S1063783415050339>
26. Rosenman G., Shur D., Krasik Ya.E., Dunaevsky A. Electron emission from ferroelectrics. *Journal of Applied Physics*, 2000, vol. 88, no. 1, pp. 6109–6161. <https://doi.org/10.1063/1.1319378>
27. Смирнова А.В., Стригалева В.Е., Варжель С.В. Исследование способов стабилизации оптических параметров фазового модулятора путем подавления пьезоэлектрического эффекта // *Навигация и управление движением: Материалы XXIV конференции молодых ученых с международным участием*. 2022. С. 85–87.
28. Шулепова А.В., Аксарин С.М., Стригалева В.Е. Исследование сдвига фазы под действием пьезоэлектрического поля в Ti:LiNbO₃ модуляторе // *Альманах научных работ молодых учёных Университета ИТМО*. Т. 4. СПб., 2021. С. 102–106.
29. Sosunov A., Ponomarev R., Zhuravlev A., Mushinsky S., Kuneva M. Reduction in DC-drift in LiNbO₃-based electro-optical modulator // *Photonics*. 2021. V. 8. N 12. P. 571. <https://doi.org/10.3390/photonics8120571>
30. Яценко А.В., Пritуленко А.С., Ягупов С.В., Сугак Д.Ю., Сольский И.М. Исследование стабильности электрических свойств восстановленных кристаллов LiNbO₃ // *Журнал технической физики*. 2017. Т. 87. № 7. С. 1049–1052. <https://doi.org/10.21883/JTF.2017.07.44676.1984>
31. Fridkin V.M. *Photoferroelectrics*. Springer, Springer, 1979. 176 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-81351-1>
32. Бесекерский В.А., Попов Е.П. Теория систем автоматического регулирования. М.: Наука, 1972. 768 с.
33. Щербаков В.С., Лазута И.В. Теория автоматического управления. Линейные непрерывные системы: учебное пособие. Омск: СибАДИ, 2013. 142 с.
34. Thiele F., Hummel T., Amelie Lange N., Dreher F., Protte M., Bruch F., Lengeling S., Herrmann H., Eigner C., Silberhorn C. Pyroelectric influence on lithium niobate during the thermal transition for cryogenic integrated photonics // *Materials for Quantum Technology*. 2024. V. 4. N 1. P. 015402. <https://doi.org/10.1088/2633-4356/ad207d>
35. *Ferroelectrics*, 2021, vol. 574, no. 1, pp. 170–178. <https://doi.org/10.1080/00150193.2021.1888062>
36. Hollinger W.P., Kovacs R.A. Tuned integrated optic modulator on a fiber optic gyroscope. Patent US5504580A. 1996.
37. Salvestrini J.P., Guilbert L., Fontana M., Abarkan M., Gille S. Analysis and control of the DC drift in LiNbO₃-based mach–zehnder modulators. *Journal of Lightwave Technology*, 2011, vol. 29, no. 10, pp. 1522–1534. <https://doi.org/10.1109/jlt.2011.2136322>
38. Popescu S.T., Petris A., Vlad V.I. Interferometric measurement of the pyroelectric coefficient in lithium niobate. *Journal of Applied Physics*, 2013, vol. 113, no. 4, pp. 043101. <https://doi.org/10.1063/1.4788696>
39. Parravicini J., Safioui J., Degiorgio V., Minzioni P., Chauvet M. All-optical technique to measure the pyroelectric coefficient in electro-optic crystals. *Journal of Applied Physics*, 2011, vol. 109, no. 3, pp. 033106. <https://doi.org/10.1063/1.3544069>
40. Yevdokimov S.V., Shostak R.I., Yatsenko A.V. Anomalies in the pyroelectric properties of LiNbO₃ crystals of the congruent composition. *Physics of the Solid State*, 2007, vol. 49, no. 10, pp. 1957–1962. <https://doi.org/10.1134/S1063783407100241>
41. Bulmer C.H., Burns W.K., Hiser S.C. Pyroelectric effects in LiNbO₃ channel waveguide devices. *Applied Physics Letters*, 1986, vol. 48, no. 16, pp. 1036–1038. <https://doi.org/10.1063/1.96640>
42. Nagata H. Activation energy of DC-drift of x-cut LiNbO₃ optical intensity modulators. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2000, vol. 12, no. 4, pp. 386–388. <https://doi.org/10.1109/68.839027>
43. Skeath P., Bulmer C.H., Hiser S.C., Burns W.K. Novel electrostatic mechanism in the thermal instability of z-cut LiNbO₃ interferometers. *Applied Physics Letters*, 1986, vol. 49, no. 19, pp. 1221–1223. <https://doi.org/10.1063/1.97419>
44. Seino M., Nakazawa T., Kubota Y., Doi M., Yamane T., Hakogi H. A low DC-drift Ti:LiNbO₃ modulator assured over 15 years. *Proc. of the Optical Fiber Communication Conference*, 1992, pp. 325–328. <https://doi.org/10.1364/ofc.1992.pd3>
45. Yatsenko A.V., Pritulenko A.S., Evdokimov S.V., Palatnikov M.N., Sidorov N.V. Specific features of electrical conductivity of LiTaO₃ and LiNbO₃ crystals in the temperature range of 290–450 K. *Physics of the Solid State*, 2015, vol. 57, no. 8, pp. 1547–1550. <https://doi.org/10.1134/S1063783415050339>
46. Rosenman G., Shur D., Krasik Ya.E., Dunaevsky A. Electron emission from ferroelectrics. *Journal of Applied Physics*, 2000, vol. 88, no. 1, pp. 6109–6161. <https://doi.org/10.1063/1.1319378>
47. Smirnova A.V., Varzhel S.V., Strigalev V.E. Methods of suppressing the pyroelectric effect to stabilize the optical parameters in a phase modulator. *Proc. of the 24th Conference of Young Scientists "Navigation and Motion Control" (with international participants)*, 2022, pp. 85–87. (in Russian)
48. Shulepova A.V., Aksarin S.M., Strigalev V.E. Study of phase shift under the influence of a pyroelectric field in a Ti:LiNbO₃ modulator. *Almanac of scientific works of young scientists of ITMO University. Vol. 4*. St. Petersburg, 2021, pp. 102–106. (in Russian)
49. Sosunov A., Ponomarev R., Zhuravlev A., Mushinsky S., Kuneva M. Reduction in DC-drift in LiNbO₃-based electro-optical modulator. *Photonics*, 2021, vol. 8, no. 12, pp. 571. <https://doi.org/10.3390/photonics8120571>
50. Yatsenko A.V., Pritulenko A.S., Yagupov S.V., Sugak D.Y., Sol'skii I.M. Investigation of the stability of electrical properties of reduced linbo3 crystals. *Technical Physics*, 2017, vol. 62, no. 7, pp. 1065–1068. <https://doi.org/10.1134/S1063784217070271>
51. Fridkin V.M. *Photoferroelectrics*. Springer, Springer, 1979, 176 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-81351-1>
52. Besekerskii V.A., Popov E.P. *Theory of Automatic Control Systems*. Moscow, Nauka, 1972, 768 p. (in Russian)
53. Shcherbakov V.S., Lazuta I.V. *The theory of automatic control. linear continuous systems*. Omsk, SibADI, 2013, 142 p. (in Russian)
54. Thiele F., Hummel T., Amelie Lange N., Dreher F., Protte M., Bruch F., Lengeling S., Herrmann H., Eigner C., Silberhorn C. Pyroelectric influence on lithium niobate during the thermal transition for cryogenic integrated photonics. *Materials for Quantum Technology*, 2024, vol. 4, no. 1, pp. 015402. <https://doi.org/10.1088/2633-4356/ad207d>

Авторы

Шулепова Алена Викторовна — инженер, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 57226292609](https://orcid.org/0000-0001-6898-3400), <https://orcid.org/0000-0001-6898-3400>, 79213040490@ya.ru

Шулепов Владимир Андреевич — кандидат технических наук, начальник группы, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 57191411190](https://orcid.org/0000-0003-2168-8046), <https://orcid.org/0000-0003-2168-8046>, shulepov_vladimir@mail.ru

Стригалева Владимир Евгеньевич — кандидат физико-математических наук, доцент, профессор, старший научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 6603225596](https://orcid.org/0000-0002-7151-9235), <https://orcid.org/0000-0002-7151-9235>, vstrglv@mail.ru

Authors

Alena V. Shulepova — Engineer, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, [sc 57226292609](https://orcid.org/0000-0001-6898-3400), <https://orcid.org/0000-0001-6898-3400>, 79213040490@ya.ru

Vladimir A. Shulepov — PhD, Head of the Group, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, [sc 57191411190](https://orcid.org/0000-0003-2168-8046), <https://orcid.org/0000-0003-2168-8046>, shulepov_vladimir@mail.ru

Vladimir E. Strigalev — PhD (Physics & Mathematics), Associate Professor, Professor, Senior Researcher, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, [sc 6603225596](https://orcid.org/0000-0002-7151-9235), <https://orcid.org/0000-0002-7151-9235>, vstrglv@mail.ru

Статья поступила в редакцию 28.03.2024
Одобрена после рецензирования 19.06.2024
Принята к печати 22.07.2024

Received 28.03.2024
Approved after reviewing 19.06.2024
Accepted 22.07.2024



Работа доступна по лицензии
Creative Commons
«Attribution-NonCommercial»

ФОТОНИКА И ОПТОИНФОРМАТИКА PHOTONICS AND OPTOINFORMATICS

doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-548-553

УДК 535.421

Изменение контраста изображения объекта наблюдения при однопиксельной и матричной визуализации через рассеивающую среду

Егор Николаевич Опарин¹✉, Анастасия Константиновна Лаппо-Данилевская²,
Алексей Викторович Черных³, Антон Николаевич Цыпкин⁴

^{1,2,3,4} Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

¹ en_oparin@itmo.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-4009-7594>

² ankonstLD@itmo.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1762-2688>

³ chernykh_a@itmo.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1297-3267>

⁴ tsyppkinan@itmo.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9254-1116>

Аннотация

Введение. Особенностью техники однопиксельной визуализации является возможность регистрации изображения на детекторе без пространственного разрешения, которое достигается путем подсвечивания объекта наблюдения пространственно-модулированными паттернами освещения. Данная техника применяется для получения изображений объектов, находящихся в затрудняющих видимость условиях, таких как дым или туман. Особенностью проведенных на данный момент исследований является доказательство работоспособности методов улучшения качества изображений, полученных методом однопиксельной визуализации, при выбранных условиях для рассеивающей среды без выявления границ применимости. Данная работа экспериментально демонстрирует влияние количества рассеивающих частиц в среде на контраст однопиксельных изображений. Кроме того, выполнено сравнение контраста изображений, полученных с помощью однопиксельной визуализации и матричного приемника, выполненного по технологии прибора с зарядовой связью (ПЗС-камеры). Это позволяет не только сравнить методы визуализации при изменяющихся условиях, но и оценить влияние потерь, вносимых рассеивающей средой, на контраст однопиксельных изображений. **Метод.** В работе использована экспериментальная схема однопиксельной визуализации, в которой однопиксельный детектор и фокусирующая линза заменены на ПЗС-камеру для получения сравнительных изображений. Между объектом и детектором помещалась кювета с раствором молока в воде различных объемных концентраций. Для каждой концентрации изображение объекта восстанавливалось методом однопиксельной визуализации и регистрировалось на ПЗС-камеру до достижения концентрации рассеивающего вещества, при котором ни один из методов не позволил получить изображение. Затем для каждого полученного изображения рассчитывался контраст. **Основные результаты.** Показано, что восстановленному методом однопиксельной визуализации изображению при концентрациях молока до 1/150 соответствует средний контраст 0,21, не снижающийся по мере роста рассеяния. При этом для ПЗС-камеры средний контраст в отсутствие рассеяния составляет 0,70, а с ростом концентрации молока монотонно снижается до 0,07. **Обсуждение.** Основной особенностью изображений, полученных методом однопиксельной визуализации сквозь рассеивающие среды, является сохранение среднего контраста при увеличении концентрации рассеивающего вещества. Полученный результат указывает на сохранение отношений между всеми зарегистрированными на одиночный детектор интенсивностями, используемыми при построении корреляционной функции. Однопиксельное изображение перестает восстанавливаться в случае, когда свет, провазимодействовавший с объектом из-за многократного рассеяния и поглощения водным раствором молока, не доходит до детектора. Рассмотренные особенности показывают перспективность использования однопиксельной визуализации для построения систем дистанционного зондирования с распознаванием образов объектов, так как позволяют получать схожие изображения при различных коэффициентах рассеяния рассеивающей среды.

Ключевые слова

однопиксельная визуализация, системы визуализации, дистанционное зондирование, рассеяние, обработка изображений, пространственный модулятор света

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки Российской Федерации в рамках государственного задания (паспорт № 2019-0903).

© Опарин Е.Н., Лаппо-Данилевская А.К., Черных А.В., Цыпкин А.Н., 2024

Ссылка для цитирования: Опарин Е.Н., Лаппо-Данилевская А.К., Черных А.В., Цыпкин А.Н. Изменение контраста изображения объекта наблюдения при однопиксельной и матричной визуализации через рассеивающую среду // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2024. Т. 24, № 4. С. 548–553. doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-548-553

Contrast change of the test object image in single-pixel and focal-plane array imaging through a scattering medium

Egor N. Oparin¹✉, Anastasiia K. Lappo-Danilevskaia², Aleksey V. Chernykh³, Anton N. Tsyppkin⁴

^{1,2,3,4} ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

¹ en_oparin@itmo.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-4009-7594>

² ankonsLD@itmo.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1762-2688>

³ chernykh_a@itmo.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1297-3267>

⁴ tsypkinan@itmo.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9254-1116>

Abstract

In recent years, the single-pixel imaging technique which uses a detector without spatial resolution and spatially modulated illumination patterns to reconstruct an object image has been finding its application for imaging objects in visibility obstructing conditions such as smoke or fog. The unifying feature of the studies published so far is the proof of workability of the methods proposed by the authors to improve the quality of single-pixel imaging images at their chosen scattering medium parameters without revealing the limits of applicability. This work experimentally demonstrates the influence of the number of scattering particles in the medium on the contrast of single-pixel images, and also compares the results with images obtained with a CCD camera, which allows not only to compare imaging methods under varying conditions, but also to evaluate the influence of losses introduced by the presence of a scattering medium on the contrast of single-pixel images. This work uses the classical experimental scheme of single-pixel imaging in which the single-pixel detector and focusing lens were replaced by a CCD camera to obtain images for comparison. A cuvette containing milk solution of different concentrations was placed between the object and the detector. For each concentration, an image of the object was reconstructed using the single-pixel imaging method and then recorded on the CCD camera until the concentration of the scattering agent was reached at which no image could be obtained by either method. The contrast was then calculated for each image obtained. It is shown that the single-pixel imaging method for milk concentrations up to 1/150 has an average contrast of 0.21, which does not decrease as the scattering increases. At the same time for CCD camera the contrast in the absence of scattering is 0.70, and with increasing milk concentration monotonically decreases to 0.07. The main feature of images obtained by single-pixel imaging through scattering media is the preservation of contrast as the concentration of the scattering medium increases indicating that the relationships between all the recorded on a single-pixel detector intensities used in the construction of the correlation function are preserved. A single-pixel image ceases to be reconstructed only when information about the object does not reach the detector due to multiple scattering and absorption produced by a milk solution. The considered features show the prospect of using single-pixel imaging for the construction of remote sensing systems with pattern recognition, as they allow obtaining similar images at different scattering coefficients of the scattering medium.

Keywords

single-pixel imaging, imaging systems, remote sensing, scattering, image processing, spatial light modulator

Acknowledgements

The work was funded by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation (Passport No. 2019-0903).

For citation: Oparin E.N., Lappo-Danilevskaia A.K., Chernykh A.V., Tsyppkin A.N. Contrast change of the test object image in single-pixel and focal-plane array imaging through a scattering medium. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 4, pp. 548–553 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-548-553

Введение

Получение изображений в рассеивающих средах является важной задачей современных научных исследований и имеет широкие перспективы применения в таких областях как биомедицинская визуализация [1], подводная съемка [2] и навигация в условиях тумана [3]. Перспективным подходом для решения обозначенной задачи считается однопиксельная визуализация (ОВ). Главной особенностью ОВ в данном контексте является тот факт, что регистрация изображения происходит не на камеру (матрицу из детекторов), а на одиночный детектор [4]. При фокусировке излучения с одинаковыми параметрами (длина волны, интенсивность) на матрицу детекторов и одиночный детектор

равных площадей, интенсивность излучения на матрице распределяется по площадям множества пикселей. Это приводит к тому, что интенсивность света на каждом отдельном пикселе матрицы будет меньше, чем на одиночном детекторе, который получает всю интенсивность света на одну площадь. Благодаря этому для заданного порога шума системы при использовании ОВ достигается рост сигнала, несущего информацию об объекте наблюдения. Дополнительное превышение полезного сигнала над шумом может быть использовано для достижения таких преимуществ, как увеличение дальности системы визуализации, повышение ее чувствительности или для снижения оптической мощности, используемой для зондирования.

Разновидность ОВ, называемая фантомной, использующаяся в настоящей работе, требует освещения объекта наблюдения набором структурированных оптических полей, называемых паттернами освещения [5]. Последующее восстановление изображения основывается на расчете корреляционной функции между паттернами освещения и соответствующими им значениями интенсивности света, прошедшего через объект или отраженного им. Полученные оптические поля формируют путем модуляции лазерного излучения специальными диффузорами [6] или управляемыми пространственными модуляторами света [7].

При разработке систем дистанционного зондирования на основе ОВ в качестве доминирующего фактора, влияющего на качество изображения, в работе [8] рассмотрено динамическое изменение пропускания среды между объектом и приемником. Такая нестационарность приводит к флуктуациям регистрируемого сигнала, что делает корреляцию паттернов освещения и соответствующих им значений интенсивности невозможной. Вместе с тем возможное влияние значения такой характеристики среды как концентрация рассеивающих частиц на пространственную структуру паттернов игнорируется, что при рассмотрении систем биомедицинской визуализации напротив считается приоритетным [9]. Таким образом, остаются не выявленными границы применимости метода ОВ в зависимости от коэффициента рассеяния среды, за которой расположен объект.

Метод исследования

В настоящей работе экспериментально исследовано влияние рассеивающей среды с различной концентрацией рассеивающих частиц на качество изображений, получаемых при ОВ и визуализации с помощью матричного приемника, выполненного по технологии прибора с зарядовой связью (ПЗС-камеры). Выполнено сравнение контраста изображений, полученных с помощью ОВ и ПЗС-камеры при изменении объемной концентрации молока в водном растворе.

Восстановление изображения методом ОВ происходит путем расчета корреляционной функции между различными паттернами освещения, взаимодействующими с объектом, и соответствующими им значениями интенсивности на однопиксельном детекторе. Наиболее широко распространенным набором паттернов являются паттерны освещения, формируемые из одноименной матрицы. Поскольку ее элементы принимают значения -1 и 1 , а пространственный модулятор света способен отобразить значения в диапазоне $(0, 1)$, то для получения изображения использован разностный метод, описанный в работе [10]. В результате использования данного метода получено улучшение качества восстановленного изображения за счет вычитания коррелированных шумов и удвоение числа паттернов, необходимых для полного восстановления однопиксельного изображения. Для полученных в настоящей работе изображений с разрешением 64×64 пикселей число паттернов составляет $4096 \times 2 = 8192$. Особенность паттернов освещения — их ортогональность, что по-

зволяет производить восстановление изображения по формуле вида:

$$GI(x, y) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N h_i (B_{i+} - B_{i-}),$$

где $GI(x, y)$ — пространственное распределение интенсивности света (изображения); $h_i(x, y)$ — сумма паттернов освещения с весовыми коэффициентами; B_{i+} и B_{i-} — интенсивности на однопиксельном детекторе, соответствующие освещению объекта положительной h_i и отрицательной $h_i = h_{i+} - h_{i-}$ частями.

Для экспериментального восстановления однопиксельных изображений сконструирована стандартная установка [7], схема которой приведена на рис. 1.

Излучение непрерывного лазера с длиной волны 532 нм освещает пространственный модулятор света на основе цифрового микрозеркального устройства (DLP 6500 0.65, Texas Instruments, США), где оно модулируется паттерном освещения h_{i+} . Отраженное от пространственного модулятора излучение фокусируется на однопиксельный фотодиодный детектор (BPW34, Vishay Intertechnology, США), установленный после собирающей линзы, обеспечивающей сбор всего проходящего лазерного света в пределах активной области фотодетектора. Полученное значение соответствует B_{i+} . Между цифровым микрозеркальным устройством и детектором на оптическом пути установлена кювета толщиной 10 мм с водным раствором молока жирностью 3,2 %. Объемная доля молока изменялась в ходе эксперимента. Далее после кюветы расположен объект наблюдения, представленный вырезанной в непрозрачном пластике сквозной полостью в виде буквы τ размером 8×6 мм.

Для сравнения ОВ с классическими методами собирающая линза и детектор заменялись ПЗС-камерой (MV-UB130GM, MindVision, Китай). Экспериментально получено два набора изображений при различной концентрации молока в воде (рис. 2). Один набор включал однопиксельные изображения, другой — полученные с помощью ПЗС-камеры.

Рассеивающие частицы молока имеют размер больший, чем длина волны (λ) падающего излучения, в

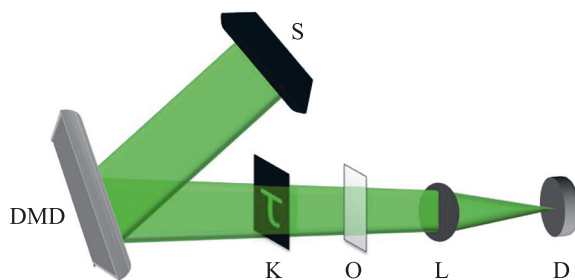


Рис. 1. Экспериментальная схема реализации метода однопиксельной визуализации: S — источник излучения; O — объект; DMD — цифровое микрозеркальное устройство; K — кювета с рассеивающей средой; L — линза; D — однопиксельный детектор

Fig. 1. Experimental scheme for implementing the single-pixel imaging method. Here S — light source, O — object, DMD — digital micromirror device, K — cuvette with scattering medium, L — lens, D — single-pixel detector

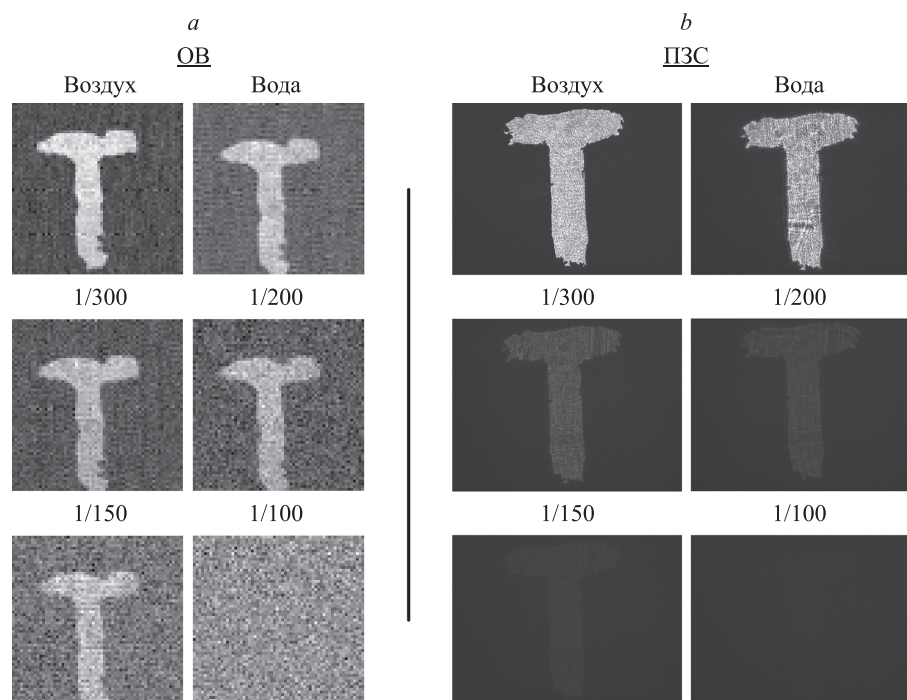


Рис. 2. Однопиксельная визуализация (а) и ПЗС-изображения (b) тестового объекта размерами 10×10 мм, полученные через среду с различным рассеянием, воздействие которого регулируется концентрацией молока в воде. Запись концентраций произведена в соотношении $V(\text{молока})/V(\text{воды})$

Fig. 2. Single-pixel (OB) and conventional (ПЗС) images of a test object obtained through a medium with different scattering, the contribution of which was controlled by the concentration of milk in water. Milk concentration is given as $V(\text{milk})/V(\text{water})$

связи с чем для их описания использована теория рассеяния Ми, представляющая частицу в виде идеальной жесткой сферы. Диаметр рассеивающих частиц (d) молока составляет от десятых до десятков микрометров [11]. Величиной, характеризующей способность тела рассеивать падающее на него излучение, является коэффициент рассеяния. Для описания среды, содержащей множество рассеивающих частиц, использован коэффициент рассеяния μ_s , рассчитанный по формуле:

$$\mu_s(d, \lambda) = NV^{-1}\sigma_s,$$

где V — объем среды; N — число частиц; σ_s — эффективное сечение рассеяния частицы [12].

Коэффициент рассеяния напрямую зависит от концентрации рассеивающих частиц, выражающейся как отношение числа частиц N к объему V . При его увеличении число фотонов, провзаимодействовавших с объектом и дошедших до детектора, уменьшается. В результате данного взаимодействия значение μ_s может быть увеличено за счет увеличения концентрации молока в водном растворе. Аналогичный алгоритм описан в работе [13]. При этом потери происходят не только из-за рассеяния, но также и из-за поглощения средой: коэффициент поглощения молока на используемой длине волны превышает коэффициент поглощения воды [11].

Экспериментальные результаты

На рис. 2 приведены экспериментальные результаты исследования предельной концентрации молока, при которой изображение объекта различимо для ме-

тодов ОБ и ПЗС-камеры и равно отношению 1/150. Следовательно, излучения, провзаимодействовавшего с объектом и дошедшего сквозь рассеивающую среду до детектора, достаточно для восстановления изображения. По изображениям, полученным с помощью ПЗС-камеры, прослеживается ухудшение различимости объектов от фона. Отметим, что контур объектов, полученных с помощью обоих методов восстановления изображений, остается четким, а искажение пространственного распределения освещения рассеивающей средой может привести к размытию границ [14]. Значит, в рассматриваемой конфигурации экспериментальной установки, симулирующей устройство для дистанционного зондирования объектов сквозь рассеивающую среду, однопиксельным детектором и ПЗС-камерой вклад рассеивающей среды можно свести к уменьшению интенсивности излучения, провзаимодействовавшего с объектом и дошедшего сквозь рассеивающую среду до детектора, а не к нарушению его пространственного распределения.

Важной для распознавания объектов наблюдения характеристикой системы дистанционного зондирования является контраст получаемых изображений. Данный параметр описывает разницу яркости различных участков изображения (как правило — область изображения объекта и фона) и вычисляется при помощи выражения:

$$\gamma = \frac{B_{\max} - B_{\min}}{B_{\max} + B_{\min}},$$

где $B_{\max}$ и $B_{\min}$ — максимальная и минимальная яркости рассматриваемого изображения.

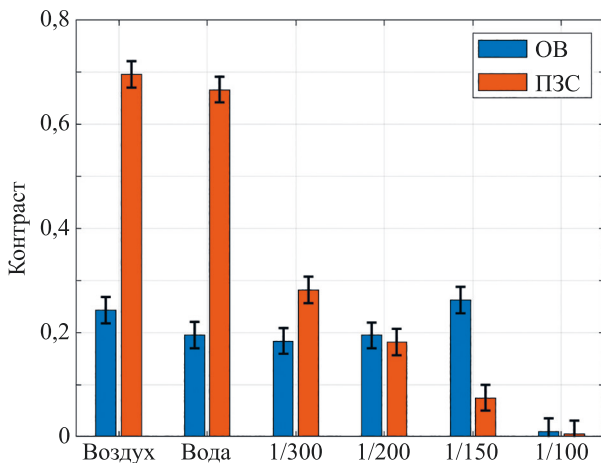


Рис. 3. Контраст изображений, полученных при однопиксельной (ОВ) и матричной (ПЗС) визуализации через раствор молока в воде. Концентрация молока записана в соотношении $V(\text{молока})/V(\text{воды})$

Fig. 3. Contrast of images obtained by single-pixel (blue bars) and conventional (red bars) imaging through a solution of milk in water. Milk concentration is given as $V(\text{milk})/V(\text{water})$

Погрешность рассчитанных значений составляет 0,02 для однопиксельного детектора и 0,01 для матричного. Величина погрешности обуславливается внутренними шумами детекторов и источника. При визуализации через воздух или чистую воду влияние рассеяния отсутствует или мало. Из рис. 3 видно, что контраст изображения с ПЗС-камеры выше, чем для ОВ: 0,69 и 0,67 для воздуха и воды против 0,24 и 0,20 соответственно. По мере увеличения концентрации молока коэффициент рассеяния растет, следовательно,

но, увеличивается и воздействие рассеяния. При этом растет и величина поглощения, из-за чего наблюдается резкий спад контраста классических изображений до 0,07 при сохранении данного параметра для однопиксельных в районе 0,21. Это происходит из-за того, что в отличие от ПЗС-камеры, где контраст изображения зависит от интенсивности сигнала, дошедшего от объекта до детектора, качество построения корреляционной функции в методе ОВ зависит от сохранения относительных величин всех зарегистрированных на одиночный детектор интенсивностей. При этом в обоих случаях при сильном ослаблении сигнала, соответствующем концентрации молока 1/100, изображение объекта не восстанавливается.

Заключение

В работе экспериментально продемонстрировано влияние концентрации рассеивающего вещества в водном растворе на контраст изображений, полученных при однопиксельной и матричной визуализации. Для однопиксельного метода визуализации характерен меньший контраст изображений в прозрачных средах, сохраняющийся по мере увеличения концентрации рассеивающих частиц в среде. У полученных с помощью прибора с зарядовой связью (ПЗС-камеры) изображений контраст в прозрачных средах выше, чем при использовании метода однопиксельной визуализации. Отметим, что с ростом концентрации молока в воде контраст снижается в 10 раз относительно визуализации через воздух или в 9,5 раза относительно чистой воды, становясь ниже, чем при однопиксельной визуализации.

Литература

- Paniagua-Diaz A.M., Starshynov I., Fayard N., Goetschy A., Pierrat R., Carminati R., Bertolotti J. Blind ghost imaging // *Optica*. 2019. V. 6. N 4. P. 460–464. <https://doi.org/10.1364/optica.6.000460>
- Le M., Wang G., Zheng H., Liu J., Zhou Y., Xu Z. Underwater computational ghost imaging // *Optics Express*. 2017. V. 25. N 19. P. 22859–22868. <https://doi.org/10.1364/oe.25.022859>
- Zhang Y., Li S., Sun J., Zhang X., Liu D., Zhou X., Li H., Hou Y. Three-dimensional single-photon imaging through realistic fog in an outdoor environment during the day // *Optics Express*. 2022. V. 30. N 19. P. 34497–34509. <https://doi.org/10.1364/oe.464297>
- Gatti A., Bache M., Magatti D., Brambilla E., Ferri F., Lugiato L.A. Coherent imaging with pseudo-thermal incoherent light // *Journal of Modern Optics*. 2006. V. 53. N 5-6. P. 739–760. <https://doi.org/10.1080/09500340500147240>
- Shapiro J.H., Boyd R.W. The physics of ghost imaging // *Quantum Information Processing*. 2012. V. 11. N 4. P. 949–993. <https://doi.org/10.1007/s11128-011-0356-5>
- Gatti A., Brambilla E., Caspani L., Jedrkiewicz O., Lugiato L.A. Quantum imaging and spatio-temporal correlations // *Optics and Spectroscopy*. 2011. V. 111. N 4. P. 505–509. <https://doi.org/10.1134/s0030400x11110087>
- Bromberg Y., Katz O., Silberberg Y. Ghost imaging with a single detector // *Physical Review A*. 2009. V. 79. N 5. P. 053840. <https://doi.org/10.1103/physreva.79.053840>
- Bashkansky M., Park S.D., Reintjes J. Single pixel structured imaging through fog // *Applied Optics*. 2021. V. 60. N 16. P. 4793–4797. <https://doi.org/10.1364/ao.425281>
- Huyan D., Lagrosas N., Shiina T. Target imaging in scattering media using ghost imaging optical coherence tomography // *APL Photonics*. 2022. V. 7. N 8. P. 086104. <https://doi.org/10.1063/5.0099638>

References

- Paniagua-Diaz A.M., Starshynov I., Fayard N., Goetschy A., Pierrat R., Carminati R., Bertolotti J. Blind ghost imaging. *Optica*, 2019, vol. 6, no. 4, pp. 460–464. <https://doi.org/10.1364/optica.6.000460>
- Le M., Wang G., Zheng H., Liu J., Zhou Y., Xu Z. Underwater computational ghost imaging. *Optics Express*, 2017, vol. 25, no. 19, pp. 22859–22868. <https://doi.org/10.1364/oe.25.022859>
- Zhang Y., Li S., Sun J., Zhang X., Liu D., Zhou X., Li H., Hou Y. Three-dimensional single-photon imaging through realistic fog in an outdoor environment during the day. *Optics Express*, 2022, vol. 30, no. 19, pp. 34497–34509. <https://doi.org/10.1364/oe.464297>
- Gatti A., Bache M., Magatti D., Brambilla E., Ferri F., Lugiato L.A. Coherent imaging with pseudo-thermal incoherent light. *Journal of Modern Optics*, 2006, vol. 53, no. 5-6, pp. 739–760. <https://doi.org/10.1080/09500340500147240>
- Shapiro J.H., Boyd R.W. The physics of ghost imaging. *Quantum Information Processing*, 2012, vol. 11, no. 4, pp. 949–993. <https://doi.org/10.1007/s11128-011-0356-5>
- Gatti A., Brambilla E., Caspani L., Jedrkiewicz O., Lugiato L.A. Quantum imaging and spatio-temporal correlations. *Optics and Spectroscopy*, 2011, vol. 111, no. 4, pp. 505–509. <https://doi.org/10.1134/s0030400x11110087>
- Bromberg Y., Katz O., Silberberg Y. Ghost imaging with a single detector. *Physical Review A*, 2009, vol. 79, no. 5, pp. 053840. <https://doi.org/10.1103/physreva.79.053840>
- Bashkansky M., Park S.D., Reintjes J. Single pixel structured imaging through fog. *Applied Optics*, 2021, vol. 60, no. 16, pp. 4793–4797. <https://doi.org/10.1364/ao.425281>
- Huyan D., Lagrosas N., Shiina T. Target imaging in scattering media using ghost imaging optical coherence tomography. *APL Photonics*, 2022, vol. 7, no. 8, pp. 086104. <https://doi.org/10.1063/5.0099638>

10. Yu Z., Wang X.-Q., Gao C., Li Z., Zhao H., Yao Z. Differential Hadamard ghost imaging via single-round detection // *Optics Express*. 2021. V. 29. N 25. P. 41457–41466. <https://doi.org/10.1364/oe.441501>
11. Stocker S., Foschum F., Krauter P., Bergmann F., Hohmann A., Happ C.S., Kienle A. Broadband optical properties of milk // *Applied Spectroscopy*. 2017. V. 71. N 5. P. 951–962. <https://doi.org/10.1177/0003702816666289>
12. Dahm D.J. Explaining some light scattering properties of milk using representative layer theory // *Journal of Near Infrared Spectroscopy*. 2013. V. 21. N 5. P. 323–339. <https://doi.org/10.1255/jnirs.1071>
13. Yu Z., Zhang L., Yuan S., Bai X., Wang Y., Chen X., Sun M., Li X., Liu Y., Zhou X. Color ghost imaging through a dynamic scattering medium based on deep learning // *Optical Engineering*. 2023. V. 62. N 2. P. 021005. <https://doi.org/10.1117/1.oe.62.2.021005>
14. Wang D., Sahoo S.K., Zhu X., Adamo G., Dang C. Non-invasive super-resolution imaging through dynamic scattering media // *Nature Communications*. 2021. V. 12. N 1. P. 3150. <https://doi.org/10.1038/s41467-021-23421-4>
10. Yu Z., Wang X.-Q., Gao C., Li Z., Zhao H., Yao Z. Differential Hadamard ghost imaging via single-round detection. *Optics Express*, 2021, vol. 29, no. 25, pp. 41457–41466. <https://doi.org/10.1364/oe.441501>
11. Stocker S., Foschum F., Krauter P., Bergmann F., Hohmann A., Happ C.S., Kienle A. Broadband optical properties of milk. *Applied Spectroscopy*, 2017, vol. 71, no. 5, pp. 951–962. <https://doi.org/10.1177/0003702816666289>
12. Dahm D.J. Explaining some light scattering properties of milk using representative layer theory. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 2013, vol. 21, no. 5, pp. 323–339. <https://doi.org/10.1255/jnirs.1071>
13. Yu Z., Zhang L., Yuan S., Bai X., Wang Y., Chen X., Sun M., Li X., Liu Y., Zhou X. Color ghost imaging through a dynamic scattering medium based on deep learning. *Optical Engineering*, 2023, vol. 62, no. 2, pp. 021005. <https://doi.org/10.1117/1.oe.62.2.021005>
14. Wang D., Sahoo S.K., Zhu X., Adamo G., Dang C. Non-invasive super-resolution imaging through dynamic scattering media. *Nature Communications*, 2021, vol. 12, no. 1, pp. 3150. <https://doi.org/10.1038/s41467-021-23421-4>

Авторы

Опарин Егор Николаевич — младший научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 57209803630](https://orcid.org/0000-0002-4009-7594), <https://orcid.org/0000-0002-4009-7594>, en_oparin@itmo.ru

Лаппо-Данилевская Анастасия Константиновна — инженер, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 57851031300](https://orcid.org/0000-0002-1762-2688), <https://orcid.org/0000-0002-1762-2688>, ankonstLD@itmo.ru

Черных Алексей Викторович — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 56034206000](https://orcid.org/0000-0003-1297-3267), <https://orcid.org/0000-0003-1297-3267>, chernykh_a@itmo.ru

Цыпкин Антон Николаевич — доктор физико-математических наук, доцент, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 56366230300](https://orcid.org/0000-0002-9254-1116), <https://orcid.org/0000-0002-9254-1116>, tsyppkinan@itmo.ru

Authors

Egor N. Oparin — Junior Researcher, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, [sc 57209803630](https://orcid.org/0000-0002-4009-7594), <https://orcid.org/0000-0002-4009-7594>, en_oparin@itmo.ru

Anastasiia K. Lappo-Danilevskaia — Engineer, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, [sc 57851031300](https://orcid.org/0000-0002-1762-2688), <https://orcid.org/0000-0002-1762-2688>, ankonstLD@itmo.ru

Aleksey V. Chernykh — PhD (Physics & Mathematics), ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, [sc 56034206000](https://orcid.org/0000-0003-1297-3267), <https://orcid.org/0000-0003-1297-3267>, chernykh_a@itmo.ru

Anton N. Tsyppkin — D.Sc. (Physics & Mathematics), Associate Professor, Associate Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, [sc 56366230300](https://orcid.org/0000-0002-9254-1116), <https://orcid.org/0000-0002-9254-1116>, tsyppkinan@itmo.ru

Статья поступила в редакцию 16.05.2024
Одобрена после рецензирования 04.07.2024
Принята к печати 23.07.2024

Received 16.05.2024
Approved after reviewing 04.07.2024
Accepted 23.07.2024



Работа доступна по лицензии
Creative Commons
«Attribution-NonCommercial»

АВТОМАТИЧЕСКОЕ УПРАВЛЕНИЕ И РОБОТОТЕХНИКА AUTOMATIC CONTROL AND ROBOTICS

doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-554-562

УДК 681.51

Синтез адаптивного наблюдателя для нелинейных нестационарных систем

Хак Тунг Нгуен¹✉, Сергей Михайлович Власов², Антон Александрович Пыркин³,
Константин Юрьевич Калинин⁴, Минь Хунг Нгуен⁵, Ван Вьонг Нгуен⁶, Ван Хуан Буй⁷

^{1,5,6} Военно-морской технический институт, Хайфон, 180000, Вьетнам

^{2,3,4,7} Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

¹ nguyenkhahtungvhq1994@gmail.com✉, <https://orcid.org/0000-0001-6430-1927>

² smvlasov@itmo.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8345-7553>

³ a.pyrkin@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-8806-4057>

⁴ kgkalinin@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0009-3092-6254>

⁵ nguyenminhhungvkhq@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0007-5265-6107>

⁶ nguyenvanvuong@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0000-3223-1645>

⁷ buinguyenkhanh201095@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6563-1909>

Аннотация

Введение. Предложен новый метод синтеза адаптивного наблюдателя состояния для класса нелинейных нестационарных систем. Подобная задача является важной и фундаментальной в теории управления и связана с проблемой управления и с задачей мониторинга эффективности функционирования системы. **Метод.** Решение поставленной задачи построено на методе обобщенного наблюдателя, основанного на оценке параметров для получения регрессионного уравнения, необходимого для оценки состояния и параметров системы. Применен метод расширения и смешивания динамического регрессора для идентификации неизвестных параметров системы. **Основные результаты.** Разработан алгоритм оценки вектора переменных состояния для нелинейной нестационарной системы, в которой неизвестные параметры зависят от вектора переменных состояния в условиях внешних возмущений. Полученные результаты доказаны с помощью математической теории. Для демонстрации эффективности предложенного алгоритма выполнено имитационное моделирование в программной среде MATLAB/Simulink. **Обсуждение.** Математическая модель рассмотренных объектов является нелинейной системой уравнений с переменными параметрами. Выполнено сравнение предложенного метода с существующими. Метод является более общим, особенно в системе, где неизвестные параметры зависят от вектора состояния с нелинейными функциями. В настоящее время поставленная задача решена только для дискретных систем. Планируется дальнейшее расширение алгоритма на непрерывные системы.

Ключевые слова

адаптивное управление, синтез адаптивного наблюдателя, идентификация, нелинейная нестационарная система

Благодарности

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, соглашение № 2019-0898.

Ссылка для цитирования: Нгуен Х.Т., Власов С.М., Пыркин А.А., Калинин К.Ю., Нгуен М.Х., Нгуен В.В., Буй В.Х. Синтез адаптивного наблюдателя для нелинейных нестационарных систем // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2024. Т. 24, № 4. С. 554–562. doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-554-562

Synthesis of adaptive observer for nonlinear nonstationary systems

Khac Tung Nguyen¹, Sergey M. Vlasov², Anton A. Pyrkin³, Konstantin Yu. Kalinin⁴,
Minh Hung Nguyen⁵, Van Vuong Nguyen⁶, Van Huan Bui⁷

^{1,5,6} Naval Engineering Institute, Hai Phong, 180000, Viet Nam

^{2,3,4,7} ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

¹ nguyenkhactung1994@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6430-1927>

² smvlasov@itmo.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8345-7553>

³ a.pyrkin@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-8806-4057>

⁴ kgkalinin@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0009-3092-6254>

⁵ nguyenminhhungvkhq@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0007-5265-6107>

⁶ nguyenvanvuong@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0000-3223-1645>

⁷ buinguyenkhanh201095@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6563-1909>

Abstract

A new method for the synthesis of adaptive state observation for a class of nonlinear non-stationary systems is proposed. This task is important and fundamental in control theory and is related to both the control problem and the task of monitoring the efficiency of the system operation. The solution to the problem is based on the generalized observer parameter estimation method to obtain the regression equation necessary for estimating the state and parameters of the system. Further, the dynamic regressor expansion and blending method dynamic regressor extension and mixing method is applied to identify the unknown system parameters. The paper proposes a method for estimating the state vector for a nonlinear non-stationary system in which the unknown parameters depend on the state vector under external disturbances. The results obtained are rigorously proved using mathematical theory. Simulation in Matlab/Simulink is performed to demonstrate the effectiveness of the developed algorithm. The mathematical model of the considered objects is a nonlinear system of equations with variable parameters. Compared to previous methods, the method proposed in this paper is more general, especially in a system where the unknown parameters depend on the state vector with nonlinear functions. However, the problem is currently solved only for discrete systems. In the future, it may be possible to extend it to continuous systems.

Keywords

adaptive control, synthesis of adaptive observer, identification, nonlinear nonstationary system

Acknowledgement

The work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, Agreement No. 2019-0898.

For citation: Nguyen K.T., Vlasov S.M., Pyrkin A.A., Kalinin K.Yu., Nguyen M.H., Nguyen V.V., Bui V.H. Synthesis of adaptive observer for nonlinear nonstationary systems. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 4, pp. 554–562 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-554-562

Введение

В работе представлен метод синтеза адаптивного наблюдателя для нелинейных нестационарных систем. Изучение данной задачи представляет интерес с точки зрения развития теории идентификации и методов адаптивного управления.

Задача оценки параметров нестационарных систем и синтез наблюдателей переменных состояния описана в работах [1–12]. В [1, 2] предложены методы управления нестационарными системами на основе метода прямого адаптивного управления, которые не требуют процедуры идентификации параметров объекта управления.

Благодаря развитию методов непрямого адаптивного управления возможно для большого класса задач использовать идентификационные подходы адаптивного управления. Применение не прямых подходов для синтеза наблюдателей нестационарных систем рассмотрены в работах [3–9].

В [3] предложен алгоритм оценивания полиномиальных параметров для нестационарных систем. Метод для решения поставленной задачи основан на преобразовании математической модели управления к виду линейного регрессионного выражения.

В [4] представлен алгоритм оценивания неизвестных переменных параметров линейных нестационарных объектов управления, которые рассмотрены в виде линейной функции времени или их производных и представляют собой кусочно-постоянные сигнал. Для параметризации линейного нестационарного объекта управления использован линейный фильтр, в результате применения которого получена линейная регрессионная модель.

В работах [6–9] предложены методы синтеза наблюдателей для нестационарных систем, основанные на методе обобщенной оценке параметров наблюдателя (Generalized Observer Parameter Estimation, GPEO) [13].

Общий недостаток существующих методов оценки — неизвестные параметры исходной системы не зависят от неизвестного вектора состояния, а нестационарные параметры представляются в виде выхода линейного генератора, но с известными матрицами.

В настоящей работе исследованы более сложные допущения по неизвестным нестационарным параметрам — нестационарные параметры системы могут быть представлены в виде линейных генераторов с неизвестными матрицей состояния и вектором начальных условий.

Постановка задачи

Рассмотрим дискретную модель нестационарной системы вида

$$\mathbf{x}(k+1) = \mathbf{A}\mathbf{x}(k) + \mathbf{B}(\beta(k))u(k) + \boldsymbol{\theta}(k)f(x(k)) + \delta(k), \quad (1)$$

$$y(k) = \mathbf{C}^T \mathbf{x}(k), \quad (2)$$

где $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{I}_{n-1} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$ и $\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$ — известные матрица и вектор; $\mathbf{B}(k) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \beta(k) \end{bmatrix}$ и $\boldsymbol{\theta}(k)$ — векторы неизвестных не-

стационарных параметров; $\mathbf{x}(k) \in \mathbb{R}^n$ — неизмеряемый вектор переменных состояния; $y(k) \in \mathbb{R}^1$ — измеряемая выходная переменная; $u(k)$ — сигнал управления; $f(x(k))$ — известная нелинейная функция; $\delta(k)$ — неизмеряемый сигнал возмущения; $\mathbf{I}$ — единичный вектор.

Допустим, что векторы нестационарных параметров $\mathbf{B}(\beta(k))$, $\boldsymbol{\theta}(k)$ и сигнал возмущения $\delta(k)$ являются выходами линейных генераторов

$$\beta(k) = \mathbf{h}_\beta \xi_\beta(k),$$

$$\xi_\beta(k+1) = \Gamma_\beta \xi_\beta(k),$$

$$\boldsymbol{\theta}(k) = \mathbf{h}_\theta \xi_\theta(k),$$

$$\xi_\theta(k+1) = \Gamma_\theta \xi_\theta(k),$$

$$\delta(k) = \mathbf{h}_\delta \xi_\delta(k),$$

$$\xi_\delta(k+1) = \Gamma_\delta \xi_\delta(k),$$

$$\Gamma_\beta = \Gamma_{0\beta} + \gamma_\beta^T \mathbf{h}_\beta, \Gamma_{0\beta} = \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{I}_\beta \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\Gamma_\theta = \Gamma_{0\theta} + \gamma_\theta^T \mathbf{h}_\theta, \Gamma_{0\theta} = \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{I}_\theta \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\Gamma_\delta = \Gamma_{0\delta} + \gamma_\delta^T \mathbf{h}_\delta, \Gamma_{0\delta} = \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{I}_\delta \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

где $\xi_\beta \in \mathbb{R}^l$, $\xi_\theta \in \mathbb{R}^m$, $\xi_\delta \in \mathbb{R}^r$ — векторы состояния генераторов с неизвестными начальными значениями $\xi_\beta(t_0)$, $\xi_\theta(t_0)$, $\xi_\delta(t_0)$; $\Gamma_\beta \in \mathbb{R}^{l \times l}$, $\Gamma_\theta \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $\Gamma_\delta \in \mathbb{R}^{r \times r}$ — матрицы неизвестных постоянных коэффициентов; $\mathbf{h}_\beta$, $\mathbf{h}_\theta$, $\mathbf{h}_\delta$ — векторы соответствующей размерности; $\gamma_\beta \in \mathbb{R}^l$, $\gamma_\theta \in \mathbb{R}^m$, $\gamma_\delta \in \mathbb{R}^r$ — векторы неизвестных постоянных параметров.

Пусть требуется синтезировать алгоритм оценивания параметров $\hat{\beta}(k)$, $\hat{\theta}(k)$, $\hat{\delta}(k)$, и переменных состояния $\hat{x}(k)$, обеспечивающего выполнение условий:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} (\beta(k) - \hat{\beta}(k)) = 0,$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} (\theta(k) - \hat{\theta}(k)) = 0,$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} (\delta(k) - \hat{\delta}(k)) = 0,$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} (x(k) - \hat{x}(k)) = 0.$$

Синтез адаптивного наблюдателя с известными параметрами

Рассмотрим метод синтеза адаптивного наблюдателя, основанный на параметризации модели (1)–(2). Предположим, что параметры матриц Γ_β , Γ_θ , Γ_δ известны.

Утверждение 1. *Существуют измеримые сигналы $\mathbf{g} \in \mathbb{R}^{n \times l}$, $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^{n \times r}$ и вектор постоянных параметров $\boldsymbol{\eta} \in \mathbb{R}^{l+m+r}$ такие, что состояние и модель системы (1)–(2) могут быть записаны в виде:*

$$\mathbf{x}(k) = \boldsymbol{\Phi}_x(k) \boldsymbol{\eta}^T + e(k), \quad (3)$$

$$y(k) = \boldsymbol{\Phi}_y(k) \boldsymbol{\eta}^T + \varepsilon(k), \quad (4)$$

где $\boldsymbol{\Phi}_x(k) = \begin{pmatrix} \mathbf{g}^T(k) \\ \mathbf{Y}^T(k) \\ \mathbf{w}^T(k) \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{\Phi}_y(k) = \begin{pmatrix} \mathbf{g}^T(k) \mathbf{C} \\ \mathbf{Y}^T(k) \mathbf{C} \\ \mathbf{w}^T(k) \mathbf{C} \end{pmatrix}$, $e(k)$, $\varepsilon(k)$ — функции экспоненциального затухания.

Доказательство утверждения 1. Рассмотрим следующие фильтры

$$\boldsymbol{\Phi}_\beta(k+1) = \Gamma_\beta \boldsymbol{\Phi}_\beta(k), \boldsymbol{\Phi}_\beta(t_0) = \mathbf{I}_l,$$

$$\boldsymbol{\Phi}_\theta(k+1) = \Gamma_\theta \boldsymbol{\Phi}_\theta(k), \boldsymbol{\Phi}_\theta(t_0) = \mathbf{I}_m,$$

$$\boldsymbol{\Phi}_\delta(k+1) = \Gamma_\delta \boldsymbol{\Phi}_\delta(k), \boldsymbol{\Phi}_\delta(t_0) = \mathbf{I}_r,$$

где $\boldsymbol{\Phi}_\beta \in \mathbb{R}^{l \times l}$, $\boldsymbol{\Phi}_\theta \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $\boldsymbol{\Phi}_\delta \in \mathbb{R}^{r \times r}$ и

$$\mathbf{g}(k+1) = \mathbf{A}\mathbf{g}(k) + \mathbf{h}_\beta \boldsymbol{\Phi}_\beta(k) u(k),$$

$$\mathbf{Y}(k+1) = \mathbf{A}\mathbf{Y}(k) + \mathbf{h}_\theta \boldsymbol{\Phi}_\theta(k) f(x(k)),$$

$$\mathbf{w}(k+1) = \mathbf{A}\mathbf{w}(k) + \mathbf{h}_\delta \boldsymbol{\Phi}_\delta(k),$$

где $\mathbf{g} \in \mathbb{R}^{n \times l}$, $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^{n \times r}$.

Приведем уравнение ошибки вида

$$e(k) = x(k) - \mathbf{g}(k) \xi_\beta(t_0) - \mathbf{Y}(k) \xi_\theta(t_0) - \mathbf{w}(k) \xi_\delta(t_0). \quad (5)$$

Получим производную уравнения (5):

$$\begin{aligned} e(k+1) &= x(k+1) - \mathbf{g}(k+1) \xi_\beta(t_0) - \mathbf{Y}(k+1) \xi_\theta(t_0) - \\ &\quad - \mathbf{w}(k+1) \xi_\delta(t_0) = \mathbf{A}\mathbf{x}(k) + \mathbf{h}_\beta \Gamma_\beta \xi_\beta(t_0) u(k) + \\ &\quad + \mathbf{h}_\theta \Gamma_\theta \xi_\theta(t_0) f(x(k)) + \mathbf{h}_\delta \Gamma_\delta \xi_\delta(t_0) - \\ &\quad - (\mathbf{A}\mathbf{g}(k) + \mathbf{h}_\beta \Gamma_\beta u(k)) \xi_\beta(t_0) - (\mathbf{A}\mathbf{Y}(k) + \mathbf{h}_\theta \Gamma_\theta f(x(k))) \xi_\theta(t_0) - \\ &\quad - (\mathbf{A}\mathbf{w}(k) + \mathbf{h}_\delta \Gamma_\delta \xi_\delta(t_0)) = \\ &= \mathbf{A}(x(k) - \mathbf{g}(k) \xi_\beta(t_0) - \mathbf{Y}(k) \xi_\theta(t_0) - \mathbf{w}(k) \xi_\delta(t_0)) = \mathbf{A}e(k). \end{aligned}$$

Следовательно, уравнение (5) будет равно нулю за шагов.

Обозначим:

$$\boldsymbol{\eta} = \begin{pmatrix} \xi_\beta(t_0) \\ \xi_\theta(t_0) \\ \xi_\delta(t_0) \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Домножим левую и правую части выражения (6) на $\mathbf{C}^T$ и получим уравнение (4).

Утверждение 1 доказано.

На основании уравнения (3) может быть построен наблюдатель состояния x .

Метод параметризации нестационарной системы

Исследуем метод параметризации нестационарной модели системы (1)–(2) для получения регрессионного уравнения.

Задача оценивания нестационарных параметров системы решим в два этапа. Представим метод оценки параметров векторов γ_β , γ_θ , γ_δ и на основе выполненной оценки разработаем метод синтеза алгоритма оценки параметров вектора η .

Представим модель системы (1)–(2) в виде:

$$\begin{aligned} x_i(k+1) &= x_{i+1}(k) + \theta_i(k)f_i(x_1(k)) + \delta_i(k), \\ &\vdots \\ x_n(k+1) &= \theta_n(k)f_n(x_1(k)) + \beta(k)u(k) + \delta_n(k), \\ y(k) &= x_1(k), \end{aligned} \quad (7)$$

где $i = \overline{1, n-1}$.

Запишем систему (7) для алгоритма «вход–выход»:

$$\begin{aligned} y(k+n) &= \beta(k)u(k) + \\ &+ \left(\theta_n(k)f_n(x_1(k)) + \sum_{i=1}^{n-1} \theta_i(k+n-i)f_i(x_1(k+n-i)) \right) + \\ &+ \left(\delta_n(k) + \sum_{i=1}^{n-1} \delta_i(k+n-i) \right). \end{aligned}$$

Заметим, что:

$$\begin{aligned} \beta(k) &= \mathbf{h}_\beta \xi_\beta(k), \\ \theta_i(k+n-i) &= \ell_{i+1}^T \mathbf{h}_\theta \xi_\theta(k+n-i) = \ell_{i+1}^T \mathbf{h}_\theta \Gamma_\theta^{n-i} \xi_\theta(k), \\ \delta_i(k+n-i) &= \ell_{i+1}^T \mathbf{h}_\delta \xi_\delta(k+n-i) = \ell_{i+1}^T \mathbf{h}_\delta \Gamma_\delta^{n-i} \xi_\delta(k), \\ y(k) &= x_1(k), \end{aligned}$$

где $i = \overline{1, n-1}$, $\ell_q \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{q}$ — вектор n -мерного Евклидова пространства.

Запишем уравнение (8) с использованием дискретного оператора z , в виде:

$$\begin{aligned} z^n y(k) &= [\mathbf{h}_\beta u(k)] \xi_\beta(k) + \\ &+ \left[\left(\ell_1^T \mathbf{h}_\theta f_n(x_1(k)) + \sum_{i=1}^{n-1} \ell_{i+1}^T \mathbf{h}_\theta \Gamma_\theta^{n-i} z^{n-i} f_i(x_1(k)) \right) \right] \xi_\theta(k) + \\ &+ \left[\left(\ell_1^T \mathbf{h}_\delta + \sum_{i=1}^{n-1} \ell_{i+1}^T \mathbf{h}_\delta \Gamma_\delta^{n-i} z^{n-i} \right) \right] \xi_\delta(k), \\ y(k) &= x_1(k). \end{aligned} \quad (9)$$

С учетом уравнения (9), рассмотрим систему

$$\begin{aligned} z^{n+k_1} y(k) &= [\mathbf{h}_\beta z^{k_1} u(k)] \xi_\beta(k) + \\ &+ \left[\left(\ell_1^T \mathbf{h}_\theta \Gamma_\theta^{k_1} z^{k_1} f_n(x_1(k)) + \right. \right. \\ &+ \left. \left. \sum_{i=1}^{n-1} \ell_{i+1}^T \mathbf{h}_\theta \Gamma_\theta^{n-i+k_1} z^{n-i+k_1} f_i(x_1(k)) \right) \right] \xi_\theta(k) + \\ &+ \left[\left(\ell_1^T \mathbf{h}_\delta \Gamma_\delta^{k_1} \xi_\delta(k) z^{k_1} + \sum_{i=1}^{n-1} \ell_{i+1}^T \mathbf{h}_\delta \Gamma_\delta^{n-i+k_1} z^{n-i+k_1} \right) \right] \xi_\delta(k), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\vdots \\ z^{n+k_h} y(k) &= [\mathbf{h}_\beta z^{k_h} u(k)] \xi_\beta(k) + \\ &+ \left[\left(\ell_1^T \mathbf{h}_\theta \Gamma_\theta^{k_h} z^{k_h} f_n(x_1(k)) + \right. \right. \\ &+ \left. \left. \sum_{i=1}^{n-1} \ell_{i+1}^T \mathbf{h}_\theta \Gamma_\theta^{n-i+k_h} z^{n-i+k_h} f_i(x_1(k)) \right) \right] \xi_\theta(k) + \\ &+ \left[\left(\ell_1^T \mathbf{h}_\delta \Gamma_\delta^{k_h} \xi_\delta(k) z^{k_h} + \sum_{i=1}^{n-1} \ell_{i+1}^T \mathbf{h}_\delta \Gamma_\delta^{n-i+k_h} z^{n-i+k_h} \right) \right] \xi_\delta(k), \end{aligned} \quad (10)$$

где $k_j \in \mathbb{N}, j = \overline{1, h}, h = l + m + r$.

Представим систему (10) в матричной форме:

$$Y(z, k) = \begin{pmatrix} z^{n+k_1} y(k) \\ \vdots \\ z^{n+k_h} y(k) \end{pmatrix} = \Omega(z, k) \xi(k). \quad (11)$$

где $\xi(k) = [\xi_\beta^T(k) \ \xi_\theta^T(k) \ \xi_\delta^T(k)]$;

$$\begin{aligned} \Omega(z, k) &= \begin{pmatrix} [\mathbf{h}_\beta z^{k_1} u(k)] & [\chi_\theta^{k_1}] & [\chi_\delta^{k_1}] \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ [\mathbf{h}_\beta z^{k_h} u(k)] & [\chi_\theta^{k_h}] & [\chi_\delta^{k_h}] \end{pmatrix}; \\ \chi_\theta^{k_1} &= \left(\ell_1^T \mathbf{h}_\theta \Gamma_\theta^{k_1} z^{k_1} f_n(x_1(k)) + \sum_{i=1}^{n-1} \ell_{i+1}^T \mathbf{h}_\theta \Gamma_\theta^{n-i+k_1} z^{n-i+k_1} f_i(x_1(k)) \right); \\ \chi_\theta^{k_h} &= \left(\ell_1^T \mathbf{h}_\theta \Gamma_\theta^{k_h} z^{k_h} f_n(x_1(k)) + \sum_{i=1}^{n-1} \ell_{i+1}^T \mathbf{h}_\theta \Gamma_\theta^{n-i+k_h} z^{n-i+k_h} f_i(x_1(k)) \right); \\ \chi_\delta^{k_1} &= \left(\ell_1^T \mathbf{h}_\delta \Gamma_\delta^{k_1} z^{k_1} + \sum_{i=1}^{n-1} \ell_{i+1}^T \mathbf{h}_\delta \Gamma_\delta^{n-i+k_1} z^{n-i+k_1} \right); \\ \chi_\delta^{k_h} &= \left(\ell_1^T \mathbf{h}_\delta \Gamma_\delta^{k_h} z^{k_h} + \sum_{i=1}^{n-1} \ell_{i+1}^T \mathbf{h}_\delta \Gamma_\delta^{n-i+k_h} z^{n-i+k_h} \right). \end{aligned}$$

Для составления реализуемого уравнения регрессора выполним сдвиг по времени на $n + k_h$ шага назад и перепишем систему (11) в виде:

$$Y(z, k) = \Omega(z, k) \xi(k - k_h - 2). \quad (12)$$

Тогда

$$\begin{aligned} Y(z, k) &= z^{-k_h-2} \begin{pmatrix} z^{2+k_1} y(k) \\ \vdots \\ z^{2+k_h} y(k) \end{pmatrix}, \\ \Omega(z, k) &= z^{-k_h-2} \Omega(z, k) = \begin{pmatrix} [\mathbf{h}_\beta z^{k_1} u(k)] & [\chi_\theta^{k_1}] & [\chi_\delta^{k_1}] \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ [\mathbf{h}_\beta z^{k_h} u(k)] & [\chi_\theta^{k_h}] & [\chi_\delta^{k_h}] \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Выполним аналогичный сдвиг по времени в выражении (10). Получим

$$\begin{aligned} z^{-k_h} y(k) &= (z^{-k_h-n} [\mathbf{h}_\beta u(k)] \ z^{-k_h-n} [\chi_\theta]) \\ &z^{-k_h-n} [\chi_\delta] \xi(k - k_h - n), \end{aligned} \quad (13)$$

где $\chi_\theta = \left(\ell_1^T \mathbf{h}_\theta f_n(x_1(k)) + \sum_{i=1}^{n-1} \ell_{i+1}^T \mathbf{h}_\theta \Gamma_\theta^{n-i} z^{n-i} f_i(x_1(k)) \right)$;

$$\chi_\delta = \left(\ell_1^T \mathbf{h}_\delta + \sum_{i=1}^{n-1} \ell_{i+1}^T \mathbf{h}_\delta \Gamma_\delta^{n-i} z^{n-i} \right).$$

Умножим уравнение (12) на присоединенную матрицу $\text{adj}(\Omega(z, k))$, получаем соотношение

$$\text{adj}(\mathbf{\Omega}(z, k))Y(z, k) = \det(\mathbf{\Omega}(z, k))\xi(k - k_h - 2). \quad (14)$$

С учетом выражений (13) и (14), найдем

$$(z^{-k_h-n}[\mathbf{h}_\beta u(k)] \ z^{-k_h-n}[\chi_0] \ z^{-k_h-n}[\chi_\delta])\text{adj}(\mathbf{\Omega}(z, k))Y(z, k) = z^{-k_h-n}\det(\mathbf{\Omega}(z, k)). \quad (15)$$

На основе уравнения (15) построим регрессионную модель измеряемой функции:

$$\zeta(z) = \zeta(z, k) = \mathbf{p}(k)\boldsymbol{\sigma}(\gamma_\beta, \gamma_\theta, \gamma_\delta). \quad (16)$$

где $\mathbf{p}(k) = \mathbf{p}(z, k)$ — регрессор; $\boldsymbol{\sigma}(\gamma_\beta, \gamma_\theta, \gamma_\delta)$ — вектор неизвестных параметров.

Отметим, что при произвольном значении матриц $\mathbf{h}_\beta, \mathbf{h}_\theta, \mathbf{h}_\delta$, регрессионная модель (16) может быть большой по размеру и времени, а вектор $\boldsymbol{\sigma}(\gamma_\beta, \gamma_\theta, \gamma_\delta)$ иметь сложный нелинейный вид.

Следствие 1. Предложенный метод работает для произвольного значения n , несмотря на то, что размерность и сложность матрицы $\mathbf{\Omega}(k)$ будет расти с увеличением n .

После вычислений получим уравнение

$$\zeta(k) = \mathbf{p}(k)\boldsymbol{\sigma}(\gamma_\beta, \gamma_\theta, \gamma_\delta).$$

с измеримыми (вычислимыми) $\zeta(k)$ и $\mathbf{p}(k)$.

Синтез адаптивного наблюдателя с неизвестными параметрами

На основе оценки параметров матриц $\hat{\Gamma}_\beta, \hat{\Gamma}_\theta, \hat{\Gamma}_\delta$ представим метод оценивания вектора $\hat{\boldsymbol{\eta}}$ и переменных состояния системы $\hat{x}$.

Задача синтеза наблюдателя нестационарной системы может быть решена в три шага.

Шаг 1. Оценка всех неизвестных параметров матриц $\Gamma_\beta, \Gamma_\theta, \Gamma_\delta$.

Шаг 2. Оценка параметров вектора $\boldsymbol{\eta}$, связанных с начальными условиями нестационарных параметров.

Шаг 3. Синтез наблюдателя состояния на основе оценки неизвестных параметров матриц $\Gamma_\beta, \Gamma_\theta, \Gamma_\delta$ и вектора $\boldsymbol{\eta}$.

Алгоритм оценивания параметров вектора $\boldsymbol{\eta}$. Воспользуемся методом Dynamic Regressor Extension And Mixing (DREM) [14] для восстановления неизвестных параметров регрессионных уравнений дискретной системы.

Рассмотрим регрессионную модель измеряемой функции вида:

$$\psi \in \mathbb{R} = \mathbf{M}^T \boldsymbol{\eta}. \quad (17)$$

где $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{l+m+r}$ — регрессор; $\boldsymbol{\eta} \in \mathbb{R}^{l+m+r}$ — вектор неизвестных параметров.

Заметим, что:

$$\psi = y, \mathbf{M} = \boldsymbol{\phi}_y.$$

Применим блок запаздывания $v_i, i = 1, l + m + r - 1$ для известных элементов регрессионной модели (17):

$$\psi(k - v_i) = \mathbf{M}^T(k - v_i)\boldsymbol{\eta}.$$

Обозначим:

$$\boldsymbol{\vartheta}_e = \mathbf{Y}_e \boldsymbol{\eta}, \quad (18)$$

где $\boldsymbol{\vartheta}_e = [\psi(k) \ \psi(k - v_1) \ \dots \ \psi(k - v_l)]^T$;
 $\mathbf{Y}_e = [\mathbf{M}^T(k) \ \mathbf{M}^T(k - v_1) \ \dots \ \mathbf{M}^T(k - v_l)]$.

Умножив уравнение (18) на матрицу $\text{adj}(\mathbf{Y}_e(k))$ получим

$$\boldsymbol{\vartheta}(k) = \Delta(k)\boldsymbol{\eta}, \quad (19)$$

где $\Delta(k) = \det(\mathbf{Y}_e(k)) \in \mathbb{R}^1$; $\boldsymbol{\vartheta}(k) = \text{adj}(\mathbf{Y}_e)\boldsymbol{\vartheta}_e(k) \in \mathbb{R}^{l+m+r}$.

Запишем уравнение (19) покомпонентно:

$$\boldsymbol{\vartheta}_i(k) = \Delta(k)\boldsymbol{\eta}_i.$$

Утверждение 2. Рассмотрим линейное регрессионное уравнение (19).

Дискретная оценка вектора $\boldsymbol{\eta}$

$$\hat{\boldsymbol{\eta}}_i(k) = \hat{\boldsymbol{\eta}}_i(k - 1) + \frac{\Delta(k)}{k_i + \Delta^2(k)}[\boldsymbol{\vartheta}_i(k) - \Delta(k)\hat{\boldsymbol{\eta}}_i(k - 1)]$$

обеспечивает следующие условия:

— ошибки оценивания параметров дискретного времени определяются выражением

$$\tilde{\boldsymbol{\eta}}_i(k) = \frac{1}{1 + \frac{\Delta^2(k)}{k_i}}\tilde{\boldsymbol{\eta}}_i(k - 1),$$

при этом справедливо равенство

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \tilde{\boldsymbol{\eta}}_i(k) = 0 \Leftrightarrow \Delta(k) \notin \mathcal{L}_2,$$

если $\Delta(k) \in PE$ сходимость экспоненциальная;

— условие сходимости метода DREM по параметрам, т. е. $\Delta(k) \notin \mathcal{L}_2$, меньше, чем $\mathbf{M}(k) \in PE$ и имеют следующие импликации:

$$\mathbf{M}(k) \in PE \Rightarrow \Delta(k) \notin \mathcal{L}_2,$$

$$\Delta(k) \notin \mathcal{L}_2 \Rightarrow \mathbf{M}(k) \in PE;$$

где PE — условие экспоненциальной параметрической сходимости метода DREM, т. е. $\Delta(k) \in PE$, меньше, чем $\mathbf{M}(k) \in PE$, в следующем смысле

$$\mathbf{M}(k) \in PE \Rightarrow \Delta(k) \in PE,$$

$$\Delta(k) \in PE[K \geq 2] \not\Rightarrow \mathbf{M}(k) \in PE[K \leq \bar{K}].$$

Синтез адаптивного наблюдателя. На основе полученной оценки параметров матриц $\hat{\Gamma}_\beta, \hat{\Gamma}_\theta, \hat{\Gamma}_\delta$ и вектора $\hat{\boldsymbol{\eta}}$ опишем метод синтеза адаптивного наблюдателя системы.

Метод содержит следующие этапы.

Этап 1. На основе регрессионного уравнения (19) и процедуры DREM получим оценку $\hat{\boldsymbol{\sigma}}(\gamma_\beta, \gamma_\theta, \gamma_\delta)$ постоянных параметров $\boldsymbol{\sigma}(\gamma_\beta, \gamma_\theta, \gamma_\delta)$ и найдем:

$$\hat{\gamma}_\beta, \hat{\gamma}_\theta, \hat{\gamma}_\delta = \boldsymbol{\sigma}^L(\hat{\boldsymbol{\sigma}}).$$

Этап 2. На основе оценок $\hat{\gamma}_\beta, \hat{\gamma}_\theta, \hat{\gamma}_\delta$ за конечное время t_γ , вычислим регрессор $\boldsymbol{\phi}_y$ уравнения (14), где $t_0 > t_\gamma$, и применим процедуру DREM для получения оценки параметров вектора $\hat{\boldsymbol{\eta}}$.

Этап 3. Выполним синтез адаптивного наблюдателя переменных состояний $\hat{x}$ вида:

$$\hat{x}(k) = \Phi_x(k) \hat{\eta}^T,$$

где функцию $\Phi_x(k)$ вычислим на основе оценок $\hat{\gamma}_\beta$, $\hat{\gamma}_\theta$, $\hat{\gamma}_\delta$.

Численное моделирование

Приведем результаты численного моделирования, демонстрирующие эффективность предложенного алгоритма оценки неизвестных параметров нестационарных нелинейных систем. Для моделирования используем программную среду MATLAB/Simulink.

Пример. Рассмотрим систему:

$$\begin{aligned} x_1(k+1) &= x_2(k) + \theta_1(k)f_1(x_1(k)) + \delta_1(k), \\ x_2(k+1) &= \beta(k)u(k) + \theta_2(k)f_2(x_1(k)) + \delta_2(k), \\ y(k) &= x_1(k). \end{aligned}$$

Предположим, что $\delta(k) = 0$, $\theta(k)$, $\beta(k)$ имеют следующие параметры:

$$\Gamma_\beta = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \gamma_\beta & 0 \end{pmatrix}, \Gamma_\theta = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \gamma_\theta & 0 \end{pmatrix}, \gamma_\beta \neq 0, \gamma_\theta \neq 0,$$

$$\mathbf{h}_\beta = [1 \ 0], \mathbf{h}_\theta = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$k_1 = 1, k_2 = 2, k_3 = 3, k_4 = 4.$$

В результате для элементов $\zeta(k)$, $\rho(k)$, σ регрессионное выражение (15) примет вид:

$$\begin{aligned} \zeta(k) &= u(k-5)u(k-2)f_1(x_1(k-3))f_1(x_1(k-2))y(k-4) + \\ &+ u(k-4)u(k-3)f_1(x_1(k-4))f_1(x_1(k-1))y(k-4), \\ \rho^T(k) &= \begin{pmatrix} u(k-5)u(k-4)f_1(x_1(k-1))f_1(x_1(k-2))y(k-4) \\ u(k-3)u(k-2)f_1(x_1(k-3))f_1(x_1(k-4))y(k-4) \\ -u(k-5)u(k-6)f_1(x_1(k-2))f_1(x_1(k-1))y(k-4) \\ u(k-5)u(k-2)f_1(x_1(k-2))f_1(x_1(k-5))y(k-2) \\ u(k-3)u(k-6)f_1(x_1(k-2))f_1(x_1(k-5))y(k-2) \\ -u(k-3)u(k-2)f_1(x_1(k-4))f_1(x_1(k-5))y(k-2) \\ -u(k-4)u(k-5)f_1(x_1(k-2))f_1(x_1(k-5))y(k) \\ u(k-3)u(k-6)f_1(x_1(k-4))f_1(x_1(k-3))y(k) \\ u(k-5)u(k-6)f_1(x_1(k-2))f_1(x_1(k-3))y(k) \\ u(k-3)u(k-4)f_1(x_1(k-4))f_1(x_1(k-5))y(k) \end{pmatrix}, \\ \sigma^T(\gamma_\beta, \gamma_\theta) &= \begin{pmatrix} \gamma_\beta & \gamma_\theta & \gamma_\beta & 1 & 1 & \gamma_\theta & 1 & 1 & 1 \\ \gamma_\theta & \gamma_\beta & \gamma_\theta^2 & \gamma_\beta & \gamma_\theta & \gamma_\beta^2 & \gamma_\beta\gamma_\theta & \gamma_\beta^2 & \gamma_\theta^2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

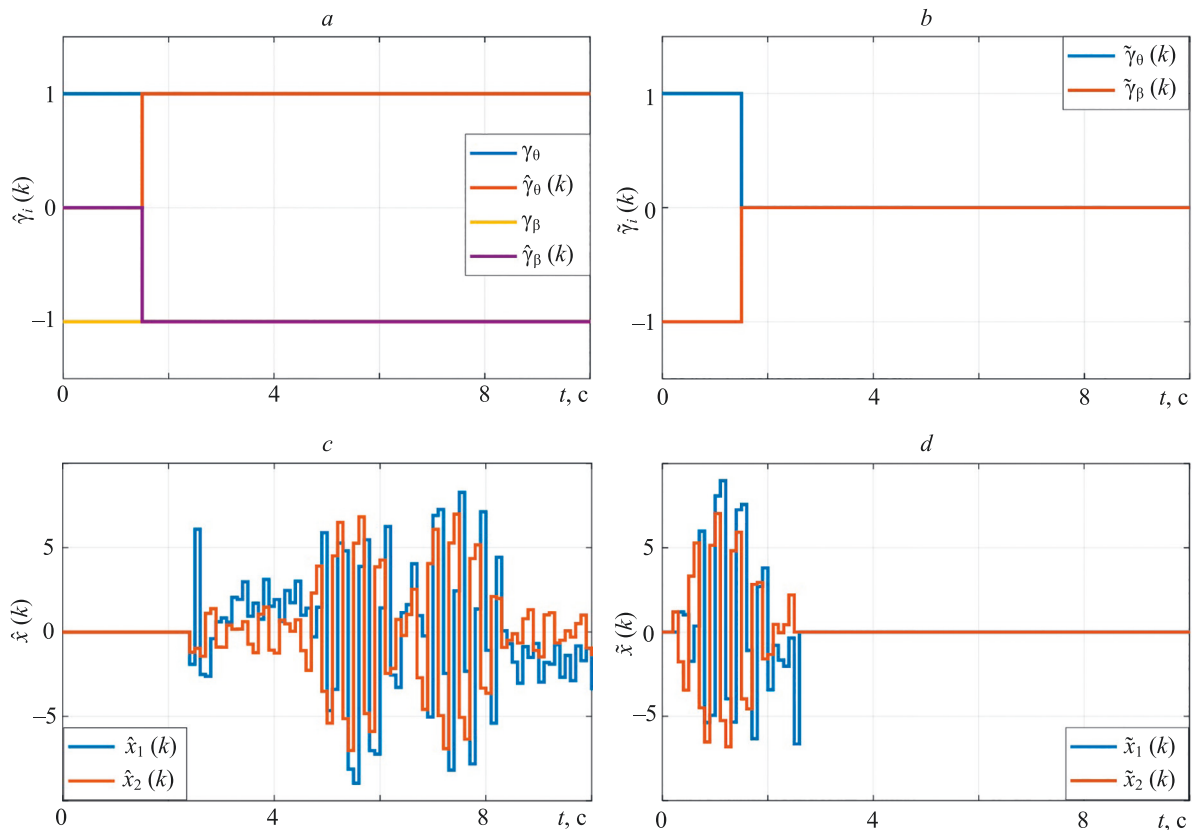


Рисунок. Результаты моделирования при: $u = \sin(t) + \sin(2t)$ (a–d); $u = 5$ (e–h); $u = e^{-0.5t}$ (k–n).

Графики: оценки параметров $\hat{\gamma}_i$ (a, e, k); ошибки оценивания параметров $\hat{\gamma}_i$ (b, f, l); оценки переменных состояния $\hat{x}$ (c, g, m); ошибки оценивания переменных состояния $\hat{x}$ (d, h, n)

Figure. Simulation results for: $u = \sin(t) + \sin(2t)$ (a–d); $u = 5$ (e–h); $u = e^{-0.5t}$ (k–n). Graphs: parameter estimates $\hat{\gamma}_i$ (a, e, k); parameter estimation errors $\hat{\gamma}_i$ (b, f, l); estimates of state variables $\hat{x}$ (c, g, m); errors in estimating state variables $\hat{x}$ (d, h, n)

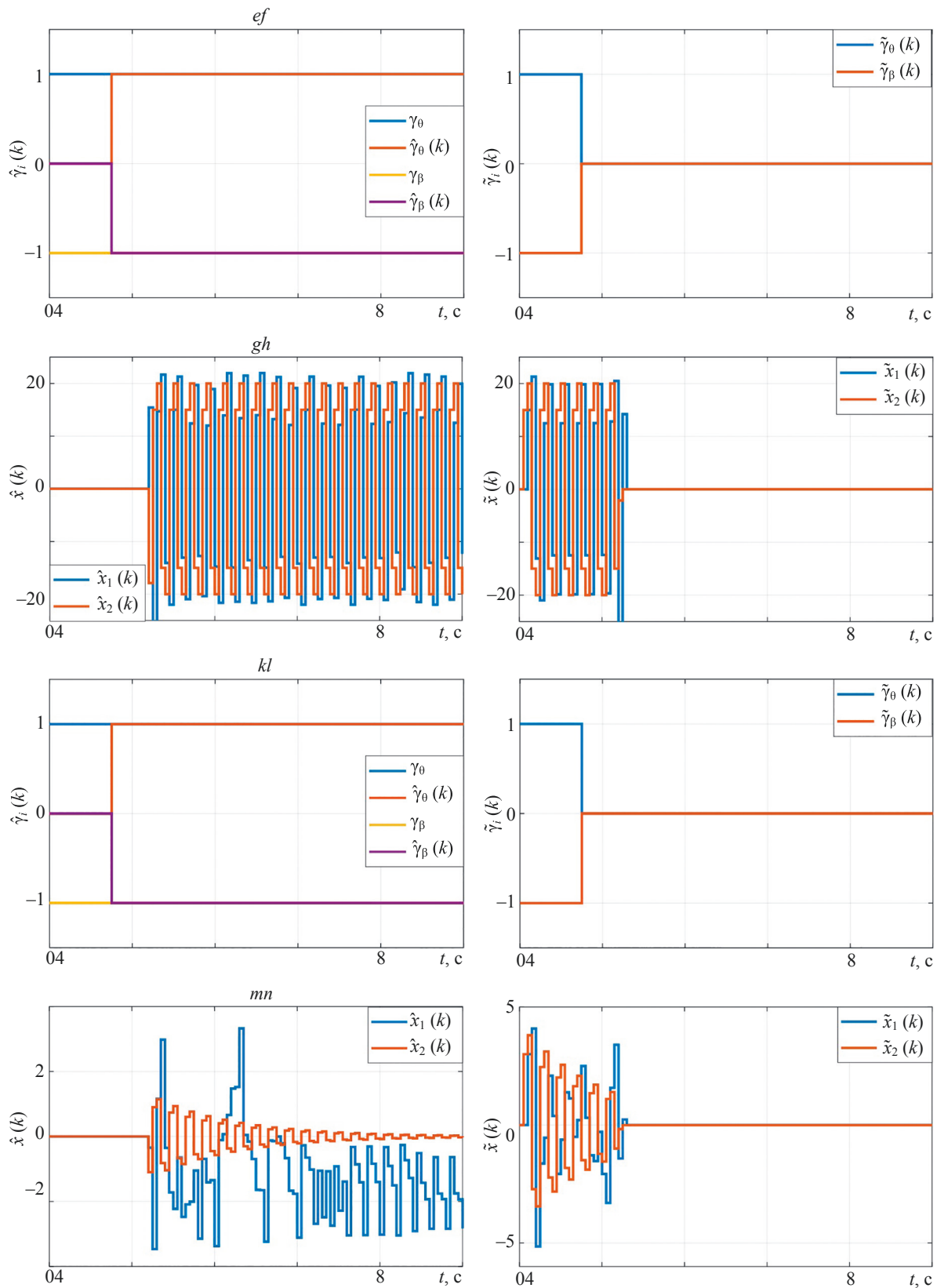


Рисунок. Продолжение
Figure. Continuation

Моделирование проведено при следующих параметрах:

$$\gamma_\beta = -1, \gamma_\theta = 1, f_1(x_1(k)) = \sin(x_1(k)).$$

Результаты моделирования и графики оценок показаны на рисунке.

Закключение

Представлен новый метод синтеза адаптивного наблюдателя состояния для класса нелинейных нестационарных систем. Предположено, что параметры системы изменяются во времени и могут быть представлены в виде линейных генераторов с неизвестными матрицами состояния и векторами с начальными условиями. Основным аналитическим инструментом,

используемым для решения задачи является метод ГРЕВО (обобщенный наблюдатель, основанный на оценке параметров), который переводит проблему наблюдения за состоянием модели в задачу оценки параметров, для которой разрабатывается уравнение регрессии. Для восстановления неизвестных параметров регрессионных выражений использован метод DREM. Результаты математического моделирования показали работоспособность предложенного метода.

Литература

1. Бобцов А.А., Наговицина А.Г. Адаптивное управление по выходу линейными нестационарными объектами // Автоматика и телемеханика. 2006. № 12. С. 163–174.
2. Бобцов А.А., Григорьев В.В., Наговицина А.Г. Алгоритм адаптивного управления нестационарным объектом в условиях возмущения и запаздывания // Мехатроника, автоматизация, управление. 2007. № 1. С. 8–14.
3. Данг Б., Пыркин А.А., Бобцов А.А., Ведяков А.А. Идентификация полиномиальных параметров нестационарных линейных систем // Известия вузов. Приборостроение. 2021. Т. 64. № 6. С. 459–468. <https://doi.org/10.17586/0021-3454-2021-64-6-459-468>
4. Ле В.Т., Коротина М.М., Бобцов А.А., Арановский С.В., Во К.Д. Идентификация линейно изменяющихся во времени параметров нестационарных систем // Мехатроника, автоматизация, управление. 2019. Т. 20. № 5. С. 259–265. <https://doi.org/10.17587/mau.20.259-265>
5. Ван Ц., Ле В.Т., Пыркин А.А., Колюбин С.А., Бобцов А.А. Идентификация кусочно-линейных параметров регрессионных моделей нестационарных детерминированных систем // Автоматика и телемеханика. 2018. № 12. С. 71–82. <https://doi.org/10.31857/s000523100002858-7>
6. Данг Бинь Хак, Пыркин А.А., Бобцов А.А., Ведяков А.А. Синтез адаптивного наблюдателя для нестационарных нелинейных систем с неизвестными полиномиальными параметрами // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2021. Т. 21. № 3. С. 374–379. <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2021-21-3-374-379>
7. Бобцов А.А., Николаев Н.А., Ортега Мартинес Р., Слита О.В., Козачёк О.А. Адаптивный наблюдатель переменных состояния линейной нестационарной системы с частично неизвестными параметрами матрицы состояния и вектора входа // Мехатроника, автоматизация, управление. 2022. Т. 23. № 6. С. 283–288. <https://doi.org/10.17587/mau.23.283-288>
8. Бобцов А.А., Лямин А.В., Сергеев К.А. Синтез закона адаптивного управления для стабилизации не точно заданных нестационарных объектов // Изв. вузов. Приборостроение. 2001. № 3. С. 3–7.
9. Куок Д.В., Бобцов А.А. Адаптивный наблюдатель переменных состояния линейных нестационарных систем с параметрами, заданными не точно // Автоматика и телемеханика. 2020. № 12. С. 100–110. <https://doi.org/10.31857/S0005231020120065>
10. Цыкунов А.М. Робастное управление нестационарными объектами // Автоматика и телемеханика. 1996. № 2. С. 117–125.
11. Клейман Е.Г., Мочалов И.А. Идентификация нестационарных объектов // Автоматика и телемеханика. 1994. № 2. С. 3–22.
12. Pyrkina A., Bobtsov A., Ortega R., Vedyakov A., Aranovskiy S. Adaptive state observers using dynamic regressor extension and mixing // Systems & Control Letters. 2019. V. 133. P. 104519. <https://doi.org/10.1016/j.sysconle.2019.104519>
13. Ortega R., Bobtsov A., Nikolaev N., Schiffer J., Dochain D. Generalized parameter estimation-based observers: Application to power systems and chemical–biological reactors // Automatica. 2021. V. 129. P. 109635. <https://doi.org/10.1016/j.automatica.2021.109635>
14. Aranovskiy S., Bobtsov A., Ortega R., Pyrkina A. Performance enhancement of parameter estimators via dynamic regressor extension and mixing // IEEE Transactions on Automatic Control. 2017. V. 62. N 7. P. 3546–3550. <https://doi.org/10.1109/tac.2016.2614889>

References

1. Bobtsov A.A., Nagovitsina A.G. Adaptive control of linear nonstationary objects output. *Automation and Remote Control*, 2006, vol. 67, no. 12, pp. 2010–2020. <https://doi.org/10.1134/S0005117906120137>
2. Bobtsov A.A., Grigoryev V.V., Nagovitsina A.G. Adaptive control algorithm by nonstationary object in terms of disturbance and delay time. *Mekhatronika, Avtomatizatsiya, Upravlenie*, 2007, no. 1, pp. 8–14. (in Russian)
3. Dung Kh.B., Pyrkina A.A., Bobtsov A.A., Vedyakov A.A. Identification of polynomial parameters of nonstationary linear systems. *Journal of Instrument Engineering*, 2021, vol. 64, no. 6, pp. 459–468. (in Russian). <https://doi.org/10.17586/0021-3454-2021-64-6-459-468>
4. Le V.T., Korotina M.M., Bobtsov A.A., Aranovskiy S.V., Vo Q.D. Identification of linear time-varying parameters of nonstationary systems. *Mekhatronika, Avtomatizatsiya, Upravlenie*, 2019, vol. 20, no. 5, pp. 259–265. (in Russian). <https://doi.org/10.17587/mau.20.259-265>
5. Wang J., Le Vang T., Pyrkina A.A., Kolyubin S.A., Bobtsov A.A. Identification of piecewise linear parameters of regression models of non-stationary deterministic systems. *Automation and Remote Control*, 2018, vol. 79, no. 12, pp. 2159–2168. <https://doi.org/10.1134/s0005117918120068>
6. Dang Binh Khac, Pyrkina A.A., Bobtsov A.A., Vedyakov A.A. Adaptive observer design for time-varying nonlinear systems with unknown polynomial parameters. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2021, vol. 21, no. 3, pp. 374–379. (in Russian). <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2021-21-3-374-379>
7. Bobtsov A.A., Nikolaev N.A., Ortega Martinez R., Slita O.V., Kozachek O.A. Adaptive state observer for linear time-varying system with partially unknown state matrix and input matrix parameters. *Mekhatronika, Avtomatizatsiya, Upravlenie*, 2022, vol. 23, no. 6, pp. 283–288. (in Russian). <https://doi.org/10.17587/mau.23.283-288>
8. Bobtsov A.A., Lyamin A.V., Sergeev K.A. Synthesis of the law of adaptive control for stabilization of not exactly specified non-stationary objects. *Journal of Instrument Engineering*, 2001, no. 3, pp. 3–7. (in Russian)
9. Quoc D.V., Bobtsov A.A. An adaptive state observer for linear time-varying systems with inaccurate parameters. *Automation and Remote Control*, 2020, vol. 81, no. 12, pp. 2220–2229. <https://doi.org/10.1134/S0005117920120061>
10. Tsykunov A.M. Robust control of nonstationary plants. *Automation and Remote Control*, 1996, vol. 57, no. 2, pp. 248–255.
11. Kleiman E.G., Mochalov I.A. Identification of time-dependent plants. *Automation and Remote Control*, 1994, vol. 55, no. 2, pp. 149–163.
12. Pyrkina A., Bobtsov A., Ortega R., Vedyakov A., Aranovskiy S. Adaptive state observers using dynamic regressor extension and mixing. *Systems & Control Letters*, 2019, vol. 133, pp. 104519. <https://doi.org/10.1016/j.sysconle.2019.104519>
13. Ortega R., Bobtsov A., Nikolaev N., Schiffer J., Dochain D. Generalized parameter estimation-based observers: Application to power systems and chemical–biological reactors. *Automatica*, 2021, vol. 129, pp. 109635. <https://doi.org/10.1016/j.automatica.2021.109635>
14. Aranovskiy S., Bobtsov A., Ortega R., Pyrkina A. Performance enhancement of parameter estimators via dynamic regressor extension and mixing. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 2017, vol. 62, no. 7, pp. 3546–3550. <https://doi.org/10.1109/tac.2016.2614889>

Авторы

Нгуен Хак Тунг — кандидат технических наук, научный сотрудник, Военно-морской технический институт, Хайфон, 180000, Вьетнам, [sc 57222389082](https://orcid.org/0000-0001-6430-1927), <https://orcid.org/0000-0001-6430-1927>, nguyenkhactungvhq1994@gmail.com

Власов Сергей Михайлович — кандидат технических наук, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 55355689600](https://orcid.org/0000-0002-8345-7553), <https://orcid.org/0000-0002-8345-7553>, smvlasov@itmo.ru

Пыркин Антон Александрович — доктор технических наук, профессор, профессор, декан факультета, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 26656070700](https://orcid.org/0000-0001-8806-4057), <https://orcid.org/0000-0001-8806-4057>, a.pyrkin@gmail.com

Калинин Константин Юрьевич — аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 26656070700](https://orcid.org/0009-0009-3092-6254), <https://orcid.org/0009-0009-3092-6254>, kgkalinin@gmail.com

Нгуен Минь Хунг — магистр, заместитель начальника отдела, Военно-морской технический институт, Хайфон, 180000, Вьетнам, <https://orcid.org/0009-0007-5265-6107>, nguyenminhhungvkhq@gmail.com

Нгуен Ван Вьонг — кандидат технических наук, научный сотрудник, Военно-морской технический институт, Хайфон, 180000, Вьетнам, <https://orcid.org/0009-0000-3223-1645>, nguyenvanvuong@gmail.com

Буй Ван Хуан — аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, <https://orcid.org/0000-0002-6563-1909>, buinguyenkhanh201095@gmail.com

Authors

Khac Tung Nguyen — PhD, Scientific Researcher, Naval Engineering Institute, Hai Phong, 180000, Viet Nam, [sc 57222389082](https://orcid.org/0000-0001-6430-1927), <https://orcid.org/0000-0001-6430-1927>, nguyenkhactungvhq1994@gmail.com

Sergey M. Vlasov — PhD, Associate Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, [sc 55355689600](https://orcid.org/0000-0002-8345-7553), <https://orcid.org/0000-0002-8345-7553>, smvlasov@itmo.ru

Anton A. Pyrkin — D.Sc., Full Professor, Dean of Faculty, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, [sc 26656070700](https://orcid.org/0000-0001-8806-4057), <https://orcid.org/0000-0001-8806-4057>, a.pyrkin@gmail.com

Konstantin Yu. Kalinin — PhD Student, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, <https://orcid.org/0009-0009-3092-6254>, kgkalinin@gmail.com

Minh Hung Nguyen — Magister, Deputy Department Head, Naval Engineering Institute, Hai Phong, 180000, Viet Nam, <https://orcid.org/0009-0007-5265-6107>, nguyenminhhungvkhq@gmail.com

Van Vuong Nguyen — PhD, Scientific Researcher, Naval Engineering Institute, Hai Phong, 180000, Viet Nam, <https://orcid.org/0009-0000-3223-1645>, nguyenvanvuong@gmail.com

Van Huan Bui — PhD Student, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, <https://orcid.org/0000-0002-6563-1909>, buinguyenkhanh201095@gmail.com

Статья поступила в редакцию 20.03.2024

Одобрена после рецензирования 02.07.2024

Принята к печати 23.07.2024

Received 20.03.2024

Approved after reviewing 02.07.2024

Accepted 23.07.2024



Работа доступна по лицензии
Creative Commons
«Attribution-NonCommercial»

НОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ И НАНОТЕХНОЛОГИИ MATERIAL SCIENCE AND NANOTECHNOLOGIES

doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-563-570

УДК 519.6, 004.942

Автоматизация поиска оптимальных значений параметров процесса олигомеризации этилена

Евгения Викторовна Антипина^{1✉}, Светлана Анатольевна Мустафина²,
Андрей Федорович Антипин³

^{1,2,3} Уфимский университет науки и технологий, Уфа, 450076, Российская Федерация

¹ stepashinaev@ya.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-8458-9638>

² mustafina_sa@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6363-1665>

³ andrejantipin@ya.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9151-4167>

Аннотация

Введение. Приведено математическое описание процесса олигомеризации этилена на катализаторе $\text{NiO/B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$ в среде жидкого растворителя гептана. Сформулированы задачи оптимального управления процессом. В качестве управляющих параметров приняты температура и время протекания процесса. Предложен алгоритм решения задачи оптимального управления промышленно значимым каталитическим процессом олигомеризации этилена. **Метод.** Поиск решения сформулированных задач осуществляется с применением генетического алгоритма с вещественным кодированием. Для каждой из рассматриваемых задач предложен способ представления математического аналога популяции, на основе которого выполняется поиск решения. Представлен пошаговый алгоритм определения оптимальных значений параметров процесса олигомеризации этилена. Особенностью алгоритма является одновременный поиск значений непрерывного параметра управления (температура) и дискретного параметра управления (время процесса). Разработана программа (приложение), позволяющая определить оптимальные значения параметров процесса. Приложение позволяет пользователю выбирать задачу оптимального управления, задавать значения параметров генетического алгоритма для поиска решения и визуализировать полученные результаты. **Основные результаты.** Проведен вычислительный эксперимент для процесса олигомеризации этилена. Рассчитана оптимальная продолжительность процесса в изотермических условиях, при которой достигается наибольшее значение концентрации углеводородов C_4 . Определены оптимальные температурный режим и продолжительность процесса олигомеризации этилена, обеспечивающие максимальную концентрацию углеводородов C_6 . **Обсуждение.** Проведенные численные эксперименты продемонстрировали меньшую ресурсозатратность, по сравнению с методами равномерного поиска и вариаций в пространстве управления. Предложенный алгоритм можно применять для исследования закономерностей протекания каталитических процессов, не прибегая к проведению лабораторных экспериментов, сопряженных с дополнительными материальными и временными затратами.

Ключевые слова

задача оптимального управления, олигомеризация этилена, генетический алгоритм, математическая модель, программное обеспечение

Благодарности

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-21-00186, <https://rscf.ru/project/24-21-00186/>.

Ссылка для цитирования: Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф. Автоматизация поиска оптимальных значений параметров процесса олигомеризации этилена // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2024. Т. 24, № 4. С. 563–570. doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-563-570

Automation of search for optimal values of the ethylene oligomerization process parameters

Evgenia V. Antipina¹✉, Svetlana A. Mustafina², Andrey F. Antipin³

^{1,2,3} Ufa University of Science and Technology, Ufa, 450076, Russian Federation

¹ stepashinaev@ya.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-8458-9638>

² mustafina_sa@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6363-1665>

³ andrejantipin@ya.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9151-4167>

Abstract

A mathematical description of the process of ethylene oligomerization on a NiO/B₂O₃-Al₂O₃ catalyst in a liquid heptane solvent is given. Problems of optimal process control are formulated. The temperature and time of the process are taken as control parameters. An algorithm is proposed for solving the problem of optimal control of the industrially significant catalytic process of ethylene oligomerization. The search for solutions to the formulated problems is carried out using a genetic algorithm with real coding. For each of the problems under consideration, a method is proposed for representing a mathematical analogue of a population on the basis of which a solution is searched. A step-by-step algorithm for determining the optimal parameters for the ethylene oligomerization process is presented. A special feature of the algorithm is the simultaneous search for the values of a continuous control parameter (temperature) and a discrete control parameter (process time). A program (application) has been developed to determine the optimal values of process parameters. The application allows the user to select an optimal control problem, set the values of the genetic algorithm parameters to find a solution, and visualize the results obtained. A computational experiment was carried out for the process of ethylene oligomerization. The optimal duration of the process under isothermal conditions was calculated, at which the highest concentration of C₄ hydrocarbons is achieved. The optimal temperature conditions and duration of the ethylene oligomerization process were determined to ensure the maximum concentration of C₆ hydrocarbons. The conducted numerical experiments demonstrated lower resource consumption compared to the methods of uniform search and variations in the control space. The proposed algorithm can be used to study the patterns of catalytic processes without resorting to laboratory experiments associated with additional material and time costs.

Keywords

optimal control problem, ethylene oligomerization, genetic algorithm, mathematical model, software

Acknowledgements

The research was supported by the Russian Science Foundation (RSF) grant No. 24-21-00186, <https://rscf.ru/en/project/24-21-00186/>.

For citation: Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Automation of search for optimal values of the ethylene oligomerization process parameters. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 4, pp. 563–570 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-563-570

Введение

Применение математического аппарата для моделирования процессов химической промышленности позволяет находить решения ряда практических задач, одной из которых является определение оптимальных условий их ведения. Поскольку при решении различных производственных задач не всегда имеется возможность провести достаточное количество экспериментов ввиду сложного состава исходного сырья или высоких материальных затрат, актуальной является разработка математических методов и компьютерных программ, позволяющих исследовать закономерности протекания каталитических процессов.

Важное практическое значение в промышленном производстве играют процессы каталитической олигомеризации и полимеризации олефинов. Продукты данных процессов применяются в крупнотоннажном промышленном производстве полиэтилена.

В настоящее время имеются исследования, в которых на основе математических методов определяются оптимальные способы ведения каталитических процессов [1, 2]. В качестве управления обычно рассматриваются температура, давление, начальный состав реакционной смеси, время процесса, скорость подачи сырья.

Методы линейного программирования применяются в химической технологии при решении задач

оптимального планирования производства [3, 4], для определения эффективного плана перевозок и т. д. В работе [5] предложен метод синтеза многостадийных систем теплообмена на основе задачи о назначениях. Линейное программирование используется для решения оптимизационных задач с линейным критерием оптимальности и линейными ограничениями, накладываемыми на область изменения переменных. Поскольку большинство каталитических процессов ввиду нестационарности чаще всего описывается нелинейными математическими моделями, то применимость данных методов для решения задач оптимального управления химическими процессами весьма ограничена.

Для оптимизации многостадийных процессов химической технологии применяется динамическое программирование, эффективность применения которого показана в работе [6]. Динамическое программирование хорошо зарекомендовало себя при решении задач, в которых на каждой стадии имеется небольшое число переменных. Его применение для сложных химических реакций, содержащих большое количество промежуточных веществ, затруднительно ввиду высокой размерности задачи и, как следствие, ресурсоемких вычислений.

Аналитические методы оптимизации процессов химической технологии (принцип максимума Понтрягина, вариационные методы) применяются для решения

Генетический алгоритм определения оптимальных значений параметров процесса олигомеризации этилена

Для решения приведенных выше задач сформулируем генетический алгоритм с вещественным кодированием. Принцип работы генетических алгоритмов основан на имитации процессов эволюции живой природы и включает в себя циклическое применение к популяции особей операций отбора, скрещивания, мутации и обновления.

Найдем управление $T(t)$ в классе кусочно-постоянных функций $T(t) = T_j, t \in [t_j, t_{j+1}], j = 0, n, t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{n+1}, t_0 = 0, t_{n+1} = \tau$.

Для каждой из задач оптимального управления процессом олигомеризации этилена введем в рассмотрение множество векторов:

— $\mathbf{p}_i = (T_{i1}, T_{i2}, \dots, T_{in}), i = \overline{1, s}$;

— $\mathbf{p}_i = (\tau_i), i = \overline{1, s}$;

— $\mathbf{p}_i = (T_{i1}, T_{i2}, \dots, T_{in}, \tau_i), i = \overline{1, s}$.

Каждый вектор $\mathbf{p}_i$, представляющий собой возможное решение задачи, назовем особью, а совокупность всех векторов $\mathbf{p}_i (i = \overline{1, s})$ — популяцией. Введем общее обозначение для элементов особи: $\mathbf{p}_i = (p_{i1}, p_{i2}, \dots, p_{ir}) = (p_{ij}), j = \overline{1, r},$ где $p_{ij} = T_{ij}, r = n$ — для задачи 1; $p_{ij} = \tau_i, r = 1$ — для задачи 2; $p_{ij} = \begin{cases} T_{ij}, j = \overline{1, n}, \\ \tau_i, j = n + 1, \end{cases} r = n + 1$ — для задачи 3.

Фитнес-функцией, определяющей, подходит ли особь в качестве решения, является целевой функционал каждой задачи. Так как осуществляется поиск максимального значения целевого функционала, наиболее подходящей (приспособленной) особи соответствует наибольшее значение целевого функционала. Чтобы вычислить значение фитнес-функции особи, необходимо найти численное решение системы дифференциальных уравнений (1) с начальными условиями (2), т. е. решить прямую кинетическую задачу.

Основные этапы работы генетического алгоритма.

Шаг 1. Создание начальной популяции особей $\mathbf{p}_i, i = \overline{1, s}$. Для каждой особи вычисляется значение фитнес-функции.

Шаг 2. Отбор. Из текущей популяции выбираются две особи $\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_m$ для последующего скрещивания с помощью одного из операторов отбора:

- панмиксия: случайным образом отбираются две особи, при этом вероятность отбора каждой из них одинакова;
- турнирный отбор: в первом турнире случайным образом выбираются две различные особи, из которых случайным образом во втором турнире отбирается одна особь.

Шаг 3. Кроссовер. Формируется новая особь путем применения одного из операторов кроссовера:

- простейший: создается два потомка $\mathbf{v}_1 = (p_{k1}, \dots, p_{kq}, p_{mq+1}, \dots, p_{mr}), \mathbf{v}_2 = (p_{m1}, \dots, p_{mq}, p_{kq+1}, \dots, p_{kr}),$ где $q \in [1, r - 1]$ — случайное число;
- арифметический: создается два потомка $\mathbf{v}_1 = \lambda \mathbf{p}_k + (1 - \lambda) \mathbf{p}_m, \mathbf{v}_2 = \lambda \mathbf{p}_m + (1 - \lambda) \mathbf{p}_k,$ где $\lambda \in [0, 1]$ — случайное число.

Шаг 4. Мутация. С целью преодоления попадания решения в точку локального экстремума сгенерированная на шаге 3 особь подвергается действию одного из операторов мутации:

- случайная — случайно выбранная координата каждого из векторов $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ заменяется случайным значением из диапазонов, задаваемых неравенством (3) и/или (4);
- неравномерная — у каждого из векторов $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ случайно выбранная l -я координата заменяется на значение, вычисленное по формуле:

$$v_l = \begin{cases} v_l + (p_{\max} - v_l)(1 - q^{(1 - \frac{N}{N_{\max}})^{mut}}), & z \leq 0,5, \\ v_l - (v_l - p_{\min})(1 - q^{(1 - \frac{N}{N_{\max}})^{mut}}), & z > 0,5, \end{cases}$$

где $p_{\max} = \bar{T}, p_{\min} = \underline{T}$ и/или $p_{\max} = \bar{\tau}, p_{\min} = \underline{\tau}$, в зависимости от решаемой задачи; $q, z \in [0, 1]$ — случайные числа; N — номер текущей популяции; $N_{\max}$ — максимальное количество популяций; mut — параметр мутации.

Шаг 5. Обновление популяции. Из текущей популяции выбирается особь с наименьшим значением фитнес-функции и заменяется вектором-мутантом. Далее осуществляется переход на шаг 2, пока не будет достигнуто условие окончания поиска. Особь с наибольшим значением фитнес-функции из последней популяции будет представлять собой решение задачи оптимального управления процессом олигомеризации этилена.

Особенностью алгоритма является возможность поиска оптимальных значений двух параметров управления, один из которых является непрерывной величиной (температура), а другой — дискретной величиной (продолжительность процесса).

В среде визуального программирования Delphi разработано приложение, позволяющее определить оптимальные значения параметров процесса олигомеризации этилена на катализаторе $\text{NiO/B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$. Данное программное обеспечение дает возможность выбрать задачу оптимального управления, задавать значения параметров генетического алгоритма для поиска ее решения и визуализировать полученные результаты. В качестве критерия оптимальности можно указать достижение наибольшего выхода только для одной фракции углеводородов. Для поиска численного решения системы дифференциальных уравнений (1) с начальными условиями (2) в программе реализован предиктор-корректорный метод Адамса второго порядка.

Вычислительный эксперимент

С помощью генетического алгоритма вычислим оптимальную продолжительность процесса олигомеризации этилена в изотермическом режиме. В качестве критерия оптимальности рассмотрим максимальное значение концентрации углеводородов фракции C_4 . Тогда целевой функционал имеет вид

$$F(\tau^*) = x_2(\tau^*). \quad (5)$$

На значения управляющего параметра наложены ограничения:

$$60 \text{ с} \leq \tau \leq 1500 \text{ с}. \quad (6)$$

Пусть заданы начальные концентрации веществ, моль/л:

$$x_1(0) = 1,85, x_i(0) = 0, i = \overline{2, 6}.$$

Требуется для процесса олигомеризации этилена определить его длительность τ^* с учетом ограничений (6), при котором функционал (5) принимает наибольшее значение.

Для решения сформулированной задачи (при $T = 473 \text{ K}$) зададим следующие значения параметров генетического алгоритма: размер популяции $s = 10$; количество популяций — 50; оператор отбора — панмиксия, оператор мутации — случайная мутация, оператор кроссовера — арифметический кроссовер.

Результаты расчетов показали, что наибольшее значение концентрации целевого продукта процесса, равное 0,396 моль/л, достигается при $\tau^* = 191 \text{ с}$ (рис. 1).

Решение задачи поиска оптимальной продолжительности процесса олигомеризации этилена найдем также с помощью метода равномерного поиска. Поиск решения осуществим с шагом, равным 1 с. Оптимальная длительность процесса составила также 191 с. Однако вычислительные затраты на поиск решения с помощью метода равномерного поиска выше, по сравнению с генетическим алгоритмом. Количество обращений к целевому функционалу в первом случае составило 1441, для генетического алгоритма — 61 (10 раз — на этапе генерирования начальной популяции, 50 раз — для особи-мутанта, добавляемого в популяцию, 1 раз — в последней популяции для выбора особи, которая рассматривается в качестве решения задачи). В результате

можно сделать вывод, что разработанный генетический алгоритм менее ресурсозатратный для поиска оптимальной продолжительности процесса олигомеризации этилена, по сравнению с методом равномерного поиска.

Вычислим оптимальный температурный режим и продолжительность процесса олигомеризации этилена. Зададим в качестве критерия оптимальности максимальное значение концентрации углеводородов фракции C_6 , т. е. целевой функционал имеет вид

$$F(T^*(t), \tau^*) = x_3(\tau^*). \quad (7)$$

На значения температуры наложены ограничения:

$$323 \text{ K} \leq T(t) \leq 473 \text{ K}, t \in [0, \tau]. \quad (8)$$

Необходимо найти температурный режим $T^*(t)$ и продолжительность процесса τ^* , удовлетворяющих условиям (6), (8), при которых целевой функционал (7) принимает наибольшее значение.

Для решения поставленной задачи применим генетический алгоритм со следующими значениями параметров: размер популяции $s = 70$; количество популяций — 500; оператор отбора — панмиксия, оператор мутации — случайная мутация, оператор кроссовера — арифметический кроссовер.

В результате проведенных вычислений установлено, что для достижения наибольшей концентрации углеводородов C_6 , равной 0,164 моль/л, продолжительность процесса составляет 462 с. При этом следует начинать процесс при минимальной температуре, спустя 194 с необходимо увеличить температуру до максимальной и поддерживать ее на этом уровне до конца процесса (рис. 2).

Вычисленные значения целевого функционала (7) для различных изотермических режимов (таблица) при оптимальной продолжительности процесса не превос-

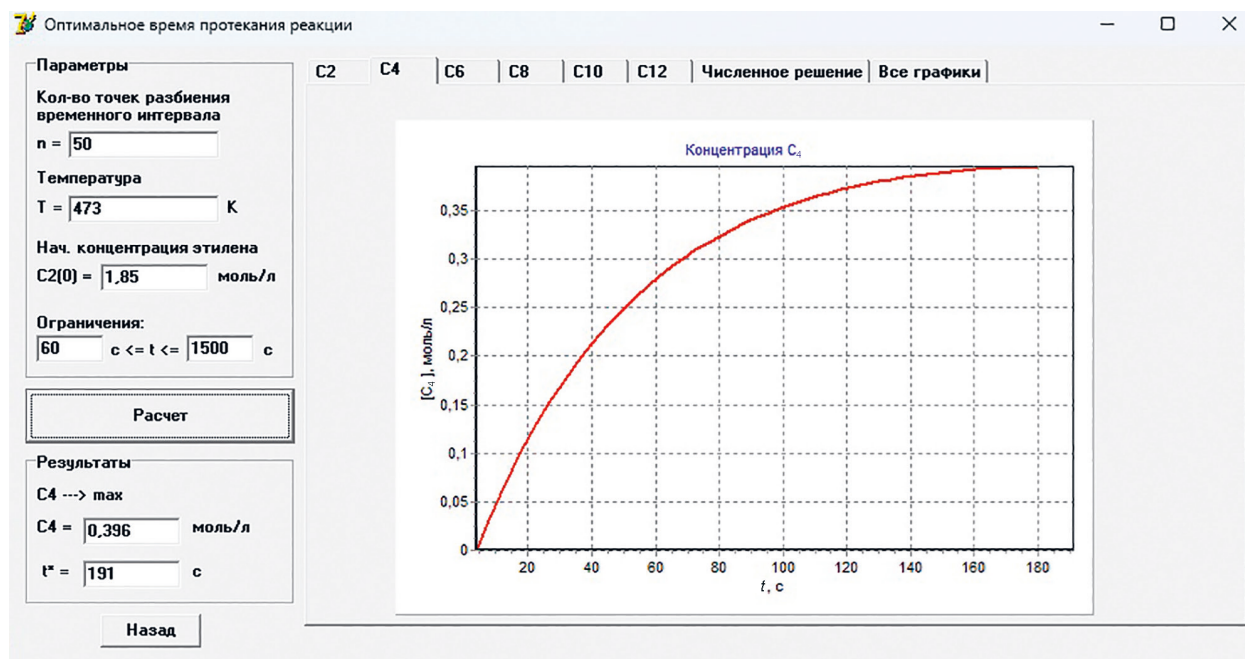


Рис. 1. Результаты решения задачи поиска оптимального времени протекания процесса олигомеризации этилена

Fig. 1. Results of solving the problem of finding the optimal time for the process of ethylene oligomerization

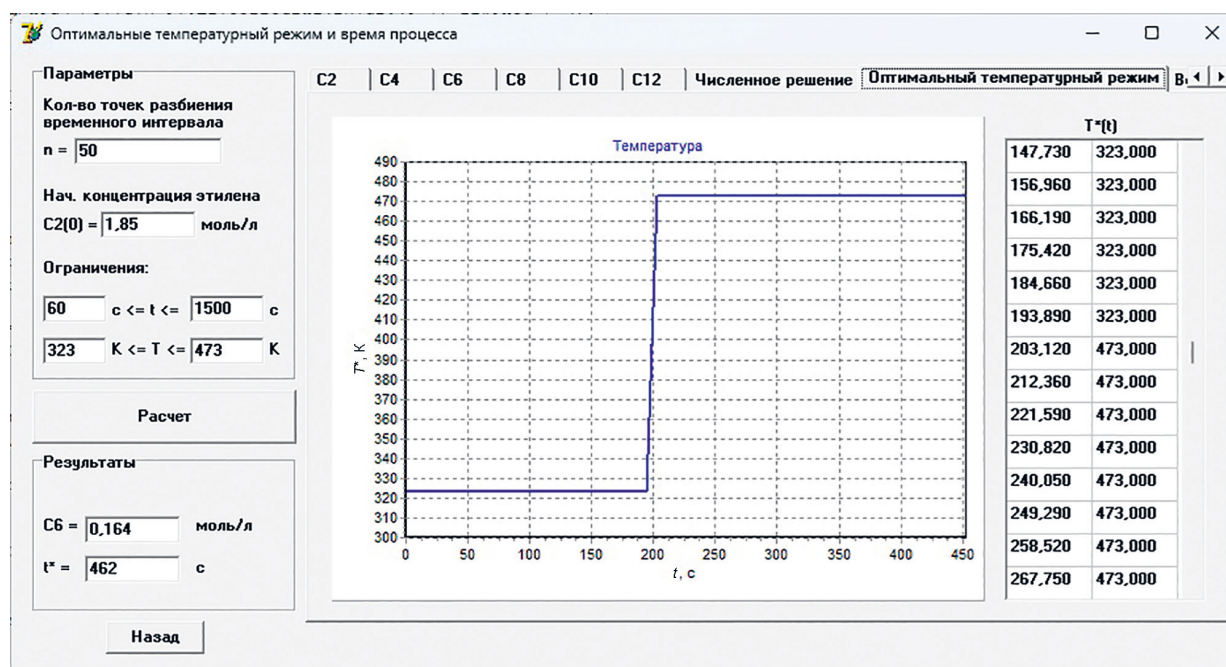


Рис. 2. Результаты решения задачи поиска оптимальных значений параметров (температуры и времени) процесса олигомеризации этилена

Fig. 2. Results of solving the problem of searching for optimal values of parameters (temperature and time) of the ethylene oligomerization process

ходят его значения, рассчитанного для оптимального температурного режима.

Задача поиска оптимального температурного режима и оптимальной продолжительности процесса олигомеризации этилена также решена с помощью метода вариаций в пространстве управлений, реализованного в программе на языке программирования Delphi. В качестве начального приближения решения задачи задана постоянная температура $T(t) = 398$ K и длительность процесса $\tau = 720$ с. Задача решена с шагом 0,1 K для температуры и с шагом 1 с для продолжительности процесса; количество точек разбиения интервала времени задано равным 50. Результаты расчетов показали, что наибольшее значение концентрации фракции углеводородов C_6 составляет 0,163 моль/л при продолжительности процесса $\tau^* = 458$ с. Структура оптимальной температурной кривой процесса близка к

температурному профилю, рассчитанному с помощью генетического алгоритма. Относительная погрешность вектора температуры составила 3,78 %. Количество обращений к целевому функционалу при решении задачи с помощью генетического алгоритма составило 571, при использовании метода вариаций в пространстве управлений — 2010. В связи с этим для поиска оптимальных значений параметров процесса олигомеризации этилена целесообразно применять разработанный генетический алгоритм.

Заключение

Разработаны алгоритм и программное обеспечение, которые позволяют определить оптимальные значения параметров процесса олигомеризации этилена на катализаторе $\text{NiO/B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$. Алгоритм сочетает в себе возможность поиска значений непрерывного параметра управления (температура) и/или дискретного параметра управления (время процесса). Алгоритм позволяет на основе математического описания процесса вычислить оптимальный температурный профиль и оптимальное время протекания процесса, при которых достигается экстремум заданного пользователем критерия оптимальности. Преимуществом программного обеспечения является возможность выбора управляющего воздействия и критерия оптимальности, что позволяет применять его для различных постановок задач оптимального управления процессом олигомеризации этилена. Проведенные численные эксперименты по определению оптимальных значений параметров процесса олигомеризации этилена продемонстрировали меньшую ресурсозатратность, по сравнению с методами равномерного поиска и вариаций в пространстве управлений.

Таблица. Значение целевого функционала (7) при постоянных допустимых значениях температуры ($\tau^* = 462$ с)

Table. Value of the target functional (7) at constant permissible temperature values ($\tau^* = 462$ s)

T, K	$x_3(\tau^*)$, моль/л
323	0,014
348	0,039
373	0,077
398	0,114
423	0,138
448	0,148
473	0,150

Литература

1. Джамбеков А.М., Щербатов И.А. Оптимальное управление процессом каталитического риформинга бензиновых фракций // Вестник Тамбовского государственного технического университета. 2017. Т. 23. № 4. С. 557–571. <https://doi.org/10.17277/vestnik.2017.04.pp.557-571>
2. Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф. Теоретическая оптимизация режимных параметров каталитической реакции с переменным реакционным объемом // Вестник Тверского государственного университета. Серия: Химия. 2022. № 2(48). С. 67–78. <https://doi.org/10.26456/vtchem2022.2.8>
3. Charitopoulos V.M., Papageorgiou L.G., Dua V. Multi-parametric mixed integer linear programming under global uncertainty // Computers & Chemical Engineering. 2018. V. 116. P. 279–295. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2018.04.015>
4. Charitopoulos V.M., Papageorgiou L.G., Dua V. Closed-loop integration of planning, scheduling and multi-parametric nonlinear control // Computers & Chemical Engineering. 2019. V. 122. P. 172–192. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2018.06.021>
5. Зиятдинов Н.Н., Емельянов И.И., Туен Л.К. Метод синтеза оптимальных многостадийных систем теплообмена // Теоретические основы химической технологии. 2018. Т. 52. № 6. С. 614–627. <https://doi.org/10.1134/S0040357118060192>
6. Fu K., Zou Y., Li S. Iterative unit-based Adaptive dynamic programming with application to fluid catalytic cracker unit // Proc. of the 2019 Chinese Automation Congress (CAC). 2019. P. 5010–5015. <https://doi.org/10.1109/CAC48633.2019.8996670>
7. Cao X., Jia S., Luo Y., Yuan X., Qi Z., Yu K.-T. Multi-objective optimization method for enhancing chemical reaction process // Chemical Engineering Science. 2019. V. 195. P. 494–506. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2018.09.048>
8. Kozuch D.J., Stillinger F.H., Debenedetti P.G. Genetic algorithm approach for the optimization of protein antifreeze activity using molecular simulations // Journal of Chemical Theory and Computation. 2020. V. 16. N 12. P. 7866–7873. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.0c00773>
9. Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Algorithm of solving a multiobjective optimization problem on the basis of a kinetic chemical reaction model // Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing. 2021. V. 57. N 6. P. 668–674. <https://doi.org/10.3103/S8756699021060029>
10. Трокоз Д.А. Метод параметрической оптимизации для широких нейронных сетей с использованием генетических алгоритмов // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. 2021. Т. 23. № 2. С. 51–56. <https://doi.org/10.37313/1990-5378-2021-23-2-51-56>
11. Stastny J., Skorpil V., Balogh Z., Klein R. Job shop scheduling problem optimization by means of graph-based algorithm // Applied Sciences. 2021. V. 11. N 4. P. 1921. <https://doi.org/10.3390/app11041921>
12. Gulbaz R., Siddiqui A.B., Anjum N., Alotaibi A.A., Althobaiti T., Ramzan N. Balancer genetic algorithm—a novel task scheduling optimization approach in cloud computing // Applied Sciences. 2021. V. 11. N 14. P. 6244. <https://doi.org/10.3390/app11146244>
13. Jalali Z., Noorzai E., Heidari S. Design and optimization of form and facade of an office building using the genetic algorithm // Science and Technology for the Built Environment. 2020. V. 26. N 2. P. 128–140. <https://doi.org/10.1080/23744731.2019.1624095>
14. Xie L., Chen Y., Chang R. Scheduling optimization of prefabricated construction projects by genetic algorithm // Applied Sciences. 2021. V. 11. N 12. P. 5531. <https://doi.org/10.3390/app11125531>
15. Migov D.A., Volzhankina K.A., Rodionov A.S. Genetic algorithms for drain placement in wireless sensor networks optimal by the reliability criterion // Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing. 2021. V. 57. N 3. P. 240–249. <https://doi.org/10.3103/S8756699021030110>
16. Волков А.А., Булучевский Е.А., Лавренов А.В. Кинетика олигомеризации этилена на катализаторе NiO/B₂O₃-Al₂O₃ в жидкой фазе // Журнал Сибирского федерального университета. Серия: Химия. 2013. Т. 6. № 4. С. 352–360.

References

1. Dzhambekov A.M., Shcherbatov I.A. Optimal control of the process of catalytic reforming of petrol fractions. *Transactions of the TSTU*, 2017, vol. 23, no. 4. pp. 557–571. (in Russian). <https://doi.org/10.17277/vestnik.2017.04.pp.557-571>
2. Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Theoretical optimization of regular parameters of a catalytic reaction with a variable reaction volume. *Herald of Tver State University. Series: Chemistry*, 2022, no. 2(48), pp. 67–78. (in Russian). <https://doi.org/10.26456/vtchem2022.2.8>
3. Charitopoulos V.M., Papageorgiou L.G., Dua V. Multi-parametric mixed integer linear programming under global uncertainty. *Computers & Chemical Engineering*, 2018, vol. 116, pp. 279–295. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2018.04.015>
4. Charitopoulos V.M., Papageorgiou L.G., Dua V. Closed-loop integration of planning, scheduling and multi-parametric nonlinear control. *Computers & Chemical Engineering*, 2019, vol. 122, pp. 172–192. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2018.06.021>
5. Ziyatdinov N.N., Emel'yanov I.I., Tuen L.Q. Method for the synthesis of optimum multistage heat exchange network. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 2018, vol. 52, no. 6, pp. 943–955. <https://doi.org/10.1134/s0040579518060167>
6. Fu K., Zou Y., Li S. Iterative unit-based Adaptive dynamic programming with application to fluid catalytic cracker unit. *Proc. of the 2019 Chinese Automation Congress (CAC)*, 2019, pp. 5010–5015. <https://doi.org/10.1109/CAC48633.2019.8996670>
7. Cao X., Jia S., Luo Y., Yuan X., Qi Z., Yu K.-T. Multi-objective optimization method for enhancing chemical reaction process. *Chemical Engineering Science*, 2019, vol. 195, pp. 494–506. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2018.09.048>
8. Kozuch D.J., Stillinger F.H., Debenedetti P.G. Genetic algorithm approach for the optimization of protein antifreeze activity using molecular simulations. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2020, vol. 16, no. 12, pp. 7866–7873. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.0c00773>
9. Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Algorithm of solving a multiobjective optimization problem on the basis of a kinetic chemical reaction model. *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*, 2021, vol. 57, no. 6, pp. 668–674. <https://doi.org/10.3103/S8756699021060029>
10. Trokoz D.A. Parametric optimization method for wide neural networks using genetic algorithms. *Izvestia of Samara Scientific Center of the Russian Academy of Sciences*, 2021, vol. 23, no. 2, pp. 51–56. (in Russian). <https://doi.org/10.37313/1990-5378-2021-23-2-51-56>
11. Stastny J., Skorpil V., Balogh Z., Klein R. Job shop scheduling problem optimization by means of graph-based algorithm. *Applied Sciences*, 2021, vol. 11, no. 4, pp. 1921. <https://doi.org/10.3390/app11041921>
12. Gulbaz R., Siddiqui A.B., Anjum N., Alotaibi A.A., Althobaiti T., Ramzan N. Balancer genetic algorithm—a novel task scheduling optimization approach in cloud computing. *Applied Sciences*, 2021, vol. 11, no. 14, pp. 6244. <https://doi.org/10.3390/app11146244>
13. Jalali Z., Noorzai E., Heidari S. Design and optimization of form and facade of an office building using the genetic algorithm. *Science and Technology for the Built Environment*, 2020, vol. 26, no. 2, pp. 128–140. <https://doi.org/10.1080/23744731.2019.1624095>
14. Xie L., Chen Y., Chang R. Scheduling optimization of prefabricated construction projects by genetic algorithm. *Applied Sciences*, 2021, vol. 11, no. 12, pp. 5531. <https://doi.org/10.3390/app11125531>
15. Migov D.A., Volzhankina K.A., Rodionov A.S. Genetic algorithms for drain placement in wireless sensor networks optimal by the reliability criterion. *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*, 2021, vol. 57, no. 3, pp. 240–249. <https://doi.org/10.3103/S8756699021030110>
16. Volkov A.A., Buluchevskiy E.A., Lavrenov A.V. Kinetics of ethylene oligomerization on NiO/B₂O₃-Al₂O₃ in liquid phase. *Journal of Siberian Federal University. Chemistry*, 2013, vol. 6, no. 4, pp. 352–360. (in Russian)

Авторы

Антипина Евгения Викторовна — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Уфимский университет науки и технологий, Уфа, 450076, Российская Федерация, [sc 57214879770](https://orcid.org/0000-0002-8458-9638), <https://orcid.org/0000-0002-8458-9638>, stepashinaev@ya.ru

Мустафина Светлана Анатольевна — доктор физико-математических наук, профессор, проректор по цифровой трансформации, Уфимский университет науки и технологий, Уфа, 450076, Российская Федерация, [sc 6603592002](https://orcid.org/0000-0002-6363-1665), <https://orcid.org/0000-0002-6363-1665>, mustafina_sa@mail.ru

Антипин Андрей Федорович — кандидат технических наук, доцент, доцент, Уфимский университет науки и технологий, Уфа, 450076, Российская Федерация, [sc 55904921400](https://orcid.org/0000-0002-9151-4167), <https://orcid.org/0000-0002-9151-4167>, andrejantipin@ya.ru

Authors

Evgenia V. Antipina — PhD (Physics & Mathematics), Senior Researcher, Ufa University of Science and Technology, Ufa, 450076, Russian Federation, [sc 57214879770](https://orcid.org/0000-0002-8458-9638), <https://orcid.org/0000-0002-8458-9638>, stepashinaev@ya.ru

Svetlana A. Mustafina — D.Sc. (Physics & Mathematics), Professor, Vice-Rector for Digital Transformation, Ufa University of Science and Technology, Ufa, 450076, Russian Federation, [sc 6603592002](https://orcid.org/0000-0002-6363-1665), <https://orcid.org/0000-0002-6363-1665>, mustafina_sa@mail.ru

Andrey F. Antipin — PhD, Associate Professor, Associate Professor, Ufa University of Science and Technology, Ufa, 450076, Russian Federation, [sc 55904921400](https://orcid.org/0000-0002-9151-4167), <https://orcid.org/0000-0002-9151-4167>, andrejantipin@ya.ru

Статья поступила в редакцию 22.03.2024

Одобрена после рецензирования 11.05.2024

Принята к печати 18.07.2024

Received 22.03.2024

Approved after reviewing 11.05.2024

Accepted 18.07.2024



Работа доступна по лицензии
Creative Commons
«Attribution-NonCommercial»

doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-571-577

УДК 538.958

Электролюминесценция новых координационных соединений ионов европия с β -дикетонами, уксусной и масляной кислотами

Анна Владимировна Осадченко¹✉, Сергей Александрович Амброзевич²,
Иван Александрович Захарчук³, Андрей Александрович Ващенко⁴,
Даниил Саюзович Дайбаге⁵, Александр Вячеславович Рыжов⁶,
Дмитрий Николаевич Певцов⁷, Николай Валерьевич Певцов⁸,
Александр Сергеевич Селюков⁹

^{1,2,3,4,5,9} Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, 119991, Российская Федерация

^{6,7,8} ООО «Химтех», Москва, 129626, Российская Федерация

⁷ Московский физико-технический институт, Долгопрудный, 141701, Российская Федерация

⁷ Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, 142432, Российская Федерация

¹ anna.vl.osadchenko@gmail.com✉, <https://orcid.org/0000-0001-9556-4885>

² s.ambrozevich@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3906-0735>

³ zakharchukia@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1502-6460>

⁴ vashchenkoa@lebedev.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2084-5900>

⁵ daibagya@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1944-1546>

⁶ rigov@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0001-4244-8968>

⁷ pevtsov.dn@mipt.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3191-5591>

⁸ 3372@bk.ru, <https://orcid.org/0009-0004-8286-8782>

⁹ selyukov@lebedev.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4007-6291>

Аннотация

Введение. Представлены результаты создания и исследования органических светоизлучающих светодиодов на основе координационных соединений ионами европия (Eu^{3+}) с β -дикетонами, уксусной и масляной кислотами. Актуальность работы обусловлена активным поиском новых материалов для создания оптоэлектронных устройств с высокими люминесцентными характеристиками. Одной из таких характеристик является высокая чистота цвета, которая достигается за счет использования материалов с узкополосной люминесценцией, например, соединений на основе ионов Eu^{3+} . **Метод.** Синтезированы комплексы на основе Eu^{3+} с 1,1,1-трифтор-4-фенил-2,4-бутандионом и уксусной $\text{Eu}(\text{Cl})(\text{Vtfa})(\text{CH}_3\text{COO})$ (соединение 1), а также масляной $\text{Eu}(\text{Vtfa})_2(\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{COO})$ (соединение 2) кислотами. Светодиоды синтезированных соединений изготовлены при помощи комбинированной методики, включающей методы центрифугирования и термического напыления в вакууме. Характеристики светодиодов измерены методами оптической спектроскопии. Для исследования оптических свойств комплексов порошкообразные образцы соединений 1 и 2 помещались между двух кварцевых подложек. Спектры фотолюминесценции регистрировались с помощью спектрометра СДЛ-1, светодиода, с длиной волны излучения 365 нм и фотоэлектронного умножителя, работающего в линейном режиме. Спектры электролюминесценции получены при помощи спектрометра Ocean Optics Maya 2000 PRO. **Основные результаты.** В спектре фотолюминесценции исследованных комплексов наблюдалась характерная для ионов Eu^{3+} линейчатая структура. В спектре электролюминесценции также присутствует излучение, характерное для ионов Eu^{3+} . Помимо него в коротковолновой области наблюдается дополнительная широкая полоса с максимумом излучения на длине волны 390 нм и с шириной на полувысоте 61 нм. Рабочее напряжение светодиода составило 10 В. Для исследованных светодиодов наблюдалось характерное «холодное» белое свечение. **Обсуждение.** В спектрах фото- и электролюминесценции для исследованных комплексов обнаружены следующие основные переходы: $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_0$ (максимумы на длинах волн $\lambda_1 = \lambda_2 = 580$ нм для соединений 1 и 2), $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_1$ (расщепленная полоса, с максимумами на длинах волн $\lambda_1 = 587$ нм, $\lambda_2 = 593$ нм,

© Осадченко А.В., Амброзевич С.А., Захарчук И.А., Ващенко А.А., Дайбаге Д.С., Рыжов А.В., Певцов Д.Н., Певцов Н.В., Селюков А.С., 2024

$\lambda_3 = 600$ нм для соединения 1 и $\lambda_1 = 592$ нм, $\lambda_2 = 599$ нм для соединения 2), $^5D_0 \rightarrow ^7F_2$ (расщепленная полоса, с максимумами на длинах волн $\lambda_1 = 614$ нм, $\lambda_2 = 619$ нм, $\lambda_3 = 623$ нм для соединения 1 и $\lambda_1 = 614$ нм, $\lambda_2 = 618$ нм, $\lambda_3 = 620$ нм для соединения 2), $^5D_0 \rightarrow ^7F_3$ (расщепленная полоса, с максимумами на длинах волн $\lambda_1 = 648$ нм, $\lambda_2 = 652$ нм, $\lambda_3 = 655$ нм для соединения 1 и $\lambda_1 = 652$ нм, $\lambda_2 = 655$ нм для соединения 2). Наблюдаемая в спектре электролюминесценции широкая полоса, возникает за счет вклада дырочного транспортного слоя и обусловлена сквозным протеканием носителей заряда через активный излучающий слой, что приводит к возникновению рекомбинации в PVK слое OLED. Анализ вольтамперных характеристик изготовленных устройств показал, что для них характерны два основных режима проводимости: ограничение тока пространственным зарядом (0–7 В) и ограничение, обусловленное процессами захвата носителей заряда (7–23 В). Результаты данной работы могут быть использованы при производстве устройств промышленного освещения.

Ключевые слова

фотолюминесценция, электролюминесценция, OLED, европий, Eu^{3+} , β -дикетоны, координационные соединения, уксусная кислота, масляная кислота

Ссылка для цитирования: Осадченко А.В., Амброзевич С.А., Захарчук И.А., Ващенко А.А., Дайбаге Д.С., Рыжов А.В., Певцов Д.Н., Певцов Н.В., Селюков А.С. Электролюминесценция новых координационных соединений ионов европия с β -дикетонами, уксусной и масляной кислотами // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2024. Т. 24, № 4. С. 571–577. doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-571-577

Electroluminescence of new coordination compounds of europium ions with β -diketones, acetic and butyric acids

Anna V. Osadchenko¹✉, Sergey A. Ambrozevich², Ivan A. Zakharchuk³,
Andrey A. Vashchenko⁴, Daniil S. Daibagya⁵, Alexandr V. Ryzhov⁶, Dmitry N. Pevtsov⁷,
Nikolai V. Pevtsov⁸, Alexandr S. Selyukov⁹

^{1,2,3,4,5,9} Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, 119991, Russian Federation

^{6,7,8} Limited Liability Company “Khimtekh”, Moscow, 129626, Russian Federation

⁷ Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, 141701, Russian Federation

⁷ Federal Research Center of Problems of Chemical Physics and Medicinal Chemistry RAS, Chernogolovka, 142432, Russian Federation

¹ anna.vl.osadchenko@gmail.com✉ <https://orcid.org/0000-0001-9556-4885>

² s.ambrozevich@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3906-0735>

³ zakharchukwork@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1502-6460>

⁴ vashchenkoaa@lebedev.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2084-5900>

⁵ daibagya@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1944-1546>

⁶ rigov@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0001-4244-8968>

⁷ pevtsov.dn@mpt.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3191-5591>

⁸ 3372@bk.ru, <https://orcid.org/0009-0004-8286-8782>

⁹ selyukov@lebedev.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4007-6291>

Abstract

In this work, organic light-emitting LEDs based on Eu^{3+} coordination compounds with β -diketones and acetic and butyric acids were created and studied. At the moment, an active search is underway for new materials to create optoelectronic devices with high luminescent characteristics. One of these characteristics is high color purity and it can be achieved through the use of materials with narrow-band luminescence, for example, compounds based on Eu^{3+} ions. Complexes based on Eu^{3+} with 1,1,1-trifluoro-4-phenyl-2,4-butanedione and acetic $\text{Eu}(\text{Cl})(\text{Btfa})(\text{CH}_3\text{COO})$ (compound 1), butyric $\text{Eu}(\text{Btfa})_2(\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{COO})$ (compound 2) acids were synthesized. The LEDs of the synthesized compounds were manufactured using a combined technique including the method of centrifugation and the method of thermal spraying in vacuum. The characteristics of the LEDs were measured by optical spectroscopy. To study the optical properties of the complexes, the powder was placed between two quartz substrates. Photoluminescence spectra were recorded using a SDL-1 spectrometer, an LED with a wavelength of 365 nm and a photoelectronic multiplier operating in linear mode. Electroluminescence spectra were obtained using the Ocean Optics Maya 2000 PRO spectrometer. A linear structure characteristic of Eu^{3+} ions was observed in the photoluminescence spectrum of the studied complexes. In the electroluminescence spectrum, radiation characteristic of Eu^{3+} ions is also observed, in addition to it, an additional wide band with a maximum at a wavelength of 390 nm and a half-height width of 61 nm is observed in the short-wavelength region. The operating voltage of the LED was 10 V. A characteristic “cold” white glow was observed for the studied LEDs. In the spectra of photos- and electroluminescence the following main transitions were found for the studied complexes: $^5D_0 \rightarrow ^7F_0$ (maxima at wavelengths $\lambda_1 = \lambda_2 = 580$ nm for compounds 1 and 2), $^5D_0 \rightarrow ^7F_1$ (split band, with maxima at wavelengths $\lambda_1 = 587$ nm, $\lambda_2 = 593$ nm, $\lambda_3 = 600$ nm for the compound 1 and $\lambda_1 = 592$ nm, $\lambda_2 = 599$ nm for compound 2), $^5D_0 \rightarrow ^7F_2$ (split band, with maxima at wavelengths $\lambda_1 = 614$ nm, $\lambda_2 = 619$ nm, $\lambda_3 = 623$ nm for compound 1 and $\lambda_1 = 614$ nm, $\lambda_2 = 618$ nm, $\lambda_3 = 620$ nm for junction 2), $^5D_0 \rightarrow ^7F_3$ (split band, with maxima at wavelengths $\lambda_1 = 648$ nm, $\lambda_2 = 652$ nm, $\lambda_3 = 655$ nm for junction 1 and $\lambda_1 = 652$ nm, $\lambda_2 = 655$ nm for compound 2). The wide band observed in the electroluminescence spectrum arises due to the contribution of the hole transport layer, due to the through flow of charge carriers through the active radiating layer, which leads to recombination in the PVK OLED layer. An analysis of the volt-ampere characteristics of the manufactured devices showed that they are characterized by two main conduction modes: the first corresponds to a limitation of the current by a spatial charge (0–7 V), the second

is a limitation due to the processes of capture of charge carriers (7–23 V). The results of this work can be used in the production of industrial lighting.

Keywords

photoluminescence, electroluminescence, OLED, Europium, Eu^{3+} , β -diketones, coordination compounds, acetic acid, butyric acid

For citation: Osadchenko A.V., Ambrozevich S.A., Zakharchuk I.A., Vashchenko A.A., Daibagya D.S., Ryzhov A.V., Pevtsov D.N., Pevtsov N.V., Selyukov A.S. Electroluminescence of new coordination compounds of europium ions with β -diketones, acetic and butyric acids. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 4, pp. 571–577 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-571-577

Введение

Органические светоизлучающие диоды (Organic Light-Emitting Diode, OLED) являются неотъемлемой частью современных технологий и применяются в том числе для создания дисплеев, а также в осветительных системах [1–4]. Обусловлено это тем, что светодиоды позволяют создать устройства с широким углом обзора с низкой себестоимостью и высокой энергоэффективностью, также подобные устройства могут быть изготовлены на гибких подложках [5]. Тем не менее, разработка новых устройств с высоким индексом цветопередачи остается актуальной задачей и на сегодняшний день. Кроме того, повышение эффективности оптоэлектронных устройств тесно связано с улучшением люминесцентных характеристик люминофоров, лежащих в их основе. В этой связи комплексы лантаноидов (Ln^{3+}) с органическими лигандами в последние десятилетия привлекают внимание широкого круга исследователей, поскольку они обладают узкополосной люминесценцией и длительными временами релаксации возбуждения [6, 7]. Однако для редкоземельных металлов и их соединений обычно наблюдаются малые значения молярного коэффициента экстинкции (от 1 до $10 \text{ л} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$). Несмотря на это, возможно частичное снятие запрета для $f-f$ переходов в ионах Ln^{3+} путем введения различных лигандов в их координационную сферу. Эти лиганды действуют как «антенны», способствующие эффективному поглощению ультрафиолетового излучения и улучшению эффективности люминесценции ионов Ln^{3+} . Соединения на основе ионов европия (Eu^{3+}) среди красных излучателей показали себя весьма успешно. Среди бесчисленного множества лигандов особое место занимают β -дикетоны, которые выделяются благодаря относительно простому методу синтеза и широкополосному поглощению [8]. Кроме того, узкие линии люминесценции Eu^{3+} -содержащих соединений обеспечивают возможность создания источников света с более высоким качеством цветопередачи [9, 10]. Цель настоящей работы — исследовать излучательные и электрофизические характеристики OLED-устройств на основе комплексов Eu^{3+} с β -дикетонами, уксусной и масляной кислотами.

Техника эксперимента

В работе исследован потенциал применения двух гетеролигандных комплексов Eu^{3+} с 1,1,1-трифтор-4-фенил-2,4-бутандионом (Btfa), уксусной $\text{Eu}(\text{Cl})(\text{Btfa})(\text{CH}_3\text{COO})$ (соединение 1), а также масляной $\text{Eu}(\text{Btfa})_2(\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{COO})$ (соединение 2) кислотами

в качестве материала активного излучающего слоя OLED.

Соединения синтезированы следующим образом. В трехгорлую колбу объемом 2,0 л, снабженную мешалкой, капельной воронкой и обратным холодильником, загружалось расчетное количество 1,1,1-трифтор-4-фенил-2,4-бутандиона (Btfa) и 0,02 моль уксусной либо масляной кислоты для соединений 1 или 2 в 300 мл изопропилового спирта. Смесь нагревалась при перемешивании до полного растворения компонентов. В отдельном стакане приготавливался раствор 0,02 моль хлорида европия в 200 мл изопропилового спирта, который затем вводился в колбу при интенсивном перемешивании. Реакционную массу перемешивали при нагревании еще 1 ч и охлаждали до комнатной температуры. Затем по каплям добавляли требуемое количество (0,04 моль или 0,06 моль) раствора аммиака в 200 мл деионизированной воды до устойчивого значения pH реакционной системы равного 7–8 и тщательно перемешивали еще 4 ч. Полученная пульпа выдерживалась в течение 12 ч, а затем фильтровалась под вакуумом и промывалась на фильтре деионизированной водой до нейтральной реакции промывных вод. Отмытый осадок сушили в вентилируемом сушильном шкафу при 50 °C до постоянной массы.

Для измерения спектров фотolumинесценции (ФЛ) использовались порошкообразные образцы соединений 1 и 2, которые помещали между кварцевыми стеклами КУ-1, пропускающими свет в диапазоне длин волн от 200 нм.

В состав экспериментальной установки для измерения спектров ФЛ входил диод с длиной волны излучения 465 нм, дифракционный спектрометр СДЛ-1 с двумя дифракционными решетками с количеством штрихов 600 штрихов/мм и фотоумножитель ФЭУ-79, чувствительный в диапазоне длин волн 300–850 нм, работавший в линейном режиме. Спектры электролюминесценции (ЭЛ) были получены при помощи спектрометра Ocean Optics Maya 2000 Pro с рабочей областью длин волн 200–1100 нм.

По методике, описанной в работе [3], были созданы светодиоды со структурой ITO/PEDOT:PSS/PVK/соединение 1 или 2/TPBi/LiF/Al, где ITO — оксид индия-олова, PEDOT:PSS — поли(3,4-этилендиокситиофен) полистирол сульфат, PVK — Poly(N-vinylcarbazole), TPBi — 2,2',2''-(1,3,5-бензинитрил)-трис(1-фенил-1-Н-бензимидазол). Отличие методики от [3] в том, что в качестве слоя с дырочной проводимостью использован PVK, наносившийся с помощью центрифуги с отжигом при 220 °C в течение 30 мин. В качестве исследуемых образцов использованы комплексы Eu^{3+}

с Вта, уксусной и масляной кислотами, которые нанесли из раствора в ацетоне с концентрацией порядка 5 г/л методом центрифугирования.

Результаты и их обсуждение

Спектры ФЛ соединений ионов Eu^{3+} с β -дикетонами, уксусной и масляной кислотами (рис. 1, непрерывные кривые) имели линейчатую структуру. В данных спектрах наблюдаются характерные для ионов Eu^{3+} пики, соответствующие следующим: $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_1$ (расщепленная полоса, с максимумами на длинах волн $\lambda_1 = 587$ нм, $\lambda_2 = 593$ нм, $\lambda_3 = 600$ нм для соединения 1 и $\lambda_1 = 592$ нм, $\lambda_2 = 599$ нм для соединения 2); $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_2$ (расщепленная полоса, с максимумами на длинах волн $\lambda_1 = 614$ нм, $\lambda_2 = 619$ нм, $\lambda_3 = 623$ нм для соединения 1 и $\lambda_1 = 614$ нм, $\lambda_2 = 618$ нм, $\lambda_3 = 620$ нм для соединения 2); $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_3$ (расщепленная полоса, с максимумами на длинах волн $\lambda_1 = 648$ нм, $\lambda_2 = 652$ нм, $\lambda_3 = 655$ нм для соединения 1 и $\lambda_1 = 652$ нм, $\lambda_2 = 655$ нм для соединения 2). Подобная линейчатая структура проявляется и в спектрах излучения, изготовленных на основе исследованных соединений OLED, что свидетельствует о том, что данные соединения проявляют ЭЛ. Кроме того, в спектрах ЭЛ также наблюдается широкая полоса, имею-

щая максимум в области длин волн 390 нм и ширину на полувысоте 61 нм, которая не свойственна ионам Eu^{3+} . Данная особенность спектра может быть связана с ЭЛ одного из транспортных слоев: TPBi (электронный) или PVK (дырочный). Выполненное сравнение полученных результатов с научными данными по ЭЛ устройств с использованием исследуемых веществ показал, что наблюдаемая дополнительная полоса в спектрах ЭЛ, изготовленных OLED обусловлена именно вкладом слоя PVK [11], поскольку TPBi излучает в более коротковолновой области спектра [12]. Возникновение ЭЛ одного из транспортных слоев объясняется частичным сквозным протеканием отрицательных носителей заряда сквозь активный излучающий слой, которое приводит к возникновению рекомбинации в слое PVK.

Для исследуемых комплексов на основе ионов Eu^{3+} с β -дикетонами, уксусной и масляной кислотами были оценены координаты цветности в рамках модели МКО 1931 [13]. Исходя из цветовой диаграммы (рис. 2), для исследованных комплексов наблюдается «холодное» белое свечение, что обусловлено синергизмом спектрального состава излучения PVK (синяя спектральная область) и Eu^{3+} (красная спектральная область). Помимо этого, были рассчитаны основные колориметрические параметры (таблица).

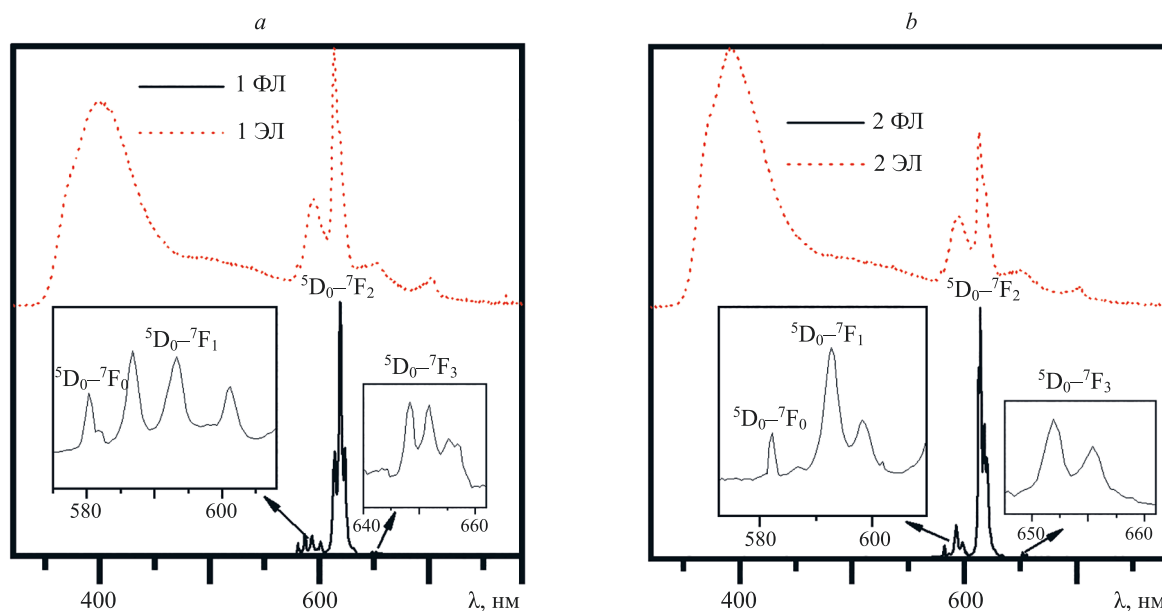


Рис. 1. Спектры фото (ФЛ)- и электролюминесценции (ЭЛ) для соединений 1 (a) и 2 (b)

Fig. 1. Spectra of photoluminescence and electroluminescence of compounds 1 (a) and 2 (b)

Таблица. Основные параметры излучения исследованных светодиодов на основе комплексов Eu^{3+} с β -дикетонами, уксусной (соединение 1) и масляной (соединение 2) кислотами

Table. The main parameters of the studied LEDs based on Eu^{3+} with β -diketones and acetic (compound 1) and butyric (compound 2) acid

Соединение	Цветовые координаты (x, y)	Чистота света CP, %	Доминирующая длина волны λ^* , нм	Цветовая температура T_c , К
1	(0,32; 0,25)	64	619	4942
2	(0,34; 0,25)	66	620	5637

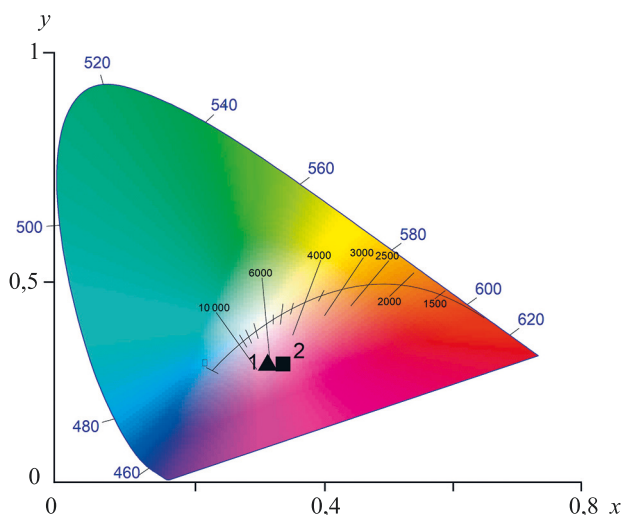


Рис. 2. Хроматическая диаграмма OLED на основе комплексов Eu^{3+} с β -дикетонами, уксусной (1) и масляной (2) кислотами в рамках модели MKO 1931

Fig. 2. OLED chromatic diagram based on Eu^{3+} complexes with β -diketones and acetic and butyric acids, CIE model 1931

Также были исследованы электрофизические характеристики устройств, изготовленных на основе соединений 1 и 2. Получены вольтамперные характеристики для светодиодов. Как известно, в вакуумной и сильноточной электронике описание проводимости часто сводится к модели пространственно-ограниченного заряда, при этом плотность тока зависит от напряжения как $J \propto V^2$ [14]. Подобная ситуация реализуется в настоящей работе при 0–7 В, т. е. проводимость ограничена пространственным зарядом. При напряжениях свыше 7 В (при 23 В получен пробой структуры) проводимость ограничивалась процессами захвата зарядов ловушками (кривая имела вид $J \propto V^n$, $n > 2$) [15], что согласуется с другими результатами для OLED на основе металлоорганических соединений [16].

Литература

1. Ващенко А.А., Витухновский А.Г., Лебедев В.С., Селюков А.С., Васильев Р.Б., Соколик М.С. Органический светоизлучающий диод на основе плоского слоя полупроводниковых нанопластинок CdSe в качестве эмиттера // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2014. Т. 100. № 2. С. 94–98. <https://doi.org/10.7868/S0370274X14140045>
2. Селюков А.С., Витухновский А.Г., Лебедев В.С., Ващенко А.А., Васильев Р.Б., Соколик М.С. Электролюминесценция коллоидных квазидвумерных полупроводниковых наноструктур CdSe в гибридном светоизлучающем диоде // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2015. Т. 147. № 4. С. 687–701.
3. Осадченко А.В., Ващенко А.А., Захарчук И.А., Дайбага Д.С., Амброзевич С.А., Володин Н.Ю., Чепцов Д.А., Долотов С.М., Травень В.Ф., Авраменко А.И., Семенова С.Л., Селюков А.С. Органические светоизлучающие диоды с новыми красителями на основе кумарина // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22. № 6. С. 1112–1118. <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2022-22-6-1112-1118>
4. Kim J.Y., Joo C.W., Lee J., Woo J.-C., Oh J.-Y., Baek N.S., Chu H.Y., Lee J.-I. Save energy on OLED lighting by a simple yet powerful technique // RSC Advances. 2015. V. 5. N 11. P. 8415–8421. <https://doi.org/10.1039/C4RA10434J>
5. Pode R. Organic light emitting diode devices: An energy efficient solid state lighting for applications // Renewable and Sustainable

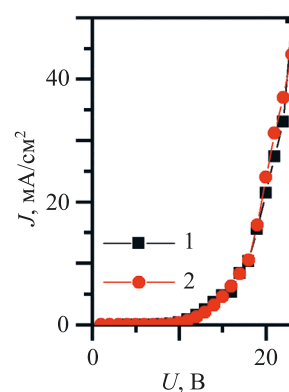


Рис. 3. Вольтамперные характеристики OLED на основе комплексов Eu^{3+} с β -дикетонами, уксусной (1) и масляной (2) кислотами

Fig. 3. Current-voltage characteristic OLED based on Eu^{3+} complexes with β -diketones and acetic (1) and butyric (2) acids

Заключение

В работе созданы и исследованы органические светоизлучающие диоды на основе новых координационных соединений ионов Eu^{3+} с β -дикетонами, уксусной и масляной кислотами. В спектрах их электролюминесценции наблюдалось как свечение комплексов ионов Eu^{3+} с характерным линейчатым видом спектра с основными переходами типа ${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_j$ (красная область спектра), так и свечение дырочного транспортного слоя PVK (синяя область спектра), обусловленное дисбалансом дырочного и электронного токов. Анализ колориметрических свойств показал, что подобный сложный спектральный состав излучения позволяет получить светодиоды с «холодным» белым свечением. Результаты работы могут быть использованы при изготовлении источников освещения с характерным белым свечением.

References

1. Vashchenko A.A., Vitukhnovskii A.G., Lebedev V.S., Selyukov A.S., Vasiliev R.B., Sokolikova M.S. Organic light-emitting diode with an emitter based on a planar layer of CdSe semiconductor nanoplatelets. *JETP Letters*, 2014, vol. 100, no. 2, pp. 86–90. <https://doi.org/10.1134/S0021364014140124>
2. Selyukov A.S., Vitukhnovskii A.G., Lebedev V.S., Vashchenko A.A., Vasiliev R.B., Sokolikova M.S. Electroluminescence of colloidal quasi-two-dimensional semiconducting CdSe nanostructures in a hybrid light-emitting diode. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2015, vol. 120, no. 4, pp. 595–606. <https://doi.org/10.1134/S1063776115040238>
3. Osadchenko A.V., Vashchenko A.A., Zakharchuk I.A., Daibagya D.S., Ambrozevich S.A., Volodin N.Yu., Cheptsov D.A., Dolotov S.M., Traven V.F., Avramenko A.I., Semenova S.L., Selyukov A.S. Organic light-emitting diodes with new dyes based on coumarin. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 6, pp. 1112–1118. (in Russian). <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2022-22-6-1112-1118>
4. Kim J.Y., Joo C.W., Lee J., Woo J.-C., Oh J.-Y., Baek N.S., Chu H.Y., Lee J.-I. Save energy on OLED lighting by a simple yet powerful technique. *RSC Advances*, 2015, vol. 5, no. 11, pp. 8415–8421. <https://doi.org/10.1039/C4RA10434J>
5. Pode R. Organic light emitting diode devices: An energy efficient solid state lighting for applications. *Renewable and Sustainable*

- Energy Reviews, 2020, V. 133, P. 110043. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2020.110043>
6. Kitagawa Y., Tsurui M., Hasegawa Y. Steric and electronic control of chiral Eu(III) complexes for effective circularly polarized luminescence // *ACS Omega*, 2020, V. 5, N 8, P. 3786–3791. <https://doi.org/10.1021/acsomega.9b03613>
7. Tanwar V., Singh S., Gupta I., Kumar P., Kumar H., Mari B., Singh D. Preparation and luminescence characterization of Eu(III)-activated Forsterite for optoelectronic applications // *Journal of Molecular Structure*, 2022, V. 1250, P. 131802. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.131802>
8. Varaksina E.A., Taydakov I.V., Ambrozevich S.A., Selyukov A.S., Lyssenko K.A., Jesus L.T., Freire R.O. Influence of fluorinated chain length on luminescent properties of Eu³⁺ β -diketonate complexes // *Journal of Luminescence*, 2018, V. 196, P. 161–168. <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2017.12.006>
9. Ilmi R., Zhang D., Dutra J.D.L., Dege N., Zhou L., Wong W.-Y., Raithby P.R., Khan M.S. A tris β -diketonate europium(III) complex based OLED fabricated by thermal evaporation method displaying efficient bright red emission // *Organic Electronics*, 2021, V. 96, P. 106216. <https://doi.org/10.1016/j.orgel.2021.106216>
10. Kozlov M.I., Kuznetsov K.M., Goloveshkin A.S., Burlakin A., Sandzhieva M., Makarov S.V., Ilina E., Utochnikova V.V. Solution-processed OLED based on a mixed-ligand europium complex // *Materials*, 2023, V. 16, N 3, P. 959. <https://doi.org/10.3390/ma16030959>
11. Wang P., Chai C., Wang F., Chuai Y., Chen X., Fan X., Zou D., Zhou Q. Single layer light-emitting diodes from copolymers comprised of mesogen-jacketed polymer containing oxadiazole units and PVK // *Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry*, 2008, V. 46, N 5, P. 1843–1851. <https://doi.org/10.1002/pola.22529>
12. Yin Y., Lü Z., Deng Z., Liu B., Mamytbekov Z.K., Hu B. White-light-emitting organic electroluminescent devices with poly-TPD as emitting layer // *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 2017, V. 28, N 24, P. 19148–19154. <https://doi.org/10.1007/s10854-017-7871-9>
13. Дайбаге Д.С., Захарчук И.А., Осадченко А.В., Селюков А.С., Амброзевич С.А., Скориков М.Л., Васильев Р.Б. Люминесцентные и колориметрические свойства ультратонких наносвитков селенида кадмия // *Краткие сообщения по физике ФИАН*, 2023, Т. 50, № 11, С. 83–91.
14. Zhu Y.B., Geng K., Cheng Z.S., Yao R.H. Space-charge-limited current injection into free space and trap-filled solid // *IEEE Transactions on Plasma Science*, 2021, V. 49, N 7, P. 2107–2112. <https://doi.org/10.1109/TPS.2021.3084461>
15. Pope M., Swenberg C.E. *Electronic Processes in Organic Crystals and Polymers*. Oxford University Press, 1999. <https://doi.org/10.1093/oso/9780195129632.001.0001>
16. Liu J., Liang Q.-B., Wu H.-B. Synthesis, photophysics, electrochemistry, thermal stability and electroluminescent performances of a new europium complex with bis(β -diketone) ligand containing carbazole group // *Luminescence*, 2017, V. 32, N 3, P. 460–465. <https://doi.org/10.1002/bio.3206>
- Energy Reviews, 2020, vol. 133, pp. 110043. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2020.110043>
6. Kitagawa Y., Tsurui M., Hasegawa Y. Steric and electronic control of chiral Eu(III) complexes for effective circularly polarized luminescence. *ACS Omega*, 2020, vol. 5, no. 8, pp. 3786–3791. <https://doi.org/10.1021/acsomega.9b03613>
7. Tanwar V., Singh S., Gupta I., Kumar P., Kumar H., Mari B., Singh D. Preparation and luminescence characterization of Eu(III)-activated Forsterite for optoelectronic applications. *Journal of Molecular Structure*, 2022, vol. 1250, pp. 131802. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.131802>
8. Varaksina E.A., Taydakov I.V., Ambrozevich S.A., Selyukov A.S., Lyssenko K.A., Jesus L.T., Freire R.O. Influence of fluorinated chain length on luminescent properties of Eu³⁺ β -diketonate complexes. *Journal of Luminescence*, 2018, vol. 196, pp. 161–168. <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2017.12.006>
9. Ilmi R., Zhang D., Dutra J.D.L., Dege N., Zhou L., Wong W.-Y., Raithby P.R., Khan M.S. A tris β -diketonate europium(III) complex based OLED fabricated by thermal evaporation method displaying efficient bright red emission. *Organic Electronics*, 2021, vol. 96, pp. 106216. <https://doi.org/10.1016/j.orgel.2021.106216>
10. Kozlov M.I., Kuznetsov K.M., Goloveshkin A.S., Burlakin A., Sandzhieva M., Makarov S.V., Ilina E., Utochnikova V.V. Solution-processed OLED based on a mixed-ligand europium complex. *Materials*, 2023, vol. 16, no. 3, pp. 959. <https://doi.org/10.3390/ma16030959>
11. Wang P., Chai C., Wang F., Chuai Y., Chen X., Fan X., Zou D., Zhou Q. Single layer light-emitting diodes from copolymers comprised of mesogen-jacketed polymer containing oxadiazole units and PVK. *Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry*, 2008, vol. 46, no. 5, pp. 1843–1851. <https://doi.org/10.1002/pola.22529>
12. Yin Y., Lü Z., Deng Z., Liu B., Mamytbekov Z.K., Hu B. White-light-emitting organic electroluminescent devices with poly-TPD as emitting layer. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 2017, vol. 28, no. 24, pp. 19148–19154. <https://doi.org/10.1007/s10854-017-7871-9>
13. Daibagya D.S., Zakharchuk I.A., Osadchenko A.V., Selyukov A.S., Ambrozevich S.A., Skorikov M.L., Vasiliev R.B. Luminescence and colorimetric properties of ultrathin cadmium selenide nanoscrolls. *Bulletin of the Lebedev Physics Institute*, 2023, vol. 50, no. 11, pp. 510–514. <https://doi.org/10.3103/S1068335623110118>
14. Zhu Y.B., Geng K., Cheng Z.S., Yao R.H. Space-charge-limited current injection into free space and trap-filled solid. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 2021, vol. 49, no. 7, pp. 2107–2112. <https://doi.org/10.1109/TPS.2021.3084461>
15. Pope M., Swenberg C.E. *Electronic Processes in Organic Crystals and Polymers*. Oxford University Press, 1999. <https://doi.org/10.1093/oso/9780195129632.001.0001>
16. Liu J., Liang Q.-B., Wu H.-B. Synthesis, photophysics, electrochemistry, thermal stability and electroluminescent performances of a new europium complex with bis(β -diketone) ligand containing carbazole group. *Luminescence*, 2017, vol. 32, no. 3, pp. 460–465. <https://doi.org/10.1002/bio.3206>

Авторы

Осадченко Анна Владимировна — младший научный сотрудник, Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, 119991, Российская Федерация, [sc 57439684100](https://orcid.org/0000-0001-9556-4885), <https://orcid.org/0000-0001-9556-4885>, anna.vl.osadchenko@gmail.com

Амброзевич Сергей Александрович — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, 119991, Российская Федерация, [sc 12789274600](https://orcid.org/0000-0002-3906-0735), <https://orcid.org/0000-0002-3906-0735>, s.ambrozevich@mail.ru

Захарчук Иван Александрович — младший научный сотрудник, Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, 119991, Российская Федерация, [sc 57672815700](https://orcid.org/0000-0002-1502-6460), <https://orcid.org/0000-0002-1502-6460>, zakharchukia@yandex.ru

Вашченко Андрей Александрович — кандидат физико-математических наук, заведующий отделом, Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, 119991, Российская Федерация, [sc 35800121600](https://orcid.org/0000-0003-2084-5900), <https://orcid.org/0000-0003-2084-5900>, vashchenkoa@lebedev.ru

Authors

Anna V. Osadchenko — Junior Researcher, Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, 119991, Russian Federation, [sc 57439684100](https://orcid.org/0000-0001-9556-4885), <https://orcid.org/0000-0001-9556-4885>, anna.vl.osadchenko@gmail.com

Sergey A. Ambrozevich — PhD (Physics & Mathematics), Senior Researcher, Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, 119991, Russian Federation, [sc 12789274600](https://orcid.org/0000-0002-3906-0735), <https://orcid.org/0000-0002-3906-0735>, s.ambrozevich@mail.ru

Ivan A. Zakharchuk — Junior Researcher, Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, 119991, Russian Federation, [sc 57672815700](https://orcid.org/0000-0002-1502-6460), <https://orcid.org/0000-0002-1502-6460>, zakharchukia@yandex.ru

Andrey A. Vashchenko — PhD (Physics & Mathematics), Head of Department, Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, 119991, Russian Federation, [sc 35800121600](https://orcid.org/0000-0003-2084-5900), <https://orcid.org/0000-0003-2084-5900>, vashchenkoa@lebedev.ru

Дайбаге Даниил Саюзович — младший научный сотрудник, Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, 119991, Российская Федерация, [sc 57673090900](https://orcid.org/0000-0003-1944-1546), <https://orcid.org/0000-0003-1944-1546>, daibagya@mail.ru

Рыжов Александр Вячеславович — заместитель директора по разработке новых продуктов, ООО «Химтех», Москва, 129626, Российская Федерация, [sc 57258474900](https://orcid.org/0009-0001-4244-8968), <https://orcid.org/0009-0001-4244-8968>, rigov@mail.ru

Певцов Дмитрий Николаевич — химик-технолог, ООО «Химтех», Москва, 129626, Российская Федерация; инженер-технолог, Московский физико-технический институт, Долгопрудный, 141701, Российская Федерация; младший научный сотрудник, Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, 142432, Российская Федерация, [sc 57258474900](https://orcid.org/0000-0002-3191-5591), <https://orcid.org/0000-0002-3191-5591>, pevtsov.dn@mipt.ru

Певцов Николай Валерьевич — директор по разработке новых продуктов, ООО «Химтех», Москва, 129626, Российская Федерация, [sc 55787344500](https://orcid.org/0009-0004-8286-8782), <https://orcid.org/0009-0004-8286-8782>, 3372@bk.ru

Селюков Александр Сергеевич — кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник, Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, 119991, Российская Федерация; [sc 55787344500](https://orcid.org/0000-0002-4007-6291), <https://orcid.org/0000-0002-4007-6291>, selyukov@lebedev.ru

Daniil S. Daibagya — Junior Researcher, Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, 119991, Russian Federation, [sc 57673090900](https://orcid.org/0000-0003-1944-1546), <https://orcid.org/0000-0003-1944-1546>, daibagya@mail.ru

Alexandr V. Ryzhov — Deputy Director for New Product Development, Limited Liability Company “Khimtekhn”, Moscow, 129626, Russian Federation, [sc 57258474900](https://orcid.org/0009-0001-4244-8968), <https://orcid.org/0009-0001-4244-8968>, rigov@mail.ru

Dmitry N. Pevtsov — Chemical Technologist, Limited Liability Company “Khimtekhn”, Moscow, 129626, Russian Federation; Process Engineer, Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, 141701, Russian Federation; Junior Researcher, Federal Research Center of Problems of Chemical Physics and Medicinal Chemistry RAS, Chernogolovka, 142432, Russian Federation, [sc 57258474900](https://orcid.org/0000-0002-3191-5591), <https://orcid.org/0000-0002-3191-5591>, pevtsov.dn@mipt.ru

Nikolai V. Pevtsov — Director for New Product Development, Limited Liability Company “Khimtekhn”, Moscow, 129626, Russian Federation, [sc 55787344500](https://orcid.org/0009-0004-8286-8782), <https://orcid.org/0009-0004-8286-8782>, 3372@bk.ru

Alexandr S. Selyukov — PhD (Physics & Mathematics), Junior Researcher, Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, 119991, Russian Federation, [sc 55787344500](https://orcid.org/0000-0002-4007-6291), <https://orcid.org/0000-0002-4007-6291>, selyukov@lebedev.ru

Статья поступила в редакцию 04.06.2024
Одобрена после рецензирования 19.06.2024
Принята к печати 24.07.2024

Received 04.06.2024
Approved after reviewing 19.06.2024
Accepted 24.07.2024



Работа доступна по лицензии
Creative Commons
«Attribution-NonCommercial»

КОМПЬЮТЕРНЫЕ СИСТЕМЫ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ COMPUTER SCIENCE

doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-578-587

УДК 004.932

Метод формирования мультимедийных файлов для задач лицевой биометрии и ее приложений

Назым Магидулловна Казиева¹✉, Георгий Александрович Кухарев²,
Калыбек Сапарулы Мауленов³

¹ Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, 10000, Республика Казахстан

² Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, 197376, Российская Федерация

³ Костанайский региональный университет имени А. Байтурсынова, Костанай, 110000, Республика Казахстан

¹ kaznaz@list.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-7559-1795>

² gakukharev@etu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2188-2172>

³ k_maulenov@inbox.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4147-3843>

Аннотация

Введение. Рассмотрены способы построения компактных мультимедийных файлов на основе цветного изображения лица, биометрических данных и документальной информации о человеке, которому принадлежит это лицо. **Метод.** Сущность предлагаемого метода состоит в генерации цветного QR-кода на основе лицевых характеристик и встраивании цветного QR-кода в изображение лица. Формирование цветного QR-кода выполнено путем замены трех слоев Least Significant Bit исходного изображения. **Основные результаты.** Представлены математические описания, псевдокоды и графические иллюстрации для понимания идеи метода, предлагаемых решений и алгоритма, реализующего метод встраивания цветного QR-кода в изображение лица. **Обсуждение.** Разработанный новый метод встраивания цветных QR-кодов в изображения лиц реализован программно и положен в основу формирования мультимедийных файлов. Метод может быть рекомендован для задач лицевой биометрии и ее приложений.

Ключевые слова

цветные изображения лиц, цветной QR-код, встраивание цветных QR-кодов, биометрический мультимедийный файл, цветные Least Significant Bit (LSB) слои, контейнер

Благодарности

Исследование финансируется Комитетом по науке Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № 19678000 «Разработка методов и алгоритмов безопасного использования QR-кодов для задач биометрии и ее приложений в том числе технологии блокчейн»).

Ссылка для цитирования: Казиева Н.М., Кухарев Г.А., Мауленов К.С. Метод формирования мультимедийных файлов для задач лицевой биометрии и ее приложений // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2024. Т. 24, № 4. С. 578–587. doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-578-587

Method for generating multimedia files for the tasks of facial biometrics and its applications

Nazym M. Kaziyeva¹✉, Georgy A. Kukharev², Kalybek S. Maulenov³

¹ L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, 10000, Republic of Kazakhstan

² St. Petersburg Electrotechnical University “LETI”, Saint Petersburg, 197376, Russian Federation

³ A. Baitursynov Kostanay State University, Kostanay, 110000, Republic of Kazakhstan

¹ kaznaz@list.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-7559-1795>

² gakukharev@etu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2188-2172>

³ k_maulenov@inbox.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4147-3843>

© Казиева Н.М., Кухарев Г.А., Мауленов К.С., 2024

Abstract

The methods of constructing compact multimedia files based on a color image of a face, biometric data and documentary information about the person to whom this face belongs are considered. The essence of the proposed method consists in generating a color QR code based on facial characteristics and embedding the code into the face image. The formation of a color QR code is performed by replacing three slices of the Least Significant Bit of the original image. Mathematical descriptions, pseudocodes and graphic illustrations are presented to understand the idea of the method, the proposed solutions, and the algorithm implementing the method of embedding a color QR code in a face image. The developed new method of embedding color QR codes in face images is implemented programmatically and is the basis for the formation of multimedia files. The method can be recommended for the tasks of facial biometrics and its applications.

Keywords

color images of faces, color QR code, embedding of color QR codes, biometric multimedia file, color Least Significant Bit (LSB)-layers, container

Acknowledgements

This research has been/was/is funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. AP19678000 Development of methods and algorithms for the safe use of QR codes for biometrics tasks and their applications, including blockchain technology).

For citation: Kaziyeva N.M., Kukharev G.A., Maulenov K.S. Method for generating multimedia files for the tasks of facial biometrics and its applications. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 4, pp. 578–587 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-578-587

Введение

Как известно, конфиденциальность информации — ключевой элемент в сохранении целостности и защиты от утечки сведений, которые не предназначены для общего использования. В первую очередь это касается личных данных людей, государственных, военных и коммерческих тайн. Один из методов сохранения конфиденциальности информации — цифровая стеганография, предоставляющая возможность скрытого хранения информации. Существует множество методов сокрытия данных в цифровых изображениях, в том числе и метод замены отдельных битов в Least Significant Bit (LSB)-слоях. Эти изменения не заметны для человеческого глаза в текстуре изображений, поскольку яркость пикселей изменяется всего на 1/255 часть. При этом заменяемые биты (0 на 1 или 1 на 0) не сосредоточены вместе, а распределены на всем поле в LSB-слоях, что часто связано с используемым процессом криптографии всей информации. Наконец, практическая цифровая стеганография слишком сложна в реализации ее криптографической части (например, в методах, описанных в работах [1–3]) и, поэтому, не всегда целесообразна для широкого и индивидуального применения. Особенно, если сохранение и передачу конфиденциальной информации необходимо выполнять в рамках требуемых стандартов, а алгоритмы записи и чтения передаваемой информации должны быть как можно более простыми и технически широкодоступными.

В отличие от стеганографии, в настоящей работе представлены способы, основанные на замене содержимого LSB-слоев бинарными QR-кодами, хранящими информацию. Впервые в научно-технических публикациях эти подходы, их реализация и применение в лицевой биометрии были раскрыты в работах [4–6], а исходными мотивами для них послужили работы [7, 8].

Цель настоящей работы состоит в представлении нового (быстрого) алгоритма, реализующего метод встраивания цветного QR-кода в цветное изображение лица (ИЛ).

В качестве примера рассмотрена задача формирования мультимедийного файла¹ на основе цветного ИЛ со встроенным в него цветным QR-кодом, содержащим биометрические данные о ИЛ и документальную информацию о человеке, которому принадлежит это лицо. Заметим, что подобный алгоритм встраивания цветных QR-кодов может быть применен для любых других цветных изображений, как и вложенная в QR-коды информация также может быть другой. Отметим, что использование встроенного в ИЛ цветного QR-кода как хранителя лицевой информации обеспечит защиту этой информации через ограничение открытого доступа к ней, сохраняя при этом условия для обмена информацией по стандартам^{2,3} и каналам связи без потери ее части и/или подмены. Эти достоинства, например, очень важны при создании и использовании биометрических баз, а также при обмене лицевыми биометрическими данными, как конфиденциальной информацией. Еще одно достоинство — встроенные в цветное изображение QR-коды не обнаруживают факта своего существования в изображении, а вложенная в QR-коды информация может быть прочитана и расшифрована только в соответствии с правилом подготовки и методом записи исходных сообщений в American Standard Code for Information Interchange (ASCII) при генерации QR-кодов.

В соответствии с технологией стеганографии предполагается использование пустого контейнера для незаметного сокрытия в нем секретной информации. После размещения информации в контейнере он становится заполненным контейнером. В предложенном методе пу-

¹ multimedia-qr-code: an easy way to share files [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://www.qrcode-tiger.com/ru/multimedia-qr-code> (дата обращения: 27.06.2024).

² ISO/IEC 18004:2015. Information technology — Automatic identification and data capture techniques — QR Code bar code symbology specification (IDT). 2015. P. 113.

³ ISO/IEC 19794-5:2011/ Information technology. Biometrics. Biometric data interchange formats. Part 5. Face image data. (IDT). 2015. P. 179.

стым контейнером служит исходное (входное) цветное ИЛ. Заполненным контейнер становится со встроенным в ИЛ QR-кодом, в который вложена биометрическая и документальная информация. В файловой форме заполненный контейнер в работах [4–6] назывался цветным BIO QR-код.

Однако, если принять во внимание современные способы применения QR-кодов¹, то цветной BIO QR-код попадает в класс мультимедийного файла — биометрический мультимедийный файл.

Общая схема встраивания биометрической информации в цветные изображения лиц

В работе рассмотрен метод, связанный с лицевой биометрией и ее приложениями, в связи с этим использованы ИЛ (портреты), которые соответствуют стандарту ISO². Такие фотопортреты имеют следующие геометрические характеристики: размер изображения не ниже 320×240 пикселей; область лица должна находиться в вертикальной оси изображения и занимать не менее 80 % его площади; расстояние между центрами глаз должно составлять не менее 60 пикселей (это минимально допустимое значение для ширины изображения равной 240 пикселей). В экспериментах

использованы цветные ИЛ из тестовой базы CUHK Face Sketch Database (CUFS)³. Исходный размер изображений в базе CUFS составляет 250×200 пикселей.

Общая схема (рис. 1) встраивания биометрической информации включает несколько этапов. На этапе 1 выполняется получение на входе А цветного входного ИЛ и его корректировка по размеру и размещению на поле изображения (определяются антропометрические точки (АПТ)) и происходит вычисление биометрических характеристик антропометрических точек и фенотипа ИЛ (определяется фенотип). На этапе 2 осуществляется получение на входе В документальной информации о человеке, которому принадлежит лицо. На этапе 3 происходит формирование соответствующих буквенно-цифровых сообщений по всем данным и генерация трех QR-кодов (ANTRO, PHENO и INFO), каждый из которых представляет уникальные характеристики конкретного человека. На этапе 4 выполняется формирование цветного QR-кода, на базе пустого трехкомпонентного изображения путем размещения в нем трех QR-кодов (ANTRO, INFO и PHENO), на месте компонент RED, GREEN и BLUE. На этапе 5 цветной QR-код встраивается в цветное ИЛ. И, таким образом, входное цветное ИЛ, которое было пустым контейнером, становится заполненным контейнером со встроен-

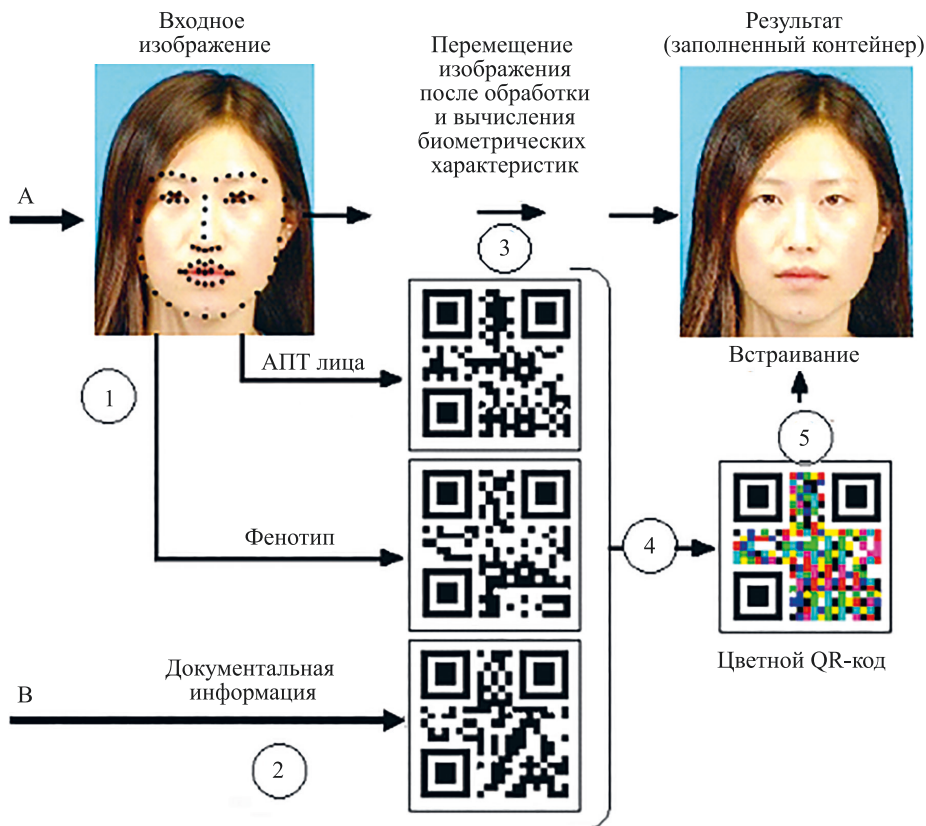


Рис. 1. Схема встраивания биометрической информации в цветные изображения лиц

Fig. 1. A scheme for embedding biometric information in color images of faces

¹ multimedia-qr-code: an easy way to share files [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://www.qrcode-tiger.com/ru/multimedia-qr-code> (дата обращения: 27.06.2024).

² ISO/IEC 19794-5:2011/ Information technology. Biometrics. P. 70.

³ CUHK Face Sketch Database (CUFS) Available at: <http://mmlab.ie.cuhk.edu.hk/archive/facesketch.html> (accessed: 03.02.2024).

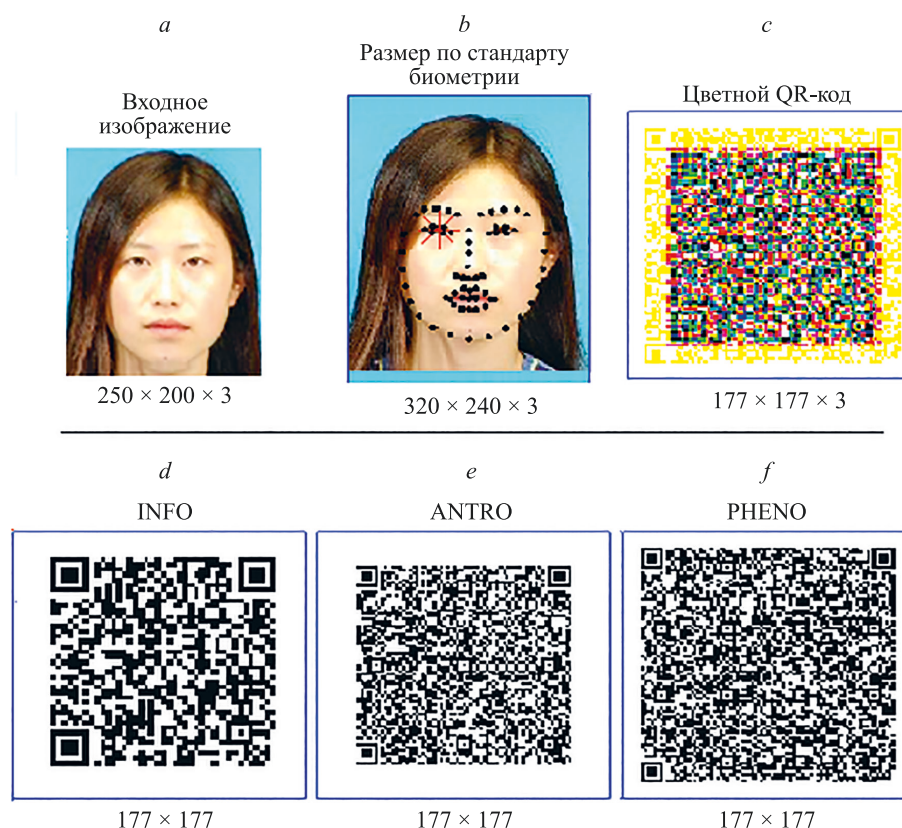


Рис. 2. Результаты, полученные на этапах 1–3 (рис. 1): входное (a) и откорректированное по размеру и положению (b) изображения лиц и четыре сформированных QR-кода (c–f)

Fig. 2. The results obtained in stages 1–3 (Fig. 1): input (a) and adjusted for size and position (b) images of faces and four generated QR codes (c–f)

ным в него цветным QR-кодом, содержащим лицевую биометрическую и документальную информации.

Результаты, полученные на этапах 1–3 показаны на рис. 2, где представлены два цветных ИЛ (входное (рис. 2, a) и откорректированное по требованиям стандарта биометрии (рис. 2, b)). Звездочка в центре правого глаза обозначает проверку правильности размещения области лица на поле откорректированного изображения. На рис. 2, c показан цветной QR-код — хранитель всей лицевой (биометрической и документальной) информации. Полученный цветной QR-код соответствует классификации мультимедийного файла и может быть использован самостоятельно с целью хранения и передачи биометрической и документальной информации. На рис. 2, d–f, показаны три бинарных QR-кода (INFO, ANTRO и PHENO), представляющие уникальные характеристики конкретного человека. Размер этих QR-кодов 177×177 пикселей (40 версия). Представленный метод реализован программно на языках программирования MATLAB и Python, а также защищен патентом [9].

Описание алгоритма

Рассмотрим работу предложенного алгоритма.

Шаг 1. Система принимает на входе А ИЛ FaceColor, которое может быть получено от камеры стойки регистрации на пункте пропуска или в виде

2D-изображения, поступающего с биометрической базы ИЛ.

Шаг 2. Предназначен для предобработки ИЛ. Здесь, основываясь на требованиях стандартов по биометрии¹, выполняются коррекции размера изображения до значений 320×240 пикселей и положения области лица на поле стандартного размера. Этот шаг обеспечивает представление ИЛ и его лицевых биометрических характеристик в границах принятого стандарта, что важно для последующего использования в создании биометрических баз данных или при обмене данными по запросу.

Шаг 3. Определяются 68 ключевых точек лица по алгоритму [10], программный код которого находится в открытом доступе библиотеки OPEN CV. Но на сегодняшний день доступны более современные инструменты, например, Mediapipe с моделью BlazeFace [11], позволяющий определить на лицах почти 400 ключевых точек, а также их высоты рельефа лица.

Шаг 4. Формируются два набора лицевых данных — координаты 68 ключевых (антропометрических) точек лица и яркостные признаки лица в этих координатах.

Шаг 5. Выполняется перевод значений биометрических данных в сообщения (строковый тип данных),

¹ ISO/IEC 19794-5:2011/ Information technology. Biometrics. Biometric data interchange formats. Part 5. Face image data. (IDT). 2015. P. 179.

которые аранжируются дополнительной информацией и граничными знаками, поддерживающими форму, принятую для сообщений, предназначенных для QR-кодов¹.

Шаг 6. Происходит кодирование сформированных на шаге 5 сообщений в символы ASCII. При этом выбор способов кодирования будет определять объем конечных символов, представленных в QR-коде². Приведем практический пример кодирования цифровых значений координат ключевых точек:

```
message = [date, 'FAP' char(NAME), char(pts(:)')],
```

где FAP (Facial Anthropometric Point) — дополнительная информация, определяющая название; pts — матрица (размером 2×68 пикселей) координат ключевых точек; char(pts) — процедура кодирования набора цифр в символы ASCII.

Рассмотрим фрагмент кода сообщения, который имеет следующий вид:

— сформированное сообщение для QR-кода ANTRO:

```
message_IN = [date, 'Facial Anthropometric Point',  
              char (NAME), char(pts_Ph(:)')];
```

— представление времени и названия данных:

```
[date, 'Facial Anthropometric Point']--->30-May-2024/  
Facial Anthropometric Point;
```

— текущее имя ИЛ:

```
char (NAME) -----> /Photo: 001/#.
```

В результате кодирования найдено 68 координат X и Y антропометрических точек (табл. 1), которые перед записью в QR-код переведены в символы ASCII. Это позволяет сократить объем данных и их смысловое значение.

Приведем примеры перевода значений координат ключевых точек в символы ASCII:

```
char (pts_Ph (:)') ---->  
978:>G;Tdv@>»iÄÄMwbl$±wwwkqw~nu^e]Tiqx~  
wphdqx~~xq°ÄÖççēGgGēçüéÖÄ°«ÄÖÜßßÜ-  
--ôîèîëüÿÄÄÿüôóóôôô.
```

При этом процедура кодирования сообщения является стандартной и зависит от используемого языка программирования, что и отличает ее от стеганографии.

Шаг 7. Из полученных данных формируются два QR-кода: ANTRO и PHENO.

Формирование кода INFO с документальной информацией представляет собой более простой алгоритм по сравнению с предыдущим, не требующий этапов 1–5 (рис. 2). Здесь достаточно иметь только документаль-

Таблица 1. Координаты антропометрических точек

Table 1. Coordinates of anthropometric points

Количество точек	Координаты, пиксели	
	X	Y
1	57	176
2	55	195
...	...	...
68	120	244

ную информацию о лице. Эта информация может включать в себя ФИО, год рождения, гражданство, номер паспорта, дату и другие сведения. Возможно также включение краткой биографии. Объем документальной информации может содержать до 4296 буквенно-цифровых знаков.

Далее необходимо преобразовать все сгенерированные бинарные QR-коды в байтовый формат, например, путем записи их в память в формате «.png» и чтения из памяти.

После завершения алгоритма сбора и обработки данных и формирования QR-кодов, выполним создание цветного QR-кода на основе сгенерированных бинарных QR-кодов: ANTRO, INFO и PHENO.

Представим данный процесс математически:

— сформируем трехкомпонентную нулевую матрицу **QRcolor** по размеру QR-кодов:

$$\mathbf{QRcolor} = \text{zeros} (Mqr, Mqr, 3),$$

где Mqr — число строк и столбцов нулевой матрицы;

— заместим три компонента пустой матрицы **QRcolor** тремя QR-кодами $\mathbf{QR}_{ANTRO}$, $\mathbf{QR}_{INFO}$ и $\mathbf{QR}_{PHENO}$ так, что:

$$\begin{cases} \mathbf{QRcolor}(:, :, 1) = \mathbf{QR}_{ANTRO}; \\ \mathbf{QRcolor}(:, :, 2) = \mathbf{QR}_{INFO}; \\ \mathbf{QRcolor}(:, :, 3) = \mathbf{QR}_{PHENO}. \end{cases}$$

При графическом отображении матрицы **QRcolor** получим цветное изображение или цветной QR-код, содержащий три QR-кода с вложенной в них биометрической и документальной информацией. Пример цветного QR-кода показан на рис. 2, с.

Встраивание биометрической и документальной информации в цветные изображения лиц

Встраивание биометрической и документальной информации в цветное ИЛ (контейнер) выполним на этапе 5 (рис. 1). Здесь соединяются два изображения: откорректированное по размеру цветное ИЛ (FaceColor) и цветной QR-код, предварительно сформированный на этапе 4. В это же время происходит встраивание цветного QR-кода в цветное ИЛ. Операция встраивания реализуется одновременным замещением трех слоев LSB в компонентах RED, GREEN и BLUE ИЛ одноименными компонентами цветного QR-кода.

Пусть матрица **FaceColor** размером $M \times N \times 3$ представляет откорректированное по размеру цветное ИЛ, а

¹ ISO/IEC 18004:2015. Information technology — Automatic identification and data capture techniques — QR Code bar code symbology specification (IDT). 2015. P. 113.

² ISO/IEC 18004:2015. Information technology — Automatic identification and data capture techniques — QR Code bar code symbology specification (IDT). 2015. P. 80.

матрица **QRcolor** размером $Mqr \times Mqr \times 3$ представляет цветной QR-код.

Тогда математически способ встраивания можно представить следующим образом.

1. Выполним операцию по модулю 2 для матрицы **FaceColor** и получим матрицу **LSBcolor** размером $M \times N \times 3$, представляющую три слоя LSB (RED, GREEN и BLUE) цветного ИЛ.
2. Получим на алгоритмическом языке Python вид матрицы:

$$\mathbf{LSBcolor} = (\mathbf{FaceColor}) \text{ MOD } 2.$$

Сформируем трехкомпонентную нулевую матрицу **NewLSBcolor**, имитирующую основу нового цветного слоя LSB:

$$\mathbf{NewLSBcolor} = \text{zeros}(M, N, 3).$$

3. Заместим цветным QR-кодом выделенное место в **NewLSBcolor**:

$$\mathbf{NewLSBcolor}(1:Mqr, 1:Mqr, :) = \mathbf{QRcolor}.$$

4. Вычтем из матрицы **FaceColor** размером $M \times N \times 3$ матрицу **LSBcolor** и полученный при этом результат

суммируем с матрицей **NewLSBcolor**, а окончательный результат сохраним в матрице **FACE_{FULL}**, которая представляет заполненное изображение-контейнер, поступающее на выход (рис. 1):

$$\mathbf{FACE}_{\text{FULL}} = (\mathbf{FACEcolor} - \mathbf{LSBcolor}) + \mathbf{NewLSBcolor}.$$

Таким образом, изображение **FACE_{FULL}** содержит теперь три встроенных в него QR-кода (в компонентах RED, GREEN и BLUE) в соответствии с тем порядком, по которому формировался цветной QR-код.

Полный вид цветных слоев для пустого контейнера представлен на рис. 3, *a*. На рис. 3, *b* показан новый цветной слой LSB для заполненного контейнера, на котором отчетливо виден встроенный цветной QR-код. В таблице (рис. 3, *c*) изображены цветные битовые слои ИЛ, а в таблице (рис. 3, *d*) — весовые значения этих битовых слоев. На рис. 3, *e* показана разница в слоях между пустым и заполненным контейнерами.

Если выделить битовые слои каждой из компонент RED, GREEN и BLUE в отдельности, то графическая картина будет содержать все 24 бинарных слоя, которые показаны на рис. 4.

На завершающем этапе процедуры встраивания QR-кодов в цветное ИЛ сформируем компактное пред-

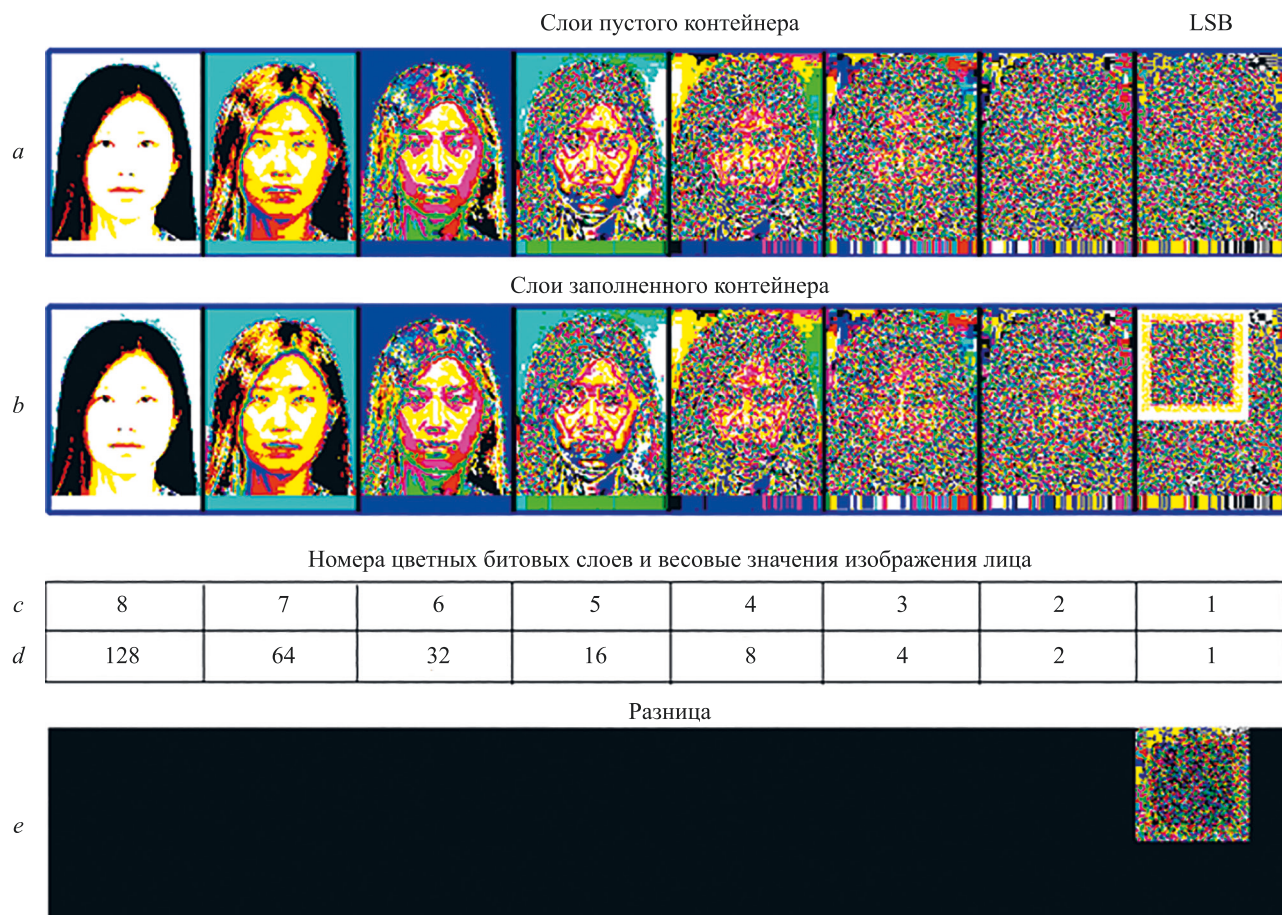


Рис. 3. Восемь цветных битовых слоев изображения лица для пустого (*a*) и заполненного (*b*) контейнеров. Номера цветных битовых слоев (*c*) и их весовые значения (*d*). Разница в слоях между пустым и заполненным контейнерами (*e*)

Fig. 3. Eight color bit slices of the face image for empty (*a*) and filled (*b*) containers. The numbers of the colored bit slices (*c*) and their weight values (*d*). The difference in slices between empty and filled containers (*e*)



Рис. 4. 24 битовых слоев цветного изображения заполненного контейнера

Fig. 4. 24 bit slices of a color image of a filled container

ставление полной лицевой информации — графической, биометрической и документальной. При этом цветное ИЛ (контейнер) сохраняет во встроенном в него цветном QR-коде основную биометрическую информацию с необходимыми документальными данными, обеспечивая универсальность представления и повышенную степень защиты всей информации. Также отметим, что цветной QR-код может быть использован самостоятельно для передачи содержащейся в нем информации. Цветные QR-коды могут иметь структуру [12, 13], в состав которой входят полные ИЛ и документальная информация. Такие QR-коды можно использовать, когда возникает необходимость сохранения графических и документальных данных о людях в течение длительных периодов их жизни. Заметим, что в одно изображение-контейнер можно встроить до трех цветных QR-кодов, что в сумме составит 9 бинарных QR-кодов и при этом практически текстура области лица не изменится. Это можно оценить по результату встраивания трех цветных QR-кодов, показанному на рис. 5, общее число встроенных бинарных QR-кодов будет 9. Заметим, что и в этом случае текстура заполненного контейнера практически остается такой же, как у пустого.

Возможны разные способы применения рассмотренного метода. Основное его достоинство — обычно в биометрических базах ИЛ, биометрические и документальные данные хранятся в разных каталогах, что с течением времени приводит к их потере и/или затруднениям в хранении и поиске.

В табл. 2 представлен псевдокод алгоритма доступа к трем цветным битовым слоям цветного изображения. Алгоритм основан на использовании матричной процедуры по модулю 2, процедуры вычитания выделенных цветных битовых слоев и учета значений весовых множителей в слоях.

Выделяемые слои могут быть прочитаны и изменены путем их замещения другими данными. Представленный алгоритм был использован в задаче встраивания трех цветных QR-кодов, показанных на рис. 5.

Сравнения текстур контейнеров

В разделе «Встраивание биометрической и документальной информации в цветные изображения лиц» было показано, что отличие между пустым и заполненным контейнерами видно только в слоях, содержащих

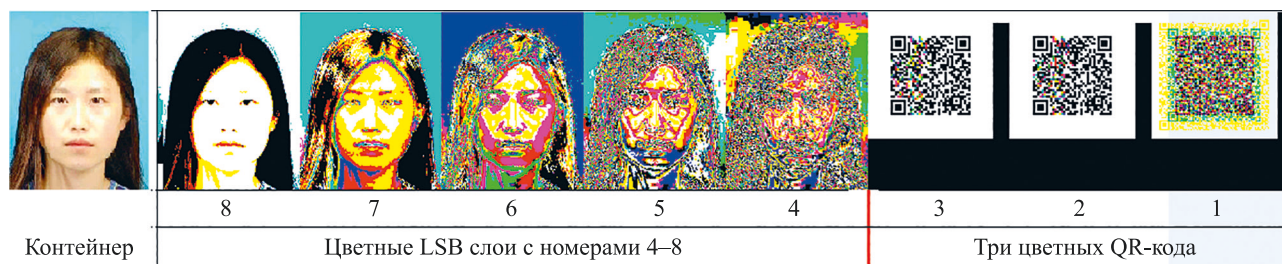


Рис. 5. Входное изображение лица со встроенными в него тремя цветными QR-кодами

Fig. 5. The original image of the face with three color QR codes embedded in it

Таблица 2. Алгоритм доступа к цветным слоям цветного изображения

Table 2. Algorithm for accessing a color slice of a color image

Вход	Цветное изображение	Матрица $\mathbf{I}$ размером $M \times N \times 3$
Выход	Матрица битовых слоев	Матрица $\mathbf{B}$ размером $M \times 3N \times 3$
1	Формируем нулевую матрицу $\mathbf{B} = [\]$ и задаем число циклов $T = 3$;	
2	Начало цикла: задаем начальное значение параметра цикла: $s = 1$;	
3	Выделяем слои LSB из матрицы $\mathbf{I}$, так, что $\mathbf{LSB}(s) = \text{mod}(\mathbf{I}, 2)$, где $\mathbf{LSB}(s)$ — трехслойная матрица размером $M \times N \times 3$;	
4	Сохраняем матрицу $\mathbf{LSB}(s)$ в матрице $\mathbf{B}$ так, что $\mathbf{B} = [\mathbf{LSB}(s) \ \mathbf{A}]$;	
5	Вычитаем из матрицы $\mathbf{I}$ матрицу $\mathbf{LSB}(s)$ так, что $\mathbf{I} = \mathbf{I} - \mathbf{LSB}(s)$;	
6	Увеличиваем параметр s на единицу так, что $s = s + 1$;	
7	Конец цикла: если $s \leq T$, уменьшаем вдвое уровневые значения матрицы $\mathbf{I}$ так, что $\mathbf{I} = \mathbf{I}/2$ и переходим к пункту 3, иначе к пункту 8;	
8	Результаты Матрица битовых слоев: $\mathbf{B} = [\mathbf{LSB}(3) \ \mathbf{LSB}(2) \ \mathbf{LSB}(1)]$; Остаток матрицы $\mathbf{I} = \mathbf{I} - [4 \times \mathbf{LSB}(3) \ 2 \times \mathbf{LSB}(2) \ \mathbf{LSB}(1)]$.	

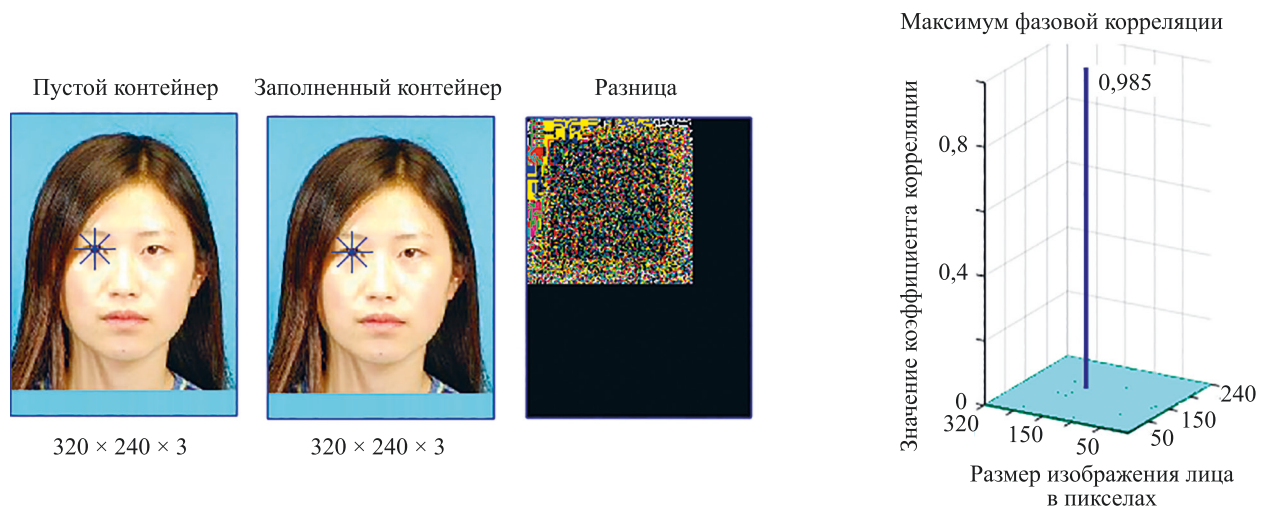


Рис. 6. Сравнение текстур изображений лиц пустого и заполненного контейнера

Fig. 6. Comparison of textures of images of faces of an empty and filled container

QR-коды. Теперь продемонстрируем, что текстура ИЛ со встроенными в него QR-кодами, также не отличается от текстуры входного изображения. На рис. 6 показаны ИЛ пустого и заполненного контейнеров из рассмотренных в работе примеров. Знаком «звездочка» в центре правого глаза показано, что эти ИЛ отвечают требованиям ISO по лицевой биометрии. На рис. 6 видна абсолютная разность между двумя цветными изображениями, как графическими объектами или числовыми матрицами. Очевидно, что отличие связано только с различием текстуры обоих изображений в области LSB (рис. 3).

Для сравнения представлен графический результат фазовой корреляции между ИЛ для пустого и заполненного контейнеров. Коэффициент корреляции составил значение 0,985. Это означает, что встроенный цветной QR-код не повлиял на изменение внешнего вида изображения. Отметим, что фазовая корреляция очень чувствительна даже к самым незначительным (почти

невидимым) изменениям текстуры изображений и, поэтому часто используется для сравнения изображений по текстуре [14].

Заключение

Представлен новый быстрый метод формирования биометрического мультимедийного файла, состоящего из цветного изображения лица со встроенным в него цветным QR-кодом. При этом цветной QR-код содержит биометрические данные о лице, а также документальную информацию о человеке, которому принадлежит это лицо. Встраивание реализуется путем одновременного замещения трех слоев LSB в компонентах RED, GREEN и BLUE цветного изображения лица цветным QR-кодом, что обеспечивает удобство и простоту реализации встраивания. Показано, что встроенный QR-код не обнаруживает факта своего существования в мультимедийном файле, что будет

интересным для задач, связанных с хранением и передачей конфиденциальной информации. В работе представлены оригинальные графические иллюстрации с соответствующими описаниями и разъяснениями, что упрощает понимание метода, предлагаемых решений и алгоритма, реализующего метод. Кроме того, предлагаемые решения обладают целым рядом качественных характеристик, представленных и подробно рассмотренных в работе. Так, улучшение графических данных изображений лиц достигается возможностью корректировки входного цветного изображения до размеров и требований стандартов по биометрии. А решения по лицевой биометрии обладают повышенной уни-

версальностью и высокой репрезентативностью, что достигается совместным их представлением на общей координатной сетке ключевых точек лица. В совокупности, все отмеченные факторы позволят расширить рамки применения предложенного мультимедийного файла не только в биометрии, но и в цифровой антропометрии, криминалистике, медицинских информационных системах и других приложениях. Так, например, алгоритм формирования биометрических мультимедийных файлов может быть использован в системах автоматической регистрации людей на линии пограничных переходов (e-border), создания биометрических баз и регистрационных данных.

Литература

1. Gaikwad A.M., Singh K.R. Embedding QR code in color images using halftoning technique // *Proc. of the 2015 International Conference on Innovations in Information, Embedded and Communication Systems (ICIECS)*. 2015. <https://doi.org/10.1109/ICIECS.2015.7193016>
2. Mukherjee S., Singh A., Dutta P. An adaptive data hiding technique based on QR code // *Proc. of the 2019 International Conference on Recent Innovations in Electrical, Electronics & Communication Engineering (ICRIEECE)*. 2019. P. 1–5.
3. Ms. D Betteena Shery Fernando, Parthiban A., Rajesh R., Vinithra M. Steganography of messages encrypted with QR code // *IJSART*. 2021. V. 7. N 3. P. 116–122.
4. Kukharev G.A., Kaziyeva N., Tsymbal D.A. Barcoding technologies for the tasks of the facial biometrics: state of the art and new solutions // *Pattern Recognition and Image Analysis*. 2018. V. 28. N 3. P. 496–509. <https://doi.org/10.1134/s1054661818030124>
5. Kaziyeva N., Kukharev G., Matveev Y. Barcoding in biometrics and its developmen // *Lecture Notes in Computer Science*. 2018. V. 11114. P. 464–471. https://doi.org/10.1007/978-3-030-00692-1_40
6. Кухарев Г.А., Матвеев Ю.Н., Казиева Н. Способ встраивания биометрической информации в цветное изображение лица и устройство для осуществления способа. Патент RU2713762C1. Бюл. 2020. № 4.
7. Garateguy G.J., Arce G.R., Lau D.L., Villarreal O.P. QR images: optimized image embedding in QR codes // *IEEE Transactions on Image Processing*. 2014. V. 23. N 7. P. 2842–2853. <https://doi.org/10.1109/TIP.2014.2321501>
8. Arce G.R., Garateguy G., Wang S.X., Lau D.L. Method to store a secret QR code into a colored secure QR code. Patent US10152663B2. 2018.
9. Кухарев Г.А., Мауленов К.С., Щеголева Н.Л. Способ встраивания биометрической информации в цветное изображение лица и устройство для его осуществления. Патент RU2771789C1. Бюл. 2022. № 14.
10. Kazemi V., Sullivan J. One millisecond face alignment with an ensemble of regression trees // *Proc. of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*. 2014. P. 1867–1874. <https://doi.org/10.1109/CVPR.2014.241>
11. Lugesesi C., Tang J., Nash H., McClanahan Ch., Uboweja E., Hays M., Zhang F., Chang Ch.-L., Yong M.G., Lee J., Chang W.-T., Hua W., Georg M., Grundmann M. MediaPipe: A Framework for Building Perception Pipelines // *ArXiv*. 2019. arXiv:1906.08172. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1906.08172>
12. Кухарев Г.А., Казиева Н. Алгоритмы формирования цветных QR-кодов для задач биометрии // *Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики*. 2019. Т. 19. № 5. С. 955–958. <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2019-19-5-955-958>
13. Кухарев Г.А., Казиева Н., Щеголева Н.Л. Способ формирования цветного QR-кода по изображениям лиц и устройство для его осуществления. Патент RU2714741C1. Бюл. 2020. № 5.
14. Кухарев Г.А., Каменская Е.И., Матвеев Ю.Н., Щеголева Н.Л. Методы обработки и распознавания изображений лиц в задачах биометрии / под ред. М.В. Хитрова. СПб.: Политехника, 2013. 388 с.

References

1. Gaikwad A.M., Singh K.R. Embedding QR code in color images using halftoning technique. *Proc. of the 2015 International Conference on Innovations in Information, Embedded and Communication Systems (ICIECS)*, 2015. <https://doi.org/10.1109/ICIECS.2015.7193016>
2. Mukherjee S., Singh A., Dutta P. An adaptive data hiding technique based on QR code. *Proc. of the 2019 International Conference on Recent Innovations in Electrical, Electronics & Communication Engineering (ICRIEECE)*, 2019, pp. 1–5.
3. Ms. D Betteena Shery Fernando, Parthiban A., Rajesh R., Vinithra M. Steganography of messages encrypted with QR code. *IJSART*, 2021, vol. 7, no. 3, pp. 116–122.
4. Kukharev G.A., Kaziyeva N., Tsymbal D.A. Barcoding technologies for the tasks of the facial biometrics: state of the art and new solutions. *Pattern Recognition and Image Analysis*, 2018, vol. 28, no. 3, pp. 496–509. <https://doi.org/10.1134/s1054661818030124>
5. Kaziyeva N., Kukharev G., Matveev Y. Barcoding in biometrics and its developmen. *Lecture Notes in Computer Science*, 2018, vol. 11114, pp. 464–471. https://doi.org/10.1007/978-3-030-00692-1_40
6. Kukharev G.A., Matveev Yu.N., Kazieva N. Method of embedding biometric information into a color image of a face and a device for realizing the method. *Patent RU2713762C1*, 2020. (in Russian)
7. Garateguy G.J., Arce G.R., Lau D.L., Villarreal O.P. QR images: optimized image embedding in QR codes. *IEEE Transactions on Image Processing*, 2014, vol. 23, no. 7, pp. 2842–2853. <https://doi.org/10.1109/TIP.2014.2321501>
8. Arce G.R., Garateguy G., Wang S.X., Lau D.L. Method to store a secret QR code into a colored secure QR code. *Patent US10152663B2*, 2018.
9. Kukharev G.A., Maulenov K.S., Shchegoleva N.L. Method for embedding biometric information in a color image of a face and a device for its implementation. *Patent RU2771789C1*, 2022. (in Russian)
10. Kazemi V., Sullivan J. One millisecond face alignment with an ensemble of regression trees. *Proc. of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, 2014, pp. 1867–1874. <https://doi.org/10.1109/CVPR.2014.241>
11. Lugesesi C., Tang J., Nash H., McClanahan Ch., Uboweja E., Hays M., Zhang F., Chang Ch.-L., Yong M.G., Lee J., Chang W.-T., Hua W., Georg M., Grundmann M. MediaPipe: A Framework for Building Perception Pipelines. *ArXiv*, 2019, arXiv:1906.08172. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1906.08172>
12. Kukharev G.A., Kaziyeva N. Algorithms of color QR codes formation for biometry tasks. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2019, vol. 19, no. 5, pp. 955–958. (in Russian). <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2019-19-5-955-958>
13. Kukharev G.A., Kazieva N., Shchegoleva N.L. Method of forming color QR-code based on images of faces and device for its implementation. *Patent RU2714741C1*, 2020. (in Russian)
14. Kukharev G.A., Kamenskaia E.I., Matveev Yu.N., Shchegoleva N.L. *Methods for Processing and Recognizing Facial Images in Biometrics Problems*. Ed. by M.V. Khitrov. St. Petersburg, Politehnika Publ., 2013, 388 p. (in Russian)

Авторы

Казиева Назым Магидулловна — PhD, старший преподаватель, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, 10000, Республика Казахстан, [sc 57203633843](https://orcid.org/0000-0002-7559-1795), <https://orcid.org/0000-0002-7559-1795>, kaznaz@list.ru

Кухарев Георгий Александрович — доктор технических наук, профессор, профессор, Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, 197376, Российская Федерация, [sc 18037842200](https://orcid.org/0000-0003-2188-2172), <https://orcid.org/0000-0003-2188-2172>, gakukharev@etu.ru

Мауленов Калыбек Сапарулы — преподаватель, Костанайский региональный университет имени А. Байтурсынова, Костанай, 110000, Республика Казахстан, [sc 57239186500](https://orcid.org/0000-0003-4147-3843), <https://orcid.org/0000-0003-4147-3843>, k_maulenov@inbox.ru

Authors

Nazym M. Kazyeva — PhD, Senior Lecturer, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, 10000, Republic of Kazakhstan, [sc 57203633843](https://orcid.org/0000-0002-7559-1795), <https://orcid.org/0000-0002-7559-1795>, kaznaz@list.ru

Georgy A. Kukharev — D.Sc., Full Professor, St. Petersburg Electrotechnical University “LETI”, Saint Petersburg, 197376, Russian Federation, [sc 18037842200](https://orcid.org/0000-0003-2188-2172), <https://orcid.org/0000-0003-2188-2172>, gakukharev@etu.ru

Kalybek S. Maulenov — Lecturer, A. Baitursynov Kostanay State University, Kostanay, 110000, Republic of Kazakhstan, [sc 57239186500](https://orcid.org/0000-0003-4147-3843), <https://orcid.org/0000-0003-4147-3843>, k_maulenov@inbox.ru

Статья поступила в редакцию 20.05.2024
Одобрена после рецензирования 13.06.2024
Принята к печати 19.07.2024

Received 20.05.2024
Approved after reviewing 13.06.2024
Accepted 19.07.2024



Работа доступна по лицензии
Creative Commons
«Attribution-NonCommercial»

doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-588-593

Advanced methods for knowledge injection in large language models

Nikita I. Kulin¹✉, Sergey B. Muravyov²

^{1,2} ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

¹ kylin98@list.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-3952-6080>

² smuravyov@itmo.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4251-1744>

Abstract

Transformer-based language models have revolutionized Natural Language Processing tasks, with advancements in language modeling techniques. Current transformer architectures utilize attention mechanisms to model text dependencies effectively. Studies have shown that these models embed syntactic structures and knowledge, explaining their performance in tasks involving syntactic and semantic elements. However, transformer-based models are prone to hallucination where incorporated knowledge is not utilized effectively. To address this, methods are emerging to mitigate hallucination and integrate external knowledge sources like knowledge graphs (e.g., Freebase, WordNet, ConceptNet, ATOMIC). Knowledge graphs represent real-world knowledge through entities and relationships offering a potential injection point to enhance model performance in inference tasks. Various injection approaches, including input, architectural, and output injections, aim to incorporate knowledge from graphs into transformer models. Input injections modify data preprocessing, architectural injections add layers for knowledge integration, and output injections adjust error functions to correct knowledge incorporation during training. Despite ongoing research, a universal solution to hallucination remains elusive, and a standardized benchmark for comparing injection methods is lacking. This study investigates knowledge graphs as one of the methods to mitigate hallucination and their possible integration into Large Language Models. Comparative experiments across General Language Understanding Evaluation benchmark tasks demonstrated that ERNIE 3.0 and XLNet outperform other injection methods with the average scores of 91.1 % and 90.1 %.

Keywords

LLM, knowledge graphs, knowledge injection methods, hallucination problem, BERT

For citation: Kulin N.I., Muravyov S.B. Advanced methods for knowledge injection in large language models. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 4, pp. 588–593. doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-588-593

УДК 004.89

Продвинутые методы внедрения знаний в больших языковых моделях

Никита Игоревич Кулин¹✉, Сергей Борисович Муравьев²

^{1,2} Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

¹ kylin98@list.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-3952-6080>

² smuravyov@itmo.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4251-1744>

Аннотация

Трансформерные языковые модели революционизировали Natural Language Processing задачи благодаря достижениям в методах моделирования языка. Текущие архитектуры трансформеров используют механизмы внимания для эффективного моделирования текстовых зависимостей. Исследования показали, что эти модели встраивают синтаксические структуры и знания, объясняя их эффективность в задачах, связанных с синтаксическими и семантическими элементами. Однако трансформаторные модели склонны к галлюцинациям, когда встроенные знания не используются эффективно. Для решения этой проблемы появляются методы, направленные на снижение галлюцинаций и интеграцию внешних источников знаний, таких как графы знаний (например, Freebase, WordNet, ConceptNet, ATOMIC). Графы знаний представляют реальные знания через сущности и отношения, предлагая потенциальную точку внедрения для повышения производительности модели

© Kulin N.I., Muravyov S.B., 2024

в задачах вывода. Различные подходы к внедрениям, включая внедрения входных и выходных данных, а также архитектурные, направлены на включение знаний из графов в трансформерные модели. Внедрения входных данных модифицируют предварительную обработку данных, архитектурные добавляют слои для интеграции знаний, а внедрения выходных данных корректируют функции ошибок для правильного включения знаний во время обучения. Несмотря на продолжающиеся исследования, универсальное решение проблемы галлюцинаций и стандартизированный бенчмарк для сравнения методов внедрения знаний отсутствуют. В данном исследовании рассматриваются графы знаний как один из методов решения галлюцинаций и их возможная интеграция в большие языковые модели. Сравнительные эксперименты на бенчмарке General Language Understanding Evaluation показали, что ERNIE 3.0 и XLNet превосходят другие методы внедрения со средними оценками 91,1 % и 90,1 %.

Ключевые слова

LLM, графы знаний, методы внедрения знаний, проблема галлюцинаций, BERT

Ссылка для цитирования: Кулин Н.И., Муравьев С.Б. Продвинутое внедрение знаний в больших языковых моделях // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2024. Т. 24, № 4. С. 588–593 (на англ. яз.) doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-588-593

Introduction

Recently, the use of language models of transformer architecture [1] has greatly improved the quality of solving a huge range of Natural Language Processing (NLP) tasks. The key difference that has determined the success of transformers such as Bidirectional Encoder Representations from Transformers (BERT) [2] or XLNet [3] is the use of self-attention mechanisms. Self-attention helps to efficiently construct dependencies between words in the text, can be parallelized by computing attention for an individual token, and considers all tokens of the same text sequence under consideration, unlike previous RNN-based architectures.

Subsequently, it has been shown that transformational models have hallucination problems, which means generating text with false-semantic or false-factual assertions. One solution to this problem is to embed information from external sources into transformers. A promising approach is knowledge graph integration which is a data graph with nodes representing entities of interest and edges representing relationships between those entities. Among such knowledge graphs are ATOMIC, ConceptNet, or WordNet.

To date, there is no universal approach to implementing information through knowledge graphs. Among current solutions, three implementation options stand out: input injection, architectural injection, and output injection. Moreover, there are no unified benchmarks for comparing the effectiveness of knowledge injection approaches, and accordingly, no comparison of current frameworks has been made.

The objective of this study was to investigate potential methods with knowledge graph integration in order to advance the development of the subject area. This involved examining existing solutions, their technical attributes, and the underlying methods. Following this analysis, a comparative experiment was performed to assess the performance of the selected methods across various benchmark tasks.

Methods

This section discusses four types of knowledge injection with knowledge graphs: input, architecture,

output, and hybrid. Input injection involves converting knowledge graph assertions into words and structuring input data to include semantic information from triplets in the knowledge graph. Architecture injections focus on architectural changes. Output injections change the output structure (layer or loss function) used in the language model in some way to incorporate knowledge. Hybrid injections include a combination of knowledge injection methods.

Some methods have been discussed in this scientific study [4]. Over time, these approaches have been refined and new ones have emerged, which motivates the construction of an experiment to compare their effectiveness. To begin, we will briefly discuss these methods. As an input injection method we focus on Align, Mask and Select (AMS) one [5]. AMS is a simple approach for incorporating knowledge into language models. This method involves creating a dataset by aligning a knowledge graph with plain text to generate questions and possible answers. The dataset is then used to pre-train a neural language representation model, such as BERT, to enhance its knowledge. AMS includes the following three steps. The knowledge graph is aligned with plain text, such as sentences from English Wikipedia. This alignment involves matching concepts from the knowledge graph with corresponding concepts in the plain text. Then, one concept from the aligned text is masked with a special token. This masked concept is used to generate plausible answers by considering neighboring concepts in the knowledge graph with the same masked token and relationship.

As an architecture injection, we discuss two approaches: OM-ADAPT [6] and KnowBERT [7]. OM-ADAPT reflects the impact of fine-tuning a BERT version equipped with adapters [8] on ConceptNet to incorporate knowledge [4]. By training models on sentences from the Open Mind Common Sense [9] corpus and traversing the ConceptNet graph, the researchers enhanced the encoded “World Knowledge” by using simple adapters and a small number of update steps on training sentences [4].

KnowBERT, developed as an enhancement to BERT, incorporates Knowledge Attention and Recontextualization (KAR) layers that utilize graph entity embeddings generated through Tucker Tensor Decompositions for knowledge graph completion [4, 10]. The KAR layers process embeddings through an attention mechanism to

create entity span embeddings which are added to BERT existing contextual representations [4]. This approach injects knowledge in later layers to promote training stability, though it could potentially overlook important knowledge due to the unfreezing of the BERT model after training the entity linker.

As an output injection method, we focus on SemBERT [11]. It utilizes a subsystem that generates embedding representations of the output of a semantic role labeling system. This representation is then combined with the contextualized representation from BERT to integrate relational knowledge [4].

As hybrid injection methods, we focus on various approaches, such as LIBERT [12], BERT-MK [13], K-BERT [14], KG-BERT [15], K-Adapter [16], ERNIE 3.0 [17], and XLNet [18].

LIBERT [12] processes batches of lexical constraints including synonyms and hyponyms/hypernyms represented as word tuples and negative examples to fit the BERT format for applications in natural language processing. The formatted input is then processed through BERT, with the [CLS] token serving as input for a softmax classifier to determine lexical relation validity.

BERT-MK [13] includes KG-transformer modules that merge transformer layers with entity representations learned from separate transformer layers trained on a KG converted into natural language sentences [4]. Additional layers incorporate an attention mask to replicate KG connections and integrate graph structure into embeddings [4].

K-BERT [14] inserts relevant triples for entities in a sentence and a knowledge graph (KG) with soft-position embeddings for ordering [4]. A masked self-attention mechanism similar to BERT-MK focuses on incorporating essential knowledge.

KG-BERT [15] fine-tunes the BERT model using text from KG triples for KG triple completion, binary classification for predicting triple authenticity, and multi-class classification for relationship type prediction.

K-Adapter [16] incorporates projection layers before and after specific transformer layers within a pre-trained RoBERTa model [4]. K-adapter utilizes the following external knowledge: factual knowledge from Wikipedia triples and linguistic knowledge from Stanford outputs [4].

ERNIE 3.0 [17] is a large-scale knowledge-enhanced pre-training model for language understanding and generation, part of a unified framework combining auto-regressive network and auto-encoding for customization in natural language tasks.

XLNet [18] is combined with a Graph Convolutional Network (GCN) for the consolidation of graph knowledge and contextual information, not for origin knowledge injection [4]. The researchers have incorporated XLNet embeddings into GCN to handle answering questions [4]. They extract relevant subgraphs from ConceptNet and Wikipedia, which contain relations among entities in a question-answer setup taken from ConceptNet, along with the top 10 most pertinent sentences from Wikipedia data through ElasticSearch [4].

The methods considered utilize different types of injections, and they were evaluated on different benchmarks and metrics in their articles and have not been previously

compared with each other. In order to determine the most effective approach and most promised type of injection, we need to conduct our own experimentation.

Comparative evaluation of methods

We first briefly describe and discuss the experimental setup and comparison results.

Experimental Setup

In the current investigation, an uncased BERT-base model, composed of 12 transformer layers with 12 attention heads each, was employed to use knowledge injection techniques. The source knowledge graphs were procured for every knowledge injection method used.

These knowledge injection methodologies were evaluated using the tasks from the evaluation benchmark, commonly known as General Language Understanding Evaluation (GLUE) [19]. GLUE is a collection of datasets routinely used for training, evaluation, and comparative analysis of NLP models. The overarching goal is to propel progress in creating comprehensive and robust natural language understanding systems. The benchmark includes diverse and challenging task datasets that specifically assess a model competency in language comprehension. For our experiment, the following tasks were chosen: CoLA, SST-2, MRPC, STS-B, QQP, MNLI, QNLI and RTE.

Experimental results

Table provides a comparative performance analysis of various knowledge injection methods on the GLUE benchmark tasks. The experiment implemented a range of injection methods, both hybrid and non-hybrid: Input injection methods, such as AMS and COMET; Architectural injection methods like KnowBERT and OM-ADAPT; Output injection method namely SemBERT; Hybrid injection methods including LIBERT, BERT-MK, K-BERT, KG-BERT, K-Adapter, ERNIE 3.0, and XLNet. The foundational model adopted for the basis of comparison was the origin BERT-base.

In terms of performance, ERNIE 3.0 surpasses other methods by registering an average improvement of 12.05 %, thus showcasing the efficacy of combining input and output injections. ERNIE 3.0 excels in nearly all GLUE tasks, the only exception being QQP (Question Paraphrases), where KnowBERT outperforms ERNIE 3.0 by a margin of 21.14 %. XLNet emerges as the second-best performer, delivering promising results on average. Interestingly, methods employing non-hybrid injections (Align-Mask-Select, SemBERT, KnowBERT) are more effective than some that utilize hybrid injections, such as LIBERT and K-BERT. Methods producing lower average scores in relation to the origin BERT-base include OM-ADAPT, SemBERT, and KG-BERT.

Discussion

Experimental results delineate the efficacy of various knowledge injection methods in addressing the issue of hallucination. The results demonstrated that ERNIE 3.0 and XLNet, which are hybrid combination approaches, outperform others in the evaluation using GLUE

Table. Comparing Knowledge Injection Methods for GLUE tasks

Knowledge Injection Method	Knowledge Sources	Average Score	MNLI, m	MNLI, mm	QQP	QNLI	SST-2	CoLA	STS-B	MRPC	RTE
BERT-base	—	81.3	84.6	82.9	88.9	90.5	93.5	52.1	85.8	88.9	66.4
Align, Mask, Select	ConceptNet	82.1	84.7	83.9	72.1	91.2	93.6	54.3	86.4	85.9	69.5
KnowBERT	Wikipedia, WordNet	83.8	85.7	84.3	90.3	91.5	93.6	54.6	89.1	88.2	73.8
OM-ADAPT (50K)	OMCS	75.5	84.2	83.5	71.6	90.6	93.9	49.8	85.8	88.9	69.7
OM-ADAPT (100K)	OMCS	74.6	83.9	82.8	71.5	90.8	92.8	48.8	85.7	87.1	64.1
SemBERT	Semantic Role Labeling of Pre-Training data	80.9	84.4	84.0	71.8	90.9	93.5	57.8	87.3	88.2	69.3
LIBERT	Wordnet, Roget's Thesaurus	74.3	79.8	78.8	69.3	87.2	90.8	35.3	82.6	86.6	63.6
BERT-MK	Unified Medical Language System	83.0	88.5	87.6	74.1	91.2	93.2	63.4	88.4	89.1	73.2
K-BERT	TBD	76.1	82.8	81.4	70.2	90.4	92.5	48.2	82.7	86.9	69.2
KG-BERT	ConceptNet	80.1	85.2	83.7	71.4	91.3	93.6	55.8	83	88.5	69.1
K-Adapter	Wikipedia	82.2	84.1	83.3	71.3	91.1	93.4	52.1	87.1	85.2	70.1
ERNIE 3.0	Wikipedia, Reddit	91.1	92.3	91.7	75.2	97.3	97.8	75.5	93.0	93.9	92.6
XLNet	Wikipedia, ConceptNet	90.1	90.9	90.9	74.7	90.5	97.1	70.2	93.0	92.9	88.5

benchmark tasks, thereby substantiating the ongoing exploration of these selected methods and their possible modifications.

The results demonstrate that non-hybrid approaches are generally outperformed by hybrid combinations. However, some hybrid methods, such as LIBERT and K-BERT, are found to be less effective than non-hybrid methods, implying certain limitations in the compatibility of injections with each other.

Notably, the experiment revealed that approaches employing knowledge graphs are capable of structuring knowledge within language models and assisting in solving NLP tasks. Among knowledge graphs, WordNet and ConceptNet have established their potential as the tools for knowledge enrichment within language models, providing motivation to incorporate other knowledge graphs, such as ATOMIC and Freebase, in the injection methods mentioned in the beginning of this section.

In addition to seeking the best knowledge injection approach, the future research agenda may include identifying the most effective configuration of the language model and the knowledge injection approach, to maximize the benefits in addressing the problem of hallucination. This course of action could serve to stimulate further research in this field.

Conclusion

The paper explores various methods for incorporating structured knowledge into language models to enhance their ability to efficiently address NLP problems. The results have shown that ERNIE 3.0 and XLNet, with their combined knowledge injection techniques are the most promising for effectively tackling the hallucination issue.

References

1. Vaswani A., Shazeer N., Parmar N., Uszkoreit J., Jones L., Gomez A.N., Kaiser Ł., Polosukhin I. Attention is all you need. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2017, vol. 30.
2. Devlin J., Chang M.-W., Lee K., Toutanova K. Bert: Pre-training of deep bidirectional transformers for language understanding. *Proc. of the 2019 Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics: Human Language Technologies. V. 1 (Long and Short Papers)*, 2019, pp. 4171–4186. <https://doi.org/10.18653/v1/N19-1423>
3. Yang Z., Dai Z., Yang Y., Carbonell J., Salakhutdinov R.R., Le Q.V. Xlnet: Generalized autoregressive pretraining for language understanding. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2019, vol. 32.
4. Colon-Hernandez P., Havasi C., Alonso J., Huggins M., Breazeal C. Combining pre-trained language models and structured knowledge. *arXiv*, 2021, arXiv:2101.12294. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2101.12294>

Литература

1. Vaswani A., Shazeer N., Parmar N., Uszkoreit J., Jones L., Gomez A.N., Kaiser Ł., Polosukhin I. Attention is all you need // *Advances in Neural Information Processing Systems*. 2017. V. 30.
2. Devlin J., Chang M.-W., Lee K., Toutanova K. Bert: Pre-training of deep bidirectional transformers for language understanding // *Proc. of the 2019 Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics: Human Language Technologies. V. 1 (Long and Short Papers)*. 2019. P. 4171–4186. <https://doi.org/10.18653/v1/N19-1423>
3. Yang Z., Dai Z., Yang Y., Carbonell J., Salakhutdinov R.R., Le Q.V. Xlnet: Generalized autoregressive pretraining for language understanding // *Advances in Neural Information Processing Systems*. 2019. V. 32.
4. Colon-Hernandez P., Havasi C., Alonso J., Huggins M., Breazeal C. Combining pre-trained language models and structured knowledge // *arXiv*. 2021. arXiv:2101.12294. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2101.12294>

5. Ye Z.-X., Chen Q., Wang W., Ling Z.-H. Align, mask and select: A simple method for incorporating commonsense knowledge into language representation models. *arXiv*, 2019, arXiv:1908.06725. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1908.06725>
6. Lauscher A., Majewska O., Ribeiro L.F.R., Gurevych I., Rozanov N., Glavaš G. Common sense or world knowledge? investigating adapter-based knowledge injection into pretrained transformers. *Proc. of Deep Learning Inside Out (DeeLIO): The First Workshop on Knowledge Extraction and Integration for Deep Learning Architectures*, 2020, pp. 43–49. <https://doi.org/10.18653/v1/2020.deeLIO-1.5>
7. Peters M.E., Neumann M., Logan R., Schwartz R., Joshi V., Singh S., Smith N.A. Knowledge enhanced contextual word representations. *Proc. of the 2019 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing and the 9th International Joint Conference on Natural Language Processing (EMNLP-IJCNLP)*, 2019, pp. 43–54. <https://doi.org/10.18653/v1/D19-1005>
8. Houlsby N., Giurgiu A., Jastrzebski S., Morrone B., De Laroussilhe Q., Gesmundo A., Attariyan M., Gelly S. Parameter-efficient transfer learning for NLP. *International Conference on Machine Learning, PMLR*, 2019, vol. 97, pp. 2790–2799.
9. Singh P., Lin T., Mueller E.T., Lim G., Perkins T., Zhu W.L. Open mind common sense: Knowledge acquisition from the general public. *Lecture Notes in Computer Science*, 2002, vol. 2519, pp. 1223–1237. https://doi.org/10.1007/3-540-36124-3_77
10. Balažević I., Allen C., Hospedales T.M. TuckER: Tensor factorization for knowledge graph completion. *Proc. of the 2019 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing and the 9th International Joint Conference on Natural Language Processing (EMNLP-IJCNLP)*, 2019, pp. 5185–5194. <https://doi.org/10.18653/v1/D19-1522>
11. Zhang Z., Wu Y., Zhao H., Li Z., Zhang S., Zhou X., Zhou X. Semantics-aware BERT for language understanding. *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, 2020, vol. 34, no. 05, pp. 9628–9635. <https://doi.org/10.1609/aaai.v34i05.6510>
12. Lauscher A., Vulić I., Ponti E.M., Korhonen A., Glavaš G. Specializing Unsupervised Pretraining Models for Word-Level Semantic Similarity. *Proc. of the 28th International Conference on Computational Linguistics (COLING 2020)*, 2020, pp. 1371–1383. <https://doi.org/10.18653/v1/2020.coling-main.118>
13. He B., Zhou D., Xiao J., Jiang X., Liu Q., Yuan N.J., Xu T. BERT-MK: Integrating graph contextualized knowledge into pre-trained language models. *Proc. of the Findings of the Association for Computational Linguistics (EMNLP 2020)*, 2020, pp. 2281–2290. <https://doi.org/10.18653/v1/2020.findings-emnlp.207>
14. Liu W., Zhou P., Zhao Z., Wang Z., Ju Q., Deng H., Wang P. K-bert: Enabling language representation with knowledge graph. *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, 2020, vol. 34, N 03, pp. 2901–2908. <https://doi.org/10.1609/aaai.v34i03.5681>
15. Yao L., Mao C., Luo Y. KG-BERT: BERT for knowledge graph completion. *arXiv*, 2019, arXiv:1909.03193. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1909.03193>
16. Wang R., Tang D., Duan N., Wei Z., Huang X., Ji J., Cao G., Jiang D., Zhou M. K-adapter: Infusing knowledge into pre-trained models with adapters. *Proc. of the Findings of the Association for Computational Linguistics (ACL-IJCNLP 2021)*, 2021, pp. 1405–1418. <https://doi.org/10.18653/v1/2021.findings-acl.121>
17. Sun Y., Wang S., Feng S., Ding S., Pang C., Shang J., Liu J., Chen X., Zhao Y., Lu Y., Liu W., Wu Z., Gong W., Liang J., Shang Z., Sun P., Liu W., Ouyang X., Yu D., Tian H., Wu H., Wang H. Ernie 3.0: Large-scale knowledge enhanced pre-training for language understanding and generation. *arXiv*, 2021, arXiv:2107.02137. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2107.02137>
18. Lv S., Guo D., Xu J., Tang D., Duan N., Gong M., Shou L., Jiang D., Cao G., Hu S. Graph-based reasoning over heterogeneous external knowledge for commonsense question answering. *Proceedings of the AAAI conference on artificial intelligence*, 2020, vol. 34, no. 05, pp. 8449–8456. <https://doi.org/10.1609/aaai.v34i05.6364>
19. Wang A., Singh A., Michael J., Hill F., Levy O., Bowman S. GLUE: A multi-task benchmark and analysis platform for natural language understanding. *Proc. of the 2018 EMNLP Workshop BlackboxNLP: Analyzing and Interpreting Neural Networks for NLP*, 2018, pp. 353–355. <https://doi.org/10.18653/v1/W18-5446>
5. Ye Z.-X., Chen Q., Wang W., Ling Z.-H. Align, mask and select: A simple method for incorporating commonsense knowledge into language representation models // *arXiv*. 2019. arXiv:1908.06725. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1908.06725>
6. Lauscher A., Majewska O., Ribeiro L.F.R., Gurevych I., Rozanov N., Glavaš G. Common sense or world knowledge? investigating adapter-based knowledge injection into pretrained transformers // *Proc. of Deep Learning Inside Out (DeeLIO): The First Workshop on Knowledge Extraction and Integration for Deep Learning Architectures*. 2020. P. 43–49. <https://doi.org/10.18653/v1/2020.deeLIO-1.5>
7. Peters M.E., Neumann M., Logan R., Schwartz R., Joshi V., Singh S., Smith N.A. Knowledge enhanced contextual word representations // *Proc. of the 2019 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing and the 9th International Joint Conference on Natural Language Processing (EMNLP-IJCNLP)*. 2019. P. 43–54. <https://doi.org/10.18653/v1/D19-1005>
8. Houlsby N., Giurgiu A., Jastrzebski S., Morrone B., De Laroussilhe Q., Gesmundo A., Attariyan M., Gelly S. Parameter-efficient transfer learning for NLP // *International Conference on Machine Learning, PMLR*. 2019. V. 97. P. 2790–2799.
9. Singh P., Lin T., Mueller E.T., Lim G., Perkins T., Zhu W.L. Open mind common sense: Knowledge acquisition from the general public // *Lecture Notes in Computer Science*. 2002. V. 2519. P. 1223–1237. https://doi.org/10.1007/3-540-36124-3_77
10. Balažević I., Allen C., Hospedales T.M. TuckER: Tensor factorization for knowledge graph completion // *Proc. of the 2019 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing and the 9th International Joint Conference on Natural Language Processing (EMNLP-IJCNLP)*. 2019. P. 5185–5194. <https://doi.org/10.18653/v1/D19-1522>
11. Zhang Z., Wu Y., Zhao H., Li Z., Zhang S., Zhou X., Zhou X. Semantics-aware BERT for language understanding // *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*. 2020. V. 34. N 05. P. 9628–9635. <https://doi.org/10.1609/aaai.v34i05.6510>
12. Lauscher A., Vulić I., Ponti E.M., Korhonen A., Glavaš G. Specializing Unsupervised Pretraining Models for Word-Level Semantic Similarity // *Proc. of the 28th International Conference on Computational Linguistics (COLING 2020)*. 2020. P. 1371–1383. <https://doi.org/10.18653/v1/2020.coling-main.118>
13. He B., Zhou D., Xiao J., Jiang X., Liu Q., Yuan N.J., Xu T. BERT-MK: Integrating graph contextualized knowledge into pre-trained language models // *Proc. of the Findings of the Association for Computational Linguistics (EMNLP 2020)*. 2020. P. 2281–2290. <https://doi.org/10.18653/v1/2020.findings-emnlp.207>
14. Liu W., Zhou P., Zhao Z., Wang Z., Ju Q., Deng H., Wang P. K-bert: Enabling language representation with knowledge graph // *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*. 2020. V. 34. N 03. P. 2901–2908. <https://doi.org/10.1609/aaai.v34i03.5681>
15. Yao L., Mao C., Luo Y. KG-BERT: BERT for knowledge graph completion // *arXiv*. 2019. arXiv:1909.03193. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1909.03193>
16. Wang R., Tang D., Duan N., Wei Z., Huang X., Ji J., Cao G., Jiang D., Zhou M. K-adapter: Infusing knowledge into pre-trained models with adapters // *Proc. of the Findings of the Association for Computational Linguistics (ACL-IJCNLP 2021)*. 2021. P. 1405–1418. <https://doi.org/10.18653/v1/2021.findings-acl.121>
17. Sun Y., Wang S., Feng S., Ding S., Pang C., Shang J., Liu J., Chen X., Zhao Y., Lu Y., Liu W., Wu Z., Gong W., Liang J., Shang Z., Sun P., Liu W., Ouyang X., Yu D., Tian H., Wu H., Wang H. Ernie 3.0: Large-scale knowledge enhanced pre-training for language understanding and generation // *arXiv*. 2021. arXiv:2107.02137. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2107.02137>
18. Lv S., Guo D., Xu J., Tang D., Duan N., Gong M., Shou L., Jiang D., Cao G., Hu S. Graph-based reasoning over heterogeneous external knowledge for commonsense question answering // *Proceedings of the AAAI conference on artificial intelligence*. 2020. V. 34. N 05. P. 8449–8456. <https://doi.org/10.1609/aaai.v34i05.6364>
19. Wang A., Singh A., Michael J., Hill F., Levy O., Bowman S. GLUE: A multi-task benchmark and analysis platform for natural language understanding // *Proc. of the 2018 EMNLP Workshop BlackboxNLP: Analyzing and Interpreting Neural Networks for NLP*. 2018. P. 353–355. <https://doi.org/10.18653/v1/W18-5446>

Authors

Nikita I. Kulin — PhD Student, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, [sc 57222386134](https://orcid.org/0000-0002-3952-6080), <https://orcid.org/0000-0002-3952-6080>, kylin98@list.ru

Sergey B. Muravyov — PhD, Associate Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, [sc 57194035005](https://orcid.org/0000-0002-4251-1744), <https://orcid.org/0000-0002-4251-1744>, smuravyov@itmo.ru

Авторы

Кулин Никита Игоревич — аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация [sc 57222386134](https://orcid.org/0000-0002-3952-6080), <https://orcid.org/0000-0002-3952-6080>, kylin98@list.ru

Муравьев Сергей Борисович — кандидат технических наук, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 57194035005](https://orcid.org/0000-0002-4251-1744), <https://orcid.org/0000-0002-4251-1744>, smuravyov@itmo.ru

Received 24.05.2024

Approved after reviewing 16.06.2024

Accepted 20.07.2024

Статья поступила в редакцию 24.05.2024

Одобрена после рецензирования 16.06.2024

Принята к печати 20.07.2024



Работа доступна по лицензии
Creative Commons
«Attribution-NonCommercial»

doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-594-601

УДК 004.855.5: 004.032.26

Предсказание связей «ген-болезнь» с помощью гетерогенной графовой нейронной сети

Денис Александрович Сидоренко¹✉, Анатолий Абрамович Шалыто²

^{1,2} Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

¹ denisssveta@mail.ru✉, <https://orcid.org/0009-0004-0571-5192>

² shalyto@mail.ifmo.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2723-2077>

Аннотация

Введение. Представлены результаты разработки модели гетерогенной графовой нейронной сети для предсказания ассоциаций между генами и заболеваниями на основе имеющихся геномных и медицинских данных. Новизна предложенного подхода состоит в объединении концепций графовых нейронных сетей и гетерогенных информационных сетей для эффективной обработки структурированных данных и учета сложных взаимодействий между генами и патологиями. **Метод.** Предложенное решение представляет собой гетерогенную графовую нейронную сеть, которая использует гетерогенную графовую структуру для представления генов, болезней и их взаимосвязей. **Основные результаты.** Оценка точности разработанной модели проведена на наборах данных DisGeNET, LASTFM, YELP. На этих же данных выполнено сравнение результатов с наиболее сильными моделями. Показано превосходство предложенной модели по метрикам точности Average Precision (AP), F1-меры (F1@S), Hit@k, Area Under Receiver Operating Characteristic curve (AUROC) при предсказании ассоциаций «ген-болезнь». **Обсуждение.** Разработанная модель может использоваться как инструмент биоинформатического анализа и в качестве вспомогательного средства для исследователей и врачей при изучении генетических заболеваний. Такой подход может ускорить процесс открытия новых лекарственных мишеней и разработку персонализированной медицины.

Ключевые слова

машинное обучение, графовые нейронные сети, гетерогенные информационные сети, биоинформатика, генетика, предсказание «ген-болезнь» ассоциаций

Ссылка для цитирования: Сидоренко Д.А., Шалыто А.А. Предсказание связей «ген-болезнь» с помощью гетерогенной графовой нейронной сети // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2024. Т. 24, № 4. С. 594–601. doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-594-601

Predicting gene-disease associations using a heterogeneous graph neural network

Denis A. Sidorenko¹✉, Anatoly A. Shalyto²

^{1,2} ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

¹ denisssveta@mail.ru✉, <https://orcid.org/0009-0004-0571-5192>

² shalyto@mail.ifmo.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2723-2077>

Abstract

The research presents the development of a heterogeneous graph neural network model for predicting gene-disease using existing genomic and medical data. The novelty of the approach is in integrating the principles of graph neural networks and heterogeneous information networks for efficient processing of structured data and consideration of complex gene-pathology interactions. The solution proposed is a heterogeneous graph neural network which utilizes a heterogeneous graph structure for representing genes, diseases, and their relationships. The performance of the developed model was evaluated on the DisGeNET, LASTFM, YELP datasets. On these datasets, a comparison was made with current SOTA models. The comparison results demonstrated that the proposed model outperforms other models in terms of Average Precision (AP), F1-measure (F1@S), Hit@k, Area Under Receiver Operating Characteristic curve (AUROC)

in predicting “gene-disease” associations. The model developed serves as a tool for bioinformatics analysis and can aid researchers and doctors in studying genetic diseases. This could expedite the discovery of new drug targets and the advancement of personalized medicine.

Keywords

machine learning, graph neural networks, heterogeneous information networks, bioinformatics, genetics, “gene-disease” prediction associations

For citation: Sidorenko D.A., Shalyto A.A. Predicting gene-disease associations using a heterogeneous graph neural network. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 4, pp. 594–601 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-594-601

Введение

Гетерогенные графовые нейронные сети стали важнейшим инструментом в области искусственного интеллекта и машинного обучения, особенно при работе со сложными структурами данных. В контексте графовых нейронных сетей гетерогенные графы относятся к графам, которые содержат вершины и ребра разных типов, что обеспечивает более полное представление реальных данных. В отличие от традиционных графовых нейронных сетей [1], которые ориентированы на однородные графы, гетерогенные графовые нейронные сети предназначены для обработки различных типов отношений данных, таких как взаимодействие пользователя с элементами, ассоциации атрибутов и отношения контента [2]. Объединив это разнообразие, гетерогенные графовые нейронные сети могут отражать более сложные закономерности и зависимости в данных, что приводит к повышению производительности при решении различных задач. Приложения таких моделей охватывают широкий спектр областей, включая системы социальных рекомендаций, платформы электронной коммерции, биоинформатику и графы знаний [3]. В последнее время развиваются модели по поиску связей между генами и болезнями, основанные на решении задачи Link Prediction на графах с помощью распространения сигнала по графу на основе случайного блуждания по нему [4]. В частности, для решения этой задачи с использованием случайных блужданий были разработаны такие модели как PRINCE и ORIENT [5].

В модели PRINCE построена приоритезация генов с помощью методов Random Walks with Restart и присвоены априорные вероятности генам исходя из близости болезней, а в ORIENT — дополнительно усилены априорные вероятности через кратчайшие пути от гена до болезни. Дополнительно для решения задачи Link Prediction в работе [6] разработана сетевая модель GuityTargets, которая до появления графовых нейронных сетей являлась наиболее эффективной применительно к этой задаче.

Основной недостаток моделей, основанных на случайном блуждании или сетевом подходе, состоит в том, что информация плохо распространяется по графу, они неэффективны на больших и сложных графах. Графовые нейронные сети позволяют создавать более мощные модели, которые охватывают как структурную, так и контекстную информации. В [7] создана модель Progressive Graph Convolution Network, которая реализует графовые свертки. Однако она обладает

существенными недостатками: в ней архитектурно используются моногенные свертки на графе — в модели вершины разных типов обозначают то же самое; не были использованы последние достижения из сложных трансформерных графовых свертки.

В настоящей работе предложена модель Heterogeneous Graph Gene Disease Link Prediction (HeteroGDLDP), которая объединяет в себе, как распространение гетерогенного сигнала по графу, так и элементы новейших архитектур графовых нейронных сетей. Кроме того, в модели применен графовый трансформер для предсказания связей «ген-болезнь», а также уникальная инициализация, которая в этой задаче ранее не применялась. В модель, используя механизм внимания, введен адаптивный механизм агрегации соседей. При агрегации информации (атрибутами и структурой окружения вершины) между вершинами применяется иерархический подход.

Использование гетерогенных графов в области нейронных сетей позволило разрешить сложные противоречия между различными объектами. Эти графы состоят из различных вершин, которые символизируют такие сущности, как отдельные гены или болезни, и ребер, обозначающих связи между этими сущностями. В отличие от однородных графов, в гетерогенных графах используются несколько типов вершин и ребер, позволяющих распознавать сложные закономерности и корреляции между различными типами данных. Нейронные сети с гетерогенными графами [8] используют такую структуру для выявления связей между разнородными типами данных, что делает их неоценимыми для выявления сложных взаимосвязей данных. Учитывая гетерогенный (имеющий разную природу отдельных вершин графа) характер информации в графах, графовые нейронные сети обычно используют слои эмбедингов (функций трансформаций) для преобразования дискретных данных (такие как вершины и ребра графа) в векторные представления с вещественными значениями, что способствует эффективной обработке данных, так как появляется механизм для обработки структурированных данных графа с помощью стандартных операций, применяемых к непрерывным векторам. Специализированные свертки в графовых нейронных сетях, такие как Relational Graph Convolutional Networks [9], предназначены для работы с различными типами ребер в гетерогенных графах, тем самым обучая отдельные матрицы для обработки разнообразных связей внутри графа. Также известны модели, которые используют механизм внимания в своих архитектурах для различных типов ребер [10].

Метод

Формулировка математической проблемы.

Сформулируем задачу Link Prediction (предсказание связей) на графе, где гены представлены как белок-белковые взаимодействия (Protein-Protein Interactions, PPI), а болезни — как онтология экспериментальных факторов (Experimental Factor Ontology, EFO).

Пусть задан гетерогенный граф $G = (V, E)$, где V — множество вершин, представляющих гены (PPI [11]) и болезни (EFO [12]); E — множество ребер, представляющих связи между генами и болезнями. Более формально: $V = V_{PPI} \cup V_{EFO}$ — объединение вершин из двух наборов данных. Ребра, $E = E_{gg} \cup E_{gd} \cup E_{dd}$ соответственно, можно разделить на три типа: между генами, между генами и болезнями, между болезнями.

Таким образом, граф G содержит информацию о взаимодействиях белков, представленных генами, а также об ассоциациях генов с болезнями. Задача Link Prediction состоит в предсказании отсутствующих или новых ребер E_{gd} между генами и болезнями, используя структуру графа, а также информацию, содержащуюся в существующих ребрах.

Формально эта задача может быть сформулирована как бинарная классификационная задача, в которой для каждой пары (u, v) , где $u \in V_{PPI}$, а $v \in V_{EFO}$, необходимо предсказать, существует ли ребро $(u, v) \in E_{gd}$. Цель исследования — обучить модель, способную предсказывать новые ассоциации между генами и болезнями, на основе информации о взаимодействиях белков и известных ассоциациях «ген-болезнь», представленных в графе G .

Разработка и построение модели. Модель HeteroGGDLP, основанная на базе (Heterogeneous Graph Transformer)-сверток (HGT) на (PPI, EFO)-графе, расширяет классическую архитектуру за счет применения следующих этапов.

1. Неслучайная инициализация — сеть, инициализируемая предварительной текстовой информацией, эмбединги которой получены с помощью модели BioBERT [13]. Пусть t_v — текстовые описания вершины v , тогда $e_v = \text{BioBERT}(t_v)$ — инициализация векторного представления вершины.
2. Адаптивный механизм агрегации соседей. Пусть N_v — множество соседей вершины v ; $h_v^{(l)}$ — представление вершины в слое l ; $\mathbf{W}_{self}^{(l)}$ — матрица весов для представления вершины в слое l ; $\mathbf{W}_{neigh}^{(l)}$ — матрица весов для представления $neigh$ соседей в слое l . Вместо стандартной агрегации соседей по формуле:

$$h_v^{(l+1)} = \sigma\left(\mathbf{W}_{self}^{(l)} h_v^{(l)} + \sum_{u \in N_v} \mathbf{W}_{neigh}^{(l)} h_u^{(l)}\right),$$

используем механизм на основе внимания:

$$h_v^{(l+1)} = \sigma\left(\mathbf{W}_{self}^{(l)} h_v^{(l)} + \sum_{u \in N_v} \alpha_{vu}^{(l)} \mathbf{W}_{neigh}^{(l)} h_u^{(l)}\right),$$

где $\alpha_{vu}^{(l)} = \frac{\exp(\text{score}(h_v^{(l)}, h_u^{(l)}))}{\sum_{k \in N_v} \exp(\text{score}(h_v^{(l)}, h_k^{(l)}))}$, $\text{score}((h_v^{(l)}, h_u^{(l)}))$ — функция, определяющая внимание. Это, как правило, LeakyRelu [14].

3. Иерархическая структура агрегации. Вместо плоской агрегации соседей в модель введем иерархическую структуру, где сначала агрегируются соседи нижнего уровня:

$$h_{v,j}^{(l+1)} = \sigma\left(\mathbf{W}_{self}^{(l)} h_{v,j}^{(l)} + \sum_{u \in N_{v,j}} \mathbf{W}_{neigh}^{(l)} h_u^{(l)}\right),$$

где $N_{v,j}$ — множество соседей нижнего уровня j вершины v ; $h_{v,j}^{(l)}$ — представление нижнего уровня j вершины v в слое l . Затем представления соседей нижнего уровня агрегируются для получения представления вершин верхнего уровня:

$$h_v^{(l+1)} = \sigma\left(\mathbf{W}_{self}^{(l)} h_v^{(l)} + \sum_j \mathbf{W}_{high}^{(l)} h_{v,j}^{(l+1)}\right).$$

4. Таким образом, объединяя адаптивный механизм агрегации соседей и иерархическую структуру агрегации, получим формулы, для агрегации представлений (эмбедингов), объединяющие эти подходы: $h_{v,j}^{(l+1)} = \sigma\left(\mathbf{W}_{self}^{(l)} h_{v,j}^{(l)} + \sum_{u \in N_{v,j}} \alpha_{vu}^{(l)} \mathbf{W}_{neigh}^{(l)} h_u^{(l)}\right)$ — для нижнего и $h_v^{(l+1)} = \sigma\left(\mathbf{W}_{self}^{(l)} h_v^{(l)} + \sum_j \beta_{vj}^{(l)} \mathbf{W}_{high}^{(l)} h_{v,j}^{(l+1)}\right)$ — для верхнего уровней, где $\beta_{vj}^{(l)}$ — вес внимания для представления соседа нижнего уровня j вершины v в слое l , вычислим по формуле:

$$\beta_{vj}^{(l)} = \frac{\exp(\text{score}(h_v^{(l)}, h_{v,j}^{(l)}))}{\sum_{k \in N_v} \exp(\text{score}(h_v^{(l)}, h_{v,k}^{(l)}))}.$$

Механизм внимания используем на нижнем уровне для агрегации представлений соседей в представления соседей нижнего уровня и на верхнем уровне для агрегации представлений соседей нижнего уровня в итоговое представление вершины. Данный подход позволяет модели адаптивно агрегировать информацию с учетом структуры графа и важности отдельных соседей на разных уровнях для различных типов связей.

Модель обучается, изменяя матрицы весов $\mathbf{W}_{neigh}^{(l)}$ через агрегацию представлений соседей различных типов связей на нижнем уровне, а затем объединяет эту информацию на верхнем уровне с учетом важности каждого типа.

В целом архитектура модели представляет собой несколько компонент:

- 1) слой инициализации BioBERT эмбедингами;
- 2) энкодер, внутри которого введена иерархическая агрегация вершин, веса внимания (трансформерная часть) для определения важности вершины в момент агрегации, а также матрица весов, изменяющихся во время обучения модели. Веса модели обучаются на разных уровнях модели: в графовых свертках, на каждом уровне иерархии агрегации;
- 3) декодер, который представляет собой функцию вычисления близости вершин и функцию активации для определения вероятности наличия связи. Выход декодера отправляется в функцию потерь, после расчета которой — вычисляется потеря. В процессе обучения модели для каждой пары вершин (u, v) декодер вычисляет оценку вероятности наличия

ребра между ними на основе сходства их векторных представлений:

$$p_{uv} = DEC(h_u, h_v) = \sigma(h_u^T h_v).$$

Функция потерь — бинарная кросс-энтропия, которая определяется по формуле:

$$L = \sum_{(u,v) \in E} \log(p_{uv}) + (1 - y_{uv}) \log(1 - p_{uv}),$$

где $y_{uv} = 1$, если $(u, v) \in E$ и $y_{uv} = 0$ в противном случае. Оптимизация параметров энкодера и декодера производится путем минимизации функции потерь L методом стохастического градиентного спуска, во время которого вычисляются градиенты и обновляются веса во всей модели для минимизации функции потерь. После обучения на выходе энкодера формируются обученные векторные представления вершин, а на выходе декодера — вероятности связей, позволяющие оценивать качество модели на любых классификационных метриках.

На рисунке показана архитектура представленной модели HeteroGGDLP, которая содержит блок BioBERT для преобразования входных данных, а также блоки энкодера и декодера.

Основные результаты

Наборы данных. Для оценки качества и сравнения предложенной модели с существующими моделями были использованы три открытых набора данных с различными характеристиками:

- DisGeNET [15] — ключевой набор данных для задачи предсказания ассоциаций «ген-болезнь»;
- YELP [16] — набор данных, содержащий информацию о связях между пользователями, бизнесами и возможными действиями между ними;
- LASTFM [17] — набор данных, описывающий взаимодействия между пользователями, музыкантами/группами и тегами.

Задача Link Prediction на наборах данных (табл. 1) сформулирована как бинарная задача классификации. Для каждого набора данных случайным образом была удалена часть связей для формирования тестового набора. Включение разнообразных наборов данных, таких как YELP и LASTFM, кроме DisGeNET, позволяет

продемонстрировать широкую применимость предложенной модели и оценить ее производительность в различных контекстах предсказания связей на гетерогенных графах, не ограничиваясь только задачей предсказания ассоциаций «ген-болезнь».

Модели для сравнения. Для сравнения с предложенной моделью HeteroGGDLP выбраны наиболее сильные модели для предсказания связей на гетерогенных графах.

- HerGePred [18] — модель для предсказания связей в гетерогенных сетях, основанная на случайных блужданиях, использующая модель node2vec [19], для того, чтобы генерировать конкретные вероятности перехода в зависимости от шага в глубину или в ширину.
- Metapath2Vec [20] — обобщение популярного алгоритма word2vec [21] на графах, позволяющее использовать векторные представления в гетерогенном графе с помощью техники Random Walks [4] для метапутей, где метапуть — заранее заданная последовательность вершин различных типов.
- DeepWalk [22] — классическая модель обучения векторных представлений вершин в однородных графах на основе техники Random Walks и word2vec. Не учитывает особенности вершин/ребер.
- HGT [23] — одна из новейших моделей трансформеров, способная обрабатывать разнородные графы с учетом использования различных типов вершин и механизма внимания.
- Heterogeneous Graph Attention Network (HAN) [10] — модель на основе графовых сверточных сетей, в которой применяется специализированный иерархический механизм для агрегации информации из метапутей в гетерогенном графе.

Таблица 1. Статистики по наборам данных для тестирования

Table 1. Statistics for testing datasets

Набор данных	Число вершин	Число ребер	Число типов ребер
DisGeNET	56 379	587 775	4
LASTFM	20 612	128 804	3
YELP	94 807	1 406 809	9

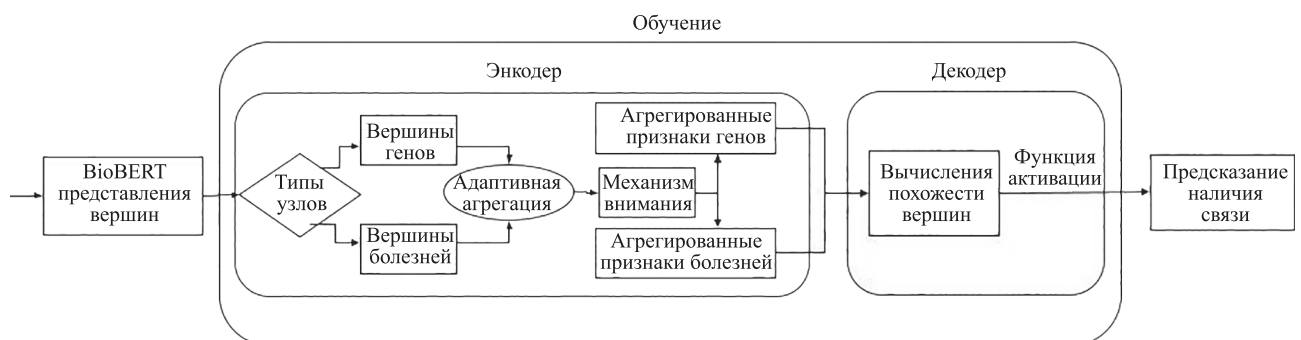


Рисунок. Архитектура модели HeteroGGDLP

Figure. Architecture of the HeteroGGDLP model

— Factor Heterogeneous Network Embedding (FHNE) [24] — модель, которая объединяет метапутевой механизм и механизм факторизации семантической информации в единую архитектуру глубокого обучения для извлечения представлений из гетерогенных графов.

Метрики

Для расчета метрик бинарной классификации исходный граф был разбит на тренировочный и тестовый. Для каждого ребра из тестового графа модель HeteroGGDLP предсказала вероятность принадлежности к положительному классу (наличие ребра). Затем предсказанные вероятности сортировались в порядке убывания. Полученный упорядоченный список вероятностей был использован для следующих метрик.

1. Area Under the Receiver Operating Characteristic Curve (AUROC) — метрика, показывающая способность модели ранжировать положительные (есть ребро) и отрицательные (нет ребра) примеры.

Значение AUROC варьируется от 0 до 1, где 1 — идеальный результат.

2. Average Precision (AP) — усредненная точность. Чем выше значение метрики, тем больше модель ранжирует положительные примеры.
3. Hit@k — доля верных предсказаний в топ-k результатах. Чем выше значение метрики, тем больше релевантных связей модель предсказывает в первых k результатах (сколько правильных предсказаний получается в топ-k ранжированном списке связей).
4. F1@S — F1-мера (гармоническое среднее между точностью и полнотой) для топ-S результатов. Показывает общую производительность на топ-S предсказаниях.

Анализ экспериментальных данных

В табл. 2 представлены результаты модели HeteroGGDLP по предсказанию связей на тестовых наборах данных.

В результате анализа табл. 2, можно сделать вывод, что предложенная модель HeteroGGDLP конкурен-

Таблица 2. Сравнение моделей в наборах данных DisGeNET, LASTFM и YELP
Table 2. Comparison of models on the DisGeNET, LASTFM and YELP datasets

Модели	Метрики					
	AUROC (±std)	AP (±std)	Hit@10 (±std)	Hit@100 (±std)	Hit@S (±std)	F1@S (±std)
DisGeNET						
HerGePred	0,490 ± 0,421	0,700 ± 0,231	0,235 ± 0,180	0,029 ± 0,031	0,588 ± 0,041	0,490 ± 0,414
Metapath2Vec	0,577 ± 0,450	0,775 ± 0,229	0,241 ± 0,175	0,029 ± 0,031	0,632 ± 0,051	0,565 ± 0,443
DeepWalk	0,722 ± 0,387	0,837 ± 0,207	0,207 ± 0,156	0,025 ± 0,027	0,532 ± 0,033	0,702 ± 0,385
HGT	0,873 ± 0,292	0,922 ± 0,159	0,196 ± 0,160	0,024 ± 0,027	0,482 ± 0,067	0,858 ± 0,297
HAN	0,767 ± 0,314	0,817 ± 0,218	0,190 ± 0,172	0,023 ± 0,029	0,437 ± 0,202	0,772 ± 0,361
FHNE	0,868 ± 0,294	0,917 ± 0,161	0,206 ± 0,158	0,025 ± 0,027	0,543 ± 0,037	0,852 ± 0,298
HeteroGGDLP	0,836 ± 0,331	0,908 ± 0,173	0,240 ± 0,181	0,029 ± 0,031	0,618 ± 0,039	0,818 ± 0,334
LASTFM						
HerGePred	0,543 ± 0,138	0,591 ± 0,114	0,605 ± 0,040	0,188 ± 0,021	0,599 ± 0,011	0,522 ± 0,118
Metapath2Vec	0,625 ± 0,168	0,687 ± 0,137	0,602 ± 0,039	0,190 ± 0,021	0,598 ± 0,011	0,584 ± 0,151
DeepWalk	0,393 ± 0,231	0,504 ± 0,156	0,520 ± 0,037	0,159 ± 0,018	0,512 ± 0,018	0,414 ± 0,190
HGT	0,790 ± 0,180	0,830 ± 0,142	0,514 ± 0,034	0,154 ± 0,018	0,513 ± 0,007	0,752 ± 0,164
HAN	0,750 ± 0,157	0,778 ± 0,123	0,597 ± 0,049	0,154 ± 0,024	0,579 ± 0,025	0,710 ± 0,138
FHNE	0,768 ± 0,153	0,789 ± 0,131	0,561 ± 0,049	0,161 ± 0,019	0,544 ± 0,030	0,724 ± 0,141
HeteroGGDLP	0,847 ± 0,115	0,857 ± 0,107	0,655 ± 0,049	0,200 ± 0,023	0,647 ± 0,026	0,783 ± 0,119
YELP						
HerGePred	0,498 ± 0,256	0,638 ± 0,173	0,416 ± 0,117	0,042 ± 0,012	0,620 ± 0,017	0,498 ± 0,227
Metapath2Vec	0,865 ± 0,179	0,892 ± 0,140	0,404 ± 0,114	0,041 ± 0,012	0,607 ± 0,018	0,816 ± 0,199
DeepWalk	0,604 ± 0,273	0,708 ± 0,192	0,338 ± 0,095	0,034 ± 0,010	0,503 ± 0,017	0,584 ± 0,246
HGT	0,707 ± 0,241	0,780 ± 0,174	0,347 ± 0,101	0,035 ± 0,011	0,523 ± 0,017	0,665 ± 0,227
HAN	0,578 ± 0,247	0,691 ± 0,173	0,349 ± 0,097	0,035 ± 0,010	0,502 ± 0,001	0,561 ± 0,225
FHNE	0,656 ± 0,248	0,749 ± 0,177	0,411 ± 0,134	0,041 ± 0,014	0,669 ± 0,067	0,624 ± 0,228
HeteroGGDLP	0,927 ± 0,132	0,940 ± 0,108	0,414 ± 0,117	0,042 ± 0,012	0,629 ± 0,020	0,887 ± 0,167

Примечание. (±std) — стандартное отклонение.

тоспособна на наборе данных DisGeNET с другими современными моделями. Несмотря на то, что по отдельным метрикам, таким как AUROC и AP, модели FHNE и HGT показывают более высокие результаты, HeteroGGDLP обеспечивает лучшие значения по другим метрикам, включая Hit@10 (0,240) и F1@S (0,818).

Хотя метрики AUROC и AP отражают общую способность модели HeteroGGDLP правильно ранжировать положительные и отрицательные примеры, метрики Hit@k и F1@S более точно измеряют практическую эффективность модели в выявлении релевантных связей «ген-болезнь». В этом контексте преимущество модели HeteroGGDLP по метрикам Hit@10 и F1@S указывает на ее способность успешно извлекать верные ассоциации «ген-болезнь» по сравнению с другими моделями (значения выделены жирным шрифтом в табл. 2), что имеет значение для практического применения в биомедицинских исследованиях, и поэтому модель HeteroGGDLP демонстрирует лучшее качество на наборе данных DisGeNET.

На наборе данных LastFM предложенная модель HeteroGGDLP продемонстрировала высокие результаты по всем ключевым метрикам, опережая другие рассматриваемые модели. В частности, HeteroGGDLP показала лучшие значения метрик AUROC (0,847) и AP (0,857), что свидетельствует о высокой способности этой модели правильно ранжировать положительные и отрицательные примеры. Кроме того, модель HeteroGGDLP превзошла остальные модели по значениям метрик Hit@10 (0,655), Hit@100 (0,200) и F1@S (0,783), что указывает на ее эффективность в выявлении верных ассоциаций из верхней части списка. Несмотря на то, что модели HGT и HAN также продемонстрировали конкурентоспособные результаты по таким метрикам, как AUROC и AP, их качество по метрикам Hit@k и F1@S заметно уступает модели HeteroGGDLP.

На наборе данных YELP модель HeteroGGDLP показала наилучшие значения метрик AUROC (0,927) и AP (0,940), что указывает на способность корректно ранжировать положительные и отрицательные примеры. Следует отметить, что по этим же метрикам модель Metapath2Vec показала второй результат после HeteroGGDLP со значениями AUROC (0,865) и AP (0,892). Преимуществом модели HeteroGGDLP является ее эффективность в извлечении значимых релевантных связей из верхней части ранжированного списка. Это видно по значениям Hit@10 (0,414), Hit@100 (0,042) и F1@S (0,887). Несмотря на схожие результаты остальных моделей по отдельным метрикам, в целом модель HeteroGGDLP продемонстрировала лучший результат по совокупности метрик.

Обсуждение

Результаты экспериментов на различных наборах данных, представленных в табл. 2, продемонстриро-

вали высокую эффективность предложенной модели HeteroGGDLP в задачах извлечения и прогнозирования связей в сложных гетерогенных графовых структурах. Наиболее высокие результаты были достигнуты на наборе данных YELP, где модель HeteroGGDLP показала лучшие значения по таким критически важным метрикам, как AUROC, AP, Hit@10, Hit@100 и F1@S, опережая альтернативные модели.

Вместе с тем, на других наборах данных, таких как DisGeNET и LASTFM, некоторые современные модели (FHNE и HGT), которые учитывают гетерогенность графов, показали схожие или более высокие результаты по отдельным метрикам. Это подчеркивает сложность задачи извлечения связей из разнородных графовых данных и необходимость дальнейших исследований для повышения стабильности и универсальности предлагаемых подходов на различных типах графовых структур.

Тем не менее, предложенная модель HeteroGGDLP продемонстрировала высокий результат по совокупности значений различных метрик, применяемых для оценки моделей на тестовых наборах данных. Помимо HeteroGGDLP, другие современные модели (HGT, HAN и FHNE) также показали хорошие результаты в сравнении с базовыми моделями (DeepWalk, Metapath2Vec), изначально разработанными для гомогенных графов. Это демонстрирует важность учета разнородности типов вершин и ребер в гетерогенных моделях для повышения качества извлечения и прогнозирования связей.

Заключение

Представлено описание разработанной модели HeteroGGDLP — гетерогенной графовой нейронной сети для задачи прогнозирования ассоциаций между генами и заболеваниями. Модель основана на совместном использовании механизмов трансформеров и графовых нейронных сетей для эффективной обработки разнородных графовых структур, представляющих взаимосвязи между генами и заболеваниями.

Достигнутые результаты имеют важное практическое значение для биомедицинских приложений, таких как поиск новых терапевтических мишеней, диагностика заболеваний и разработка персонализированной медицины.

Отметим ряд ограничений текущей модели. Во-первых, использованные наборы данных могут быть расширены путем интеграции дополнительных источников биомедицинской информации. Во-вторых, необходимо дальнейшее совершенствование архитектуры модели и методов обучения для повышения стабильности и способности к обобщению на разнообразных типах графовых структур. В-третьих, требуется учет дополнительных факторов и контекстной информации, влияющих на ассоциации «ген-болезнь», таких как экспрессия генов, эпигенетические модификации, клинические и демографические данные пациентов.

Литература

References

- Henaff M., Bruna J., LeCun Y. Deep convolutional networks on graph-structured data // arXiv. 2015. arXiv:1506.05163. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1506.05163>
- Wang X., Bo D., Shi C., Fan S., Ye Y., Yu P.S. A survey on heterogeneous graph embedding: methods, techniques, applications and sources // IEEE Transactions on Big Data. 2023. V. 9. N 2. P. 415–436. <https://doi.org/10.1109/TBDDATA.2022.3177455>
- Shao B., Li X., Bian G. A survey of research hotspots and frontier trends of recommendation systems from the perspective of knowledge graph // Expert Systems with Applications. 2021. V. 165. P. 113764. <https://doi.org/10.1016/j.eswa.2020.113764>
- László L. Random walks on graphs: a survey // Combinatorics. V. 2. 1993. P. 1–46.
- Li L., Wang Y., An L., Kong X., Huang T. A network-based method using a random walk with restart algorithm and screening tests to identify novel genes associated with Menière's disease // PLOS ONE. 2017. V. 12. N 8. P. e0182592. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0182592>
- Muslu Ö., Hoyt C.T., Lacerda M., Hofmann-Apitius M., Frohlich H. GuiltyTargets: Prioritization of novel therapeutic targets with network representation learning // IEEE/ACM Transactions on Computational Biology and Bioinformatics. 2022. V. 19. N 1. P. 491–500. <https://doi.org/10.1109/TCBB.2020.3003830>
- Li Y., Kuwahara H., Yang P., Song L., Gao X. PGCN: Disease gene prioritization by disease and gene embedding through graph convolutional neural networks // biorxiv.org. 2019. <https://doi.org/10.1101/532226>
- Dutta A., Alcaraz J., TehraniJamsaz A., Cesar E., Sikora A., Jannesari A. Performance optimization using multimodal modeling and heterogeneous GNN // arXiv. 2023. arXiv:2304.12568. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2304.12568>
- Thanapalasingam T., van Berkel L., Bloem P., Groth P. Relational graph convolutional networks: Closer Look // PeerJ Computer Science. 2022. V. 8. P. e1073. <https://doi.org/10.7717/PEERJ-CS.1073>
- Wang X., Ji H., Shi C., Wang B., Ye Y., Cui P., Yu P.S. Heterogeneous graph attention network // Proc. of the WWW '19: The World Wide Web Conference. 2019. P. 2022–2032. <https://doi.org/10.1145/3308558.3313562>
- Ali A., Bagchi A. An overview of protein-protein interaction // Current Chemical Biology. 2015. V. 9. N 1. P. 53–65. <https://doi.org/10.2174/221279680901151109161126>
- Malone J., Holloway E., Adamusiak T., Kapushesky M., Zheng J., Kolesnikov N., Zhukova A., Brazma A., Parkinson H. Modeling sample variables with an experimental factor ontology // Bioinformatics. 2010. V. 26. N 8. P. 1112–1118. <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btq099>
- Lee J., Yoon W., Kim S., Kim D., Kim S., So C.H., Kang J. BioBERT: a pre-trained biomedical language representation model for biomedical text mining // Bioinformatics. 2020. V. 36. N 4. P. 1234–1240. <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btz682>
- Zhang X., Zou Y., Shi W. Dilated convolution neural network with LeakyReLU for environmental sound classification // Proc. of the 22nd International Conference on Digital Signal Processing (DSP). 2017. <https://doi.org/10.1109/ICDSP.2017.8096153>
- Piñero J., Queralt-Rosinach N., Bravo A., Deu-Pons J., Bauer-Mehren A., Baron M., Sanz F., Furlong L.I. DisGeNET: A discovery platform for the dynamical exploration of human diseases and their genes // Database. 2015. V. 2015. <https://doi.org/10.1093/database/bav028>
- Alam M., Cevallos B., Flores O., Lunetto R., Yayoshi K., Woo J. Yelp Dataset Analysis using Scalable Big Data // arXiv. 2021. arXiv:2104.08396v1. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2104.08396>
- Li Y., Guo X., Lin W., Zhong M., Li Q., Liu Z., Zhong W., Zhu Z. Learning dynamic user interest sequence in knowledge graphs for click-through rate prediction // IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering. 2023. V. 35. N 1. P. 647–657. <https://doi.org/10.1109/TKDE.2021.3073717>
- Kuo Y., Wang R., Liu G., Shu Z., Wang N., Zhang R., Yu J., Chen J., Li X., Zhou X. HerGePred: Heterogeneous network embedding representation for disease gene prediction // IEEE Journal of Biomedical and Health Informatics. 2019. V. 23. N 4. P. 1805–1815. <https://doi.org/10.1109/JBHI.2018.2870728>
- Grover A., Leskovec J. node2vec: Scalable feature learning for networks // Proc. of the KDD'16. International Conference on
- Henaff M., Bruna J., LeCun Y. Deep convolutional networks on graph-structured data. *arXiv*, 2015, arXiv:1506.05163. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1506.05163>
- Wang X., Bo D., Shi C., Fan S., Ye Y., Yu P.S. A survey on heterogeneous graph embedding: methods, techniques, applications and sources. *IEEE Transactions on Big Data*, 2023, vol. 9, no. 2, pp. 415–436. <https://doi.org/10.1109/TBDDATA.2022.3177455>
- Shao B., Li X., Bian G. A survey of research hotspots and frontier trends of recommendation systems from the perspective of knowledge graph. *Expert Systems with Applications*, 2021, vol. 165, pp. 113764. <https://doi.org/10.1016/j.eswa.2020.113764>
- László L. Random walks on graphs: a survey. *Combinatorics*. V. 2. 1993, pp. 1–46.
- Li L., Wang Y., An L., Kong X., Huang T. A network-based method using a random walk with restart algorithm and screening tests to identify novel genes associated with Menière's disease. *PLOS ONE*, 2017, vol. 12, no. 8, pp. e0182592. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0182592>
- Muslu Ö., Hoyt C.T., Lacerda M., Hofmann-Apitius M., Frohlich H. GuiltyTargets: Prioritization of novel therapeutic targets with network representation learning. *IEEE/ACM Transactions on Computational Biology and Bioinformatics*, 2022, vol. 19, no. 1, pp. 491–500. <https://doi.org/10.1109/TCBB.2020.3003830>
- Li Y., Kuwahara H., Yang P., Song L., Gao X. PGCN: Disease gene prioritization by disease and gene embedding through graph convolutional neural networks. *bioRxiv.org*, 2019. <https://doi.org/10.1101/532226>
- Dutta A., Alcaraz J., TehraniJamsaz A., Cesar E., Sikora A., Jannesari A. Performance optimization using multimodal modeling and heterogeneous GNN. *arXiv*, 2023, arXiv:2304.12568. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2304.12568>
- Thanapalasingam T., van Berkel L., Bloem P., Groth P. Relational graph convolutional networks: Closer Look. *PeerJ Computer Science*, 2022, vol. 8, pp. e1073. <https://doi.org/10.7717/PEERJ-CS.1073>
- Wang X., Ji H., Shi C., Wang B., Ye Y., Cui P., Yu P.S. Heterogeneous graph attention network. *Proc. of the WWW '19: The World Wide Web Conference*, 2019, pp. 2022–2032. <https://doi.org/10.1145/3308558.3313562>
- Ali A., Bagchi A. An overview of protein-protein interaction. *Current Chemical Biology*, 2015, vol. 9, no. 1, pp. 53–65. <https://doi.org/10.2174/221279680901151109161126>
- Malone J., Holloway E., Adamusiak T., Kapushesky M., Zheng J., Kolesnikov N., Zhukova A., Brazma A., Parkinson H. Modeling sample variables with an experimental factor ontology. *Bioinformatics*, 2010, vol. 26, no. 8, pp. 1112–1118. <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btq099>
- Lee J., Yoon W., Kim S., Kim D., Kim S., So C.H., Kang J. BioBERT: a pre-trained biomedical language representation model for biomedical text mining. *Bioinformatics*, 2020, vol. 36, no. 4, pp. 1234–1240. <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btz682>
- Zhang X., Zou Y., Shi W. Dilated convolution neural network with LeakyReLU for environmental sound classification. *Proc. of the 22nd International Conference on Digital Signal Processing (DSP)*, 2017. <https://doi.org/10.1109/ICDSP.2017.8096153>
- Piñero J., Queralt-Rosinach N., Bravo A., Deu-Pons J., Bauer-Mehren A., Baron M., Sanz F., Furlong L.I. DisGeNET: A discovery platform for the dynamical exploration of human diseases and their genes. *Database*, 2015, vol. 2015. <https://doi.org/10.1093/database/bav028>
- Alam M., Cevallos B., Flores O., Lunetto R., Yayoshi K., Woo J. Yelp Dataset Analysis using Scalable Big Data. *arXiv*, 2021, arXiv:2104.08396v1. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2104.08396>
- Li Y., Guo X., Lin W., Zhong M., Li Q., Liu Z., Zhong W., Zhu Z. Learning dynamic user interest sequence in knowledge graphs for click-through rate prediction. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2023, vol. 35, no. 1, pp. 647–657. <https://doi.org/10.1109/TKDE.2021.3073717>
- Kuo Y., Wang R., Liu G., Shu Z., Wang N., Zhang R., Yu J., Chen J., Li X., Zhou X. HerGePred: Heterogeneous network embedding representation for disease gene prediction. *IEEE Journal of Biomedical and Health Informatics*, 2019, vol. 23, no. 4, pp. 1805–1815. <https://doi.org/10.1109/JBHI.2018.2870728>
- Grover A., Leskovec J. node2vec: Scalable feature learning for networks. *Proc. of the KDD'16. International Conference on*

- Knowledge Discovery & Data Mining, 2016. P. 855–864. <https://doi.org/10.1145/2939672.2939754>
20. Yuxiao D., Chawla N., Swami A. metapath2vec: Scalable representation learning for heterogeneous networks // Proc. of the KDD'17. International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining, 2017. P. 135–144. <https://doi.org/10.1145/3097983.3098036>
 21. Mikolov T., Chen K., Corrado G., Dean J. Efficient estimation of word representations in vector space // Proc. of the Workshop ICLR, 2013.
 22. Perozzi B., Al-Rfou R., Skiena S. DeepWalk: Online learning of social representations // Proc. of the KDD'14. 20th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, 2014. P. 701–710. <https://doi.org/10.1145/2623330.2623732>
 23. Hu Z., Dong Y., Wang K., Sun Y. Heterogeneous graph transformer // Proc. of the WWW '20. The Web Conference, 2020. P. 2704–2710. <https://doi.org/10.1145/3366423.3380027>
 24. He M., Huang C., Liu B., Wang Y., Li J. Factor graph-aggregated heterogeneous network embedding for disease-gene association prediction // BMC Bioinformatics, 2021. V. 22. P. 165. <https://doi.org/10.1186/s12859-021-04099-3>

Авторы

Сидоренко Денис Александрович — аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, <https://orcid.org/0009-0004-0571-5192>, denisissveta@mail.ru

Шалыто Анатолий Абрамович — доктор технических наук, профессор, главный научный сотрудник, профессор, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 56131789500](https://orcid.org/0000-0002-2723-2077), <https://orcid.org/0000-0002-2723-2077>, shalyto@mail.ifmo.ru

Статья поступила в редакцию 23.04.2024
Одобрена после рецензирования 25.06.2024
Принята к печати 24.07.2024

Authors

Denis A. Sidorenko — PhD Student, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, <https://orcid.org/0009-0004-0571-5192>, denisissveta@mail.ru

Anatoly A. Shalyto — D.Sc., Full Professor, Chief Scientific Researcher, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, [sc 56131789500](https://orcid.org/0000-0002-2723-2077), <https://orcid.org/0000-0002-2723-2077>, shalyto@mail.ifmo.ru

Received 23.04.2024
Approved after reviewing 25.06.2024
Accepted 24.07.2024



Работа доступна по лицензии
Creative Commons
«Attribution-NonCommercial»

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ MODELING AND SIMULATION

doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-602-607

УДК 532.529

Компьютерное моделирование взаимодействия ударной волны со стенкой, экранированной неоднородным слоем газозвеси

Дмитрий Викторович Садин✉

Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург, 197198, Российская Федерация
sadin@yandex.ru✉, <https://orcid.org/0000-0001-5335-4847>

Аннотация

Введение. В современных технологиях пневмотранспорта, псевдооживления, напыления полимеров широко используются газодисперсные среды. Особый интерес с точки зрения динамического нагружения конструкций представляют ударно-волновые процессы в газодисперсных смесях в окрестности стенок. Использование компьютерных методов моделирования позволяет снизить временные и материальные затраты на совершенствование конструкций и оптимизацию параметров технологических процессов. **Метод.** Динамика газозвеси рассмотрена в эйлеровой двухконтинуальной формулировке. Для расчетов использован гибридный метод крупных частиц второго порядка аппроксимации с нелинейной коррекцией Superbee на эйлеровом и VanLeer на лагранжевом этапах. Алгоритм реализован в виде многопоточного кода решателя с обработкой графических результатов в отдельном параллельном процессе. **Основные результаты.** Проведено подробное численное моделирование характерных этапов взаимодействия ударной волны со стенкой, экранированной слоем мелкодисперсной газозвеси с цилиндрической областью повышенной плотности частиц. Начало процесса (до взаимодействия прошедшей в слой газозвеси плоской ударной волны с неоднородностью) носит одномерный характер. Дальнейшее развитие физической картины связано с существенной перестройкой течения. Огибающая цилиндрическую границу неоднородности ударная волна сходится к плоскости симметрии с образованием эффекта фокусировки. Вследствие бароклинной неустойчивости (несовпадения градиентов давления и плотности) на поверхности границы повышенной плотности образуется вихревая зона. Как показал детальный анализ результатов расчета, наиболее существенные (более, чем на порядок по отношению к начальному состоянию) всплески давления и плотности газозвеси вызваны взаимодействиями прошедшей в неоднородность и сфокусированной ударной волной, а затем набегающим отраженным композиционным ударно-волновым импульсом. **Обсуждение.** Полученные результаты имеют теоретическое и прикладное значения. Выявлены новые физические эффекты отражения ударной волны от стенки, экранированной слоем газозвеси с цилиндрической областью повышенной плотности дисперсной фракции. Определены причины последовательности всплесков давления и плотности смеси, которые могут приводить к воспламенению и детонации горючей дисперсной фазы. Разработанный численный алгоритм и методика компьютерного моделирования могут лежать в основе анализа ударно-волновых явлений в окрестности стенок конструкций и обоснования рациональных параметров технологических газопорошковых технологий.

Ключевые слова

компьютерное моделирование, ударная волна, стенка, неоднородный слой газозвеси

Ссылка для цитирования: Садин Д.В. Компьютерное моделирование взаимодействия ударной волны со стенкой, экранированной неоднородным слоем газозвеси // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2024. Т. 24, № 4. С. 602–607. doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-602-607

Computer simulation of the interaction between a shock wave and a wall shielded by an inhomogeneous gas suspension layer

Dmitry V. Sadin✉

Mozhaisky Military Aerospace Academy, Saint Petersburg, 197198, Russian Federation

sadin@yandex.ru✉, <https://orcid.org/0000-0001-5335-4847>

Abstract

In modern technologies of pneumatic transport, fluidization, and polymer spraying, gas-dispersed media are widely used. Of particular interest, from the point of view of dynamic loading of structures, are shock-wave processes in gas-dispersed mixtures in the vicinity of the walls. The use of computer modeling methods makes it possible to reduce time and material costs for improving designs and optimizing technological process parameters. A hybrid large-particle method of second order approximation with a nonlinear correction, Superbee at the Eulerian stage and VanLeer at the Lagrangian stage, was used for the calculations. The algorithm is implemented as multi-threaded solver code, with processing of graphical results in a separate parallel process. A detailed numerical simulation of the characteristic stages of the interaction of a shock wave with a wall shielded by a layer of finely dispersed gas suspension with a cylindrical region of increased particle density was carried out. The beginning of the process (before the interaction of a plane shock wave passing into the layer of gas suspension with inhomogeneity) is one-dimensional in nature. Further development of the physical picture is associated with a significant restructuring of the flow. The shock wave enveloping the cylindrical boundary of the inhomogeneity converges to the plane of symmetry with the formation of a focusing effect. Due to baroclinic instability (mismatch of pressure and density gradients), a vortex zone is formed on the surface of the high-density boundary. As shown by a detailed analysis of the calculation results, the most significant (more than an order of magnitude relative to the initial state) surges in pressure and density of the gas suspension are caused by the interactions of a focused shock wave that has passed into the inhomogeneity, and then an incident reflected composite shock wave pulse. The results obtained have theoretical and applied significance. New physical effects of shock wave reflection from a wall shielded by a layer of gas suspension with a cylindrical region of increased density of the dispersed fraction have been revealed. The reasons for the sequence of bursts in pressure and density of the mixture, which can lead to ignition and detonation of the combustible dispersed phase, are determined. The developed numerical algorithm and computer modeling technique can form the basis for the analysis of shock wave phenomena in the vicinity of the walls of structures and the justification of rational parameters of technological gas-powder technologies.

Keywords

computer simulation, shock wave, wall, inhomogeneous gas suspension layer

For citation: Sadin D.V. Computer simulation of the interaction between a shock wave and a wall shielded by an inhomogeneous gas suspension layer. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 4, pp. 602–607 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-602-607

Введение

Газодисперсные среды используются в промышленных установках пневмотранспорта, псевдооживления [1], аддитивных технологиях напыления полимеров [2], газопорошковых системах ликвидации пожаров [3], а также представляют практический интерес при анализе аварийных ситуаций, например, в угольных шахтах.

Кроме физических явлений, известных в «чистой» газодинамике, наличие в потоке примеси частиц в некоторых случаях может приводить к новым и иногда неочевидным эффектам. Например, в вихревых турбулентных течениях отмечена кластеризация частиц [4], экспериментально обнаружены аэродинамически стабильные когерентные структуры частиц при их радиальном расширении в спутном потоке ударной волны [5], изучены ударно-волновые эффекты на дозвуковом режиме течения несущего газа [6], отмечено резонансное увеличение скорости двухфазной среды [7], расслоение и дрейф границ раздела сред [8, 9].

Наличие неоднородных по плотности областей усложняет физическую картину и сопровождается явлениями рефракции [10], фокусировки [11], развития неустойчивости и образования вихрей [12]. Особый интерес с точки зрения динамического нагружения конструкций представляют струйные течения [6] и

ударно-волновые процессы в газодисперсных смесях в окрестности стенок [13, 14].

Предварительное моделирование взаимодействия ударной волны со стенкой, экранированной неоднородным слоем газозвеси, показало серию всплесков давления и плотности смеси. В настоящей работе выполнено подробное исследование данного явления.

Модель и метод расчета динамики газозвеси

Динамика газозвеси в двухконтинуальной формулировке [15], имеет вид:

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \nabla_d \mathbf{G} + \mathbf{B}(\nabla_d \mathbf{F}) = \mathbf{H}(\mathbf{q}), \quad (1)$$

где $\mathbf{q} = [\rho_1, \rho_2, \rho_1 \mathbf{v}_1, \rho_2 \mathbf{v}_2, \rho_2 e_2, \rho_1 E_1 + \rho_2 K_2]^T$, $\rho_i = \rho_i^\circ \alpha_i$ ($i = 1, 2$), нижние индексы 1 и 2 — величины, относящиеся к газу и дисперсной фазе; верхний индекс «°» — обозначение истинного значения плотности, $\rho = \rho_1 + \rho_2$, $E_1 = e_1 + \mathbf{v}_1^2/2$, $K_2 = \mathbf{v}_2^2/2$, параметры α_i , ρ_i , $\mathbf{v}_i$, E_i , e_i и p — объемная доля, приведенная плотность, вектор скорости с проекциями u_i и v_i , полная и внутренняя энергии единицы массы i -ой фазы, давление газа; $\mathbf{G} = [\rho_1 \mathbf{v}_1, \rho_2 \mathbf{v}_2, \rho_1 \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1, \rho_2 \mathbf{v}_2 \mathbf{v}_2, \rho_2 e_2 \mathbf{v}_2, \rho_1 E_1 \mathbf{v}_1 + \rho_2 K_2 \mathbf{v}_2]^T$; $\mathbf{F} = [0, 0, p, p, 0, p(\alpha_1 \mathbf{v}_1 + \alpha_2 \mathbf{v}_2)]^T$; $\mathbf{H} = [0, 0, -\mathbf{F}_\mu, \mathbf{F}_\mu, Q_T, -Q_T]^T$; $\nabla_d = \text{diag}(\nabla, \nabla, \nabla, \nabla, \nabla, \nabla)$; $\mathbf{B} = \text{diag}[1, 1, \alpha_1, \alpha_2, 1, 1]$; ∇ — оператор набла (Гамильтона); $\mathbf{F}_\mu$ и Q_T — вязкая

составляющая силы межфазного трения и теплообмена в единице объема; t — время.

Дополнительными соотношениями являются уравнения состояния идеального калорически совершенного газа и несжимаемых твердых монокристаллических частиц: $p = (\gamma_1 - 1)\rho_1^0 e_1$, $e_1 = c_v T_1$, $e_2 = c_2 T_2$, $\{\gamma_1, c_v, c_2, \rho_2^0\} \equiv \text{const}$, где T_1 и T_2 — температуры несущей фазы и частиц; γ_1 и c_v — показатель адиабаты и удельная теплоемкость газа при постоянном объеме; c_2 — удельная теплоемкость частиц. Интенсивности межфазного трения и теплообмена F_μ , Q_T заданы на основе критериальных соотношений [15].

Для расчетов использован гибридный метод крупных частиц второго порядка аппроксимации [16] с нелинейной коррекцией Superbee на эйлеровом и VanLeer на лагранжевом этапах [17]¹. Алгоритм реализован на языке Object Pascal (компилятор FPC 3.2.2, лицензия GPL/LGPL) в виде многопоточного кода решателя с обработкой графических результатов в отдельном параллельном процессе.

Постановка задачи

В ограниченном с трех сторон объеме (рис. 1) в направлении правой стенки по покоящемуся воздуху 0 движется плоская ударная волна 1 с числом Маха 1,5. На ее пути расположен слой мелкодисперсной газозвеси 2 толщиной $0,5L$ с цилиндрической неоднородностью 3 диаметром $D = 0,25L$ с повышенной концентрацией частиц.

Начальные параметры газа и взвеси в рассматриваемых областях (рис. 1) представлены в таблице. Исходное состояние смеси газа и частиц в областях 2 и 3 — равновесное. Параметры за ударной волной в зоне 1 определены из аналитических соотношений Рэнкина–Гюгонио при заданном числе Маха 1,5 (до четырех значащих цифр). Для однородности вычислений в областях чистого газа 0 и 1 задана пренебрежимо малая концентрация дисперсной фазы $\alpha_2 = 10^{-10}$.

Газозвесь содержала монокристаллические частицы диаметром $d = 0,1$ мкм, плотностью $\rho_2^0 = 2500$ кг/м³ и теплоемкостью частиц — $c_2 = 710$ Дж/(кг·К). Воздух принят калорически совершенным газом с показателем адиабаты $\gamma_1 = 1,4$ и газовой постоянной $R_1 = 287$ Дж/(кг·К). Геометрия задачи определена одним параметром $L = 0,8$ м.

Краевые условия заданы в виде условий непротекания на стенках, а входные — на левой границе расчетной области — параметры за падающей ударной волной. В расчетной области, обозначенной штриховой линией (рис. 1), введена неравномерная сетка, исключая искажение исследуемого численного решения. В зоне $L \times L$ использована равномерная декартова расчетная сетка с детализацией 1600×800 до оси симметрии. Расчеты выполнены с числом Куранта CFL = 0,4.

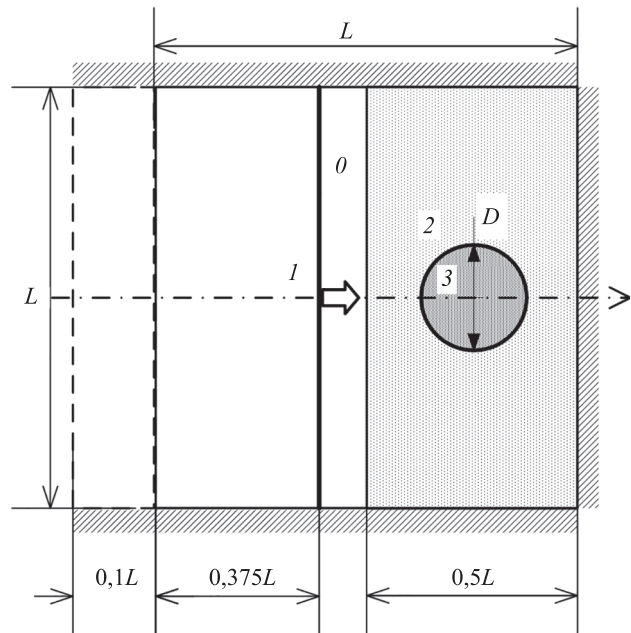


Рис. 1. Схема задачи: 0 — невозмущенный газ; 1 — ударная волна; 2 — слой газозвеси; 3 — цилиндрическая неоднородность повышенной плотности

Fig. 1. Problem diagram: 0 — undisturbed gas; 1 — shock wave; 2 — layer of gas suspension; 3 — cylindrical heterogeneity of increased density

Таблица. Начальные условия

Table. Initial conditions

Область	α_2	p , МПа	$T_1 = T_2$, К	$u_1 = u_2$, м/с
0	10^{-10}	0,1000	293,0	0
1	10^{-10}	0,2458	386,8	238,3
2	10^{-3}	0,1000	293,0	0
3	10^{-2}	0,1000	293,0	0

Результаты компьютерного моделирования

Эволюция взаимодействия падающей ударной волны с мелкодисперсным слоем газозвеси, экранирующей стенку показана на рис. 2. Результаты компьютерного моделирования представлены в виде численных шлирен-изображений функции градиента плотности смеси $\nabla(\rho/\rho^{(1)})$ с использованием техники описанной в работе [18]. На рис. 2 добавлены фрагменты профилей плотности $\rho/\rho^{(1)}$ в плоскости симметрии. В начальный момент времени $t = 0$ ограниченный слой и цилиндрическая неоднородность повышенной плотности находятся в равновесном неподвижном состоянии (рис. 2, a , где c_1 и c_2 — границы раздела сред).

После прихода фронта ударной волны на левую границу газозвеси c_1 возникает одномерный распад разрыва с образованием отраженного и прошедшего в слой скачков уплотнения, который затем взаимодействует с цилиндрической областью повышенной плотности. Далее картина течения приобретает двумерный характер и формируется сложная структура. Ударно-волновая конфигурация в момент времени $t = 1,07$ мс отображена на рис. 2, b .

¹ В работе [17, с. 787] допущена опечатка: в формуле ограничителя Super-C вместо «0,4» должно быть значение «0».

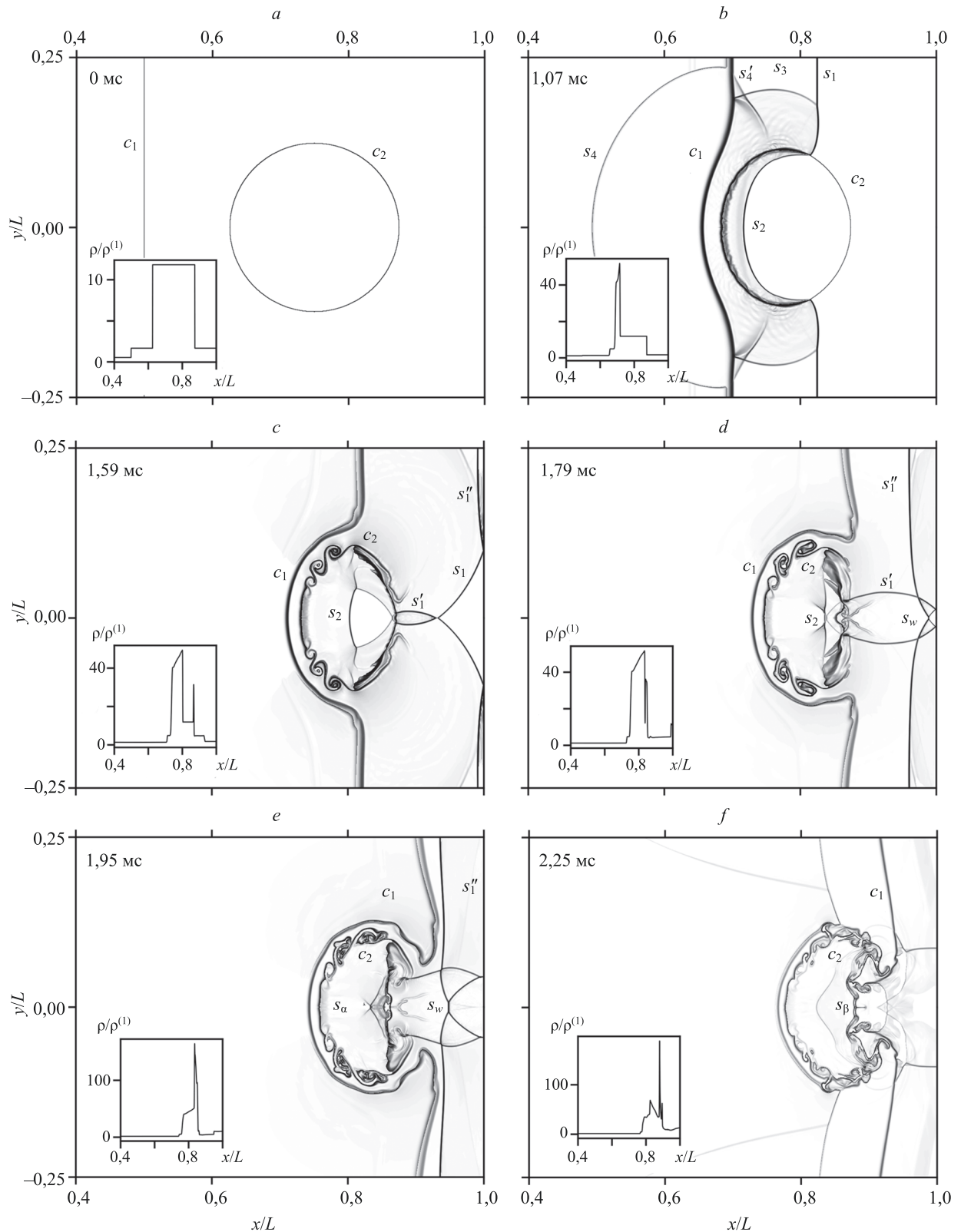


Рис. 2. Численные шlieren-изображения функции градиента плотности смеси и фрагменты профилей плотности в плоскости симметрии.

c_1, c_2 — границы раздела сред; r — волна разрежения; $s_1, s_2, \dots$ — ударные волны; s_w, s_a, s_β — композиционные ударно-волновые импульсы

Fig. 2. Numerical Schlieren images of the mixture density gradient function and fragments of density profiles in the symmetry plane.

Interface boundaries — c_1, c_2 ; rarefaction wave — r ; shock waves — $s_1, s_2, \dots$; compositional shock wave pulses — s_w, s_a, s_β

Ударно-волновая конфигурация включает отраженную от поверхности газозвеси c_1 волну разрежения r и ударные волны: прошедшую в слой s_1 и неоднородность s_2 , отраженные от него в слое s_3 и газе s_4 . Поскольку отраженные волны s_3 и s_4 движутся с различными скоростями, то образуется предвестник s'_4 . Плотность смеси возрастает примерно в 4 раза (рис. 2, *b*).

Огибающая цилиндрическую границу неоднородности ударная s_1 сходится к плоскости симметрии. На рис. 2, *c* ($t = 1,59$ мс) показан момент ее фокусировки s'_1 и отражения от стенки s'_1 . Вследствие бароклинической неустойчивости (несовпадения градиентов давления и плотности) на поверхности границы повышенной плотности c_2 образуется вихревая зона.

В момент времени $t = 1,79$ мс (рис. 2, *d*) формируется ударно-волновой импульс s_w как композиция сфокусированной и отраженных от стенки ударных волн, который движется навстречу неоднородности c_2 . Затем при $t = 1,95$ мс происходит всплеск плотности s_α , вызванный взаимодействием прошедшей в неоднородность s_2 и сфокусированной s'_1 ударных волн (рис. 2, *e*). Скачок плотности еще большей интенсивности s_β (более, чем на порядок по отношению к начальному значению) возникает в момент времени $t = 2,25$ мс, когда отраженный от стенки композиционный ударно-вол-

новой импульс s_w набегают на зону всплеска плотности s_α (рис. 2, *f*). Последовательности всплесков давления и плотности смеси могут приводить к воспламенению и детонации горючей дисперсной фазы.

Заключение

Проведено численное моделирование взаимодействия ударной волны со стенкой, экранированной слоем газозвеси с цилиндрической областью повышенной плотности. Показана существенная перестройка течения с формированием дифракции, прошедшей в слой ударной волны, ее фокусировки, образования, отраженного от стенки и сфокусированного композиционного ударно-волнового импульса. Бароклиническая неустойчивость на поверхности неоднородности повышенной плотности является причиной образования вихревой зоны. Как показал детальный анализ, наиболее существенные (более чем на порядок по отношению к начальному состоянию) всплески давления и плотности газозвеси вызваны взаимодействиями прошедшей в неоднородность и сфокусированной ударными волнами, а затем набегающим отраженным композиционным ударно-волновым импульсом.

Литература

- Da Calva Mouillevois T., Audren-Paul M., Chollon G., Bertrand N. Fluidization of variable short fiber/powder mixtures: hydrodynamic investigation // *Chemical Engineering Journal*. 2023. V. 471. P. 144846. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2023.144846>
- Губайдуллин Д.А., Федяев В.Л., Моренко И.В. Математическое моделирование неизоэнтальпических процессов струйного напыления полимерных порошковых композиций и формирования защитных покрытий // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*. 2016. Т. 17. № 4. С. 3.
- Зуев Ю.В., Лепешинский И.А., Решетников В.А., Истомин Е.А. Особенности двухфазных струй с большой концентрацией дисперсной фазы // *Математическое моделирование*. 2012. Т. 24. № 1. С. 129–142.
- Emelyanov V.N., Volkov K.N. Direct numerical simulation of fully developed turbulent gas–particle flow in a duct // *Russian Journal of Nonlinear Dynamics*. 2022. V. 18. N 3. P. 379–395. <https://doi.org/10.20537/nd220304>
- Frost D.L., Grégoire Y., Petel O., Goroshin S., Zhang F. Particle jet formation during explosive dispersal of solid particles // *Physics of Fluids*. 2012. V. 24. N 9. P. 091109. <https://doi.org/10.1063/1.4751876>
- Садин Д.В., Любарский С.Д., Гравченко Ю.А. Особенности недорасширенной импульсной ударной газодисперсной струи с высокой концентрацией частиц // *Журнал технической физики*. 2017. Т. 87. № 1. С. 22–26. <https://doi.org/10.21883/jtf.2017.01.44013.1809>
- Shirokova E.N. Numerical study of a pulsed jet flow of an inhomogeneous gas-dispersed mixture // *Fluid Dynamics*. 2023. V. 58. N 8. P. 1594–1601. <https://doi.org/10.1134/s0015462823602590>
- Губайдуллин Д.А., Осипов П.П., Альмакаев И.М. Моделирование дрейфа мелкодисперсных частиц в акустическом резонаторе с помощью пакета CFD // *Известия вузов. Проблемы энергетики*. 2017. Т. 19. № 9–10. С. 112–121. <https://doi.org/10.30724/1998-9903-2017-19-9-10-112-121>
- Садин Д.В. Численное и аналитическое исследование разлета газозвеси в закрытой ударной трубе // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2021. Т. 14. № 4. С. 40–49. <https://doi.org/10.18721/JPM.14403>
- Булут П.В., Волков К.Н. Численное моделирование рефракции ударной волны на наклонном контактно-разрыве // *Научно-технический вестник информационных технологий, механики и*

References

- Da Calva Mouillevois T., Audren-Paul M., Chollon G., Bertrand N. Fluidization of variable short fiber/powder mixtures: hydrodynamic investigation. *Chemical Engineering Journal*, 2023, vol. 471, pp. 144846. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2023.144846>
- Gubaidullin D.A., Fedyaev V.L., Morenko I.V. Mathematical modeling of non-isothermal process of the jet spraying of powder polymeric compositions and the formation of protective coatings. *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2016, vol. 17, no. 4, pp. 3. (in Russian)
- Zuev Yu.V., Lepeshinsky I.A., Reshetnikov V.A., Istomin E.A. Features of two-phase jets with big concentration of the disperse phase. *Matematicheskoe modelirovanie*, 2012, vol. 24, no. 1, pp. 129–142. (in Russian)
- Emelyanov V.N., Volkov K.N. Direct numerical simulation of fully developed turbulent gas–particle flow in a duct. *Russian Journal of Nonlinear Dynamics*, 2022, vol. 18, no. 3, pp. 379–395. <https://doi.org/10.20537/nd220304>
- Frost D.L., Grégoire Y., Petel O., Goroshin S., Zhang F. Particle jet formation during explosive dispersal of solid particles. *Physics of Fluids*, 2012, vol. 24, no. 9, pp. 091109. <https://doi.org/10.1063/1.4751876>
- Sadin D.V., Lyubarskii S.D., Gravchenko Yu.A. Features of an underexpanded pulsed impact gas-dispersed jet with a high particle concentration. *Technical Physics*, 2017, vol. 626 no. 1, pp. 18–23. <https://doi.org/10.1134/s1063784217010194>
- Shirokova E.N. Numerical study of a pulsed jet flow of an inhomogeneous gas-dispersed mixture. *Fluid Dynamics*, 2023, vol. 58, no. 8, pp. 1594–1601. <https://doi.org/10.1134/s0015462823602590>
- Gubaidullin D.A., Osipov P.P., Almakaev I.M. Modeling of the fine particles drift in acoustic resonator using CFD-package. *Power Engineering: Research, Equipment, Technology*, 2017, vol. 19, no. 9–10, pp. 112–121. (in Russian). <https://doi.org/10.30724/1998-9903-2017-19-9-10-112-121>
- Sadin D.V. Numerical and analytical study of gas suspension expansion in a closed shock tube. *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematic*, 2021, vol. 14, no. 4, pp. 40–49. <https://doi.org/10.18721/JPM.14403>
- Bulat P.V., Volkov K.N. Numerical simulation of shock wave refraction on inclined contact discontinuity. *Scientific and Technical*

- оптики. 2016. Т. 16. № 3. С. 550–558. <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2016-16-3-550-558>
11. Георгиевский П.Ю., Левин В.А., Сутырин О.Г. Фокусировка ударной волны при взаимодействии ударной волны с цилиндрическим облаком пыли // Письма в Журнал технической физики. 2016. Т. 42. № 18. С. 17–24.
 12. Садин Д.В., Давидчук В.А. Взаимодействие плоской ударной волны с областями различной формы и плотности в мелкодисперсной газозвеси // Инженерно-физический журнал. 2020. Т. 93. № 2. С. 489–498.
 13. Болдырева О.Ю., Губайдуллин А.А., Дудко Д.Н., Кутушев А.Г. Численное исследование передачи ударно-волновой нагрузки экранируемой плоской стенке через слой порошкообразной среды и разделяющий их воздушный зазор // Физика горения и взрыва. 2007. Т. 43. № 1. С. 132–142.
 14. Садин Д.В., Широкова Е.Н. Точное решение задачи отражения ударной волны от стенки, экранированной слоем газозвеси // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23. № 4. С. 843–849. <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-4-843-849>
 15. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. Ч. 1. М.: Наука, 1987. 464 с.
 16. Садин Д.В. Эффективная реализация гибридного метода крупных частиц // Математическое моделирование. 2022. Т. 34. № 4. С. 113–127. <https://doi.org/10.20948/mm-2022-04-08>
 17. Садин Д.В. Управление численной диссипацией гибридного метода крупных частиц в задачах с вихревой неустойчивостью // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22. № 4. С. 785–791. <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2022-22-4-785-791>
 18. Quirk J.J., Karni S. On the dynamics of a shock-bubble interaction // Journal of Fluid Mechanics. 1996. V. 318. P. 129–163. <https://doi.org/10.1017/s0022112096007069>
 - Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2016, vol. 16, no. 3, pp. 550–558. (in Russian). <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2016-16-3-550-558>
 11. Georgievskiy P.Yu., Levin V.A., Sutyurin O.G. Shock focusing upon interaction of a shock with a cylindrical dust cloud. *Technical Physics Letters*, 2016, vol. 42, no. 9, pp. 936–939. <https://doi.org/10.1134/S1063785016090182>
 12. Sadin D.V., Davidchuk V.A. Interaction of a plane shock wave with regions of varying shape and density in a finely divided gas suspension. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 2020, vol. 93, no. 2, pp. 474–483. <https://doi.org/10.1007/s10891-020-02143-2>
 13. Boldyreva O.Y., Gubaidullin A.A., Dudko D.N., Kutushev A.G. Numerical study of the transfer of shock-wave loading to a screened flat wall through a layer of a powdered medium and a subsequent air gap. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2007, vol. 43, no. 1, pp. 114–123. <https://doi.org/10.1007/s10573-007-0016-3>
 14. Sadin D.V., Shirokova E.N. The exact solution of a shock wave reflection problem from a wall shielded by a gas suspension layer. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 4, pp. 843–849. (in Russian). <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-4-843-849>
 15. Nigmatulin R.I. *Dynamics of Multiphase Media. V. 1*. New York, USA, Hemisphere Publ. Corp., 1990, 507 p.
 16. Sadin D.V. Efficient Implementation of the hybrid large particle method. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2022, vol. 14, no. 6, pp. 946–954. <https://doi.org/10.1134/S207004822206014X>
 17. Sadin D.V. Numerical dissipation control of a hybrid large-particle method in vortex instability problems. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 4, pp. 785–791. (in Russian). <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2022-22-4-785-791>
 18. Quirk J.J., Karni S. On the dynamics of a shock-bubble interaction. *Journal of Fluid Mechanics*, 1996, vol. 318, pp. 129–163. <https://doi.org/10.1017/s0022112096007069>

Автор

Садин Дмитрий Викторович — доктор технических наук, профессор, профессор, Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург, 197198, Российская Федерация, [sc 6602924618](https://orcid.org/0000-0001-5335-4847), <https://orcid.org/0000-0001-5335-4847>, sadin@yandex.ru

Author

Dmitry V. Sadin — D.Sc., Full Professor, Mozhaisky Military Aerospace Academy, Saint Petersburg, 197198, Russian Federation, [sc 6602924618](https://orcid.org/0000-0001-5335-4847), [https://orcid.org/0000-0001-5335-4847](mailto:sadin@yandex.ru), sadin@yandex.ru

Статья поступила в редакцию 23.04.2024
Одобрена после рецензирования 29.05.2024
Принята к печати 18.07.2024

Received 23.04.2024
Approved after reviewing 29.05.2024
Accepted 18.07.2024



Работа доступна по лицензии
Creative Commons
«Attribution-NonCommercial»

doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-608-614

УДК 519.226.3

Моделирование многомерных данных с помощью композитных байесовских сетей

Ирина Юрьевна Деева¹, Каринэ Артуровна Шахкян^{2✉}, Юрий Константинович Каминский³

^{1,2,3} Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

¹ iriny.deeva@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-8679-5868>

² kshahkyan@yandex.ru✉, <https://orcid.org/0009-0003-2606-431X>

³ jkaminski@niuitmo.ru, <https://orcid.org/0009-0006-6418-6117>

Аннотация

Введение. Представлен новый подход к моделированию нелинейных зависимостей, названный композитными байесовскими сетями. Основной акцент сделан на интеграции моделей машинного обучения в байесовские сети с сохранением их основополагающих принципов. Новизна предложенного подхода состоит в том, что он позволяет решить проблему несоответствия данных традиционным предположениям о зависимостях.

Метод. Представленный подход заключается в подборе разнообразных моделей машинного обучения на этапе обучения композитных байесовских сетей. Это позволяет гибко настраивать характер зависимостей в соответствии с требованиями и продиктованными характеристиками моделируемого объекта. Программная реализация подхода выполнена в виде специализированного фреймворка, описывающего все необходимые функциональные возможности. **Основные результаты.** Проведена экспериментальная оценка эффективности моделирования зависимостей между признаками. Для экспериментов выбраны для бенчмарков и из репозитория UCI для реальных данных. Эффективность предложенных композитных байесовских сетей подтверждена сравнением значений правдоподобия и показателя F1 с классическими байесовскими сетями, обученными алгоритмом Hill-Climbing. Показана высокая точность представления многомерных распределений. При этом на бенчмарках улучшение оказалось незначительным, поскольку они содержат линейные зависимости, которые хорошо моделируются классическими алгоритмами. На реальных наборах данных UCI получено улучшение правдоподобия в среднем на 30 %. **Обсуждение.** Полученные результаты могут найти применение в областях, требующих моделирования сложных зависимостей между признаками, например, в машинном обучении, статистике, задачах анализа данных, а также в конкретных предметных областях.

Ключевые слова

байесовские сети, вероятностные графовые модели, обучение параметров, модели машинного обучения, генетический алгоритм

Благодарности

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FSER-2024-0004).

Ссылка для цитирования: Деева И.Ю., Шахкян К.А., Каминский Ю.К. Моделирование многомерных данных с помощью композитных байесовских сетей // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2024. Т. 24, № 4. С. 608–614. doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-608-614

Flexible and tractable modeling of multivariate data using composite Bayesian networks

Irina Yu. Deeva¹, Karine A. Shakhkhan^{2✉}, Yuri K. Kaminsky³

^{1,2,3} ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

¹ iriny.deeva@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-8679-5868>

² kshahkyan@yandex.ru✉, <https://orcid.org/0009-0003-2606-431X>

³ jkaminski@niuitmo.ru, <https://orcid.org/0009-0006-6418-6117>

© Деева И.Ю., Шахкян К.А., Каминский Ю.К., 2024

Abstract

The article presents a new approach to modeling nonlinear dependencies called composite Bayesian networks. The main emphasis is on integrating machine learning models into Bayesian networks while maintaining their fundamental principles. The novelty of the approach is that it allows us to solve the problem of data inconsistency with traditional assumptions about dependencies. The presented method consists in selecting a variety of machine learning models at the stage of training composite Bayesian networks. This allows you to flexibly customize the nature of the dependencies in accordance with the requirements and dictated characteristics of the modeled object. The software implementation is made in the form of a specialized framework that describes all the necessary functionality. The results of experiments to evaluate the effectiveness of modeling dependencies between features are presented. Data for the experiments was taken from the blearn repository for benchmarks and from the UCI repository for real data. The performance of composite Bayesian networks was validated by comparing the likelihood and F1 score with classical Bayesian networks trained with the Hill-Climbing algorithm, demonstrating high accuracy in representing multivariate distributions. The improvement in benchmarks is insignificant since they contain linear dependencies that are well modeled by the classical algorithm. An average 30 % improvement in likelihood was obtained on real UCI datasets. The obtained data can be applied in areas that require modeling complex dependencies between features, for example, in machine learning, statistics, data analysis, as well as in specific subject areas.

Keywords

Bayesian networks, probabilistic graph models, parameter learning, machine learning models, genetic algorithm

Acknowledgements

The research was carried out within the state assignment of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (project No. FSER-2024-0004).

For citation: Deeva I.Yu., Shakhkhan K.A., Kaminsky Yu.K. Flexible and tractable modeling of multivariate data using composite Bayesian networks. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 4, pp. 608–614 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-608-614

Введение

Современные методологии искусственного интеллекта конкурируют с традиционными моделями, включая байесовские сети, которые используются для представления данных через условные распределения, определяемые направленными ациклическими графами [1]. В работе [1] рассмотрены ограничения классических байесовских сетей: гибкость (несоответствие между данными и предположениями о характере зависимости данных); контролируемость (невозможность влиять на зависимости в условных распределениях); неэффективное представление параметров распределения, часто связанное с большими таблицами условных вероятностей [2, 3]. В настоящей работе представлен новый подход — композитные байесовские сети (КБС), которые расширяют классические модели, сохраняя их достоинства и добавляя возможность моделировать все параметры с помощью методов машинного обучения. Пример такой КБС показан на рис. 1.

Большинство байесовских сетей, описанных в тематических научных работах, относятся к категории параметрических моделей, т. е. они строятся с использованием параметрических условных распределений вероятностей с фиксированным числом параметров. Среди них наиболее распространены дискретные байесовские сети, специально разработанные для моделирования дискретных признаков [4]. В то же время гауссовские байесовские сети представляют собой отдельный подтип, специально разработанный для применения в непрерывных байесовских сетях. В гауссовских байесовских сетях каждый узел использует линейные гауссовские условные распределения вероятностей [5].

Гибридные байесовские сети могут моделировать как дискретные, так и непрерывные признаки. Одним из наиболее известных типов таких сетей является

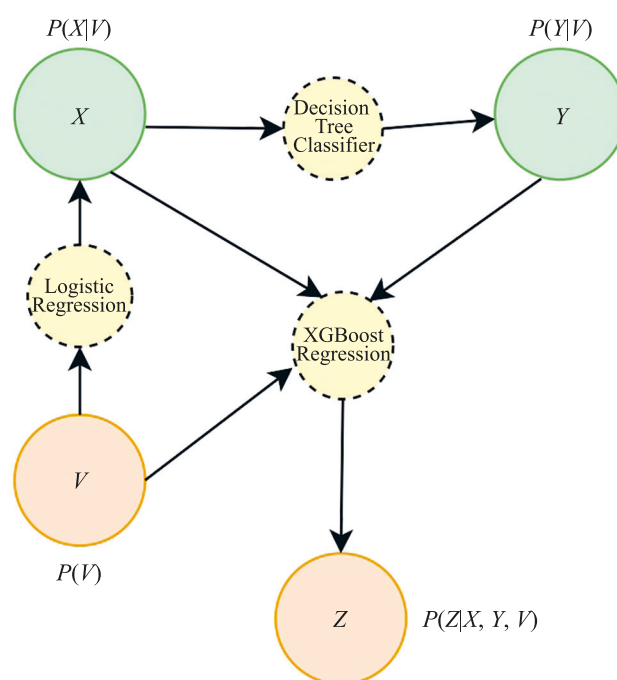


Рис. 1. Пример композитной байесовской сети.

Зеленые узлы — дискретные признаки, оранжевые — непрерывные признаки, желтые — модели, используемые для моделирования параметров условных распределений; X, Y, V, Z — узлы байесовской сети; P — вероятность; Decision Tree Classifier — классификатор дерева решений; Logistic Regression — логистическая регрессия; XGBoost Regression — XGBoost перрессия

Fig. 1. An example of a composite Bayesian network.

Green nodes are discrete features, orange nodes are continuous features, yellow nodes are models used to model the parameters of conditional distributions; X, Y, V, Z — Bayesian network nodes; P — probability

условная линейная гауссовская байесовская сеть [6]. В этой модели дискретные переменные представлены таблицами условных вероятностей, а непрерывные — линейными гауссовскими распределениями.

Исследователи также указывают на ограничения байесовских сетей, связанные с гибкостью, контролируемостью и большими таблицами условных вероятностей. Например, непараметрические байесовские сети используют оценку плотности ядра для моделирования условных распределений [7, 8], обеспечивая заметную гибкость. Однако вычислительные требования для непараметрической оценки могут быть значительными, что требует дополнительных процедур для обучения параметра сглаживания. Существуют и параметрические решения, включающие использование смесей гауссовых распределений [9] или смесей усеченных базисных функций [10]. Тем не менее, эти методы затрачивают слишком много времени. Чтобы упростить параметрическое обучение, некоторые ученые выступают за использование полупараметрических моделей [11], в которых только определенные узлы представлены в виде непараметрических моделей. Такой подход значительно сокращает время обучения и семплирования, но не решает проблему, связанную с хранением больших таблиц условных вероятностей для дискретных распределений. Для решения подобных задач также используются каузальные модели, которые описывают причинно-следственные отношения между признаками [12]. Связи в таких моделях моделируются с помощью предиктивной модели с добавлением случайного шума. Однако каузальные модели могут быть чувствительны к выбросам, в то время как КБС более устойчивы к выбросам и имеют вероятностный подход.

Новизна настоящей работы включает следующие аспекты: КБС, объединяющие полезные свойства моделей машинного обучения и классических вероятностных моделей; представление алгоритма для автоматического выбора моделей машинного обучения с помощью эволюционной оптимизации; процедуру семплирования, адаптированную для КБС; разработку программного обеспечения в виде комплексной структуры для изучения и применения КБС на различных типах данных, включая непрерывные, дискретные и смешанные данные. Эффективность предложенного метода, который устраняет вышеупомянутые ограничения, подтверждается экспериментальными результатами.

Постановка проблемы

В основе байесовских сетей лежит направленный ациклический граф, который задается как $G = \{V, E\}$. Однако в предлагаемой композитной формулировке эта структура дополнена дополнительной категорией вершин M и задается как $G = \{V, E, M\}$. В данном контексте V — набор узлов-признаков, в которых моделируются распределения вероятностей, M — набор узлов-моделей, представляющих модели машинного обучения, которые устанавливают связи с узлами-признаками, а E — набор направленных ребер. Процесс

обучения КБС формулируется как оптимизационная задача с функцией оценки F , в виде:

$$M_{opt}, E_{opt} = \operatorname{argmax}_{M, E} F(G).$$

Предлагаемый подход. В контексте КБС модели машинного обучения играют ключевую роль в вычислении параметров условных распределений, выраженных в виде $\Theta_{V_{child}|V_{parent}} = M(V_{parent})$, где V_{child} — узел дочернего признака; V_{parent} — узел родительского признака. Отметим, что Θ — параметры распределения в узле-признаке. Массив потенциальных моделей машинного обучения зависит от типов узлов-признаков, интегрированных в модель. Эти узлы могут принимать непрерывную и дискретную формы, что зависит от характеристик, присущих моделируемому признаку. Например, если два признака являются непрерывными, они могут быть связаны между собой в рамках любой модели машинного обучения, способной решить задачу регрессии. Рассчитаем параметры условного непрерывного распределения для связи между узлами X и Y , сформулированной как $X \rightarrow m \rightarrow Y$:

$$\mu_{Y|X} = m(x), \operatorname{var}_{Y|X} = (m(x) - y)^2.$$

Аналогично вычислениям параметров условных распределений получим общий вид функции оценки:

$$F(G) = \sum_{i=1}^n LL(\theta_i | v_i) + \sum_{j=1}^k LL(m_j(v_{parents_j}) | v_j), \quad (1)$$

где LL — лог-правдоподобие; n — количество узлов без родителей; θ — параметры распределения в узлах без родителей (маргинальные узлы); k — количество узлов с родителями; m — узел модели машинного обучения.

Ядро алгоритма

Для решения задачи структурного и параметрического обучения КБС в качестве стратегии оптимизации используем эволюционный алгоритм. Эволюционные алгоритмы, которые часто применяются для решения подобных задач, могут быть подходящим алгоритмом оптимизации, однако успешность результата во многом зависит от заданных генетических операторов и других параметров [13]. В данной постановке необходимо задать правила редактирования ребер графа. Редактирование ребер требует трех различных спецификаций: структуры (изменение направлений ребер графа); моделей (изменение модели); гибридное (изменение структуры и модели).

Исходя из характера моделируемых признаков, выберем набор допустимых моделей машинного обучения. Эта начальная спецификация позволяет накладывать ограничения, например, использовать монотонно возрастающие модели в соответствии с требованиями области. Такая *управляемость* полезна для работы с теми областями, где зависимости известны. Далее определим правила проверки валидности моделей, включая отсутствие циклов и уникальность признаков.

Для оптимизации опишем специальные правила редактирования моделей. Критерием завершения работы

алгоритма является стабилизация значения функции оценки. Функция оценки в формуле (1) использована в качестве метрики. После окончания подготовки началась процесс оптимизации графа, включая итеративную оценку параметров распределений в узлах-признаках для вычисления функции оценки.

Дополнительно, в рамках разработанных алгоритмов, представлен алгоритм семплирования для КБС (рис. 2). Этот алгоритм, который называется предковым семплированием от корней к листьям, разработан для работы в рамках установленной структуры. При наличии наблюдаемых признаков в родительских узлах алгоритм использует модель машинного обучения, связывающую родительские и дочерние узлы, для предсказания параметров условного распределения. Для непрерывных узлов это среднее значение, а для дискретных — вычисляются условные вероятности. Затем, используя предсказанные параметры условного распределения, алгоритм выполняет семплирование. Для непрерывных узлов используются гауссовские распределения, а для дискретных — мультиномиальные.

Программная реализация

Предложенный алгоритм, предназначенный для оптимизации композитных моделей, интегрирован в более крупный фреймворк с открытым исходным ко-

дом BAMT¹ для моделирования байесовских сетей. Алгоритм разработан с особой точностью, обеспечивая легкое слияние процесса оптимизации с существующими компонентами фреймворка.

В рамках фреймворка BAMT генетический алгоритм использует ряд сложных операций — от кроссоверов, позволяющих обменивать родительские узлы-модели между композитными структурами, до мутаций, которые облегчают добавление, удаление и изменение структур, а также встраивание новых моделей. Эти операции были оптимизированы для обеспечения эффективности и точности, гарантируя, что композитные модели эволюционируют в направлении наилучшей возможной конфигурации для любого набора данных.

Важнейшим элементом эволюционной оптимизации в рамках BAMT является фреймворк GOLEM. Разработанный в лаборатории композитного искусственного интеллекта Университета ИТМО GOLEM² служит основой, обрабатывая генетические операции и обеспечивая правильную оптимизацию композитных моделей.

¹ [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://github.com/aimclub/BAMT> (дата обращения: 03.05.2024).

² [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://github.com/aimclub/GOLEM> (дата обращения: 03.05.2024).

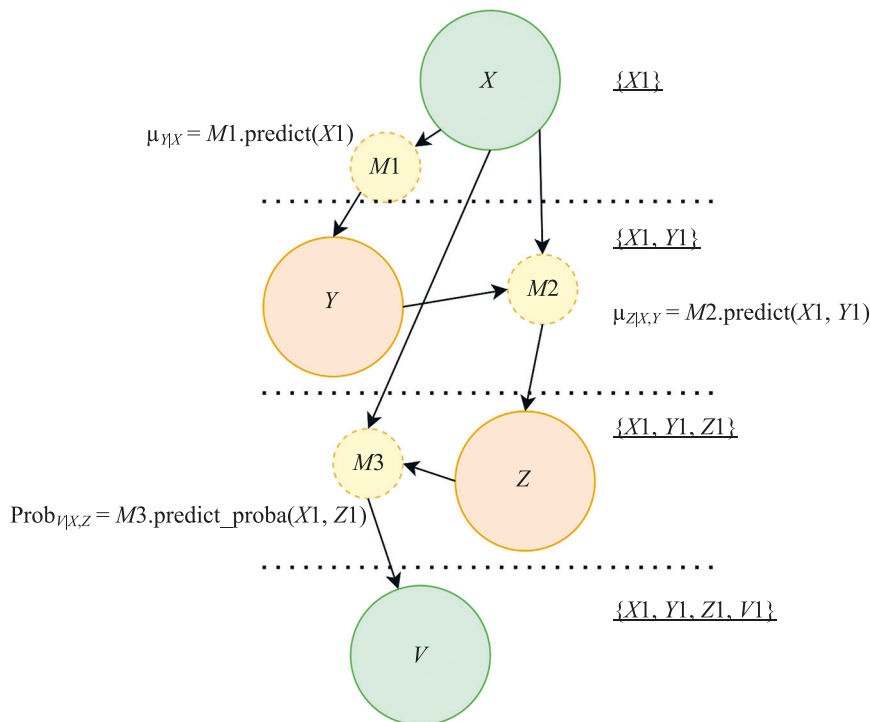


Рис. 2. Схема процесса вероятностного вывода для композитной байесовской сети.

Зеленые узлы — дискретные признаки, оранжевые — непрерывные признаки, желтые — модели, используемые для моделирования параметров условных распределений; $X1, Y1, V1, Z1$ — семплированные значения узлов байесовской сети X, Y, V, Z соответственно; $M1, M2, M3$ — модели машинного обучения

Fig. 2. Schematic illustration of the probabilistic inference process for a composite Bayesian network.

Green nodes are discrete features, orange nodes are continuous features, yellow nodes are models used to model the parameters of conditional distributions; $X1, Y1, V1, Z1$ — sampled values of Bayesian network nodes X, Y, V, Z , respectively; $M1, M2, M3$ — machine learning models

Одной из наиболее примечательных особенностей наших композитных моделей является эффективность использования памяти. Например, КБС из 8 узлов на основе набора данных Asia, сохраненная в формате JSON, занимает в четыре раза меньше места, чем классическая байесовская сеть. Такая разница в объеме памяти впечатляет не только для небольших сетей, но становится значительно более заметной для больших сетей, особенно для тех, которые работают со смешанными данными.

Примеры и экспериментальные исследования

Экспериментальные исследования КБС выполнены на двух наборах данных. Бенчмарки из репозитория bnlearn¹ и реальные наборы данных из репозитория UCI². Проведено сравнение результатов эксперимента с классическим подходом, когда для обучения структуры используется алгоритм Hill-Climbing [14] с функцией K2, а все распределения представлены одинаково, с помощью линейных зависимостей или таблиц условных вероятностей (HCbn) [15]. Результаты сравнивались с позиций качества структурного и параметрического обучений. Для измерения качества структурного обучения использован показатель F1 между эталонной и полученной структурами (чем F1 выше, тем более похожа полученная структура на эталонную). Для измерения качества параметрического обучения вычислено правдоподобие на тестовом наборе данных.

Алгоритм обучения КБС предлагает три режима работы. В первом режиме (одновременное обучение) структура и параметры в виде моделей машинного обучения подбираются одновременно с помощью методов эволюционной оптимизации (compositeGA). Второй режим (многокритериальное обучение) предполагает выбор структуры на основе определенного структурного критерия (например, K2 [16]), в то время как модели машинного обучения выбираются в соответствии с формулой (1) (multiGA). Во втором режиме целью является определение оптимального решения

на фронте Парето. Третий режим (последовательное обучение) использует пошаговый подход. Сначала обучается структура — обычно это делается с помощью алгоритмов типа Hill-Climbing, а затем выбираются модели машинного обучения (seqGA).

Для работы генетического алгоритма необходимо задать его гиперпараметры: количество индивидов — 20; количество поколений — 1000 (большое значение, чтобы алгоритм сошелся); вероятность мутации — 0,9; вероятность кроссовера — 0,8; критерий остановки — нет улучшений метрики в течение 10 поколений; тайм-аут — 15 мин.

Результаты экспериментов на бенчмарках. Для проведения экспериментов на бенчмарках были выбраны наборы данных, содержащие различные типы данных (дискретные и непрерывные). В табл. 1 представлены результаты обучения.

Результаты обучения показали, что КБС имеют высокое правдоподобие, но улучшение по сравнению с базовым вариантом невелико. Это объясняется спецификой используемых бенчмарков, имеющих нормальные распределения и линейные зависимости. Однако КБС выделяются в качестве структурного обучения, особенно благодаря многокритериальному подходу и использованию эволюционной оптимизации. Даже при сопоставимом правдоподобии они эффективно распознают структуры, предположительно, благодаря эффективному исследованию эволюционным алгоритмом пространства потенциальных структур.

На рис. 3 показан график сходимости для трех режимов обучения КБС. Видно, что для подхода, когда структура уже обучена и выбраны только модели машинного обучения (seqGA), алгоритм сходится быстрее.

Эксперименты на реальных данных. Чтобы подробнее изучить преимущества КБС, выполнен эмпирический анализ на реальных наборах данных UCI, включающих в себя сочетание непрерывных и дискретных признаков. Из-за отсутствия эталонных структур для этих наборов данных сравнение проводилось только на основе метрики правдоподобия. Результаты, представленные в табл. 2, продемонстрировали заметное превосходство КБС. Отметим, что постоянно выигрывает подход, при котором и структура и модели выбираются с использованием одной и той же композитной метрики. Эти результаты подчеркивают способность предло-

¹ [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://www.bnlearn.com/bnrepository> (дата обращения: 03.05.2024).

² [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://archive.ics.uci.edu/datasets> (дата обращения: 03.05.2024).

Таблица 1. Сравнение результатов обучения байесовских сетей для трех режимов композитных байесовских сетей и базового жадного алгоритма (HCbn) для бенчмарков

Table 1. Comparison of Bayesian Network learning results for three modes of composite Bayesian Network and the baseline — greedy algorithm (HCbn) for benchmarks

Наборы данных	Правдоподобие				F1			
	CompGA	multiGA	consqGA	HCbn	CompGA	multiGA	consqGA	HCbn
Asia	–451	–454	–451	–456	0,49	0,67	0,29	0,29
Cancer	–417	–419	–418	–426	0,39	0,57	0,57	0,57
Earthquake	–100	–101	–101	–93	0,57	0,93	1	1
Sachs	–1469	–1470	–1427	–1545	0,38	0,6	0,53	0,53
Sangiovese	984	1005	1013	988	0,22	0,2	0,17	0,17

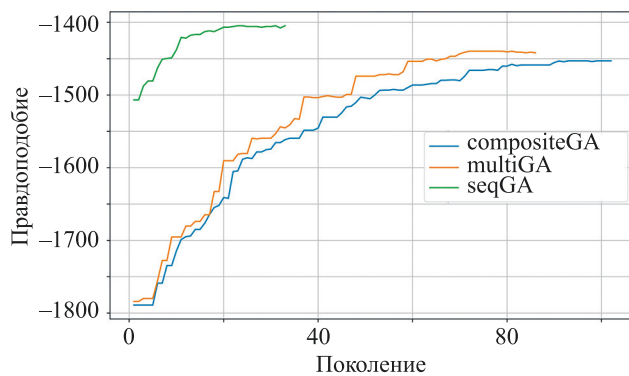


Рис. 3. Сходимость трех режимов обучения составной байесовской сети на примере набора данных Sachs

Fig. 3. Convergence of three training modes for a composite Bayesian network using the example of the Sachs dataset

Таблица 2. Сравнение результатов обучения байесовских сетей для трех режимов КБС и базового жадного алгоритма (HCbn) для наборов данных UCI

Table 2. Comparison of Bayesian Network learning results for three modes of composite Bayesian Network and the baseline — greedy algorithm (HCbn) for UCI datasets

Наборы данных	CompGA	multiGA	consqGA	HCbn
Abalone	1816	1803	1833	1732
Adult	−3527	−4666	−8361	−11041
Australian_statlog	−3143	−3196	−5022	−5146
Liver_disorders	−1382	−1494	−1759	−1809

Литература

- Handbook of Graphical Models / ed. by M. Maathuis, M. Drton, S. Lauritzen, M. Wainwright. CRC Press, 2018. 554 p. <https://doi.org/10.1201/9780429463976>
- Mascaro S., Nicholso A.E., Korb K.B. Anomaly detection in vessel tracks using Bayesian networks // *International Journal of Approximate Reasoning*. 2014. V. 55. N 1. P. 84–98. <https://doi.org/10.1016/j.ijar.2013.03.012>
- McLachlan S., Dube K., Hitman G.A., Fenton N.E., Kyrimi E. Bayesian networks in healthcare: Distribution by medical condition // *Artificial Intelligence in Medicine*. 2020. V. 107. P. 101912. <https://doi.org/10.1016/j.artmed.2020.101912>
- Friedman N., Goldszmidt M. Learning Bayesian networks with local structure // *NATO ASI Series*. 1998. V. 89. P. 421–459. https://doi.org/10.1007/978-94-011-5014-9_15
- Grzegorzczak M. An introduction to gaussian bayesian networks // *Methods in Molecular Biology*. 2010. V. 662. P. 121–147. https://doi.org/10.1007/978-1-60761-800-3_6
- Lerner U., Segal E., Koller D. Exact inference in networks with discrete children of continuous parents // *arXiv*. 2013. arXiv:1301.2289. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1301.2289>
- Pérez A., Larrañaga P., Inza I. Bayesian classifiers based on kernel density estimation: Flexible classifiers // *International Journal of Approximate Reasoning*. 2009. V. 50. N 2. P. 341–362. <https://doi.org/10.1016/j.ijar.2008.08.008>
- Ickstadt K., Bornkamp B., Grzegorzczak M., Wieczorek J., Sheriff M.R., Grecco H.E., Zamir E. Nonparametric Bayesian networks // *Bayesian Statistics 9*. 2011. P. 283–316. <https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780199694587.003.0010>
- Deeva I., Bubnova A., Kalyuzhnaya A.V. Advanced approach for distributions parameters learning in Bayesian networks with gaussian mixture models and discriminative models // *Mathematics*. 2023. V. 11. N 2. P. 343. <https://doi.org/10.3390/math11020343>
- Langseth H., Nielsen T.D., Rumi R., Salmerón A. Mixtures of truncated basis functions // *International Journal of Approximate*

женной методологии эффективно отражать нелинейные зависимости в сложных наборах данных.

Заключение

Представлена новая категория байесовских сетей, известная как композитные байесовские сети, в которых для аппроксимации параметров условных распределений используются модели машинного обучения. Представлены алгоритмы, облегчающие обучение и семплирование композитных байесовских сетей. Описан фреймворк ВАМТ, который включает в себя все основные функциональные возможности для работы с композитными байесовскими сетями. Экспериментальные результаты показали уникальную гибкость и практичность рассмотренного подхода при моделировании условных распределений, что особенно заметно на реальных данных, которые часто не соответствуют классическим предположениям о распределениях и зависимостях. Кроме того, композитный подход обеспечивает эффективное хранение обученных моделей, устраняя необходимость в больших таблицах условных вероятностей и тем самым уменьшая размер модели в четыре раза. Таким образом, композитные байесовские сети представляют собой инновационный инструмент, позволяющий активно применять вероятностные методы искусственного интеллекта к реальным наборам данных.

References

- Handbook of Graphical Models*. Ed. by M. Maathuis, M. Drton, S. Lauritzen, M. Wainwright. CRC Press, 2018, 554 p. <https://doi.org/10.1201/9780429463976>
- Mascaro S., Nicholso A.E., Korb K.B. Anomaly detection in vessel tracks using Bayesian networks. *International Journal of Approximate Reasoning*, 2014, vol. 55, no. 1, pp. 84–98. <https://doi.org/10.1016/j.ijar.2013.03.012>
- McLachlan S., Dube K., Hitman G.A., Fenton N.E., Kyrimi E. Bayesian networks in healthcare: Distribution by medical condition. *Artificial Intelligence in Medicine*, 2020, vol. 107, pp. 101912. <https://doi.org/10.1016/j.artmed.2020.101912>
- Friedman N., Goldszmidt M. Learning Bayesian networks with local structure. *NATO ASI Series*, 1998, vol. 89, pp. 421–459. https://doi.org/10.1007/978-94-011-5014-9_15
- Grzegorzczak M. An introduction to gaussian bayesian networks. *Methods in Molecular Biology*, 2010, vol. 662, pp. 121–147. https://doi.org/10.1007/978-1-60761-800-3_6
- Lerner U., Segal E., Koller D. Exact inference in networks with discrete children of continuous parents. *arXiv*, 2013, arXiv:1301.2289. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1301.2289>
- Pérez A., Larrañaga P., Inza I. Bayesian classifiers based on kernel density estimation: Flexible classifiers. *International Journal of Approximate Reasoning*, 2009, vol. 50, no. 2, pp. 341–362. <https://doi.org/10.1016/j.ijar.2008.08.008>
- Ickstadt K., Bornkamp B., Grzegorzczak M., Wieczorek J., Sheriff M.R., Grecco H.E., Zamir E. Nonparametric Bayesian networks. *Bayesian Statistics 9*, 2011, pp. 283–316. <https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780199694587.003.0010>
- Deeva I., Bubnova A., Kalyuzhnaya A.V. Advanced approach for distributions parameters learning in Bayesian networks with gaussian mixture models and discriminative models. *Mathematics*, 2023, vol. 11, no. 2, pp. 343. <https://doi.org/10.3390/math11020343>
- Langseth H., Nielsen T.D., Rumi R., Salmerón A. Mixtures of truncated basis functions. *International Journal of Approximate*

- Reasoning, 2012, V. 53, N 2, P. 212–227. <https://doi.org/10.1016/j.ijar.2011.10.004>
11. Atienza D., Larrañaga P., Bielza C. Hybrid semiparametric Bayesian networks // *TEST*, 2022, V. 31, N 2, P. 299–327. <https://doi.org/10.1007/s11749-022-00812-3>
 12. Sloman S. Causal Models: How People Think about the World and Its Alternatives. Oxford University Press, 2005, 211 p. <https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780195183115.001.0001>
 13. Larrañaga P., Karshenas H., Bielza C., Santana R. A review on evolutionary algorithms in Bayesian network learning and inference tasks // *Information Sciences*, 2013, V. 233, P. 109–125. <https://doi.org/10.1016/j.ins.2012.12.051>
 14. Gámez J.A., Mateo J.L., Puerta J.M. Learning Bayesian networks by hill climbing: efficient methods based on progressive restriction of the neighborhood // *Data Mining and Knowledge Discovery*, 2011, V. 22, N 1-2, P. 106–148. <https://doi.org/10.1007/s10618-010-0178-6>
 15. Behjati S., Beigy H. Improved K2 algorithm for Bayesian network structure learning // *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 2020, V. 91, P. 103617. <https://doi.org/10.1016/j.engappai.2020.103617>
 16. Lerner B., Malka R. Investigation of the K2 algorithm in learning Bayesian network classifiers // *Applied Artificial Intelligence*, 2011, V. 25, N 1, P. 74–96. <https://doi.org/10.1080/08839514.2011.529265>

Авторы

Деева Ирина Юрьевна — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, se57210416999@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-8679-5868>

Шахкян Каринэ Артуровна — инженер, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, kshahkyan@yandex.ru, <https://orcid.org/0009-0003-2606-431X>

Каминский Юрий Константинович — инженер, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, jkaminski@niuitmo.ru, <https://orcid.org/0009-0006-6418-6117>

Authors

Irina Yu. Deeva — PhD (Physics & Mathematics), Senior Researcher, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, se57210416999@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-8679-5868>

Karine A. Shakhkyan — Engineer, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, kshahkyan@yandex.ru, <https://orcid.org/0009-0003-2606-431X>

Yury K. Kaminsky — Engineer, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, jkaminski@niuitmo.ru, <https://orcid.org/0009-0006-6418-6117>

Статья поступила в редакцию 03.05.2024

Одобрена после рецензирования 05.06.2024

Принята к печати 19.07.2024

Received 03.05.2024

Approved after reviewing 05.06.2024

Accepted 19.07.2024



Работа доступна по лицензии
Creative Commons
«Attribution-NonCommercial»

doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-615-619

УДК 669; 67.014

Метод получения двухкомпонентных композиционных материалов с заданной теплопроводностью

Юрий Петрович Заричняк¹, Вячеслав Петрович Ходунков²✉

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

² Всероссийский научно-исследовательский институт метрологии им. Д.И. Менделеева, Санкт-Петербург, 190005, Российская Федерация

¹ zarich4@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-8713-3583>

² walkerearth@mail.ru✉, <https://orcid.org/0000-0001-9208-7462>

Аннотация

Введение. Предложен метод получения двухкомпонентных композиционных материалов, отличающийся от известных методов тем, что в результате его реализации может быть достигнуто любое значение теплопроводности создаваемого композита, выбранное из диапазона теплопроводностей исходных компонентов.

Метод. Метод заключается в смешивании существенно разнородных твердых компонентов в заданной пропорции, последующем их прессовании и спекании. Пропорцию компонентов предварительно находят расчетным путем исходя из требуемого значения теплопроводности смеси. Для оценки ожидаемой теплопроводности композита и определения требуемой пропорции компонентов предложено использовать разработанную новую модель структуры с хаотически расположенными компонентами. **Основные результаты.** Показано, что для получения необходимой теплопроводности двухкомпонентной смеси можно успешно управлять структурой с хаотически расположенными компонентами, где в качестве элементарной ячейки используется предложенная в работе восьмизлементная кубическая ячейка. При этом обеспечивается точность задания требуемого значения теплопроводности не ниже 90 %. Реализация метода показана на примере получения медно-алундового композита с заданным значением теплопроводности $\lambda = 110$ Вт/(м·К), которое, согласно представленному в примере расчету, соответствует процентному соотношению компонентов 74/26 (медь/алунд). **Обсуждение.** Разработанный метод позволяет получать двухкомпонентные композиты с заданной теплопроводностью в широком диапазоне от нескольких единиц до нескольких сотен Вт/(м·К). В качестве компонентов может использоваться практически неограниченная номенклатура веществ, находящихся в твердом порошкообразном состоянии. Обеспечивается возможность реализации непрерывной шкалы теплопроводности твердых тел. При использовании тугоплавких веществ эта шкала может быть расширена до температуры 2000–2500 °С. Метод может найти применение в метрологии, металлургии, ядерных технологиях, авиационной и тяжелой промышленности, кораблестроении.

Ключевые слова

композиционный материал, теплопроводность, моделирование, взаимопроникающие компоненты, пропорция, электротепловая аналогия, элементарная ячейка

Ссылка для цитирования: Заричняк Ю.П., Ходунков В.П. Метод получения двухкомпонентных композиционных материалов с заданной теплопроводностью // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2024. Т. 24, № 4. С. 615–619. doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-615-619

Method for obtaining two-component composite materials with a given thermal conductivity

Yuri P. Zarichnyak¹, Vyacheslav P. Khodunkov²✉

¹ ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

² D.I. Mendeleev Institute for Metrology (VNIIM), Saint Petersburg, 190005, Russian Federation

¹ zarich4@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-8713-3583>

² walkerearth@mail.ru✉, <https://orcid.org/0000-0001-9208-7462>

© Заричняк Ю.П., Ходунков В.П., 2024

Abstract

A method for obtaining two-component composite materials is proposed which differs from known methods in that as a result of the implementation of the method any value of the thermal conductivity of the composite being created can be achieved, if taken from the range of thermal conductivity of the initial components. The method consists in mixing substantially heterogeneous solid components in a given proportion, their subsequent pressing, and sintering. The proportion of the components is previously calculated based on the required value of the thermal conductivity of the mixture. To estimate the expected thermal conductivity of the composite and find the required proportion of components, it is proposed to use the structure model with chaotically arranged components developed by the authors of the article. It is shown that in order to achieve the goal, the thermal conductivity of a two-component mixture can be successfully modeled by a structure with chaotically arranged components, where an eight-element cubic cell proposed by the authors of the work is used as an elementary cell. At the same time, the accuracy of setting the required thermal conductivity value is at least 90 %. The implementation of the method is shown by the example of obtaining a copper-alund composite with a given thermal conductivity value $\lambda = 110 \text{ W/(m}\cdot\text{K)}$ which, according to the calculation presented in the example, corresponds to a percentage ratio of components 74/26 (copper/alund). The developed method makes it possible to obtain two-component composites with a given thermal conductivity in a wide range from several units to several hundred $\text{W/(m}\cdot\text{K)}$. An almost unlimited range of substances in a solid powdery state can be used as components. It is possible to implement a continuous scale of thermal conductivity of solids. When using refractory substances, this scale can be extended to a temperature of 2000–2500 °C. The method is intended for use in metrology, metallurgy, nuclear technology, aviation and heavy industry, shipbuilding.

Keywords

composite material, thermal conductivity, modeling, interpenetrating components, proportion, electrothermal analogy, unit cell

For citation: Zarichnyak Yu.P., Khodunkov V.P. Method for obtaining two-component composite materials with a given thermal conductivity. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 4, pp. 615–619 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-615-619

Введение

Предложенный метод относится к технологиям получения композиционных материалов с заранее заданными теплофизическими свойствами, а именно — к композитам в виде двухкомпонентной смеси, образованной путем механического смешения двух веществ с их последующим прессованием и спеканием. Метод отличается от известных методов тем, что в результате его реализации может быть достигнуто любое значение теплопроводности создаваемого композита из диапазона теплопроводностей исходных компонентов. Метод предназначен для использования в приборостроении, авиационной и космической отраслях промышленности, в теплоэнергетике, а также в метрологии для создания стандартных образцов теплопроводности твердых тел.

На современном уровне развития науки и техники известны и применяются разнообразные методы получения композиционных материалов [1–6], в том числе, с заранее заданным значением теплопроводности [7–10]. Рассмотрим подробнее методы, наиболее близкие к разработанному методу.

Метод получения рецептуры композиционного полимерного материала с эффективными теплофизическими и электрофизическими характеристиками в заданных интервалах. При использовании данного метода по экспериментальным данным строят поверхности и соответствующие им изолинии эффективных характеристик, зависящие от управляющих параметров — объемной доли компонентов, типа и среднего радиуса частиц наполнителя. По полученным изолиниям определяют рецептуру, т. е. значения управляющих параметров, обеспечивающую попадание эффективных характеристик в заданные интервалы значений [9]. Согласно данному методу, состав и свойства компози-

ционного полимерного материала определяются объемной долей и средним радиусом частиц наполнителя, который обладает известными теплофизическими и электрофизическими свойствами. Недостатки метода: низкая достоверность априорного задания теплопроводности композита, обусловленная ее сильной зависимостью от точности знания среднего радиуса частиц наполнителя; температурный диапазон существования композиционного полимерного материала ограничен предельной рабочей температурой полимера, которая, как правило, не высока и не превышает 200 °C; ограничение по номенклатуре материалов, применяемых для создания композита, так как один из материалов обязательно должен быть полимером.

Метод получения композиционного материала на основе металлической матрицы и неметаллического волокна, который заключается в том, что изготавливают преформу из неметаллического волокна. Преформу помещают в пресс-форму с перфорированным дном, уплотняют с одновременным удалением воды через перфорированное дно, фиксируют, сушат, заливают и пропитывают под давлением матричным металлом. В другом варианте осуществления метода при пропитке преформы под давлением выполняют направленную кристаллизацию материала, а в качестве неметаллического волокна используют дискретные волокна углерода, оксида алюминия или карбида кремния, а в качестве матричного металла — алюминий, магний, цинк, олово, свинец или их сплавы [10]. Недостаток метода: ограниченная номенклатура материалов, применяемых в качестве матрицы и наполнителя.

Метод получения композиционных материалов с заданными физико-химическими свойствами, в котором эти свойства, в первом приближении, определяются суммой свойств составляющих компонентов пропорционально их количеству [2]. Метод не применим для

создания композиционных материалов с заданной теплопроводностью. Это обусловлено тем, что теплопроводность является интенсивной физической величиной, поэтому ее эффективное значение для смеси материалов не является суммой теплопроводностей составляющих смесь компонентов — в этом заключается недостаток метода.

Цель работы — разработка метода получения композиционных материалов с заранее заданным значением теплопроводности.

Описание предлагаемого метода

Представленный новый метод разработан на основании результатов, полученных в работе [11]¹, и заключается в следующем. В заданной пропорции равномерно смешаны два компонента, представленные в виде порошков с заранее известными значениями теплопроводности. Далее порошки спрессованы в заданную форму и измерена теплопроводность полученного композита, которому присвоено измеренное значение теплопроводности. Отметим, что пропорция смешиваемых веществ рассчитана исходя из необходимого значения теплопроводности.

Для расчета ожидаемого значения теплопроводности смоделирована структура создаваемого композита моделью с хаотически распределенными по объему компонентами [12, 13].

Создаваемый двухкомпонентный композит структурно представляет совокупность элементарных ячеек (рис. 1), каждая из которых имеет вид куба, состоящего из восьми одинаковых специально ориентированных кубиков, каждый из которых образован параллельно-расположенными слоями, моделирующими слои веществ 1 и 2. При этом размеры куба равны $2L \times 2L \times 2L$, а кубика — $L \times L \times L$; слой вещества 1 имеет толщину a , а вещества 2 — b ; высота и ширина всех слоев 1, 2 одинакова и равна L . Через элементарную ячейку проходит направленный тепловой поток q . Данная ячейка в виде куба из восьми кубиков обладает эффективной теплопроводностью, равной эффективной теплопроводности ($\lambda_{\text{эфф}}$) создаваемого двухкомпонентного композита.

Значение $\lambda_{\text{эфф}}$ данной элементарной ячейки, т. е. композита, может быть рассчитано через ее эффективное тепловое сопротивление $R_{\text{эфф}}$, которое, в свою очередь, рассчитывается исходя из схемы электрического замещения, составленной по электротепловой аналогии (рис. 2). Согласно закону Кирхгофа, рассчитаем $R_{\text{эфф}}$ для электрической схемы:

$$R_{\text{эфф}} = 0,25(R_{\parallel} + R_{\perp}). \quad (1)$$

С другой стороны, $R_{\text{эфф}}$ электрической схемы может быть рассчитано из общеизвестного определения для теплового сопротивления участка тепловой цепи:

$$R = l/(\lambda S), \quad (2)$$

где l — длина участка тепловой цепи (в направлении передачи теплоты); λ — теплопроводность участка цепи; S — площадь сечения, в котором передается теплота на данном участке цепи.

Применим к $R_{\text{эфф}}$ элементарной ячейки двухкомпонентного композита соотношение (2), тогда запишем:

$$R_{\text{эфф}} = 2L/(\lambda_{\text{эфф}}S). \quad (3)$$

Решив уравнение (3) совместно с (1) относительно $\lambda_{\text{эфф}}$ композита при условии, что $S = 4L^2$, получим:

$$\lambda_{\text{эфф}} = 2/(L(R_{\parallel} + R_{\perp})). \quad (4)$$

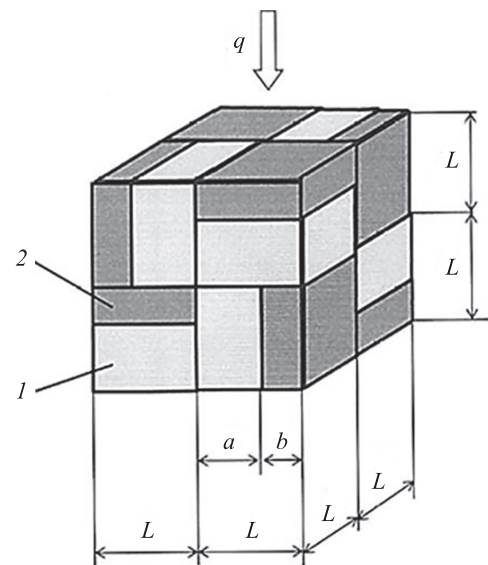


Рис. 1. Элементарная ячейка, моделирующая структуру создаваемого двухкомпонентного композита

Fig. 1. Unit cell modeling the structure of the created two-component composite

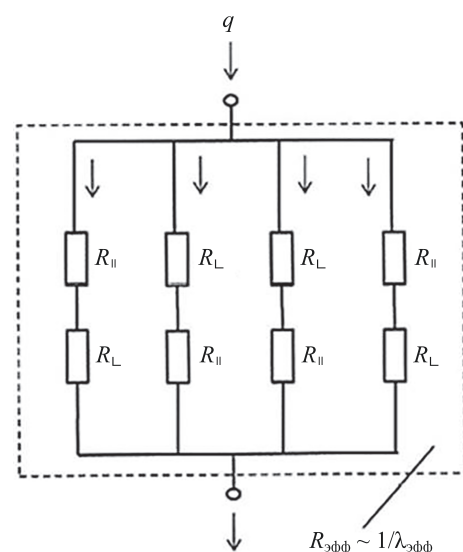


Рис. 2. Электрическая схема замещения теплового сопротивления элементарной ячейки

Fig. 2. Electric circuit for substituting the thermal resistance of the unit cell

¹ Приказ Роспатента № 183 от 8 ноября 2021 г. О результатах отбора изобретений, включенных в базу данных «100 лучших изобретений России» за первое полугодие 2021 года [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://agnc.ru/news/14647> (дата обращения: 26.04.2024).

Примем $L = 1$ (кубики единичной длины), в результате получим более простое соотношение:

$$\lambda_{\text{эфф}} = 2/(R_{\parallel} + R_{\perp}). \quad (5)$$

Значения эффективных тепловых сопротивлений кубиков можно рассчитать исходя из общеизвестного определения теплового сопротивления участка тепловой цепи (2), соотношения для которых имеют вид (при $L = 1$):

$$R_{\parallel} = 1/(a\lambda_1 + b\lambda_2), \quad (6)$$

$$R_{\perp} = a/\lambda_1 + b/\lambda_2. \quad (7)$$

В соотношениях (6) и (7) теплопроводности веществ 1 и 2 — λ_1 и λ_2 заранее известны. Неизвестными параметрами остаются толщины слоев веществ a и b . Рассчитаем указанные толщины слоев веществ (выраженные в относительных единицах) исходя из объемного содержания каждого вещества по следующим соотношениям:

$$a = X_1/(X_1 + X_2), \quad (8)$$

$$b = X_2/(X_1 + X_2), \quad (9)$$

где X_1 и X_2 — объемные содержания веществ 1 и 2 . При этом объемные содержания веществ X_1 и X_2 измеряют также в относительных единицах.

Далее, используя соотношения (4)–(9), выполним расчет зависимости $\lambda_{\text{эфф}}$ создаваемого двухкомпонентного композита от объемного содержания (пропорции смешивания) веществ 1 и 2 , т. е. от X_1 и X_2 . Полученную зависимость $\lambda_{\text{эфф}} = f(X_i)$, $i = 1, 2$ построим графически или выразим математически с помощью аппроксимации, например, полиномом n -ой степени, как показано на рис. 3 для примера реализации метода. Согласно найденной пропорции, необходимо равномерно сме-

шать порошки веществ 1 и 2 , спрессовать полученную смесь по одной из общеизвестных технологий в заданную форму и выполнить спекание. На последнем этапе измерить $\lambda_{\text{эфф}}$, полученного из смеси двухкомпонентного композита, и присвоить ему измеренное значение теплопроводности.

Пример реализации метода

Пусть, например, требуется создать медно-алундовый двухкомпонентный композит, обладающий эффективной теплопроводностью $\lambda_{\text{эфф}} = 110$ Вт/(м·К). В качестве вещества 1 взята чистая медь (Cu), в качестве вещества 2 — алунд (Al_2O_3). Теплопроводности веществ известны: Cu равна $\lambda_1 = 400$ Вт/(м·К), Al_2O_3 — $\lambda_2 = 20$ Вт/(м·К). Данные по теплопроводности приведены для комнатной температуры. Для реализации метода первоначально по соотношениям (4)–(9) выполним расчет зависимости $\lambda_{\text{эфф}}$ создаваемого двухкомпонентного композита от объемного содержания (пропорции смешивания) веществ, например, от объемного содержания X_1 вещества 1 , т. е. находят зависимость $\lambda_{\text{эфф}} = f(X_1)$. Полученную зависимость построим графически или выполним аппроксимацию математически. Для рассматриваемого примера осуществим аппроксимацию зависимости полиномом 6-й степени с коэффициентом достоверности аппроксимации $k_R = 0,999$:

$$\lambda_{\text{эфф}} = 11860X_1^6 - 30359X_1^5 + 29599X_1^4 - 13324X_1^3 + 2715,5X_1^2 - 116,7X_1 + 22.$$

Исходя из данной зависимости, найдем требуемые объемные содержания веществ, которые, как следует из расчетов, для $\lambda_{\text{эфф}} = 110$ Вт/(м·К) равны $X_1 = 0,74$ и $X_2 = 0,26$.

Затем в установленной пропорции равномерно смешаем порошки указанных веществ (Cu и Al_2O_3), полученную смесь спрессуем в заданную форму и спечем, т. е. сформируем образец нужного размера и формы. После операции прессования и спекания измерим $\lambda_{\text{эфф}}$ полученного двухкомпонентного композита любым, соответствующим по точности измерителем теплопроводности, обладающим заданной погрешностью измерения (например, не более 2 %) в диапазоне измеряемой теплопроводности. Найденное с помощью измерителя значение $\lambda_{\text{эфф}}$ присваивают созданному двухкомпонентному композиту.

Оценим достоверность задания $\lambda_{\text{эфф}}$ согласно предлагаемому методу не ниже 90 % (относительная неопределенность предсказания ≈ 10 %).

Предложенный метод позволяет создать двухкомпонентные композиты с заданной теплопроводностью, непрерывно изменяемой в широком диапазоне от сотен до нескольких единиц, при этом может использоваться практически неограниченная номенклатура веществ, находящихся в твердом порошкообразном состоянии. Отметим, что в методе не предъявляются какие-либо жесткие требования к гранулометрическому составу порошков используемых веществ. Кроме того, использование веществ, обладающих высокой температурой плавления, позволяет создавать композиты с высокой

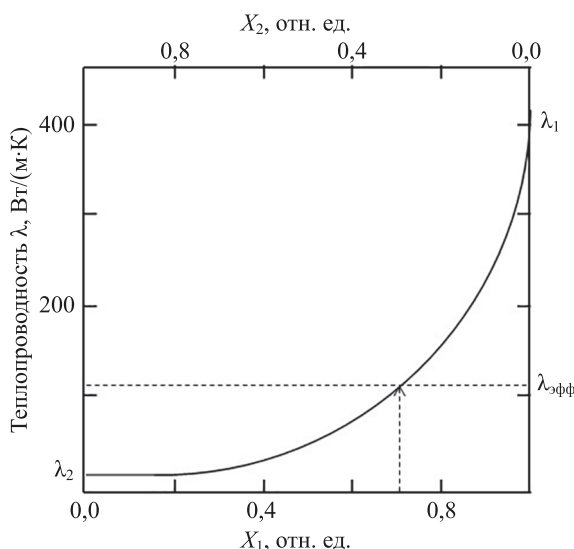


Рис. 3. Зависимость эффективной теплопроводности создаваемого двухкомпонентного композита от объемного содержания вещества 1 для представленного примера реализации метода

Fig. 3. Dependence of the effective thermal conductivity of the created two-component composite on the volumetric content of substance 1 for the presented example of the method

рабочей температурой, вплоть до температуры 2000–2500 °С.

Заключение

Предложенный метод позволяет создавать двухкомпонентные композиты с любым значением теплопроводности, взятым из диапазона теплопроводностей исходных компонентов, при этом может использоваться

практически неограниченная номенклатура веществ, находящихся в твердом порошкообразном состоянии. Кроме того, какие-либо жесткие требования к гранулометрическому составу порошков используемых веществ не предъявляются. Использование веществ, обладающих высокой температурой плавления, позволяет создавать композиты с высокой рабочей температурой, вплоть до 2000–2500 °С.

Литература

1. Han X.H., Wang Q., Park Y.G., T'Joel C., Sommers A., Jacobi A. A review of metal foam and metal matrix composites for heat exchangers and heat sinks // *Heat Transfer Engineering*. 2012. V. 33. N 12. P. 991–1009. <https://doi.org/10.1080/01457632.2012.659613>
2. Гаврилин И.В. Композиционные материалы в машиностроении: Обзорная информация. М., 1989. 40 с.
3. Sidhu S.S., Kumar S., Batish A. Metal Matrix Composites for Thermal Management: A Review // *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*. 2016. V. 41. N 2. P. 132–157. <https://doi.org/10.1080/10408436.2015.1076717>
4. Qu X.H., Zhang L., Wu M., Ren S.-B. Review of metal matrix composites with high thermal conductivity for thermal management applications // *Progress in Natural Science: Materials International*. 2011. V. 21. N 3. P. 189–197. [https://doi.org/10.1016/S1002-0071\(12\)60029-X](https://doi.org/10.1016/S1002-0071(12)60029-X)
5. Jia J., Cheng W., Long K. Concurrent design of composite materials and structures considering thermal conductivity constraints // *Engineering Optimization*. 2017. V. 49. N 8. P. 1335–1353. <https://doi.org/10.1080/0305215X.2016.1248959>
6. Галыгин В.Е., Баронин Г.С., Таров В.П., Завражин Д.О. Современные технологии получения и переработки полимерных и композиционных материалов: учебное пособие. Тамбов: Издательство ФГБОУ ВПО «ТГТУ», 2012. 179 с.
7. Ходунков В.П., Заричняк Ю.П. Способ создания металлокомпозита с предсказуемой теплопроводностью. Патент RU2739728C1. Бюл. 2020. № 1.
8. Павлов С.П., Макарова В.М., Злобина И.В., Бекренев Н.В. Предпосылки регулирования теплопроводности полимерных композиционных материалов на основе моделирования тепловых потоков и аддитивных технологий // *Современные наукоемкие технологии*. 2018. № 12-2. С. 337–342.
9. Бочкарева С.А., Гришаева Н.Ю., Люкшин Б.А., Реутов А.И., Люкшин П.А. Способ получения состава композиционного полимерного материала с заданными свойствами. Патент RU2668915C2. Бюл. 2018. № 28.
10. Абузин Ю.А., Наймушин А.И., Гончаров И.Е., Кочетов В.Н. Способ получения композиционного материала. Патент RU2392090C2. Бюл. 2010. № 17.
11. Ходунков В.П., Заричняк Ю.П. Способ создания двухкомпонентного композита с заданной теплопроводностью. Патент RU2748669C1. Бюл. 2021. № 16.
12. Дульнев Г.Н., Заричняк Ю.П. Теплопроводность смесей и композиционных материалов. Л.: Энергия, 1974. 264 с.
13. Дульнев Г.Н., Заричняк Ю.П. Теплопроводность многокомпонентных смесей // *Инженерно-физический журнал*. 1967. Т. 12. № 4. С. 419.

Авторы

Заричняк Юрий Петрович — доктор физико-математических наук, профессор, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 6701513411](https://orcid.org/0000-0001-8713-3583), <https://orcid.org/0000-0001-8713-3583>, zarich4@gmail.com

Ходунков Вячеслав Петрович — кандидат технических наук, старший научный сотрудник, Всероссийский научно-исследовательский институт метрологии им. Д.И. Менделеева, Санкт-Петербург, 190005, Российская Федерация, [sc 6504750914](https://orcid.org/0000-0001-9208-7462), <https://orcid.org/0000-0001-9208-7462>, walkerearth@mail.ru

References

1. Han X.H., Wang Q., Park Y.G., T'Joel C., Sommers A., Jacobi A. A review of metal foam and metal matrix composites for heat exchangers and heat sinks. *Heat Transfer Engineering*, 2012, vol. 33, no. 12, pp. 991–1009. <https://doi.org/10.1080/01457632.2012.659613>
2. Gavrilin I.V. *Composite Materials in Mechanical Engineering: Overview Information*. Moscow, 1989, 40 p. (in Russian)
3. Sidhu S.S., Kumar S., Batish A. Metal Matrix Composites for Thermal Management: A Review. *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*, 2016, vol. 41, no. 2, pp. 132–157. <https://doi.org/10.1080/10408436.2015.1076717>
4. Qu X.H., Zhang L., Wu M., Ren S.-B. Review of metal matrix composites with high thermal conductivity for thermal management applications. *Progress in Natural Science: Materials International*, 2011, vol. 21, no. 3, pp. 189–197. [https://doi.org/10.1016/S1002-0071\(12\)60029-X](https://doi.org/10.1016/S1002-0071(12)60029-X)
5. Jia J., Cheng W., Long K. Concurrent design of composite materials and structures considering thermal conductivity constraints. *Engineering Optimization*, 2017, vol. 49, no. 8, pp. 1335–1353. <https://doi.org/10.1080/0305215X.2016.1248959>
6. Galygin V.E., Baronin G.S., Tarov V.P., Zavrazhin D.O. *Modern Technologies for the Production and Processing of Polymer and Composite Materials*. Tambov, TSTU, 2012, 179 p. (in Russian)
7. Khodunkov V.P., Zarichnyak Yu.P. Method of metal composite creation with predicted heat conductivity. *Patent RU2739728C1*, 2020. (in Russian)
8. Pavlov S.P., Makarova V.M., Zlobina I.V., Bekrennev N.V. Preconditions of regulation of thermal conductivity of polymer composites based on modeling of heat flow and additive technologies. *Modern High Technologies*, 2018, no. 12-2, pp. 337–342. (in Russian)
9. Bochkareva S.A., Grishaeva N.Yu., Lyukshin B.A., Reutov A.I., Lyukshin P.A. Method for producing composition of composite polymer material with prescribed properties. *Patent RU2668915C2*, 2018. (in Russian)
10. Abuzin J.A., Najmushin A.I., Goncharov I.E., Kochetov V.N. Method of composite material obtainment. *Patent RU2392090C2*, 2010. (in Russian)
11. Khodunkov V.P., Zarichnyak Yu.P. Method for creating two-component composite with given thermal conductivity. *Patent RU2748669C1*, 2021. (in Russian)
12. Dulnev G.N., Zarichniak Iu.P. *Thermal Conductivity of Mixtures and Composite Materials*. Leningrad, Jenergiya Publ., 1974, 264 p. (in Russian)
13. Dulnev G.N., Zarichniak Iu.P. Thermal Conductivity of Multicomponent Mixtures. *Inzhenerno-fizicheskij zhurnal*, 1967, vol. 12, no. 4, pp. 419. (in Russian)

Authors

Yuri P. Zarichnyak — D.Sc. (Physics & Mathematics), Professor, Associate Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, [sc 6701513411](https://orcid.org/0000-0001-8713-3583), <https://orcid.org/0000-0001-8713-3583>, zarich4@gmail.com

Vyacheslav P. Khodunkov — PhD, Senior Researcher, D.I. Mendeleev Institute for Metrology (VNIIM), Saint Petersburg, 190005, Russian Federation, [sc 6504750914](https://orcid.org/0000-0001-9208-7462), <https://orcid.org/0000-0001-9208-7462>, walkerearth@mail.ru

doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-620-628

УДК 536.248.2

Компьютерное моделирование тепломассообменных процессов при конденсации водяных паров из продуктов сгорания природного газа на поверхности гладких цилиндрических труб

Павел Александрович Брызгунов¹✉, Андрей Николаевич Рогалев²,
Владимир Олегович Киндра³, Иван Игоревич Комаров⁴,
Ольга Владимировна Злывко⁵

^{1,2,3,4,5} Национальный исследовательский университет «МЭИ», Москва, 111250, Российская Федерация

¹ bryzgunovpa@mpei.ru✉, <https://orcid.org/0000-0003-3710-5116>

² rogalevan@mpei.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7256-0144>

³ kindravo@mpei.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8406-7901>

⁴ komarovii@mpei.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3853-8220>

⁵ zlyvkoov@mpei.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0554-4026>

Аннотация

Введение. Представлены результаты численного моделирования тепломассообменных процессов при конденсации водяных паров из продуктов сгорания на пучках гладких горизонтальных цилиндрических труб. Разработана инженерная математическая модель конденсации водяных паров из газопаровой смеси с высоким содержанием неконденсирующихся газов на основе экспериментальных данных. **Метод.** Предложенная математическая модель включает в себя совместно решаемые уравнения сохранения тепловой энергии, импульса и массы, при этом уравнение сохранения массы учитывает транспорт примесей за счет конвекции, молекулярной и турбулентной диффузии. Смена фаз учитывается в источниковых членах уравнения сохранения массы, предусматривается конденсация в объеме при прохождении смеси через точку росы и локальная поверхностная конденсация на охлаждающих трубках. Для описания конденсации в объеме используется модель «возврата к температуре насыщения», а для поверхностной конденсации разработана алгебраическая эмпирическая модель на основе анализа экспериментальных данных. Преимуществом выбранного подхода является отсутствие необходимости расчета гидродинамики капель и пленок конденсата как отдельной сплошной среды ввиду учета влияния данных факторов на тепломассообмен в экспериментальных коэффициентах, что значительно снижает вычислительную трудоемкость задачи и позволяет проводить инженерные расчеты в сопряженной постановке. Структура разработанной математической модели обеспечивает простую интеграцию с распространенными коммерческими и свободно распространяемыми CFD-кодами. **Основные результаты.** По экспериментальным данным определен коэффициент разработанной эмпирической модели конденсации. Показано, что при настройке коэффициента по одной базовой точке модель обеспечивает совпадение с экспериментальными данными по другим режимам с отклонением, не превышающим неопределенность эксперимента. С использованием верифицированной модели проведено моделирование участка конденсационного теплоутилизатора для выхлопных газов газотурбинной установки с шахматным пучком гладких труб в сопряженной постановке. Определено численное значение повышения воспринимаемого охлаждающей жидкостью теплового потока за счет утилизации скрытой теплоты конденсации. **Обсуждение.** Полученные данные моделирования и разработанная модель конденсации водяных паров из продуктов сгорания природного газа могут быть использованы при расчетах и проектировании конденсационных теплоутилизаторов, а также конденсационных водогрейных котлов.

Ключевые слова

конденсация водяных паров, неконденсирующиеся газы, капельная конденсация, конденсационные теплоутилизаторы, утилизация теплоты выхлопных газов, тепломассообменные процессы, вычислительная гидродинамика

Благодарности

Исследование проведено в НИУ «МЭИ» при финансовой поддержке Минобрнауки России (государственное задание № FSWF-2023-0014, соглашение № 075-03-2023-383 от 18 января 2023 г.).

© Брызгунов П.А., Рогалев А.Н., Киндра В.О., Комаров И.И., Злывко О.В., 2024

Ссылка для цитирования: Брызгунов П.А., Рогалев А.Н., Киндра В.О., Комаров И.И., Злышко О.В. Компьютерное моделирование тепломассообменных процессов при конденсации водяных паров из продуктов сгорания природного газа на поверхности гладких цилиндрических труб // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2024. Т. 24, № 4. С. 620–628. doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-620-628

Computer simulation of heat and mass transfer processes during water vapor condensation from natural gas combustion products on smooth cylindrical tubes

Pavel A. Bryzgunov¹✉, Andrey N. Rogalev², Vladimir O. Kindra³,
Ivan I. Komarov⁴, Olga V. Zlyvko⁵

^{1,2,3,4,5} National research University MPEI, Moscow, 111250, Russian Federation

¹ bryzgunovpa@mpei.ru✉, <https://orcid.org/0000-0003-3710-5116>

² rogalevan@mpei.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7256-0144>

³ kindravo@mpei.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8406-7901>

⁴ komarovii@mpei.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3853-8220>

⁵ zlyvkoov@mpei.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0554-4026>

Abstract

The results of numerical simulation of heat and mass transfer processes during the condensation of water vapor from natural gas combustion products on bundles of smooth horizontal cylindrical tubes are presented. An empirical mathematical model of condensation of water vapor from a gas-steam mixture with a high content of non-condensable gases has been developed based on experimental data. The proposed mathematical model includes jointly solvable equations of thermal energy, momentum and mass conservation, while the equation of conservation of mass takes into account the species transport due to convection, molecular and turbulent diffusion. The phase change is taken into account in the source terms of the mass conservation equation; both condensation in the volume as the mixture passes through the dew point and local surface condensation on the cooling tubes are taken into account. To describe condensation in the volume, the return to saturation temperature model is used, and for surface condensation an algebraic empirical model was developed based on the analysis of experimental data. The advantage of the chosen approach is that there is no need to calculate the hydrodynamics of droplets and condensate films as a separate continuous one due to the influence of these factors on heat and mass transfer in the experimental coefficients, which significantly reduces the computational complexity of the problem and allows engineering calculations to be carried out in a coupled formulation. The structure of the developed mathematical model ensures easy integration with common commercial and freely available CFD codes. Based on experimental data, the coefficient of the developed condensation model was determined. It is shown that when adjusting the coefficient using one base point, the model ensures agreement with experimental data for other modes with a deviation not exceeding the experimental error. Using a verified model, a section of a condensation heat exchanger for gas turbine unit exhaust gases with a staggered bundle of smooth pipes in a coupled formulation was simulated, and the numerical value of increasing cooling water heat perception due to the utilization of latent heat of condensation was determined. The obtained modeling data and the developed model of condensation of water vapor from natural gas combustion products can be used in the calculations and design of condensing heat exchangers as well as condensing boilers.

Keywords

condensation of water vapor, non-condensable gases, drip condensation, condensation heat exchangers, exhaust heat recovery, heat and mass transfer processes, computational fluid dynamics

Acknowledgements

This study conducted by Moscow Power Engineering Institute was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (project No. FSWF-2023-0014, contract No. 075-03-2023-383, 2023/18/01).

For citation: Bryzgunov P.A., Rogalev A.N., Kindra V.O., Komarov I.I., Zlyvko O.V. Computer simulation of heat and mass transfer processes during water vapor condensation from natural gas combustion products on smooth cylindrical tubes. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 4, pp. 620–628 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-620-628

Введение

Надежные методики и модели для расчета тепломассообменных процессов при конденсации водяных паров из газопаровых смесей с преобладающим содержанием неконденсирующихся газов актуальны для большого количества технических приложений. К таким решениям, в частности, относятся задачи охлаждения воздуха для вентиляции и кондиционирования, где в качестве смеси выступает влажный воздух (массовая доля воды не превышает 3 %), а также разработка конденсационных теплоутилизаторов для выхлопных газов котельных установок и микрогазотурбинных устано-

вок, содержащих массовую долю пара до 10–20 %. За счет полезного использования скрытой теплоты парообразования конденсационные теплоутилизаторы, в которых при охлаждении газов ниже точки росы можно получить дополнительно 12–15 % рекуперации тепла [1], имеют значительно большую эффективность по сравнению с обычными теплообменными аппаратами. Перспективными являются теплообменные аппараты, реализующие фазовые переходы за счет конденсации на горячей стороне и кипения низкокипящей жидкости на холодной, так как кипение обеспечивает высокие коэффициенты теплопередачи порядка 50–100 Вт/(м²·К) [2].

Обзор литературы по тематике моделирования конденсации

В настоящее время сформирован значительный научный задел в области исследования тепломассообменных процессов при конденсации, однако полное математическое описание получено только для пленочной конденсации насыщенных паров в исследованиях, обзор которых применительно к конденсации на поверхности трубок дан в работе [3]. При наличии даже небольшой доли неконденсирующихся газов задача в значительной мере осложняется, что учитывается с помощью внесения экспериментальных поправок [4]. Отдельной задачей является моделирование тепломассообмена при капельной конденсации, для которой к настоящему времени не было разработано универсального математического описания. Большинство известных исследований капельной конденсации являются эмпирическими и имеют ограниченную область применения ввиду зависимости интенсивности процесса от ряда параметров, таких как температура, шероховатость и смачиваемость поверхности трубки, доля неконденсирующихся газов, режим течения. Обзор существующих теоретических и экспериментальных исследований капельной конденсации приведен в работе [5].

В численном моделировании процессов конденсации наибольшее развитие достигнуто в моделировании пленочной конденсации из насыщенных паров на трубках и трубных пучках методом Volume of Fluid (VOF). Данный подход подразумевает моделирование пленки конденсата как дополнительной сплошной среды с учетом сил поверхностного натяжения, при этом основной моделью фазового перехода является модель Ли и ее модификации [6]. В работе [7] приведены результаты моделирования конденсации неподвижного и подвижного паров на горизонтальных трубках посредством метода VOF и модифицированной модели Ли с автоматическим подбором эмпирической константы на примере пентана и воды. Продemonстрировано хорошее качественное и количественное соответствие результатов численного моделирования с теоретическими и экспериментальными данными. В работе [8] представлены результаты моделирования конденсации фреона при внутреннем течении паров в круглой трубе при использовании того же подхода, однако в данном случае модель в значительной мере использует эмпирические данные, которые выражаются в модификации граничных условий для учета теплообмена между стенкой трубки и конденсатом. К преимуществам данного подхода можно отнести высокую точность и реалистичность получаемых результатов, а также универсальность модели с точки зрения конденсирующейся среды. К недостаткам относится высокая вычислительная трудоемкость нестационарного метода VOF, обусловленная необходимостью сгущения сетки для разрешения межфазной границы и малого шага по времени (порядка 10^{-6} – 10^{-5} с) для обеспечения требуемого числа Куранта ($C < 1$). Высокая трудоемкость расчета при использовании метода VOF значительно затрудняет его применение в инженерных приложениях.

Численный расчет течения и тепломассообмена из смесей с наличием неконденсирующихся газов является еще более сложной задачей, поэтому основным подходом в данном случае является использование инженерных эмпирических моделей. В работах [9–11] приведены результаты моделирования процессов конденсации чистого пара и при наличии неконденсирующихся газов, при этом использована упрощенная одномерная модель пленки конденсата. В [12] описана более простая инженерная модель конденсации из паровоздушной смеси на пучках гладких труб с использованием для замыкания эмпирических данных по коэффициентам теплоотдачи в зависимости от стороны трубки («подветренная», «наветренная») и отрыва пленки конденсата. В работах [9–12] конденсат не моделируется как отдельная сплошная среда, но учитывается влияние пленки на перенос массы, энергии и импульса. По результатам верификации, модель обеспечивает достаточное совпадение с экспериментальными данными, однако во всех рассмотренных авторами случаях массовая концентрация воздуха не превышает 10–20 % и наблюдается пленочный режим конденсации, тогда как в случаях конденсации паров из выхлопных газов концентрация воздуха порядка 90 % и отмечается капельный режим, что подтверждается экспериментальными данными [13].

В связи с этим при моделировании конденсации из смесей с низким содержанием пара используются в основном упрощенные феноменологические модели. В данных моделях выпадение капель конденсата не моделируется, но в источниках уравнивания энергии учитывается выделение скрытой теплоты конденсации. Это является главным фактором, определяющим теплоотдачу, при этом коэффициенты, характеризующие интенсивность конденсации, выбираются посредством сравнения с эмпирическими данными. Смесь моделируется как гомогенная несжимаемая жидкость, в которой сухой воздух является сплошной средой, а для пара решается уравнение транспорта примесей. В [14] приведены результаты моделирования конденсации паров из продуктов сгорания природного газа и разработана модель, которая содержит три эмпирических коэффициента, подбираемых в соответствии с опытными данными. Наличие трех коэффициентов несколько осложняет настройку модели на другие режимы. В работах [15, 16] для расчета скорости конденсации вблизи холодных стенок использованы соотношения на основе закона Фика, содержащие один эмпирический коэффициент, при этом в модели не учитывается возможная конденсация в объеме при прохождении смеси на удалении от стенок через точку росы. В [17] представлена модель, учитывающая конденсацию на стенках трубки и в объеме, при этом для конденсации на стенках использованы упрощенные соотношения для эквивалентного коэффициента теплоотдачи, а также закон Фика. К недостаткам данной модели можно отнести то, что она настроена и протестирована только для случаев относительной влажности 100 % на входе, т. е. на насыщенный паром воздух.

Цель настоящей работы — повышение точности и снижение трудоемкости расчета тепломассообменных

процессов в конденсационных теплоутилизаторах для рекуперации теплоты продуктов сгорания природного газа посредством разработки и валидации упрощенной эмпирической модели конденсации.

Основные задачи исследования: разработка инженерной математической модели конденсации влаги из продуктов сгорания природного газа с использованием эмпирических данных с минимальным числом эмпирических коэффициентов; валидация разработанной модели посредством расчета тестовых задач и сравнения с экспериментальными данными; проведение расчета секции конденсационного теплоутилизатора для выхлопных газов микрогазотурбинной установки в сопряженной постановке.

Математическая модель конденсации пара при высокой массовой доле неконденсирующихся газов

Предложенная математическая модель содержит совместно решаемые дифференциальные уравнения сохранения массы, импульса, энергии, а также модель турбулентности. Поставленные задачи решались методом установления, т. е. в нестационарной постановке с выходом на стационарный режим.

Для моделирования переноса массы применена модель транспорта примесей, в данной модели основная среда (смесь сухого воздуха, монооксида и диоксида углерода) считается сплошной средой, при этом для примеси (пара) решается уравнение транспорта массовой концентрации. Изменение плотности смеси учтено в уравнении неразрывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_i)}{\partial x_i} = 0, \quad (1)$$

где ρ — плотность смеси, вычисляемая аддитивным методом по плотностям компонентов смеси, включающей в себя неконденсирующиеся газы и водяной пар; t — время; v_i — компоненты скорости; x_i — координаты.

Для плотности неконденсирующихся газов ($\rho_{n.c.}$) также использовано дополнительное соотношение, выражающее зависимость плотности от давления, которое, в свою очередь, зависит от концентрации водяных паров и уменьшается при снижении концентрации пара:

$$\rho_{n.c.} = \rho_{n.c.in} \frac{T_{in}}{T} P_{in} \left(1 - \frac{\frac{r_{v.in} - r_v}{m_v}}{\frac{r_{n.c.in}}{m_{n.c.}} + \frac{r_{v.in}}{m_v}} \right), \quad (2)$$

где T и T_{in} — местная температура и температура на входе; r_v и $r_{v.in}$ — местная массовая концентрация пара и массовая концентрация пара на входе; $r_{n.c.}$ и $r_{n.c.in}$ — местная массовая концентрация неконденсирующихся газов и массовая концентрация неконденсирующихся газов на входе; m_v и $m_{n.c.}$ — молекулярная масса пара и неконденсирующихся газов; $\rho_{n.c.in}$ — плотность неконденсирующихся газов на входе; P_{in} — давление на входе.

Для вычисления скорости, температуры и параметров турбулентности использован гомогенный подход,

при котором компоненты смеси имеют общие поля соответствующих переменных. Теплофизические свойства смеси рассчитаны аддитивным способом. Уравнение закона сохранения импульса имеет вид:

$$\frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} + v_j \frac{\partial(\rho v_i)}{\partial x_j} = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left((\mu + \mu_t) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right), \quad (3)$$

где μ и μ_t — коэффициенты динамической молекулярной и турбулентной вязкостей смеси.

В качестве модели турбулентности выбрана модель k - ω SST (Shear Stress Transport) Ментера [18], так как данная модель обеспечивает высокую точность расчета турбулентной вязкости как в пограничном слое, так и в ядре потока. Используются стандартные значения и функции для источников членов и эмпирических замыкающих коэффициентов:

$$\begin{aligned} \frac{\partial k}{\partial t} + v_j \frac{\partial k}{\partial x_j} &= P_k - \beta^* k \omega + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu}{\rho} + \sigma^* \frac{\mu_t}{\rho} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right], \\ \frac{\partial \omega}{\partial t} + v_j \frac{\partial \omega}{\partial x_j} &= \gamma P_k \frac{\rho}{\mu_t} - \beta \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu}{\rho} + \sigma^* \frac{\mu_t}{\rho} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + \\ &+ 2(1 - F_1) \sigma_{\omega 2} \frac{\nabla k \nabla \omega}{\omega}, \\ \mu_t &= \frac{\rho a_1 k}{\max(a_1 \omega, SF_2)}, \end{aligned} \quad (4)$$

где k — турбулентная кинетическая энергия; ω — удельная скорость диссипации турбулентной кинетической энергии; P_k — скорость генерации турбулентной кинетической энергии; β^* , σ^* , γ , β , $\sigma_{\omega 2}$, S — эмпирические коэффициенты модели; F_1 , F_2 — функции смешения.

Концентрация пара рассчитана по уравнению транспорта примеси:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_v r_v) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_v v_j r_v) &= \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\rho D + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial r_v}{\partial x_j} \right) &+ S_{vol} + S_{wall}, \end{aligned} \quad (5)$$

где ρ_v и r_v — плотность и массовая концентрация пара; D — коэффициент диффузии в системе «газы-пар»; Sc_t — турбулентное число Шмидта, принято равным $Sc_t = 0,7$; S_{vol} и S_{wall} — стоки массы пара при конденсации в объеме и на поверхности труб.

$$\begin{aligned} \frac{\partial(c_p \rho T)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (c_p \rho v_j T) &= \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\lambda + c_p \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) &+ Q_{vol} + Q_{wall}, \end{aligned} \quad (6)$$

где c_p , ρ и λ — удельная теплоемкость, плотность и коэффициент теплопроводности смеси; Pr_t — турбулентное число Прандтля, принято $Pr_t = 0,85$; Q_{vol} и Q_{wall} — источники энергии при конденсации в объеме и на поверхности труб.

Выражения для источниковых членов составляют используемую модель конденсации. Объемные источники теплоты и стоки массы рассчитывались следующим образом:

$$Q_{vol} = \min\left(-\rho c_p \frac{T - T_{sat}}{\Delta \tau}, \frac{h_{fg} \rho_v r_v}{\Delta \tau}\right), T < T_{sat}, \quad (7)$$

$$S_{vol} = -\frac{q_{vol}}{h_{fg}}, \quad (8)$$

где T_{sat} — температура насыщения, которая определяется стандартным способом по парциальным давлениям в зависимости от общего давления и концентраций компонентов смеси; h_{fg} — теплота фазового перехода жидкость-газ.

Физический смысл выражений (7) и (8): если температура в объеме меньше температуры насыщения, то сконденсируется часть пара, при этом высвободившаяся скрытая теплота парообразования локально нагреет смесь до температуры насыщения. С другой стороны, источниковый член лимитирован концентрацией пара в конечном объеме, т. е. исключена возможность конденсации большей массы пара, чем заключена в объеме.

Поверхностный источник энергии и поверхностный сток массы на трубках рассчитаны следующим образом:

$$S_{wall} = -C_1 \frac{T_{sat} - T_{wall}}{h_{fg}} \text{Re}^n, T_{wall} < T_{sat}, \quad (9)$$

$$Q_{wall} = -(h_{fg} + h_{H_2O}) S_{wall}, \quad (10)$$

где T_{wall} — температура стенки; Re — число Рейнольдса текущего ряда трубок в пучке, определенное по диаметру трубки и максимальной скорости в межтрубном пространстве; C_1, n — эмпирические коэффициенты модели, при этом C_1 имеет размерность коэффициента теплоотдачи; h_{H_2O} — удельная энтальпия воды при температуре насыщения.

Физический смысл выражения (9): скорость конденсации прямо пропорциональна разности температур между трубкой и температурой насыщения, скорости набегающего потока, диаметру трубки и обратно пропорциональна теплоте фазового перехода и вязкости смеси. При этом вся выделенная в ходе конденсации теплота поглощается стенкой трубки. В случае граничных условий первого рода на стенке данный источ-

ник не учитывается ввиду изотермичности стенки, для сопряженной постановки с расчетом распределения температур на стенке задается источник внутреннего тепловыделения. Член h_{H_2O} компенсирует потери энтальпии за счет стока массы.

Коэффициент n определяется из теории подобия между процессами теплообмена и массообмена, $n = 0,6$ [19]. Коэффициент $C_1 = 0,14 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$ получен в ходе калибровки модели по экспериментальным значениям плотности теплового потока при конденсации влаги из продуктов сгорания природного газа на горизонтальных гладких трубках [20] для точки при температуре стенки 50°C , коэффициенте избытка воздуха 1,09, скорости набегающего потока газов $0,55 \text{ м/с}$. Таким образом, имеется замкнутая система уравнений (1)–(10), описывающая процессы тепломассообмена в рассматриваемой задаче. Структура соотношений (1)–(10) такова, что предлагаемая модель может быть использована практически в любом коммерческом или свободно распространяемом CFD-коде.

Валидация математической модели

По причине того, что коэффициент C_1 предложенной модели конденсации был определен по результатам калибровки только по одной экспериментальной точке, необходима верификация модели с целью оценки точности воспроизведения различных режимов по скорости набегающего потока и температуре стенки. Для этого выполнено моделирование процесса при граничных условиях физических экспериментов, описанных в работах [13, 20] при соответствии расчетной области и граничных условий модели рабочему участку экспериментального стенда (рис. 1, таблица). Для построения сетки применена программа ANSYS Meshing, использована неструктурная сетка с тетраэдрическими элементами в основной зоне потока и призматическими элементами в пристеночной области трубок. Для расчета использован программный пакет ANSYS CFX 18. В качестве контрольного параметра для верификации выбран тепловой поток конденсации, рассчитываемый по массовому балансу.

Для валидации модели выполнены расчеты при двух скоростях набегающего потока воздуха и разных температурах стенки. Как видно из рис. 2, предложенная модель с коэффициентом, откалиброванным по одной точке, позволяет получать значения плотности тепло-

Таблица. Граничные условия численного моделирования

Table. Boundary conditions of numerical simulation

Параметр	Значения граничных условий	
	Режим течения, описанный в [20]	Режим течения, описанный в [13]
Скорость на входе w_{in} , м/с	0,55	3,62
Температура на входе T_{in} , °C	145	124
T_{wall} , °C (варьируемый параметр)	30; 35; 40; 45; 50	
$r_{v,in}$	0,111	0,103
Давление на выходе P_{out} , Па	101 300	101 300

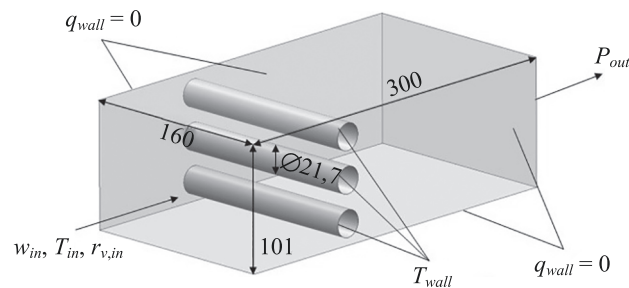


Рис. 1. Геометрия расчетной области и граничные условия валидационных расчетов (размеры приведены в миллиметрах).

q_{wall} — плотность теплового потока; P_{out} — давление на выходе

Fig. 1. Geometry and boundary conditions for simulation during model validation (dimensions are given in millimeters).

q_{wall} — heat flux; P_{out} — outlet pressure

вого потока конденсации, совпадающие с опытными данными в пределах неопределенности эксперимента ($\pm 20\%$), что говорит о ее физической адекватности и приемлемой для инженерных расчетов точности. На рис. 3 представлены примеры полей температуры и концентрации пара в области обтекания труб. Как видно из рис. 3, *b*, в теневой зоне за трубами концентрация пара падает, после чего выравнивается вниз по течению за счет диффузии и конвекции, что также соответствует физике процесса и подтверждает вывод об адекватности и точности модели.

Сопряженное моделирование тепломассообмена на участке конденсационного кожухотрубного теплообменника с шахматным расположением труб

Для сопряженного моделирования разработана модель секции конденсационного водоохлаждаемого кожухотрубного теплоутилизатора выхлопных газов с медными трубками. Геометрия модели показана на рис. 4. Граничные условия для модели теплоутилизатора: $w_{in} = 4$ м/с; $T_{in} = 145$ °С; скорость на вхо-

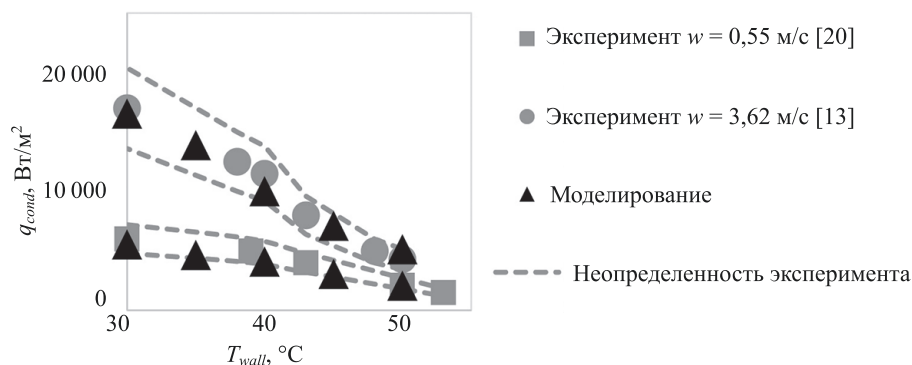


Рис. 2. Сравнение расчетной и экспериментальной зависимости плотности теплового потока конденсации от температуры стенки

Fig. 2. Comparison of calculated and experimental obtained condensation heat flux vs. wall temperature

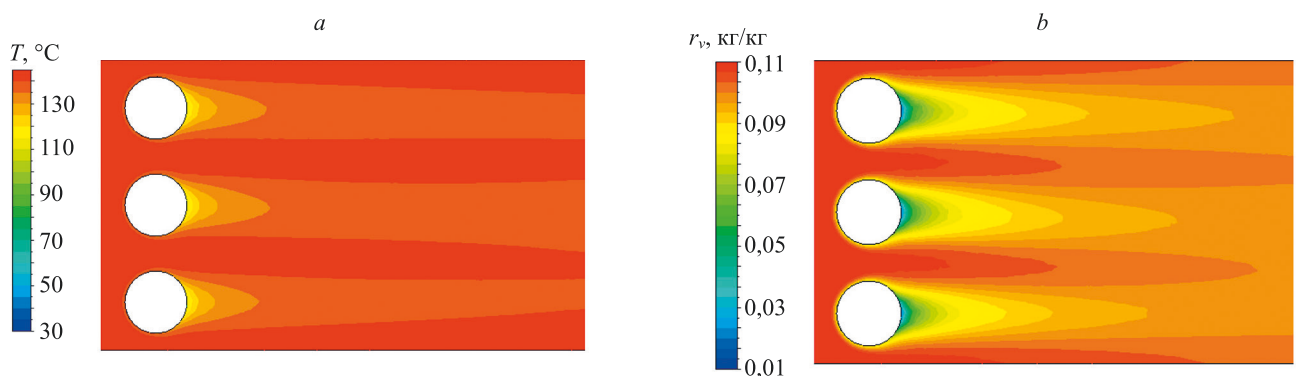


Рис. 3. Пример полей при $w = 0.55$ м/с, $T_{wall} = 30$ °С для температуры смеси (a) и концентрации пара (b)

Fig. 3. Example of temperature and vapor mass fraction contours: mixture temperature at $w = 0.55$ м/с, $T_{wall} = 30$ °С (a); vapor mass fraction at $w = 0.55$ м/с, $T_{wall} = 30$ °С (b)

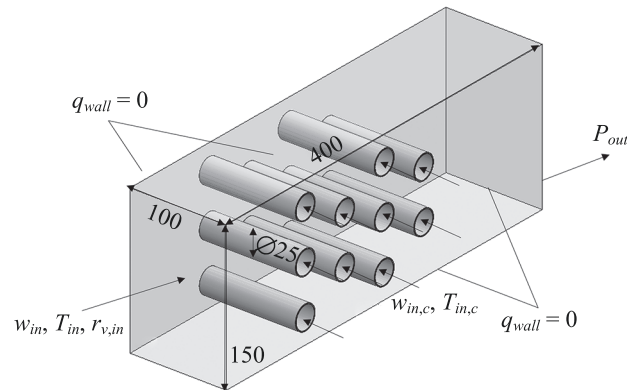


Рис. 4. Геометрия и граничные условия модели секции теплоутилизатора (размеры приведены в миллиметрах)

Fig. 4. Geometry and boundary conditions for heat exchanger section model

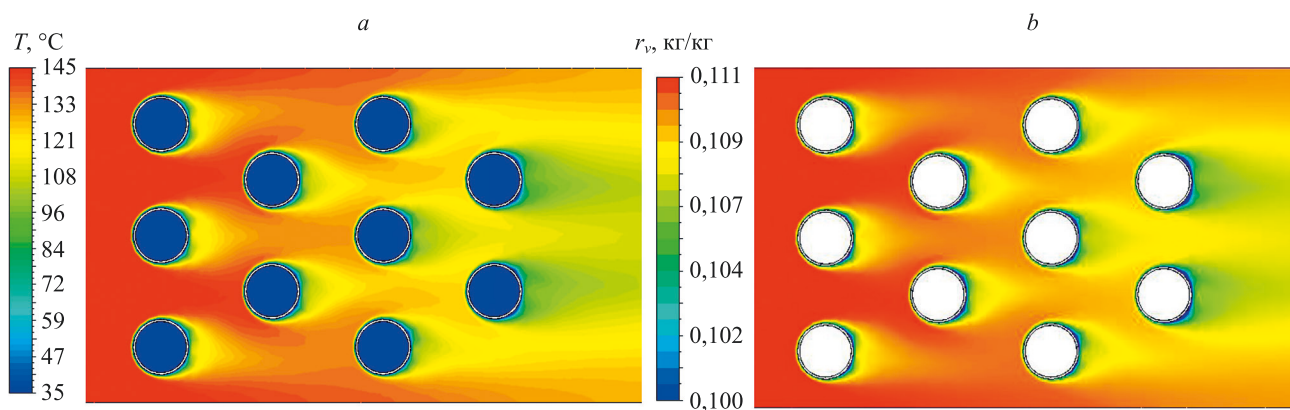


Рис. 5. Результаты моделирования секции теплоутилизатора в сопряженной постановке для полей температур (a) и концентраций водяного пара (b)

Fig. 5. Results of heat exchanger numerical simulation in a coupled approach: temperature contour (a), vapor mass fraction contour (b)

де $w_{in,c} = 0,1$ м/с; $r_{v,in} = 0,111$; температура на входе $T_{in,c} = 35$ °C.

На рис. 5 приведены поля температур и концентраций пара в сопряженной модели конденсационного теплоутилизатора. Видно, что в данной конфигурации сохраняется характер изменения температур и концентраций, наблюдаемый в калибровочных расчетах, что свидетельствует о применимости разработанной модели к моделированию в сопряженной постановке. Для оценки эффекта конденсации на тепловой баланс также выполнены сопряженные расчеты без учета конденсации. По результатам сравнения расчетов с учетом и без учета конденсации установлено, что при учете конденсации охлаждающая вода воспринимает на 20 % больше тепла.

Заключение

Разработана эмпирическая инженерная модель конденсации водяных паров из продуктов сгорания природного газа, учитывающая конденсацию в объеме при прохождении через точку росы и на поверхности трубок, имеющих температуру меньше температуры насыщения. Для разработанной модели проведена калибровка и определены значения коэффициентов, с использованием которых модель обеспечивает хорошее согласие с опытными данными при их настройке по одной точке, при этом отклонение не превышает 20 %. Проведены расчеты конденсационного теплоутилизатора в сопряженной постановке. Установлено, что учет конденсации на 20 % увеличивает воспринимаемый теплоносителем тепловой поток.

Литература

1. Ionkin I.L., Roslyakov P.V., Luning B. Application of condensing heat utilizers at heat-power engineering objects (Review) // *Thermal Engineering*. 2018. V. 65. N 10. P. 677–690. <https://doi.org/10.1134/s0040601518100038>
2. Апицына О.С., Малышев А.А., Зайцев А.В., Малинина О.С. Моделирование тепло-гидродинамических процессов в испарителях низкотемпературных систем с внутриканальным кипением хладагентов // *Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики*. 2023. Т. 23. № 2. С. 422–429. <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-2-422-429>
3. Bonneau C., Josset C., Melot V., Auvity B. Comprehensive review of pure vapour condensation outside of horizontal smooth tubes // *Nuclear Engineering and Design*. 2019. V. 349. P. 92–108. <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2019.04.005>
4. Huang J., Zhang J., Wang L. Review of vapor condensation heat and mass transfer in the presence of non-condensable gas // *Applied Thermal Engineering*. 2015. V. 89. P. 469–484. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2015.06.040>
5. El Fil B., Kini G., Garimella S. A review of dropwise condensation: Theory, modeling, experiments, and applications // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2020. V. 160. P. 120172. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.120172>
6. Tan Z., Cao Z., Chu W., Wang Q. Improvement on evaporation-condensation prediction of Lee model via a temperature deviation based dynamic correction on evaporation coefficient // *Case Studies in Thermal Engineering*. 2023. V. 48. P. 103147. <https://doi.org/10.1016/j.csite.2023.103147>
7. Minko K.B., Artemov V.I., Klement'ev A.A. Simulation of condensation of stagnant or moving saturated vapor on a horizontal tube using the volume-of-fluid (VOF) method // *Thermal Engineering*. 2023. V. 70. N 3. P. 175–193. <https://doi.org/10.1134/s0040601523030059>
8. Yankov G.G., Milman O.O., Minko K.B., Artemov V.I. Simulation of the condensation processes of R113 in a horizontal pipe by the VOF method // *Thermal Engineering*. 2023. V. 70. N 11. P. 860–874. <https://doi.org/10.1134/s0040601523110137>
9. Minko K.B., Artemov V.I., Yan'kov G.G., Krylov V.S. Numerical simulation of steam condensation in a steam-gas mixture flow in a variable-section channel with a bundle of smooth horizontal tubes // *Thermal Engineering*. 2019. V. 66. N 12. P. 928–935. <https://doi.org/10.1134/s0040601519120061>
10. Minko K.B., Yankov G.G., Artemov V.I., Milman O.O. A mathematical model of forced convection condensation of steam on smooth horizontal tubes and tube bundles in the presence of noncondensables // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2019. V. 140. P. 41–50. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.05.099>
11. Minko K.B., Artemov V.I., Yan'kov G.G., Krylov V.S. Verification of the mathematical model of steam film condensation from a flowing steam-air mixture on a bundle made of horizontal tubes // *Thermal Engineering*. 2019. V. 66. N 11. P. 804–811. <https://doi.org/10.1134/s004060151911003x>
12. Minko K.B., Yan'kov G.G., Krylov V.S., Klementiev A.A. An engineering model of steam condensation from a flowing steam-gas mixture on a bundle made of horizontal tubes // *Thermal Engineering*. 2021. V. 68. N 9. P. 705–716. <https://doi.org/10.1134/s0040601521080061>
13. Osakabe M., Itoh T., Yagi K. Condensation heat transfer of actual flue gas on horizontal tubes // *Proceedings of the 5th ASME/JSME Joint Thermal Engineering Conference*. 1999. San Diego, California. P. 1–8.
14. Lin C.-X., Wang D., Bao S. Numerical modeling and simulation of condensation heat transfer of a flue gas in a bundle of transport membrane tubes // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2013. V. 60. P. 41–50. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2012.12.053>
15. Yang K., Yang J., Da Y., Han L., Deng L., Che D. A numerical study on convective condensation of flue gas in tubular heat exchangers // *Applied Thermal Engineering*. 2024. V. 243. P. 122524. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2024.122524>
16. Wu X., Che D. A numerical study of high moisture flue gas in tube banks // *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*. 2014. V. 65. N 4. P. 357–377. <https://doi.org/10.1080/10407782.2013.831673>

References

1. Ionkin I.L., Roslyakov P.V., Luning B. Application of condensing heat utilizers at heat-power engineering objects (Review). *Thermal Engineering*, 2018, vol. 65, no. 10, pp. 677–690. <https://doi.org/10.1134/s0040601518100038>
2. Apitsyna O.S., Malyshev A.A., Zaitsev A.V., Malinina O.S. Modeling of heat-hydrodynamic processes in evaporators of low-temperature systems with intrachannel boiling of refrigerants. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 2, pp. 422–429. (in Russian). <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-2-422-429>
3. Bonneau C., Josset C., Melot V., Auvity B. Comprehensive review of pure vapour condensation outside of horizontal smooth tubes. *Nuclear Engineering and Design*, 2019, vol. 349, pp. 92–108. <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2019.04.005>
4. Huang J., Zhang J., Wang L. Review of vapor condensation heat and mass transfer in the presence of non-condensable gas. *Applied Thermal Engineering*, 2015, vol. 89, pp. 469–484. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2015.06.040>
5. El Fil B., Kini G., Garimella S. A review of dropwise condensation: Theory, modeling, experiments, and applications. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2020, vol. 160, pp. 120172. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.120172>
6. Tan Z., Cao Z., Chu W., Wang Q. Improvement on evaporation-condensation prediction of Lee model via a temperature deviation based dynamic correction on evaporation coefficient. *Case Studies in Thermal Engineering*, 2023, vol. 48, pp. 103147. <https://doi.org/10.1016/j.csite.2023.103147>
7. Minko K.B., Artemov V.I., Klement'ev A.A. Simulation of condensation of stagnant or moving saturated vapor on a horizontal tube using the volume-of-fluid (VOF) method. *Thermal Engineering*, 2023, vol. 70, no. 3, pp. 175–193. <https://doi.org/10.1134/s0040601523030059>
8. Yankov G.G., Milman O.O., Minko K.B., Artemov V.I. Simulation of the condensation processes of R113 in a horizontal pipe by the VOF method. *Thermal Engineering*, 2023, vol. 70, no. 11, pp. 860–874. <https://doi.org/10.1134/s0040601523110137>
9. Minko K.B., Artemov V.I., Yan'kov G.G., Krylov V.S. Numerical simulation of steam condensation in a steam-gas mixture flow in a variable-section channel with a bundle of smooth horizontal tubes. *Thermal Engineering*, 2019, vol. 66, no. 12, pp. 928–935. <https://doi.org/10.1134/s0040601519120061>
10. Minko K.B., Yankov G.G., Artemov V.I., Milman O.O. A mathematical model of forced convection condensation of steam on smooth horizontal tubes and tube bundles in the presence of noncondensables. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, vol. 140, pp. 41–50. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.05.099>
11. Minko K.B., Artemov V.I., Yan'kov G.G., Krylov V.S. Verification of the mathematical model of steam film condensation from a flowing steam-air mixture on a bundle made of horizontal tubes. *Thermal Engineering*, 2019, vol. 66, no. 11, pp. 804–811. <https://doi.org/10.1134/s004060151911003x>
12. Minko K.B., Yan'kov G.G., Krylov V.S., Klementiev A.A. An engineering model of steam condensation from a flowing steam-gas mixture on a bundle made of horizontal tubes. *Thermal Engineering*, 2021, vol. 68, no. 9, pp. 705–716. <https://doi.org/10.1134/s0040601521080061>
13. Osakabe M., Itoh T., Yagi K. Condensation heat transfer of actual flue gas on horizontal tubes. *Proceedings of the 5th ASME/JSME Joint Thermal Engineering Conference*, San Diego, California, 1999, pp. 1–8.
14. Lin C.-X., Wang D., Bao S. Numerical modeling and simulation of condensation heat transfer of a flue gas in a bundle of transport membrane tubes. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2013, vol. 60, pp. 41–50. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2012.12.053>
15. Yang K., Yang J., Da Y., Han L., Deng L., Che D. A numerical study on convective condensation of flue gas in tubular heat exchangers. *Applied Thermal Engineering*, 2024, vol. 243, pp. 122524. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2024.122524>
16. Wu X., Che D. A numerical study of high moisture flue gas in tube banks. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 2014, vol. 65, no. 4, pp. 357–377. <https://doi.org/10.1080/10407782.2013.831673>

17. Vyskocil L., Schmid J., Macek J. CFD simulation of air–steam flow with condensation // *Nuclear Engineering and Design*. 2014. V. 279. P. 147–157. <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2014.02.014>
18. 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>
19. Taniguchi H., Kudo K., Hwang Q.-R., Fujii A. Heat and mass transfer from air with high water vapor content (Latent heat recovery from flue gas) // *JSME international journal. Ser. 2, Fluids engineering, heat transfer, power, combustion, thermophysical properties*. 1988. V. 31. N 2. P. 299–305. https://doi.org/10.1299/jsmeb1988.31.2_299
20. Osakabe M., Ishida K., Yagi K., Itoh T., Ohmasa K. Condensation heat transfer on tubes in actual flue gas // *Heat Transfer — Asian Research*. 2001. V. 30. N 2. P. 139–151. [https://doi.org/10.1002/1523-1496\(200103\)30:2<139::AID-HTJ5>3.0.CO;2-0](https://doi.org/10.1002/1523-1496(200103)30:2<139::AID-HTJ5>3.0.CO;2-0)

Авторы

Брызгунов Павел Александрович — аспирант, Национальный исследовательский университет «МЭИ», Москва, 111250, Российская Федерация, [sc 57844836600](https://orcid.org/0000-0003-3710-5116), <https://orcid.org/0000-0003-3710-5116>, bryzgunova@mpei.ru

Рогалев Андрей Николаевич — доктор технических наук, доцент, заведующий кафедрой, Национальный исследовательский университет «МЭИ», Москва, 111250, Российская Федерация, [sc 34980078500](https://orcid.org/0000-0001-7256-0144), <https://orcid.org/0000-0001-7256-0144>, rogalevan@mpei.ru

Киндра Владимир Олегович — кандидат технических наук, доцент, Национальный исследовательский университет «МЭИ», Москва, 111250, Российская Федерация, [sc 57023993700](https://orcid.org/0000-0002-8406-7901), <https://orcid.org/0000-0002-8406-7901>, kindravo@mpei.ru

Комаров Иван Игоревич — доктор технических наук, доцент, доцент, Национальный исследовательский университет «МЭИ», Москва, 111250, Российская Федерация, [sc 56105319600](https://orcid.org/0000-0003-3853-8220), <https://orcid.org/0000-0003-3853-8220>, komarovii@mpei.ru

Злышко Ольга Владимировна — кандидат экономических наук, доцент, доцент, Национальный исследовательский университет «МЭИ», Москва, 111250, Российская Федерация, [sc 57060525900](https://orcid.org/0000-0003-0554-4026), <https://orcid.org/0000-0003-0554-4026>, zlyvkoov@mpei.ru

Authors

Pavel A. Bryzgunov — PhD Student, National Research University MPEI, Moscow, 111250, Russian Federation, [sc 57844836600](https://orcid.org/0000-0003-3710-5116), <https://orcid.org/0000-0003-3710-5116>, bryzgunova@mpei.ru

Andrey N. Rogalev — D.Sc., Associate Professor, Head of Department, National Research University MPEI, Moscow, 111250, Russian Federation, [sc 34980078500](https://orcid.org/0000-0001-7256-0144), <https://orcid.org/0000-0001-7256-0144>, rogalevan@mpei.ru

Vladimir O. Kindra — PhD, Associate Professor, National Research University MPEI, Moscow, 111250, Russian Federation, [sc 57023993700](https://orcid.org/0000-0002-8406-7901), <https://orcid.org/0000-0002-8406-7901>, kindravo@mpei.ru

Ivan I. Komarov — D.Sc., Associate Professor, Associate Professor, National Research University MPEI, Moscow, 111250, Russian Federation, [sc 56105319600](https://orcid.org/0000-0003-3853-8220), <https://orcid.org/0000-0003-3853-8220>, komarovii@mpei.ru

Olga V. Zlyvko — PhD (Economy), Associate Professor, Associate Professor, National Research University MPEI, Moscow, 111250, Russian Federation, [sc 57060525900](https://orcid.org/0000-0003-0554-4026), <https://orcid.org/0000-0003-0554-4026>, zlyvkoov@mpei.ru

Статья поступила в редакцию 12.04.2024

Одобрена после рецензирования 23.04.2024

Принята к печати 22.07.2024

Received 12.04.2024

Approved after reviewing 23.04.2024

Accepted 22.07.2024



Работа доступна по лицензии
Creative Commons
«Attribution-NonCommercial»

doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-629-636

УДК 519.63

Потеря устойчивости защемленной по контуру прямоугольной нанопластины

Михаил Васильевич Сухотерин¹✉, Анна Анатольевна Сосновская²

^{1,2} Государственный университет морского и речного флота имени адмирала С.О. Макарова, Санкт-Петербург, 198035, Российская федерация

¹ sukhoterimv@gumrf.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-8295-7089>

² sosnovskayaaa@gumrf.ru, <https://orcid.org/0009-0000-6476-6783>

Аннотация

Введение. Изучен спектр критических нагрузок и форм равновесия CCCC-нанопластины (C — clamped edge, защемленный край) при различных значениях нелокального нанопараметра. **Метод.** Симметричные формы представлены двумя гипербола-тригонометрическими рядами по двум координатам, которые подчинялись основному дифференциальному уравнению физического состояния А.Д. Эрингена. Граничные условия отсутствия прогибов и углов поворота защемленных граней были удовлетворены полностью. В результате получена однородная бесконечная система линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных коэффициентов гипербола-тригонометрических рядов, содержащая в качестве основного параметра относительную сжимающую нагрузку. Преобразованная система включает только одну последовательность коэффициентов. Построен итерационный процесс поиска нетривиального решения в сочетании с методом перебора величины нагрузки. **Основные результаты.** Для каждого значения нелокального параметра найдены первые четыре критические нагрузки для симметричных форм сверхкритического равновесия и получены их 3D-изображения. Установлено, что критические нагрузки убывали с ростом нелокального параметра. Исследовано влияние на точность результатов количества членов, удерживаемых в рядах, и числа итераций. **Обсуждение.** Полученные результаты могут быть использованы при проектировании различных наноразмерных smart-конструкций.

Ключевые слова

прямоугольная CCCC-нанопластина, теория Эрингена, спектр критических нагрузок, ряды Фурье

Ссылка для цитирования: Сухотерин М.В., Сосновская А.А. Потеря устойчивости защемленной по контуру прямоугольной нанопластины // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2024. Т. 24, № 4. С. 629–636. doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-629-636

Instability of a rectangular CCCC-nanoplate

Mikhail V. Sukhoterin¹✉, Anna A. Sosnovskaya²

^{1,2} Admiral Makarov State University of Maritime and Inland Shipping, Saint Petersburg, 198035, Russian Federation

¹ sukhoterimv@gumrf.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-8295-7089>

² sosnovskayaaa@gumrf.ru, <https://orcid.org/0009-0000-6476-6783>

Abstract

The spectrum of critical loads and equilibrium forms of a CCCC-nanoplate (C — clamped edge) at various values of a non-local nanoparameter has been studied. The symmetric solution is represented by two hyperbolic-trigonometric series in two coordinates which obeyed the basic differential equation of the physical state of Eringen. The boundary conditions for the absence of deflections and angles of rotation of the pinched faces were precisely satisfied. As a result, a homogeneous infinite system of linear algebraic equations with respect to unknown coefficients of these series is obtained containing a relative compressive load as the main parameter. After the conversion, the system began to contain only one sequence of coefficients. An iterative process of searching for a non-trivial solution in combination with the method of iterating over the load value is constructed. For each value of the nonlocal parameter, the first four critical loads for symmetric forms of supercritical equilibrium are found and their 3D images are obtained. It was found

that critical loads decreased with an increase in the nonlocal parameter. The influence of the number of members held in rows and the number of iterations on the accuracy of the results is investigated. The results obtained can be used in the design of various nanoscale smart structures.

Keywords

rectangular CCCC-nanoplate, Eringen theory, critical load spectrum, Fourier series

For citation: Sukhoterin M.V., Sosnovskaya A.A. Instability of a rectangular CCCC-nanoplate. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 4, pp. 629–636 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-629-636

Введение

Многочисленные исследования в области деформирования наноразмерных балок, пластин и оболочек, а также дискретных наноструктур (нанотрубок, графена) появились после публикации ряда работ турецкого ученого Ахмета Джемала (Кемаля) Эрингена, а также его монографии [1]. Эрингеном были получены уравнения физического состояния в интегральной и дифференциальной формах, в которых присутствует так называемый нелокальный параметр, учитывающий размерный эффект нанообъекта (размер гранул, расстояние между атомами, внешние размеры), свойства материала и влияние соседних точек на напряженно-деформированное состояние.

Приведем эти две формы уравнений:

$$\sigma_{ij}(\mathbf{x}) = \int_V K(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, \tilde{\varepsilon}) \sigma_{ij}^{(c)}(\mathbf{x}') dV(\mathbf{x}'),$$

$$[1 - (e_0 A)^2 \nabla^2] \sigma_{ij}(\mathbf{x}) = \sigma_{ij}^{(c)}(\mathbf{x}).$$

Здесь $\sigma_{ij}(\mathbf{x})$ — тензор напряжений нелокальной теории; V — объем области; $K(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, \tilde{\varepsilon})$ — функция влияния (ядро Гельмгольца), которая быстро убывает по мере удаления точки влияния $\mathbf{x}'$ от рассматриваемой точки $\mathbf{x}(x_1, x_2, x_3)$; $\tilde{\varepsilon} = e_0 A / l_c$ — безразмерный нелокальный параметр; e_0 — безразмерная нелокальная упругая константа Эрингена (находится экспериментально для каждого материала или путем сопоставления дисперсионных кривых плоских волн с кривыми динамики атомной решетки); A — внутренний характерный размер (размер гранул, расстояние между атомами дискретной структуры); ∇^2 — двумерный оператор Лапласа; l_c — внешний характерный размер нанообъекта (например, длина, ширина или высота); $\sigma_{ij}^{(c)}(\mathbf{x})$ — тензор напряжений классической теории.

Эрингеном найдено значение константы $e_0 = 0,39$. В работе [2] методом градиента деформации получено значение $e_0 = 0,288$. Нулевое значение нелокального параметра соответствует обычной классической теории пластин и оболочек. Рост этого параметра [3] приводит к росту прогибов и снижению собственных частот колебаний и критических нагрузок при потере устойчивости. В работе [4] показано, что дифференциальное уравнение Эрингена не вполне корректно, так как оно не учитывает краевые эффекты нанообъекта. В том числе отмечено, что интегральная форма, которая учитывает краевые эффекты, приводит к сложному и не всегда реализуемому процессу поиска решения. Эрингеном [1] предложено также смешанное уравнение, учитывающее как локальный, так и нелокальный параметры:

$$\sigma_{ij}(\mathbf{x}) = \xi \sigma_{ij}^{(c)}(\mathbf{x}) + (1 - \xi) \int_V K(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, \tilde{\varepsilon}) \sigma_{ij}^{(c)}(\mathbf{x}') dV(\mathbf{x}'),$$

где $\xi \in [0; 1]$ — коэффициент, учитывающий долю локальной составляющей закона физического состояния.

Предмет исследования

Важной задачей теории нанопластин является задача устойчивости при двухосном сжатии ее сторон равномерной нагрузкой от воздействия электрического или магнитного полей. В работах [5–9] предложено решение данной задачи энергетическими методами. В [5] рассмотрен прямоугольный однослойный лист графена переменной толщины со свободно опертыми кромками (SSSS-пластина, S — supported edge, опертый край). Критические нагрузки для различных значений нелокального параметра определялись из условия минимума потенциальной энергии пластины, а также с использованием метода Галеркина. В работе [6] задача колебаний и устойчивости нанопластины на упругом основании решалась методом Ритца. Отметим, что в перечисленных работах рассматривались пластины с различными граничными условиями. Работа [7] посвящена устойчивости в магнитном поле магнито-электроупругой функционально градуированной нанопластины с пьезоэлектрическим приводом (актуатором). Для решения использовались тригонометрические функции. В [8] применен энергетический итерационный метод разделения переменных, основанный на соотношении Рэлея: вариация энергии деформации приравнивалась работе критической силы на возможном перемещении. Рассматривались различные граничные условия (пяти видов). Отношение сторон пластины принято равным 0,5, 1 и 2. Получены численные результаты для эйлеровых критических нагрузок в зависимости от значений нелокального параметра.

В работе [9] применен метод Рэлея–Ритца в сочетании с принципом Гамильтона и учтено влияние деформации поперечного сдвига в нанопластинах средней толщины.

В [10] использован симплектический метод в сочетании с методом суперпозиции. Исследована консольная пластина на упругом основании, грани которой сжимаются плоским магнитным полем. В работах [11–13] применен метод дифференциальных квадратур, с помощью которого решалась задача устойчивости однослойного листа графена [11, 12] и ортотропной нанопластины на упругом основании [13].

В [14] использован метод конечных полос в сочетании с принципом виртуальной работы. Исследованы ортотропные нанопластины при двух- и одноосном

сжатиях, а также при чистом сдвиге, с различными граничными условиями, включая условия защемленного контура. В [15] применен метод конечных разностей. Получены 3D-формы потери устойчивости для первых трех критических нагрузок SSSS- и CCCC-нанопластин С — clamped edge, защемленный край). В работе [16] задача устойчивости функционально-градуированных SSSS-нанопластин на упругом основании при биаксиальной нагрузке решена с помощью принципа Гамильтона.

Применение различных приближенных методов оставляет открытым вопрос о точности вычислений критических нагрузок. Для нанопластин, обладающих высокой упругостью, необходимо знать некоторый спектр критических нагрузок и соответствующих форм, что может использоваться в создании различных датчиков.

В настоящей работе для определения спектра критических нагрузок и соответствующих форм равновесия CCCC-нанопластин в рамках нелокальной теории Эрингена (дифференциальная форма) использовался итерационный метод в сочетании с методом перебора параметра нагрузки (метод «стрельбы») [17, 18]. Искомая функция прогибов представлена двумя гипербола-тригонометрическими рядами. Это позволило с высокой точностью определить первые четыре критические нагрузки симметричных форм равновесия для ряда значений нелокального параметра.

Постановка задачи

Рассмотрим защемленную по контуру прямоугольную нанопластину постоянной толщины h с размерами $a \times b$ (CCCC-нанопластина). Начало координат разместим в центре пластины, оси направим параллельно ее сторонам. Пусть в своей плоскости нанопластина сжимается двухосными равномерно распределенными усилиями (биаксиальная нагрузка) одинаковой интенсивности $N_x = N_y = N$, приложенными ко всем граням (рис. 1).

Биаксиальная нагрузка может иметь место, когда нанопластина находится в магнитном или электрическом поле.

Дифференциальное уравнение равновесия нанопластины после потери устойчивости от действия критической сжимающей нагрузки N имеет вид [8]:

$$D\nabla^2\nabla^2w + N\nabla^2w - \varepsilon^*N\nabla^2\nabla^2w = 0, \quad (1)$$

где w — прогиб пластины (по оси oz); $D = Eh^3[12(1 - \nu^2)]$ — изгибная жесткость; E — модуль упругости Юнга; ν — коэффициент Пуассона; $\varepsilon^* = (e_0A)^2$ — постоянная наноматериала. Последнее слагаемое в формуле (1) учитывает влияние наноразмеров пластины. Если $e_0A = 0$, то получим уравнение устойчивости классической теории пластин. Рабочий диапазон 0–2 нм (нанометра) изменения нелокального параметра e_0A для нанопластин впервые введен в работе [19].

Перейдем к безразмерным координатам $x = X/b$, $y = Y/b$. Тогда уравнение (1) примет вид:

$$\nabla^2\nabla^2w + P\nabla^2w - \varepsilon P\nabla^2\nabla^2w = 0, \quad (2)$$

где $P = Nb^2/D$ — безразмерная интенсивность сжимающих усилий; $\varepsilon = \varepsilon^*/b^2$ — безразмерная постоянная на-

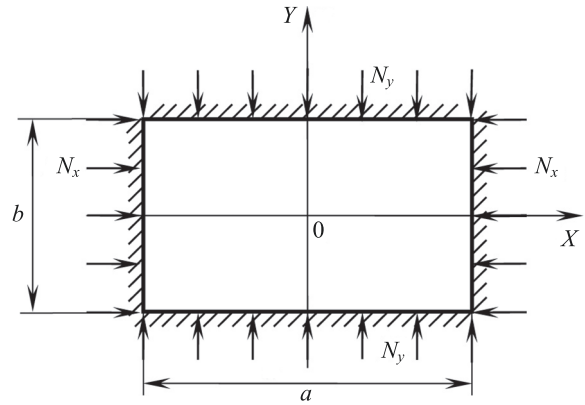


Рис. 1. Схема сжимающей нагрузки CCCC-нанопластины

Fig. 1. CCCC-nanoplate compressive load diagram

номатериала. В данном случае относительные размеры нанопластины: $x \in [-\gamma/2, \gamma/2]$, $y \in [-1/2, 1/2]$, где $\gamma = a/b$.

Граничные условия имеют вид:

$$w = 0, \quad \partial w / \partial x \text{ на гранях } x = \pm \gamma/2, \quad (3)$$

$$w = 0, \quad \partial w / \partial y \text{ на гранях } y = \pm 1/2. \quad (4)$$

Равенство нулю производных на контуре означает, что углы поворота защемленных граней должны быть равны нулю.

Построение решения

Высокоупругие нанопластины с ростом сжимающей нагрузки могут несколько раз терять устойчивость, меняя формы закритического равновесия. Эти формы могут быть симметричными относительно осей координат, антисимметричными и смешанными. Найдем критические усилия, которые приводят к симметричным формам равновесия нагрузок. Первая (эйлерова) критическая нагрузка должна давать симметричную форму, подобную форме изгиба нанопластины под действием равномерной поперечной нагрузки. Антисимметричные и смешанные формы равновесия и соответствующие критические значения изучим отдельно.

Прогиб нанопластины выберем в виде суммы двух функциональных рядов с четными функциями:

$$w_1(x, y) = \sum_{k=1,3,\dots}^{\infty} (-1)^k A_k \operatorname{ch}(\alpha_k x) \cos(\lambda_k y), \quad (5)$$

$$w_2(x, y) = \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} (-1)^s C_s \operatorname{ch}(\xi_s y) \cos(\mu_s x), \quad (6)$$

где A_k , α_k , C_s , ξ_s — искомые коэффициенты; $\lambda_k = k\pi$; $\mu_s = s\pi/\gamma$; $k = (k+2)/2$; $\tilde{s} = (s+1)/2$.

Выбор коэффициентов λ_k и μ_s обусловлен тем, что на концах нанопластины $y = \pm 1/2$ и $x = \pm \gamma/2$ соответствующие косинусы должны обращаться в нуль, а это возможно, если индексы k и s нечетные. Нечетность этих индексов (и исключение четных) может быть обеспечена при разложении гиперболических функций в ряды Фурье по косинусам при условии антисимметричного продолжения этих функций на «фиктивных» отрезках $[1/2, 1]$ и $[\gamma/2, \gamma]$. Другими словами, для разложения

рассматриваются отрезки двойной длины и ширины $[-\gamma, \gamma]$, $[-1, 1]$. Заметим, что в центре пластины оба тригонометрических косинуса дают единицу.

Каждый из рядов (5) и (6) подчиним основному уравнению (2) задачи. Это даст два биквадратных уравнения для определения коэффициентов α_k и ξ_s :

$$\begin{aligned} (1 - \varepsilon P)\alpha_k^4 + [P - 2(1 - \varepsilon P)\lambda_k^2]\alpha_k^2 - P\lambda_k^2 + (1 - \varepsilon P)\lambda_k^4 &= 0, \\ (1 - \varepsilon P)\xi_s^4 + [P - 2(1 - \varepsilon P)\mu_s^2]\xi_s^2 - P\mu_s^2 + (1 - \varepsilon P)\mu_s^4 &= 0, \end{aligned}$$

решение которых

$$\begin{aligned} \alpha_{k1} &= \lambda_k, \quad \alpha_{k2} = \sqrt{\lambda_k^2 - P/(1 - \varepsilon P)}, \\ \xi_{s1} &= \mu_s, \quad \xi_{s2} = \sqrt{\mu_s^2 - P/(1 - \varepsilon P)}. \end{aligned} \quad (7)$$

Отрицательные корни не будем учитывать в силу четности решения.

С учетом полученных корней функции (5) и (6) запишем в виде:

$$w_1(x, y) = \sum_{k=1,3,\dots}^{\infty} (-1)^k [A_k \operatorname{ch}(\alpha_{k1}x) + B_k \operatorname{ch}(\alpha_{k2}x)] \cos(\lambda_k y), \quad (8)$$

$$w_2(x, y) = \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} (-1)^s [C_s \operatorname{ch}(\xi_{s1}y) + D_s \operatorname{ch}(\xi_{s2}y)] \cos(\mu_s x), \quad (9)$$

где B_k и D_s — неопределенные коэффициенты.

Если потребовать, чтобы функция (8) обращалась в нуль на гранях $x = \pm \gamma/2$, а функция (9) — на гранях $y = \pm 1/2$, то для неопределенных коэффициентов получим соотношения

$$B_k = -A_k \operatorname{ch} \alpha_{k1}^* / \operatorname{ch} \alpha_{k2}^*, \quad D_s = -C_s \operatorname{ch} \xi_{s1}^* / \operatorname{ch} \xi_{s2}^*,$$

где $\alpha_{k1}^* = \alpha_{k1}\gamma/2$, $\alpha_{k2}^* = \alpha_{k2}\gamma/2$, $\xi_{s1}^* = \xi_{s1}/2$, $\xi_{s2}^* = \xi_{s2}/2$.

В результате ряды (8) и (9) примут вид:

$$w_1(x, y) = \sum_{k=1,3,\dots}^{\infty} (-1)^k A_k^* \left[\frac{\operatorname{ch}(\alpha_{k1}x)}{\operatorname{ch} \alpha_{k1}^*} - \frac{\operatorname{ch}(\alpha_{k2}x)}{\operatorname{ch} \alpha_{k2}^*} \right] \cos(\lambda_k y), \quad (10)$$

$$w_2(x, y) = \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} (-1)^s C_s^* \left[\frac{\operatorname{ch}(\xi_{s1}y)}{\operatorname{ch} \xi_{s1}^*} - \frac{\operatorname{ch}(\xi_{s2}y)}{\operatorname{ch} \xi_{s2}^*} \right] \cos(\mu_s x), \quad (11)$$

где $A_k^* = A_k \operatorname{ch} \alpha_{k1}^*$, $C_s^* = C_s \operatorname{ch} \xi_{s1}^*$.

Потребуем, чтобы были равны нулю и углы поворота на краях нанопластины, т. е. выполнялись вторые условия (3), (4). Тогда получим систему двух уравнений

$$\begin{aligned} &\sum_{k=1,3,\dots}^{\infty} (-1)^k A_k^* (\alpha_{k1} \operatorname{th} \alpha_{k1}^* - \alpha_{k2} \operatorname{th} \alpha_{k2}^*) \cos(\lambda_k y) + \\ &+ \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} C_s^* \mu_s \left[\frac{\operatorname{ch}(\xi_{s1}y)}{\operatorname{ch} \xi_{s1}^*} - \frac{\operatorname{ch}(\xi_{s2}y)}{\operatorname{ch} \xi_{s2}^*} \right] = 0, \\ &\sum_{k=1,3,\dots}^{\infty} A_k^* \lambda_k \left[\frac{\operatorname{ch}(\alpha_{k1}x)}{\operatorname{ch} \alpha_{k1}^*} - \frac{\operatorname{ch}(\alpha_{k2}x)}{\operatorname{ch} \alpha_{k2}^*} \right] + \\ &+ \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} (-1)^s C_s^* (\xi_{s1} \operatorname{th} \xi_{s1}^* - \xi_{s2} \operatorname{th} \xi_{s2}^*) \cos(\mu_s x) = 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Для упрощения системы (12) разложим гиперболические функции в ряды Фурье по косинусам. Эти разложения имеют вид [16, 17]:

$$\begin{aligned} \operatorname{ch} \xi_{s1} y &= -4 \operatorname{ch} \xi_{s1}^* \sum_{k=1,3,\dots}^{\infty} (-1)^k \frac{\lambda_k \cos \lambda_k y}{\xi_{s1}^2 + \lambda_k^2}, \\ \operatorname{ch} \xi_{s2} y &= -4 \operatorname{ch} \xi_{s2}^* \sum_{k=1,3,\dots}^{\infty} (-1)^k \frac{\lambda_k \cos \lambda_k y}{\xi_{s2}^2 + \lambda_k^2}, \\ \operatorname{ch} \alpha_{k1} x &= -\frac{4}{\gamma} \operatorname{ch} \alpha_{k1}^* \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} (-1)^s \frac{\mu_s \cos \mu_s x}{\alpha_{k1}^2 + \mu_s^2}, \\ \operatorname{ch} \alpha_{k2} x &= -\frac{4}{\gamma} \operatorname{ch} \alpha_{k2}^* \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} (-1)^s \frac{\mu_s \cos \mu_s x}{\alpha_{k2}^2 + \mu_s^2}. \end{aligned}$$

Как было отмечено, гиперболические функции на «фиктивных» отрезках $[1/2, 1]$ и $[\gamma/2, \gamma]$ при разложении необходимо дополнить своими антисимметричными выражениями относительно точек $y = 1/2$ и $x = \gamma/2$. В итоге это позволило получить простые разложения, не содержащие четных гармоник. Именно поэтому и в рядах (5), (6) нет четных гармоник.

Подставим разложения в систему (12) и переставим знаки суммирования в двойных суммах. После освобождения от знака внешней суммы система упростится:

$$\begin{cases} A_k^* (\alpha_{k1} \operatorname{th} \alpha_{k1}^* - \alpha_{k2} \operatorname{th} \alpha_{k2}^*) + \\ + 4 \lambda_k \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} C_s^* \mu_s \frac{\xi_{s1}^2 - \xi_{s2}^2}{(\xi_{s1}^2 + \lambda_k^2)(\xi_{s2}^2 + \lambda_k^2)} = 0, \\ \frac{4}{\gamma} \mu_s \sum_{k=1,3,\dots}^{\infty} A_k^* \lambda_k \frac{\alpha_{k1}^2 - \alpha_{k2}^2}{(\alpha_{k1}^2 + \mu_s^2)(\alpha_{k2}^2 + \mu_s^2)} + \\ + C_s^* (\xi_{s1} \operatorname{th} \xi_{s1}^* - \xi_{s2} \operatorname{th} \xi_{s2}^*) = 0. \end{cases}$$

Из (7) следует, что $\xi_{s1}^2 - \xi_{s2}^2 = \alpha_{k1}^2 - \alpha_{k2}^2 = P/(1 - \varepsilon P)$, тогда получим

$$\begin{cases} A_k^* = -4 \frac{P}{1 - \varepsilon P} \frac{\lambda_k}{\varphi_k} \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} \frac{C_s^* \mu_s}{\sigma_{ks} \left(\sigma_{ks} - \frac{P}{1 - \varepsilon P} \right)} \\ C_s^* = -\frac{4}{\gamma} \frac{P}{1 - \varepsilon P} \frac{\mu_s}{\theta_s} \sum_{k=1,3,\dots}^{\infty} \frac{A_k^* \lambda_k}{\sigma_{ks} \left(\sigma_{ks} - \frac{P}{1 - \varepsilon P} \right)} \end{cases} \quad (13)$$

где $\varphi_k = \alpha_{k1} \operatorname{th} \alpha_{k1}^* - \alpha_{k2} \operatorname{th} \alpha_{k2}^*$, $\theta_s = \xi_{s1} \operatorname{th} \xi_{s1}^* - \xi_{s2} \operatorname{th} \xi_{s2}^*$, $\sigma_{ks} = \lambda_k^2 + \mu_s^2$.

Если подставить вторую формулу системы уравнений (13) в первую, то разрешающая бесконечная система примет вид

$$\begin{aligned} A_K^* &= \frac{16P^2}{\gamma(1 - \varepsilon P)^2} \frac{\lambda_K}{\varphi_K} \sum_{s=1,3,\dots}^{\infty} \frac{\mu_s^2}{\theta_s} \frac{1}{\sigma_{Ks} \left(\sigma_{Ks} - \frac{P}{1 - \varepsilon P} \right)} \times \\ &\times \sum_{k=1,3,\dots}^{\infty} \frac{\lambda_k A_k^*}{\left(\sigma_{ks} - \frac{P}{1 - \varepsilon P} \right)}, \quad K = 1, 3, \dots \end{aligned} \quad (14)$$

Формула (14) представляет собой однородную бесконечную систему линейных алгебраических уравнений относительно одной последовательности коэффициентов A_k^* . Система (14) приведена к стандартному виду: неизвестные коэффициенты фигурируют и в левой части (обособлено), и под знаком внутренней суммы в правой, что позволяет организовать итерационный процесс нахождения нетривиальных решений вместо требования обращения в нуль определителя системы. Коэффициенты в правой части можно считать предыдущей итерацией, а в левой — последующей. Система (14) содержит в качестве параметра неизвестную критическую нагрузку P , которую можно перебирать методом «стрельбы» до получения нетривиальных решений системы.

Численные результаты моделирования. Обсуждение

Для решения системы (14) разработана программа в среде аналитических вычислений Maple. Исходными данными являются отношение сторон нанопластины, число итераций, количество членов, удерживаемых в рядах (размер редуцированной системы), постоянная наноматериала $\varepsilon = (e_0 A)^2 / b^2$, величина сжимающей нагрузки. Начальные значения коэффициентов A_{k0}^* заданы в виде убывающей последовательности $1/\lambda_k^2$. Новые коэффициенты A_{ki}^* распечатывались на каждой i -ой итерации. Если по итерациям они убывали или возрастали, то назначалось новое значение нагрузки. При критическом значении, начиная с некоторой итерации, соответствующие коэффициенты предыдущей итерации и последующей не отличались (и были не равны нулю).

В качестве примера рассмотрим квадратную нанопластину размером 5×5 нм. Нелокальный параметр $e_0 A$ назначим в пределах 0–2 нм, согласно [19], с шагом 0,25. Для оценки точности вычислений число членов в рядах в контрольном варианте было увеличено от 59 до 109, число итераций — от 15 до 30, количество значащих цифр в вычислениях — от 10 до 50. Окончательно в рядах удерживалось 99 членов, число итераций принималось равным 25, количество значащих цифр — 30. Дальнейшее увеличение этих параметров не изменяло первые пять значащих цифр искомых коэффициентов.

В таблице представлен найденный спектр из первых четырех критических нагрузок квадратной нанопластины для ряда значений нелокального параметра $e_0 A$.

Критические нагрузки P_{1cr} и P_{2cr} для квадратной пластины Кирхгоффа совпали с результатами работы [17], где использовался данный метод.

Для сравнения в последней строке таблицы приведены результаты (пять значений), полученные в работе [8] для эйлеровых нагрузок, которые практически совпали с результатами настоящей работы, но все же оказались чуть выше, что характерно для энергетических методов.

Заметим, что в работе [8, таблица 9] при записи результатов некоторые значения были переставлены ошибочно. Например, значение 24,0594 записано в другом столбце (для $e_0 A = 1,5$). Из-за этого оно оказалось локальным максимумом, что не соответствовало графику убывающей зависимости для критической нагрузки [8, рис. 5], что было исправлено в настоящей работе.

По данным таблицы (первые две строки) построены графики зависимостей критических нагрузок P_{1cr} и P_{2cr} от нелокального параметра нанопластины $\delta = e_0 A$ (рис. 2). Кривая 1 соответствует эйлеровой нагрузке P_{1cr} , а кривая 2 — P_{2cr} .

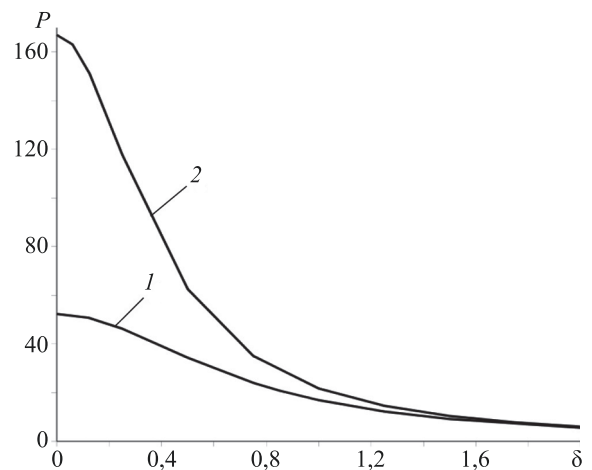


Рис. 2. Зависимости критических нагрузок P_{1cr} (кривая 1) и P_{2cr} (кривая 2) от нелокального параметра $\delta = e_0 A$

Fig. 2. Dependence of the first (Eulerian) and second critical loads from a non-local parameter $\delta = e_0 A$ (curve 1 and 2, respectively)

Таблица. Критические безразмерные сжимающие нагрузки $P = Nb^2/D$ квадратной нанопластины для симметричных форм равновесия при различных значениях нелокального параметра

Table. Critical dimensionless compressive loads $P = Nb^2/D$ of a square nanoplate for symmetric equilibrium forms at different values of the nonlocal parameter

P_{cr}	$e_0 A$								
	0	0,25	0,5	0,75	1,0	1,25	1,5	1,75	2,0
P_{1cr}	52,3450	46,2875	34,3594	24,0361	16,9193	12,2543	9,1656	7,0619	5,5833
P_{2cr}	167,0292	117,8276	62,5509	35,1038	21,7453	14,6013	10,4180	7,7828	6,0246
P_{3cr}	246,327	152,447	71,1255	37,6511	22,6965	15,0241	10,6316	7,9014	6,0953
P_{4cr}	434,787	208,3342	81,3010	40,3226	23,6407	15,4321	10,8342	8,0128	6,1614
P_{1cr} [8]	52,455	46,3739	—	24,0594	16,9308	—	—	—	5,5846

Примечание. Прочерки в таблице означают, что эти результаты в данной работе отсутствуют.

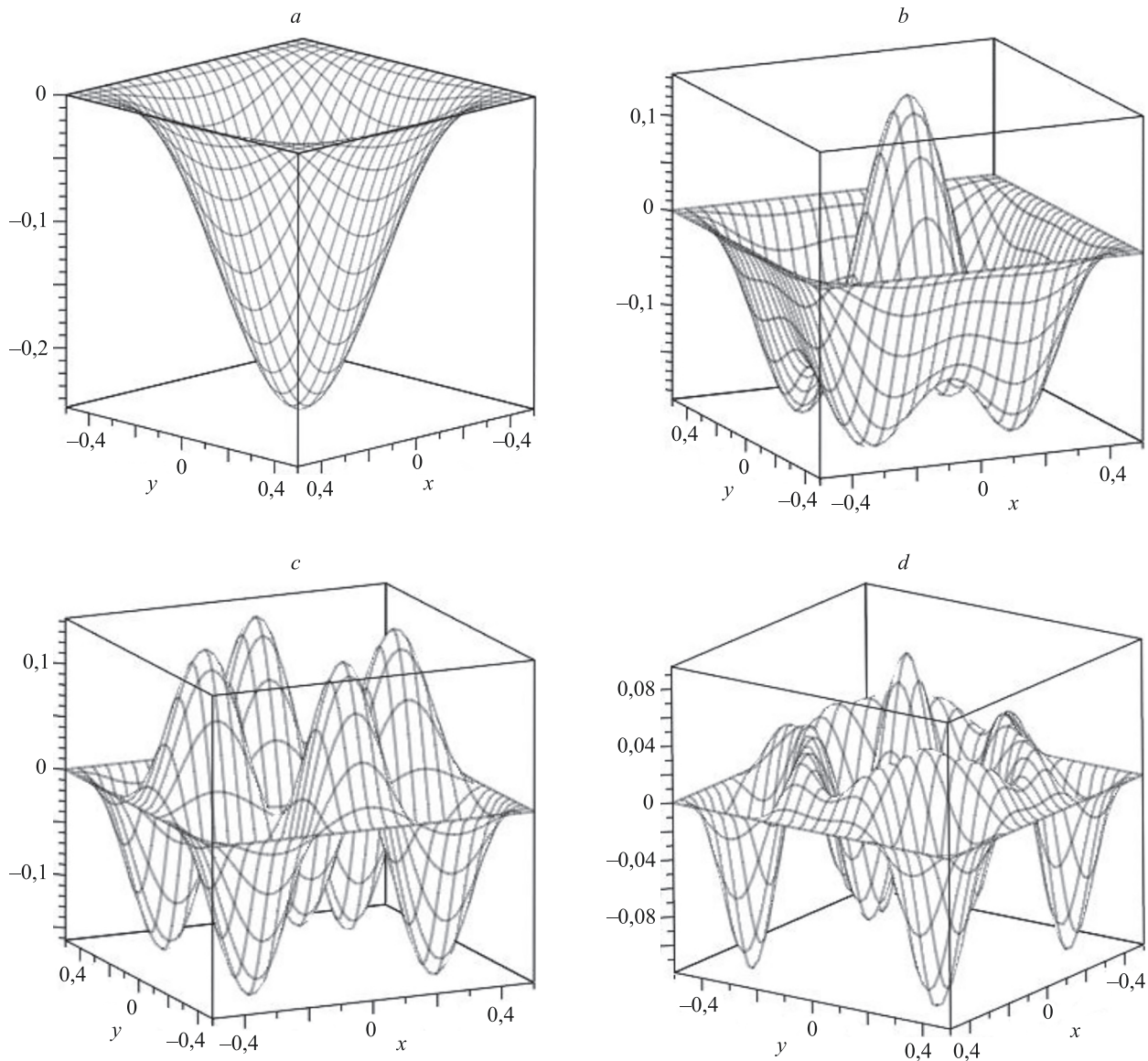


Рис. 3. Симметричные формы равновесия квадратной нанопластины для параметра $e_0A = 1$ при критических нагрузках: $P_{1cr} = 16,9193$ (a); $P_{2cr} = 21,7453$ (b); $P_{3cr} = 22,6965$ (c); $P_{4cr} = 23,6407$ (d)

Fig. 3. Symmetrical forms of equilibrium of a square nanoplate for the parameter $e_0A = 1$ at critical loads: $P_{1cr} = 16.9193$ (a); $P_{2cr} = 21.7453$ (b); $P_{3cr} = 22.6965$ (c); $P_{4cr} = 23.6407$ (d)

Зависимости (рис. 2) и данные таблицы показывают, что с ростом нелокального параметра критические нагрузки убывают и при $e_0A = 2$ практически совпадают ($P_{cr} \approx 6$).

При вычислении критических нагрузок определены и соответствующие нетривиальные функции прогибов нанопластины (10), (11), для которых были получены 3D-изображения форм равновесия. На рис. 3 приведены четыре формы равновесия для нанопараметра $e_0A = 1$. Для остальных значений этого параметра соответствующие формы были подобны и близки (при неизменных начальных значениях коэффициентов A_{k0}^*). Например, наибольшие прогибы при эйлеровой нагрузке составили $-0,2468$; $-0,2470$; $-0,2466$ для $e_0A = 0$; 1; 2. Это говорит о том, что дифференциальное уравнение (1) физического состояния нелокальной теории Эрингена не позволяет обнаружить какой-либо краевой эффект при

деформации нанопластины по сравнению с тонкой пластиной Кирхгоффа. Первая форма (рис. 3, a) соответствует изогнутой поверхности пластины под действием равномерной поперечной нагрузки (одна «выпучина»). Вторая форма (рис. 3, b) имеет одну и четыре вершины по разные стороны, третья (рис. 3, c) — четыре вершины в одну сторону и пять в другую. Четвертая форма (рис. 3, d): одна вершина с «венчиком» с одной стороны и 8 вершин с другой стороны. «Венчик» представляет собой четыре необособленные вершины.

Отметим, что в работе [8] найдены только эйлеровы нагрузки для различных значений нелокального параметра; соответствующие формы равновесия не представлены.

Заключение

Предложенная методика и численные результаты могут быть использованы при проектировании и эксплуатации чувствительных элементов различных датчиков в микроэлектронике и нанотехнике, которые подвержены сжатию в плоскости нанопластины. Последовательное изменение форм закритических состояний датчика с ростом нагрузки приводит через

актуаторы к соответствующему изменению управляющего сигнала в smart-конструкциях.

Предполагается в дальнейшем исследовать антисимметричные и смешанные формы потери устойчивости, определить соответствующие критические нагрузки для данного закрепления пластины, а также рассмотреть и другие варианты граничных условий.

Литература

1. Eringen A.C. *Nonlocal Continuum Field Theories*. New York: Springer, 2002. 376 p.
2. Wang L.F., Hu H.Y. Flexural wave propagation in single-walled carbon nanotubes // *Physical Review B*. 2005. V. 71. N 19. P. 195412. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.71.195412>
3. Михасев Г.И., Авдейчик Е.В., Каплунов Ю.Д., Приказчиков Д.А. Исследование свободных продольных колебаний наноразмерной балки с позиций двухфазной нелокальной теории упругости Эрингена // Теоретическая и прикладная механика: международный научно-технический сборник. Вып. 33. Минск: Белорусский национальный технический университет, 2018. С. 72–80.
4. Benvenuti E., Simone A. One-dimensional nonlocal and gradient elasticity: Closed-form solution and size effect // *Mechanics Research Communications*. 2013. V. 48. P. 46–51. <https://doi.org/10.1016/j.mechrescom.2012.12.001>
5. Farajpour A., Danesh M., Mohammadi M. Buckling analysis of variable thickness nanoplates using nonlocal continuum mechanics // *Physica E: Low-dimensional systems and Nanostructures*. 2011. V. 44. N 3. P. 719–727. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2011.11.022>
6. Bastami M., Behjat B. Ritz solution of buckling and vibration problem of nanoplates embedded in an elastic medium // *Sigma Journal of Engineering and Natural Sciences*. 2017. V. 35. N 2. P. 285–302.
7. Ebrahimi F., Barati M.R. Buckling analysis of piezoelectrically actuated smart nanoscale plates subjected to magnetic field // *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*. 2017. V. 28. N 11. P. 1472–1490. <https://doi.org/10.1177/1045389x16672569>
8. Wang Z., Xing Y., Sun Q., Yang Y. Highly accurate closed-form solutions for free vibration and eigenbuckling of rectangular nanoplates // *Composite Structures*. 2019. V. 210. P. 822–830. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2018.11.094>
9. Chwał M., Muc A. Buckling and free vibrations of nanoplates—comparison of nonlocal strain and stress approaches // *Applied Sciences*. 2019. V. 9. N 7. P. 1409. <https://doi.org/10.3390/app9071409>
10. Wang W., Rong D., Xu C., Zhang J., Xu X., Zhou Z. Accurate buckling analysis of magnetically affected cantilever nanoplates subjected to in-plane magnetic fields // *Journal of Vibration Engineering & Technologies*. 2020. V. 8. N 4. P. 505–515. <https://doi.org/10.1007/s42417-019-00106-3>
11. Pradhan S.C., Kumar A. Buckling analysis of single layered graphene sheet under biaxial compression using nonlocal elasticity theory and DQ method // *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*. 2011. V. 8. N 7. P. 1325–1334. <https://doi.org/10.1166/jctn.2011.1818>
12. Pradhan S.C., Murmu T. Small scale effect on the buckling of single-layered graphene sheets under biaxial compression via nonlocal continuum mechanics // *Computational Materials Science*. 2009. V. 47. N 1. P. 268–274. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2009.08.001>
13. Mohammadi M., Goodarzi M., Ghayour M., Alivand S. Small scale effect on the vibration of orthotropic plates embedded in an elastic medium and under biaxial in-plane pre-load via nonlocal elasticity theory // *Journal of Solid Mechanics*. 2012. V. 4. N 2. P. 128–143.
14. Analoei H.R., Azhari M., Heidarpour A. Elastic buckling and vibration analyses of orthotropic nanoplates using nonlocal continuum mechanics and spline finite strip method // *Applied Mathematical Modelling*. 2013. V. 37. N 10–11. P. 6703–6717. <https://doi.org/10.1016/j.apm.2013.01.051>
15. Karamooz Ravari M.R., Talebi S., Shahidi A.R. Analysis of the buckling of rectangular nanoplates by use of finite-difference method // *Meccanica*. 2014. V. 49. N 6. P. 1443–1455. <https://doi.org/10.1007/s11012-014-9917-x>

References

1. Eringen A.C. *Nonlocal Continuum Field Theories*. New York: Springer, 2002, 376 p.
2. Wang L.F., Hu H.Y. Flexural wave propagation in single-walled carbon nanotubes. *Physical Review B*, 2005, vol. 71, no. 19, pp. 195412. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.71.195412>
3. Mikhasev G.I., Avdeichik E.V., Kaplunov Iu.D., Prikazchikov D.A. Study of free longitudinal vibrations of a nano-sized beam from the standpoint of Eringen's two-phase nonlocal elasticity theory. *Theoretical and Applied Mechanics: International Scientific and Technical Collection*. Vol. 33. Minsk, BNTU, 2018, pp. 72–80. (in Russian)
4. Benvenuti E., Simone A. One-dimensional nonlocal and gradient elasticity: Closed-form solution and size effect. *Mechanics Research Communications*, 2013, vol. 48, pp. 46–51. <https://doi.org/10.1016/j.mechrescom.2012.12.001>
5. Farajpour A., Danesh M., Mohammadi M. Buckling analysis of variable thickness nanoplates using nonlocal continuum mechanics. *Physica E: Low-dimensional systems and Nanostructures*, 2011, vol. 44, no. 3, pp. 719–727. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2011.11.022>
6. Bastami M., Behjat B. Ritz solution of buckling and vibration problem of nanoplates embedded in an elastic medium. *Sigma Journal of Engineering and Natural Sciences*, 2017, vol. 35, no. 2, pp. 285–302.
7. Ebrahimi F., Barati M.R. Buckling analysis of piezoelectrically actuated smart nanoscale plates subjected to magnetic field. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, 2017, vol. 28, no. 11, pp. 1472–1490. <https://doi.org/10.1177/1045389x16672569>
8. Wang Z., Xing Y., Sun Q., Yang Y. Highly accurate closed-form solutions for free vibration and eigenbuckling of rectangular nanoplates. *Composite Structures*, 2019, vol. 210, pp. 822–830. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2018.11.094>
9. Chwał M., Muc A. Buckling and free vibrations of nanoplates—comparison of nonlocal strain and stress approaches. *Applied Sciences*, 2019, vol. 9, no. 7, pp. 1409. <https://doi.org/10.3390/app9071409>
10. Wang W., Rong D., Xu C., Zhang J., Xu X., Zhou Z. Accurate buckling analysis of magnetically affected cantilever nanoplates subjected to in-plane magnetic fields. *Journal of Vibration Engineering & Technologies*, 2020, vol. 8, no. 4, pp. 505–515. <https://doi.org/10.1007/s42417-019-00106-3>
11. Pradhan S.C., Kumar A. Buckling analysis of single layered graphene sheet under biaxial compression using nonlocal elasticity theory and DQ method. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 2011, vol. 8, no. 7, pp. 1325–1334. <https://doi.org/10.1166/jctn.2011.1818>
12. Pradhan S.C., Murmu T. Small scale effect on the buckling of single-layered graphene sheets under biaxial compression via nonlocal continuum mechanics. *Computational Materials Science*, 2009, vol. 47, no. 1, pp. 268–274. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2009.08.001>
13. Mohammadi M., Goodarzi M., Ghayour M., Alivand S. Small scale effect on the vibration of orthotropic plates embedded in an elastic medium and under biaxial in-plane pre-load via nonlocal elasticity theory. *Journal of Solid Mechanics*, 2012, vol. 4, no. 2, pp. 128–143.
14. Analoei H.R., Azhari M., Heidarpour A. Elastic buckling and vibration analyses of orthotropic nanoplates using nonlocal continuum mechanics and spline finite strip method. *Applied Mathematical Modelling*, 2013, vol. 37, no. 10–11, pp. 6703–6717. <https://doi.org/10.1016/j.apm.2013.01.051>
15. Karamooz Ravari M.R., Talebi S., Shahidi A.R. Analysis of the buckling of rectangular nanoplates by use of finite-difference method.

16. Hosseini M., Jamalpoor A., Fath A. Surface effect on the biaxial buckling and free vibration of FGM nanoplate embedded in visco-Pasternak standard linear solid-type of foundation // *Meccanica*. 2016. V. 52. N 6. P. 1381–1396. <https://doi.org/10.1007/s11012-016-0469-0>
17. Сухотерин М.В., Потехина Е.В., Анненков Л.В. Определение спектра критических нагрузок и форм равновесия сжатых панелей обшивки корпуса судна // Вестник государственного университета морского и речного флота имени адмирала С.О. Макарова. 2014. № 2(24). С. 44–51.
18. Сухотерин М.В., Распутин Е.И., Пижурина Н.Ф. Смешанные формы свободных колебаний прямоугольной CFCF-пластины // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23. № 2. С. 413–421. <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-2-413-421>
19. Duan W.H., Wang C.M., Zhang Y.Y. Calibration of nonlocal scaling effect parameter for free vibration of carbon nanotubes by molecular dynamics // *Journal of Applied Physics*. 2007. V. 101. N 2. P. 024305. <https://doi.org/10.1063/1.2423140>
16. Hosseini M., Jamalpoor A., Fath A. Surface effect on the biaxial buckling and free vibration of FGM nanoplate embedded in visco-Pasternak standard linear solid-type of foundation. *Meccanica*, 2016, vol. 52, no. 6, pp. 1381–1396. <https://doi.org/10.1007/s11012-016-0469-0>
17. Sukhoterina M.V., Potekhina E.V., Annenkov L.V. Etermination of the spectrum of critical loads and forms balance compressed cladding panels hull. *Vestnik gosudarstvennogo universiteta morskogo i rechnogo flota imeni admirala S.O. Makarova*, 2014, no. 2(24), pp. 44–51. (in Russian)
18. Sukhoterina M.V., Rasputina E.I., Pizhurina N.F. Mixed forms of free oscillations of a rectangular CFCF-plate. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 2, pp. 413–421. (in Russian). <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-2-413-421>
19. Duan W.H., Wang C.M., Zhang Y.Y. Calibration of nonlocal scaling effect parameter for free vibration of carbon nanotubes by molecular dynamics. *Journal of Applied Physics*, 2007, vol. 101, no. 2, pp. 024305. <https://doi.org/10.1063/1.2423140>

Авторы

Сухотерин Михаил Васильевич — доктор технических наук, доцент, заведующий кафедрой, Государственный университет морского и речного флота имени адмирала С.О. Макарова, Санкт-Петербург, 198035, Российская Федерация, [sc 16496923700](https://orcid.org/0000-0002-8295-7089), <https://orcid.org/0000-0002-8295-7089>, sukhoterimv@gumrf.ru

Сосновская Анна Анатольевна — старший преподаватель, Государственный университет морского и речного флота имени адмирала С.О. Макарова, Санкт-Петербург, 198035, Российская Федерация, [sc 59171016800](https://orcid.org/0009-0000-6476-6783), <https://orcid.org/0009-0000-6476-6783>, sosnovskayaaa@gumrf.ru

Authors

Mikhail V. Sukhoterina — D.Sc., Associate Professor, Head of Department, Admiral Makarov State University of Maritime and Inland Shipping, Saint-Petersburg, 198035, Russian Federation, [sc 16496923700](https://orcid.org/0000-0002-8295-7089), <https://orcid.org/0000-0002-8295-7089>, sukhoterimv@gumrf.ru

Anna A. Sosnovskaya — Senior Lecturer, Admiral Makarov State University of Maritime and Inland Shipping, Saint-Petersburg, 198035, Russian Federation, [sc 59171016800](https://orcid.org/0009-0000-6476-6783), <https://orcid.org/0009-0000-6476-6783>, sosnovskayaaa@gumrf.ru

Статья поступила в редакцию 23.04.2024
Одобрена после рецензирования 28.05.2024
Принята к печати 19.07.2024

Received 23.04.2024
Approved after reviewing 28.05.2024
Accepted 19.07.2024



Работа доступна по лицензии
Creative Commons
«Attribution-NonCommercial»

doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-637-644

УДК 519.688, 517.977.5

Использование генетических алгоритмов для решения задачи поиска оптимального состава реакционной смеси

Эльдар Наилевич Мифтахов¹✉, Анастасия Павловна Кашникова²,
Дмитрий Владимирович Иванов³

^{1,3} Уфимский университет науки и технологий, Уфа, 450076, Российская Федерация

² Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологий, Стерлитамак, 453103, Российская Федерация

¹ promif@mail.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-0471-5949>

² a.kashnikova98@yandex.ru, <https://orcid.org/0009-0000-0264-0114>

³ ivanov_dv@list.ru, <https://orcid.org/0009-0005-7117-0191>

Аннотация

Введение. Представлен эвристический подход к оптимизации сложных физико-химических процессов в виде генетического алгоритма решения задач. В сравнении с другими эволюционными методами генетический алгоритм позволяет работать с большими пространствами поиска и сложными функциями оценки, что особенно важно при исследовании многофакторных физико-химических систем. В связи с достаточно высокой потребностью в вычислительных ресурсах при работе с крупными и сложными пространствами поиска оптимизация имеющихся схем организации расчетов положительно влияет на точность получаемых результатов. В работе предложен модифицированный генетический алгоритм, позволяющий минимизировать количество итераций для достижения заданной точности при решении задачи поиска оптимального состава исходной реакционной смеси. **Метод.** Для сложного физико-химического процесса сформулирована задача оптимизации, которая заключается в поиске состава исходной реакционной смеси, способствующего максимизации (или минимизации) заданного целевого параметра. Критерий оптимальности определяется типом решаемой задачи и при организации вычислений ориентирован на максимальный выход целевого продукта. Основные этапы реализации генетического алгоритма включают в себя создание начального набора решений и последующую итерационную оценку их качества для дальнейшего комбинирования и изменения до достижения оптимальных значений с использованием механизмов, схожих с биологической эволюцией. Для повышения эффективности метода и сокращения числа итераций предложена модификация генетического алгоритма, которая сводится к динамической оценке параметра «мутации», зависящей от разнообразия особей в образованной популяции решений. **Основные результаты.** На основании серии вычислительных экспериментов проведен анализ влияния параметров генетического алгоритма на точность и эффективность решения задачи на примере исследования кинетики ферментативной реакции Михаэлиса–Ментен. Результаты вычислений по определению оптимального состава реакционной смеси показали, что динамическое определение параметра «мутации» способствует повышению точности решения задачи и кратному снижению относительной величины ошибки, достигающей 0,77 % при выполнении 200 итераций и 0,21 % — при 400 итераций. **Обсуждение.** Представленный модифицированный подход к решению задачи оптимизации не ограничен типом и наполнением изучаемого физико-химического процесса. Проведенные вычисления показали высокую степень влияния параметра «мутации» на точность и эффективность решения задачи, а динамическое управление величиной данного параметра позволило повысить скорость работы генетического алгоритма и уменьшить количество итераций для достижения оптимального решения заданной точности. Это особенно актуально при исследовании многофакторных систем, когда влияние параметров носит нетривиальный характер.

Ключевые слова

эволюционные методы, генетический алгоритм, задача оптимизации, реакция Михаэлиса–Ментен

Благодарности

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-21-00380, <https://rscf.ru/project/24-21-00380/>.

© Мифтахов Э.Н., Кашникова А.П., Иванов Д.В., 2024

Ссылка для цитирования: Мифтахов Э.Н., Кашникова А.П., Иванов Д.В. Использование генетических алгоритмов для решения задачи поиска оптимального состава реакционной смеси // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2024. Т. 24, № 4. С. 637–644. doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-637-644

Using genetic algorithms to solve the problem of finding the optimal composition of the reaction mixture

Eldar N. Miftakhov^{1✉}, Anastasia P. Kashnikova², Dmitry V. Ivanov³

^{1,3} Ufa University of Science and Technology, 450076, Ufa, Russian Federation

² Branch of Ufa University of Science and Technology, 453103, Sterlitamak, Russian Federation

¹ promif@mail.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-0471-5949>

² a.kashnikova98@yandex.ru, <https://orcid.org/0009-0000-0264-0114>

³ ivanov_dv@list.ru, <https://orcid.org/0009-0005-7117-0191>

Abstract

A heuristic approach to optimization of complex physicochemical processes in the form of a genetic algorithm for solving problems is presented. In comparison with other evolutionary methods, the genetic algorithm allows working with large search spaces and complex evaluation functions, which is especially important in the study of multifactor physicochemical systems. Due to the relatively high need for computing resources when working with large and complex search spaces, optimization of existing calculation organization schemes has a positive effect on the accuracy of the calculated results. The paper presents a modified genetic algorithm that minimizes the number of iterations to achieve a given accuracy when solving the problem of finding the optimal composition of the initial reaction mixture. For a complex physicochemical process, an optimization problem is formulated which consists in finding the composition of the initial reaction mixture that promotes maximization (or minimization) of a given target parameter. The optimality criterion is determined by the type of the problem being solved and, when organizing calculations, is focused on the maximum yield of the target product. The main steps of implementing the genetic algorithm include creating an initial set of solutions and subsequent iterative evaluation of their quality for subsequent combination and modification until optimal values are achieved using mechanisms similar to biological evolution. To improve the efficiency of the method and reduce the number of iterations, a modification of the genetic algorithm is proposed which boils down to a dynamic estimate of the “mutation” parameter, depending on the diversity of individuals in the formed population of solutions. In a series of computational experiments, an analysis was made of the influence of the genetic algorithm parameters on the accuracy and efficiency of solving the problem using the example of studying the kinetics of the Michaelis-Menten enzymatic reaction. The results of calculations to determine the optimal composition of the reaction mixture showed that the dynamic determination of the “mutation” parameter contributes to an increase in the accuracy of the problem solution and a multiple decrease in the relative error value reaching 0.77 % when performing 200 iterations and 0.21 % when performing 400 iterations. The presented modified approach to solving the optimization problem is not limited by the type and content of the studied physicochemical process. The calculations performed showed a high degree of influence of the “mutation” parameter on the accuracy and efficiency of the problem solution, and dynamic control of the value of this parameter allowed increasing the speed of the genetic algorithm and reduce the number of iterations to achieve an optimal solution of a given accuracy. This is especially relevant in the study of multifactorial systems when the influence of parameters is non-trivial.

Keywords

evolutionary methods, genetic algorithm, optimization problem, Michaelis-Menten reaction

Acknowledgements

The study was supported by the grant from the Russian Science Foundation № 24-21-00380, <https://rscf.ru/en/project/24-21-00380/>.

For citation: Miftakhov E.N., Kashnikova A.P., Ivanov D.V. Using genetic algorithms to solve the problem of finding the optimal composition of the reaction mixture. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 4, pp. 637–644 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-637-644

Введение

Одной из значимых задач исследования сложных физико-химических процессов является решение задачи планирования производства, предполагающего оптимизацию всех производственных циклов и поиск оптимальных решений для улучшения производственной эффективности и снижения всех затрат. Решение таких задач предполагает многократные эмпирические исследования, которые в условиях действующего лабораторного и промышленного производств невозможно реализовать из-за дороговизны исходных компонентов и непрерывной работы действующей технологической

линии. Все более актуальными становятся математические методы, позволяющие путем организации серии вычислительных экспериментов оценить необходимые закономерности протекания процесса и определить оптимальные условия его проведения.

Математическое описание сложного физико-химического процесса должно учитывать все значимые факторы производства, влияющие на скорость протекания процесса и свойства получаемого продукта. Высокая размерность и нелинейный характер математического описания определяет необходимость использования нетривиальных подходов и методов, позволяющих минимизировать количество необходимых вычислительных

испытаний и найти оптимальное решение за наиболее короткое время. При использовании классических методов необходимо ориентироваться на те подходы, которые не требуют аналитического представления функции. В первую очередь, к ним можно отнести метод сопряженных градиентов, существенным недостатком которого является необходимость вычисления направления движения к оптимуму в каждой точке. В условиях отсутствия аналитического представления оптимизируемой функции нахождение производной осуществляется численно. Огромный интерес также вызывают методы безусловной оптимизации, которые не требуют расчета производной, однако не применимы без дополнительных преобразований в случае наличия явных ограничений на искомые параметры системы. К сожалению, данные методы не гарантируют сходимости к глобальному экстремуму и могут быть неэффективными или неустойчивыми в случае, если область поиска содержит разрывы.

В контексте решения задач управления физико-химическими процессами наиболее ярко себя демонстрируют эвристические методы оптимизации [1, 2], предоставляя необходимые инструменты для анализа и улучшения реакционных механизмов, кинетических параметров и условий реакции. Использование классических методов невозможно в силу высокой размерности пространства параметров или наличия большого количества локальных решений. В совокупности с современными вычислительными технологиями эти методы открывают новые возможности для понимания и управления химическими процессами и системами.

Среди эвристических методов оптимизации особо стоит выделить эволюционные алгоритмы, обладающие мощными характеристиками надежности и гибкости для поиска глобальных решений сложных задач оптимизации. Применительно к физико-химическим процессам огромным преимуществом перед другими эволюционными алгоритмами обладают генетические алгоритмы [3, 4], поскольку позволяют работать с большими пространствами поиска и сложными функциями оценки, что особенно важно в контексте исследования многофакторных физико-химических систем. Впервые предложенные Холландом [5] генетические алгоритмы успешно применяются для решения задач оптимизации различного типа [6–8]. Среди группы эвристических методов также заслуживает внимания алгоритм, основанный на методе имитации отжига (Simulated Annealing). Однако, как и сам алгоритм, так и его модификации чаще всего применяются для решения таких дискретных задач как задача маршрутизации, балансировка нагрузки и разработка цифровых схем.

К основным недостаткам генетического алгоритма относят высокую потребность в вычислительных ресурсах при работе с крупными и сложными пространствами поиска. Однако стремительное развитие информационных технологий и облачных вычислений позволяет сегодня успешно интегрировать технологии параллельных расчетов в случае решения объемных многофакторных задач [9]. В работах [10, 11] предложен модифицированный алгоритм метода виртуальной субпопуляции, позволяющий минимизировать

время поиска. С целью повышения эффективности алгоритма в ряде работ предлагается использовать различные варианты мультиродительского кроссовера: с унимодальным распределением [12], симплексный [13], родительско-центрический [14] и треугольный [15]. К существенным недостаткам генетического алгоритма также относят низкую его эффективность в случаях, когда параметры алгоритма не адаптированы для конкретной задачи оптимизации [16]. Все перечисленные особенности алгоритма определяют огромный интерес к исследованию значимости его параметров на эффективность решения задачи оптимизации.

Цель работы — разработка модифицированного генетического алгоритма, позволяющего минимизировать количество итераций для достижения оптимального решения заданной точности при решении задачи поиска оптимального состава исходной реакционной смеси.

Постановка задачи

Пусть физико-химический процесс характеризуется протеканием ряда последовательных и параллельных элементарных реакций с участием активных частиц. Математическая модель такого процесса представляет собой систему дифференциальных уравнений, характеризующих изменение материального баланса по каждому компоненту реакции с начальными условиями $\mathbf{X}_i(0) = \mathbf{X}_i^0$:

$$\frac{d\mathbf{X}_i}{dt} = \mathbf{F}_i(t, \mathbf{X}_i(t)), i = 1, \dots, n,$$

где $\mathbf{X}(t)$ — вектор, определяющий концентрации всех исходных компонентов реакции в момент времени $t \in [0, t_{end}]$; $\mathbf{F}$ — непрерывная вектор-функция.

Введем в рассмотрение некоторое выходное состояние системы $\tilde{\mathbf{X}}$, которое является целью планирования эксперимента. Определим вектор начальных концентраций исходных компонентов системы $\mathbf{X}^*(0) = (x_1^*(0), x_2^*(0), \dots, x_n^*(0))$, при котором в момент конечного времени моделирования эксперимента t_{end} система перейдет в необходимое состояние $\tilde{\mathbf{X}}$. Будем считать, что на каждый из элементов искомого вектора $\mathbf{X}^*(0)$ действуют ограничения:

$$\underline{x}_i \leq x_i^*(0) \leq \bar{x}_i, i = 1, \dots, n. \quad (1)$$

В этом случае в качестве критерия оптимальности можно рассматривать функционал вида

$$G(\mathbf{X}^*(0)) = \sum_{i=1}^m (\mathbf{X}_i(t_{end}) - \tilde{\mathbf{X}}_i) \rightarrow \min, m \leq n, \quad (2)$$

где m — количество требуемых состояний системы.

Критерий оптимальности зависит от типа решаемой задачи оптимизации (максимальный выход целевого продукта, требуемая скорость протекания процесса, экономические показатели и т. д.). В случаях, когда требуется найти максимальный выход одного из конечных продуктов x_m , целевая функция примет вид

$$G(\mathbf{X}^*(0)) = x_m(t_{end}) \rightarrow \max, m \leq n.$$

Описание модифицированного генетического алгоритма

Для решения задачи оптимизации применим генетический алгоритм, который представляет собой эвристический алгоритм поиска оптимального решения путем последовательного комбинирования и вариации искомых параметров с использованием механизмов, напоминающих биологическую эволюцию. Основное наполнение генетического алгоритма представляет собой итерационное выполнение четырех основных операторов: селекции, кроссинговера (скрещивания, репродукции), мутации, создания нового поколения. В результате операторов скрещивания и мутации с последующей оценкой приспособленности получим новое поколение, которое в итерационном режиме исполнения алгоритма будет стремиться к оптимальному решению задачи.

Опишем основные этапы генетического алгоритма применительно к поставленной задаче.

Этап 1. Задается начальная популяция из K возможных решений для каждого из компонентов, представляющая собой двумерный вектор размерностью $n \times K$. Вводится параметр $iter = 1$, определяющий порядковый номер формируемого поколения. Каждая строка двумерного вектора будет представлять собой один из возможных векторов решения задачи оптимизации. С учетом имеющихся ограничений вида (1) рекомендуется вектор начальной популяции для каждого из используемых компонентов определить из точек заданного отрезка на равном удалении друг от друга:

$$\mathbf{X}^{iter} = x_{ij}(0) = \underline{x}_i + \frac{\bar{x}_i - \underline{x}_i}{(K-1)}(j-1), j = 1, \dots, K.$$

Этап 2. Проводится оценка степени приспособленности каждой особи популяции путем расчета значения целевой функции для каждого из предложенных на этапе 1 решений. Причем, если значение целевой функции (2) для каждого из них соответствует критерию остановки

$$G(\mathbf{X}_j^{iter}) \leq \varepsilon, j = 1, \dots, K, \quad (3)$$

где ε — заданная точность решения задачи, то алгоритм следует остановить и вывести найденное решение.

Этап 3. Проводится выборка K родителей из популяции посредством оператора селекции для дальнейшей репродукции. Вероятность выбора родителей напрямую определяется степенью их приспособленности. Для исполнения данного этапа требуется на основании найденных значений степени приспособленности определить вероятности выбора каждой особи. В случае максимизации целевой функции используется выражение:

$$p(\mathbf{X}_j^{iter}) = \frac{G^2(\mathbf{X}_j^{iter})}{\sum_{j=1}^K G^2(\mathbf{X}_j^{iter})}.$$

Затем следует расположить найденные значения в виде дискретных точек $p_s = \sum_{j=1}^s p(\mathbf{X}_j^{iter})$ на отрезке от 0 до 1.

Вызывая K раз генератор случайных чисел получим ряд равномерно распределенных на отрезке от 0 до 1 чисел, которые используются для выбора очередной особи в качестве родителя. Очевидно, что если для некоторого решения степень приспособленности окажется значительно выше, чем у других, то наиболее вероятно, что оно будет выбрано для продолжения рода неоднократно.

Этап 4. Из найденного на этапе 3 родительского пула с помощью оператора кроссинговера проводится процедура получения K потомков. Стоит отметить, что в качестве оператора кроссинговера можно использовать как простейший арифметический кроссинговер (равномерный или неравномерный), так и более сложные (кроссинговер смешивания или Лапласа) [17].

В частности, если на некоторой итерации случайным образом были выбраны две родительские особи $\mathbf{X}^1 = (x_1^1, x_2^1, \dots, x_n^1)$ и $\mathbf{X}^2 = (x_1^2, x_2^2, \dots, x_n^2)$, то в случае использования арифметического кроссинговера значения вектора потомка образуются по правилу

$$y_i = ax_i^1 + (1-a)x_i^2, i = 1, \dots, n,$$

где

$$a = \frac{\max G(\mathbf{X}_j)}{\max G(\mathbf{X}_j) + \min G(\mathbf{X}_j)}, j = 1, \dots, K.$$

Этап 5. Для образованных на этапе 4 потомков проводится процедура мутации с некоторой заданной вероятностью p_m . Нередки случаи, когда все особи сходятся к локальному экстремуму и занимают всю популяцию, что приводит к ее преждевременному «вырождению». Для того чтобы противостоять алгоритму сходимости к локальному экстремуму, используется оператор «мутации», основная цель которого ввести некоторое генетическое разнообразие в популяцию.

Ранее проведенные испытания показали, что значение вероятностного параметра p_m оказывает огромное влияние на количество итераций алгоритма. В случае, когда величина p_m являлась фиксированной в ходе всех итераций, сходимость генетического алгоритма была достаточно низкой. В связи с этим в рамках решения поставленной задачи предлагается модифицировать генетический алгоритм и придать величине p_m динамический характер, основным критерием для которого является степень разнообразия особей в образованной популяции. Математическим выражением подобного разнообразия является дисперсия значений образованного списка

$$\sigma_j^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\mathbf{X}_{ij}^{iter} - \bar{\mathbf{X}})^2}{n}, j = 1, \dots, K. \quad (4)$$

Если дисперсия (4) не превышает заданное пороговое значение $\sigma_{\min}^2$, то следуеткратно увеличить значение $\hat{p}_m = \text{Mut} \cdot p_m$, чтобы внести большее разнообразие в популяцию.

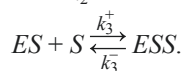
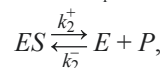
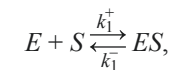
Этап 6. Проводится оценка степени приспособленности каждой особи в новой популяции. В случае, если значение целевой функции (2) соответствует критерию остановки алгоритма

$$G(\mathbf{X}_j^{iter}) \leq \varepsilon, j = 1, \dots, K,$$

то алгоритм следует остановить и вывести найденное решение. В противном случае переходим к исполнению этапа 3 с целью дальнейшей репродукции и получения более приспособленных потомков. Поскольку условие (3) может никогда не выполняться, то проводится дополнительная проверка по достижению максимального количества итераций. Если параметр *iter* превышает заданное максимальное значение, то алгоритм следует остановить и вывести текущее решение.

Вычислительный эксперимент

Используем представленный модифицированный генетический алгоритм для решения задачи определения начальных концентраций реагентов при исследовании кинетики ферментативной реакции Михаэлиса–Ментен [18]. Данная реакция широко используется в научных исследованиях, а также в медицине и промышленности, и остается одной из ключевых моделей в биохимической кинетике. Реакция Михаэлиса–Ментен описывает процесс ферментативного катализа, в котором фермент (энзим) — *E* связывается с молекулой субстрата — *S*, образуя фермент-субстратные комплексы, представляющие собой промежуточные продукты реакции — *ES*, *ESS*, которые затем могут разлагаться на продукт — *P* и восстанавливать фермент. Кинетический механизм такого процесса можно представить в виде набора обратимых реакций:



С использованием обозначений [*E*] — x_1 , [*S*] — x_2 , [*ES*] — x_3 , [*ESS*] — x_4 , [*P*] — x_5 система дифференциальных уравнений, описывающих изменение материального баланса по каждому компоненту реакции, примет вид:

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = -k_1^+ x_1 x_2 + k_1^- x_3 - k_2^- x_1 x_5 + k_2^+ x_3, \\ \frac{dx_2}{dt} = -k_1^+ x_1 x_2 + k_1^- x_3 - k_3^+ x_2 x_3 + k_3^- x_4, \\ \frac{dx_3}{dt} = k_1^+ x_1 x_2 - k_1^- x_3 + k_2^- x_1 x_5 - k_2^+ x_3 - k_3^+ x_2 x_3 + k_3^- x_4, \\ \frac{dx_4}{dt} = k_3^+ x_2 x_3 - k_3^- x_4, \\ \frac{dx_5}{dt} = -k_2^- x_1 x_5 + k_2^+ x_3, \end{cases}$$

с начальными условиями $x_1(0) = x_1^0$, $x_2(0) = x_2^0$, $x_3(0) = 0$, $x_4(0) = 0$, $x_5(0) = 0$ и соответствующими значениями кинетических параметров: $k_1^+ = 1,2$ л/(моль·мин); $k_2^+ = 1,1$ мин⁻¹; $k_3^+ = 2,3$ л/(моль·мин); $k_1^- = 0,9$ мин⁻¹; $k_2^- = 0,9$ л/(моль·мин); $k_3^- = 0,3$ мин⁻¹, характеризующих скорости элементарных реакций.

Требуется найти вектор начальных концентраций исходных компонентов системы [*E*] — x_1 и [*S*] — x_2 в виде $\mathbf{X}^*(0) = (x_1^*(0), x_2^*(0))$, который обеспечит максимальную концентрацию конечного продукта [*P*] — x_5 в реакционной массе в конечный момент моделирования $t_{end} = 10$ мин, при условии, что $0 \leq x_i^*(0) \leq 2$ моль/л

$$G(\mathbf{X}^*(0))(t_{end}) = \frac{x_5(t_{end})}{x_1(t_{end}) + x_2(t_{end}) + x_3(t_{end}) + x_4(t_{end}) + x_5(t_{end})} \rightarrow \max. \quad (5)$$

Для решения данной задачи генетический алгоритм, описанный в разделе «Описание модифицированного генетического алгоритма», был запрограммирован с использованием языка Python (версия 3.10.12). Размер начальной популяции *K* на этапе 1 реализации алгоритма определен четырьмя особями на равном расстоянии друг от друга и для каждого из компонентов x_1 , x_2 рассчитан в соответствии с выражением

$$\mathbf{X}_1^1 = \mathbf{X}_2^1 = (0; 0,67; 1,34; 2).$$

Поскольку целью решения задачи является поиск вектора $\mathbf{X}^*(0) = (x_1^*(0), x_2^*(0))$, позволяющего получить максимальное значение функции вида (5), то для окончания генетического алгоритма часто руководствуются критически малым изменением значения функции приспособленности, свидетельствующем о том, что решение достигнуто. Однако большой интерес вызывает влияние параметров реализации генетического алгоритма на точность получаемых расчетных результатов. Для получения подобной детализированной картины проведена серия вычислительных экспериментов, в которых варьировались параметры «мутации», определяющие реализацию этапа 5 алгоритма, и по полученным результатам (таблица) оценивалось влияние параметров генетического алгоритма на максимальную погрешность решения задачи. Для каждого из представленного набора параметров осуществлено не менее 100 запусков программы, чтобы оценить и зафиксировать максимальное отклонение полученного результата. Во всех случаях с целью выбора потомков для дальнейшего роста популяции в качестве оператора кроссинговера использован простейший арифметический кроссинговер.

Анализ полученных результатов позволяет сделать вывод о том, что динамическое определение параметра «мутации», критерием для которого является разнообразие особей в образованной популяции, положительно влияет на точность получаемых расчетных результатов. Из таблицы видно, что рост параметра «мутации» в диапазоне $0,05 \leq p_m \leq 0,3$ (строки 1–20) благоприятно сказывался на точности получаемых расчетных результатов, однако дальнейшее увеличение значения параметра p_m и проведение расчетов для $p_m = 0,4$ и $p_m = 0,5$ (строки 21 и 22) привело лишь к росту погрешности. В то же время в каждом отдельном случае видно, что введение модифицированного параметра «мутации» для каждого из рассмотренных значений p_m привело к увеличению точности получаемого решения.

Таблица. Влияние параметров генетического алгоритма на точность результатов

Table. The influence of genetic algorithm parameters on the accuracy of results

Номер строки	Параметр «мутации» p_m	Множитель «мутации» Mut	Модифицированный параметр «мутации» $\tilde{p}_m$	Отклонение от результата, %	
				50 итераций	100 итераций
1	0,05	1	0,05	10,9	5,88
2	0,05	2	0,10	9,90	4,81
3	0,05	4	0,20	7,64	4,18
4	0,05	6	0,30	8,15	4,45
5	0,05	8	0,40	8,13	3,77
6	0,10	1	0,10	6,45	3,41
7	0,10	2	0,20	6,14	1,84
8	0,10	3	0,30	5,94	1,93
9	0,10	4	0,40	6,03	2,83
10	0,20	1	0,20	3,79	1,67
11	0,20	3/2	0,30	3,47	1,58
12	0,20	2	0,40	3,78	1,60
13	0,20	5/2	0,50	3,77	1,47
14	0,20	3	0,60	3,60	1,86
15	0,30	1	0,30	3,08	1,53
16	0,30	4/3	0,40	3,00	1,51
17	0,30	5/3	0,50	2,89	1,47
18	0,30	2	0,60	2,96	1,36
19	0,30	7/3	0,70	2,72	1,47
20	0,30	8/3	0,80	2,90	1,46
21	0,40	1	0,40	3,01	1,59
22	0,50	1	0,50	3,23	1,63

В частности, для $p_m = 0,1$ (строки 6–9) относительная величина ошибки снизилась на 46 % со значения 3,41 % до 1,84 %. Минимальное влияние было зафиксировано для случая $p_m = 0,3$ (строки 15–20), когда относительная ошибка снизилась со значения 1,53 % до 1,36 %.

В частности, для рассматриваемой задачи наилучшее решение достигнуто для параметров «мутации» $p_m = 0,3$ и $\tilde{p}_m = 0,6$, дальнейшее использование которых при очередном запуске программы на 200 итераций позволило снизить максимальную погрешность до 0,77 %, а в случае 400 итераций — до 0,21 %.

С целью оценки корректности и точности полученного решения представленная задача была решена также методом градиентного спуска, позволившего получить аналогичное оптимальное значение целевой функции, представленное максимальной концентрацией продукта $x_5 = 31,49$ %, при начальных концентрациях исходных веществ $x_1 = 0,43$ моль/л и $x_2 = 1,09$ моль/л. Изменение концентрации всех участвующих в реакции компонентов при найденных значениях x_1 , x_2 представлено на рисунке.

Отметим, что в условиях отсутствия аналитического представления оптимизируемой функции требовалось каждый раз численно рассчитывать значение производной, что приводило к неоднократным обращениям

к целевой функции. К альтернативному подходу, не требующему расчета производной, можно отнести метод Нелдера–Мида, часто применяющийся при выборе

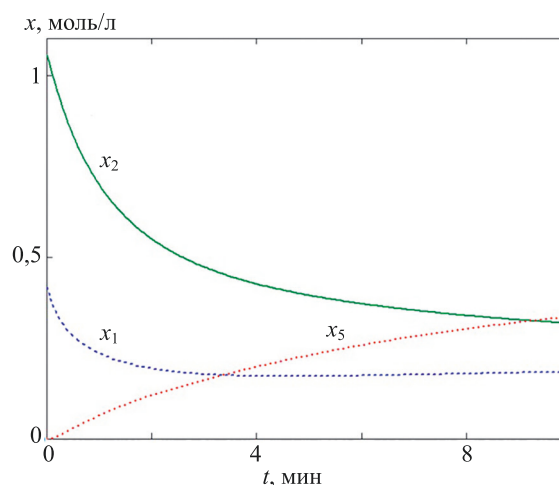


Рисунок. Динамика изменения концентраций исходных компонентов E, S и целевого продукта P

Figure. Dynamics of changes in concentrations of initial components E, S and target product P

параметров в задачах машинного обучения. Решение задачи на языке Python средствами библиотеки SciPy позволило подтвердить ранее найденное решение. Однако оба этих метода относятся к классу методов безусловной оптимизации и определяют необходимость дополнительных преобразований при постановке задачи. В частности, в работе [19] с использованием метода штрафов исходная задача планирования эксперимента была сведена к задаче безусловной оптимизации. Кроме того, данные методы не гарантируют нахождение оптимального решения в случае наличия у оптимизируемой функции нескольких экстремумов.

Несмотря на то, что для получения решения той же точности в рамках реализации генетического алгоритма потребовалось большее количество итераций, использование данного подхода при исследовании и оптимизации сложных многофакторных физико-химических систем является предпочтительным. Особенности реализации генетического алгоритма способствуют нахождению глобального оптимума благодаря случайному характеру при поиске решений и возможности поддерживать их разнообразие в популяции. Кроме того, данный алгоритм позволяет осуществлять поиск одного или нескольких параметров системы в дискретном множестве переменных. Часто такая необходимость возникает при решении задач оптимизации технологических параметров промышленного производства, когда область их возможных значений ограничена. В этом случае использование эвристических методов оптимизации является единственным способом решения задачи.

Заключение

Представленный эвристический подход к оптимизации сложных физико-химических процессов успешно справляется с решением задач планирования эксперимента, независимо от вида целевой функции и задаваемых ограничений. Модифицированный генетический алгоритм и проведение серии вычислительных экспериментов показали большое влияние, оказываемое процедурой «мутации» на точность расчетных результатов. Анализ получаемого на каждом этапе решения и гибкое управление параметрами генетического алгоритма позволяет минимизировать количество итераций для достижения оптимального решения.

Программная реализация представленной модификации генетического алгоритма позволила решить задачи планирования эксперимента при исследовании кинетики ферментативной реакции Михаэлиса–Ментен. В ходе серии вычислительных экспериментов были определены начальные концентрации исходных компонентов — ферментов, выступающих в роли катализатора, обеспечивающих максимальную концентрацию конечного продукта. Тип физико-химического процесса и его наполнение не влияют на представленный генетический алгоритм и его программную реализацию, однако эффективность алгоритма будет выше в случае обновленной настройки параметров «мутации», определяющих реализацию этапа 5 алгоритма. Разработанный на основе алгоритма программный продукт может использоваться для решения задачи планирования эксперимента при исследовании многофакторных физико-химических систем.

Литература

1. Пантелеев А.В. Метаэвристические алгоритмы поиска глобального экстремума. М.: Изд-во МАИ-ПРИНТ, 2009. 160 с.
2. Пантелеев А.В., Скавинская Д.В., Алешина Е.А. Метаэвристические алгоритмы поиска оптимального программного управления. М.: Инфра-М, 2020. 396 с. <https://doi.org/10.12737/18293>
3. Карпенко А.П. Современные алгоритмы поисковой оптимизации. Алгоритмы, вдохновленные природой: учеб. пособие. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2014. 448 с.
4. Саймон Д. Алгоритмы эволюционной оптимизации: практическое руководство / пер. с англ. А.В. Логунова. М.: ДМК Пресс, 2020. 940 с.
5. Holland J.H. *Adaptation in Natural and Artificial Systems: An Introductory Analysis with Applications to Biology, Control, and Artificial Intelligence*. University of Michigan Press, 1992. 211 p.
6. Goldberg D.E. *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*. Addison-Wesley, 1989. 412 p.
7. Long Q., Wu Ch., Huang T., Wang X. A genetic algorithm for unconstrained multi-objective optimization // *Swarm and Evolutionary Computation*. 2015. V. 22. P. 1–14. <https://doi.org/10.1016/j.swevo.2015.01.002>
8. Mohamed A.W., Mohamed A.K. Adaptive guided differential evolution algorithm with novel mutation for numerical optimization // *International Journal of Machine Learning and Cybernetics*. 2019. V. 10. N 2. P. 253–277. <https://doi.org/10.1007/s13042-017-0711-7>
9. Andraws S., Shmatkov S., Bulavin D. Using genetic algorithms for solving the comparison-based identification problem of multifactor estimation model // *Journal of Software Engineering and Applications*. 2013. V. 6. N 7. P. 349–353. <https://doi.org/10.4236/jsea.2013.67044>
10. Gholizadeh S., Salajegheh E., Torkzadeh P. Structural optimization with frequency constraints by genetic algorithm using wavelet radial

References

1. Panteleev A.V. *Metaheuristic Algorithms for Finding the Global Extremum*. Moscow, MAI-PRINT Publ., 2009, 160 p. (in Russian)
2. Panteleev A., Skavinskaya D.V., Aleshina E. *Metaheuristic Algorithms of Search of Optimum Program Control*. Moscow, Infra-M Publ., 2020, 396 p. (in Russian). <https://doi.org/10.12737/18293>
3. Karpenko A.P. *Modern Search Engine Optimization Algorithms. Algorithms Inspired by Nature*. Moscow, Bauman Moscow State Technical University Publ., 2014, 448 p. (in Russian)
4. Simon D. *Evolutionary Optimization Algorithms*. Wiley, 2013, 784 p.
5. Holland J.H. *Adaptation in Natural and Artificial Systems: An Introductory Analysis with Applications to Biology, Control, and Artificial Intelligence*. University of Michigan Press, 1992, 211 p.
6. Goldberg D.E. *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*. Addison-Wesley, 1989, 412 p.
7. Long Q., Wu Ch., Huang T., Wang X. A genetic algorithm for unconstrained multi-objective optimization. *Swarm and Evolutionary Computation*, 2015, vol. 22, pp. 1–14. <https://doi.org/10.1016/j.swevo.2015.01.002>
8. Mohamed A.W., Mohamed A.K. Adaptive guided differential evolution algorithm with novel mutation for numerical optimization. *International Journal of Machine Learning and Cybernetics*, 2019, vol. 10, no. 2, pp. 253–277. <https://doi.org/10.1007/s13042-017-0711-7>
9. Andraws S., Shmatkov S., Bulavin D. Using genetic algorithms for solving the comparison-based identification problem of multifactor estimation model. *Journal of Software Engineering and Applications*, 2013, vol. 6, no. 7, pp. 349–353. <https://doi.org/10.4236/jsea.2013.67044>
10. Gholizadeh S., Salajegheh E., Torkzadeh P. Structural optimization with frequency constraints by genetic algorithm using wavelet radial basis function neural network. *Journal of Sound and Vibration*, 2008,

- basis function neural network // *Journal of Sound and Vibration*. 2008. V. 312. N 1-2. P. 316–331. <https://doi.org/10.1016/j.jsv.2007.10.050>
11. Salajegheh E., Gholizadeh S. Optimum design of structures by an improved genetic algorithm using neural networks // *Advances in Engineering Software*. 2005. V. 36. N 11-12. P. 757–767. <https://doi.org/10.1016/j.advengsoft.2005.03.022>
 12. Ono I., Kita H., Kobayashi S. A real-coded genetic algorithm using the unimodal normal distribution crossover // *Advances in Evolutionary Computing*. Springer, 2003. P. 213–237. https://doi.org/10.1007/978-3-642-18965-4_8
 13. Tsutsui S., Yamamura M., Higuchi T. Multi-parent recombination with simplex crossover in real coded genetic algorithms // *Proc. of the 1st Annual Conference Genetic and Evolutionary Computation (GECCO'99)*. V. 1. 1999. P. 657–664.
 14. Rolland L., Chandra R. The forward kinematics of the 6-6 parallel manipulator using an evolutionary algorithm based on generalized generation gap with parent-centric crossover // *Robotica*. 2016. V. 34. N 1. P. 1–22. <https://doi.org/10.1017/s0263574714001362>
 15. Elfeky Eh.Z., Sarker R.A., Essam D.L. Analyzing the simple ranking and selection process for constrained evolutionary optimization // *Journal of Computer Science and Technology*. 2008. V. 23. N 1. P. 19–34. <https://doi.org/10.1007/s11390-008-9109-z>
 16. Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф. Поиск оптимальных начальных концентраций веществ каталитической реакции на основе кинетической модели // *Автоматизация*. 2023. Т. 59. № 4. С. 78–87. <https://doi.org/10.15372/AUT20230409>
 17. Thakur M., Meghwani S.S., Jalota H. A modified real coded genetic algorithm for constrained optimization // *Applied Mathematics and Computation*. 2014. V. 235. P. 292–317. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2014.02.093>
 18. Hangos K.M., Szederkényi G. Mass action realizations of reaction kinetic system models on various time scales // *Journal of Physics: Conference Series*. 2011. V. 268. P. 012009. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/268/1/012009>
 19. Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф. Численный алгоритм поиска оптимального состава реагирующей смеси на основе кинетической модели реакции // *Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики*. 2023. Т. 23. № 6. С. 1128–1135. <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-6-1128-1135>
 - vol. 312, no. 1-2, pp. 316–331. <https://doi.org/10.1016/j.jsv.2007.10.050>
 11. Salajegheh E., Gholizadeh S. Optimum design of structures by an improved genetic algorithm using neural networks. *Advances in Engineering Software*, 2005, vol. 36, no. 11-12, pp. 757–767. <https://doi.org/10.1016/j.advengsoft.2005.03.022>
 12. Ono I., Kita H., Kobayashi S. A real-coded genetic algorithm using the unimodal normal distribution crossover. *Advances in Evolutionary Computing*. Springer, 2003, pp. 213–237. https://doi.org/10.1007/978-3-642-18965-4_8
 13. Tsutsui S., Yamamura M., Higuchi T. Multi-parent recombination with simplex crossover in real coded genetic algorithms. *Proc. of the 1st Annual Conference Genetic and Evolutionary Computation (GECCO'99)*. V. 1, 1999, pp. 657–664.
 14. Rolland L., Chandra R. The forward kinematics of the 6-6 parallel manipulator using an evolutionary algorithm based on generalized generation gap with parent-centric crossover. *Robotica*, 2016, vol. 34, no. 1, pp. 1–22. <https://doi.org/10.1017/s0263574714001362>
 15. Elfeky Eh.Z., Sarker R.A., Essam D.L. Analyzing the simple ranking and selection process for constrained evolutionary optimization. *Journal of Computer Science and Technology*, 2008, vol. 23, no. 1, pp. 19–34. <https://doi.org/10.1007/s11390-008-9109-z>
 16. Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Search for the optimal initial concentrations of catalytic reaction compounds on the basis of a kinetic model. *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*, 2023, vol. 59, no. 4, pp. 461–469. <https://doi.org/10.3103/S8756699023040027>
 17. Thakur M., Meghwani S.S., Jalota H. A modified real coded genetic algorithm for constrained optimization. *Applied Mathematics and Computation*, 2014, vol. 235, pp. 292–317. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2014.02.093>
 18. Hangos K.M., Szederkényi G. Mass action realizations of reaction kinetic system models on various time scales. *Journal of Physics: Conference Series*, 2011, vol. 268, pp. 012009. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/268/1/012009>
 19. Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Numerical algorithm for finding the optimal composition of the reacting mixture on the basis of the reaction kinetic model. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 6, pp. 1128–1135. (in Russian). <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-6-1128-1135>

Авторы

Мифтахов Эльдар Наилевич — доктор физико-математических наук, научный сотрудник, Уфимский университет науки и технологий, Уфа, 450076, Российская Федерация, [sc 56178153800](https://orcid.org/0000-0002-0471-5949), <https://orcid.org/0000-0002-0471-5949>, promif@mail.ru

Кашникова Анастасия Павловна — аспирант, Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологий, Стерлитамак, 453103, Российская Федерация, [sc 57221470510](https://orcid.org/0009-0000-0264-0114), <https://orcid.org/0009-0000-0264-0114>, a.kashnikova98@yandex.ru

Иванов Дмитрий Владимирович — кандидат физико-математических наук, доцент, Уфимский университет науки и технологий, Уфа, 450076, Российская Федерация, [sc 57197070892](https://orcid.org/0009-0005-7117-0191), <https://orcid.org/0009-0005-7117-0191>, ivanov_dv@list.ru

Authors

Eldar N. Miftakhov — D.Sc. (Physics & Mathematics), Scientific Researcher, Ufa University of Science and Technology, 450076, Ufa, Russian Federation, [sc 56178153800](https://orcid.org/0000-0002-0471-5949), <https://orcid.org/0000-0002-0471-5949>, promif@mail.ru

Anastasia P. Kashnikova — PhD Student, Branch of Ufa University of Science and Technology, 453103, Sterlitamak, Russian Federation, [sc 57221470510](https://orcid.org/0009-0000-0264-0114), <https://orcid.org/0009-0000-0264-0114>, a.kashnikova98@yandex.ru

Dmitry V. Ivanov — PhD (Physics & Mathematics), Associate Professor, Ufa University of Science and Technology, 450076, Ufa, Russian Federation, [sc 57197070892](https://orcid.org/0009-0005-7117-0191), <https://orcid.org/0009-0005-7117-0191>, ivanov_dv@list.ru

Статья поступила в редакцию 02.04.2024

Одобрена после рецензирования 12.06.2024

Принята к печати 22.07.2024

Received 02.04.2024

Approved after reviewing 12.06.2024

Accepted 22.07.2024



Работа доступна по лицензии
Creative Commons
«Attribution-NonCommercial»

doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-645-653

УДК 536.7

Конфигурируемые модели горения в камере сгорания микротурбинного двигателя с возможностью подключения различных физико-химических процессов

Павел Викторович Булат¹, Леонид Олегович Вокин²,
Константин Николаевич Волков³, Александр Борисович Никитенко⁴,
Николай Васильевич Продан⁵, Максим Евгеньевич Ренев⁶✉

^{1,2,3,4,5,6} 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 leonidvokin@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2944-1822>

³ k.volkov@kingston.ac.uk, <https://orcid.org/0000-0001-6055-2323>

⁴ nikitenko_alex@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0003-8070-3733>

⁵ kolinti@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6383-039X>

⁶ renevme@mail.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-0583-0607>

Аннотация

Введение. Разработаны математическая и числовая модели горения топливной смеси в камере сгорания микротурбинного двигателя. Сложность модели может меняться, что дает разработчикам достаточно удобный инструмент расчета и проектирования. Модели позволяют учитывать требуемые задачи проектирования путем подключения и отключения различных физических процессов, создавать оптимальную по уровню сложности модель для каждого конкретного случая. **Метод.** Разработка требуемой конфигурации начинается с рассмотрения простой модели брутто-реакции горения керосина в воздухе без сопряженного теплообмена с твердыми телами. Поэтапно в методику расчета добавляются модели расширенной кинетики, закрученности потока, излучения, теплообмена со стенками, наличия смазки в керосине. **Основные результаты.** Результаты расчета температуры на стенке и полноты сгорания сравнивались с показателями турбореактивных двигателей фирмы JetCat P100-RX и P550-PRO, интегральные характеристики которых хорошо известны. В ходе выполненных расчетных и экспериментальных исследований проведено сравнение пятен побеглости на стенках камеры сгорания с расчетными распределениями температуры. Получено высокое совпадение результатов для полной математической модели. Выявлен эффект лучшего охлаждения камеры сгорания и увеличения полноты сгорания за счет закрутки потока за компрессором. Подтверждено влияние добавки масла в керосин на увеличение удельного расхода топлива на 1–4 %. **Обсуждение.** Значимость полученных результатов состоит в возможности применения предложенной методики расчета в инженерной практике. Рассмотренные модификации модели представляют важный этап в создании и верификации математической модели внутрикамерных процессов.

Ключевые слова

малоразмерный газотурбинный двигатель, камера сгорания, численное моделирование, валидация

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в ходе реализации проекта «Разработка фундаментальных и прикладных основ перспективных методов увеличения эффективности малоразмерных газотурбинных двигателей беспилотных летательных аппаратов и аэрокосмических транспортных систем, а также наземных энергетических установок», № FZWf-2024-0004.

Ссылка для цитирования: Булат П.В., Вокин Л.О., Волков К.Н., Никитенко А.Б., Продан Н.В., Ренев М.Е. Конфигурируемые модели горения в камере сгорания микротурбинного двигателя с возможностью подключения различных физико-химических процессов // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2024. Т. 24, № 4. С. 645–653. doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-645-653

Configurable combustion models of combustion chamber of microturbine engine with possibility of connecting various physico-chemical processes

Pavel V. Bulat¹, Leonid O. Vokin², Konstantin N. Volkov³, Alexander B. Nikitenko⁴, Nikolay V. Prodan⁵, Maksim E. Renev⁶✉

^{1,2,3,4,5,6} Baltic State Technical University "VOENMEH" named after D.F. Ustinov, Saint Petersburg, 190005, Russian Federation

¹ pavelbulat@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0099-9953>

² leonidvokin@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2944-1822>

³ k.volkov@kingston.ac.uk, <https://orcid.org/0000-0001-6055-2323>

⁴ nikitenko_alex@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0003-8070-3733>

⁵ kolinti@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6383-039X>

⁶ renevme@mail.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-0583-0607>

Abstract

Mathematical and numerical models of the combustion of a fuel mixture in the combustion chamber of a microturbine engine have been developed. Complexity of the models can vary, which gives developers a fairly convenient calculation and design tool. Models allow to take into account the required design tasks by considering and not taking into account various physical processes, and create an optimal complexity model for each specific case. The development of the required configuration begins with the consideration of a simple model of the global kerosene in air combustion reaction without conjugate heat exchange with solids. Step by step, models of extended kinetics, swirling flow, radiation, heat exchange with walls, and the presence of lubricant oil in kerosene are added to the calculation methodology. The results of calculating the wall temperature and combustion completeness were compared with those of JetCat P100-RX and P550-PRO turbojet engines, the integral characteristics of which are well known. In the course of the performed computational and experimental studies, a comparison of the run-off spots on the walls of the combustion chamber with the calculated temperature distributions was performed. A good agreement of the results was obtained for the complete mathematical model. The effect of better cooling of the combustion chamber and increasing the completeness of combustion by twisting the flow behind the compressor is revealed. The effect of the addition of oil to kerosene on an increase in specific fuel consumption by 1–4 % has been determined. The significance of the results obtained lies in the possibility of applying the proposed calculation methodology in engineering practice. The considered modifications of the model represent an important stage in the creation and verification of a mathematical model of in-chamber processes.

Keywords

micro gas turbine engine, combustion chamber, numerical simulation, validation

Acknowledgements

This work was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation during the implementation of the project "Development of fundamental and applied principles of promising methods for increasing the efficiency of small-sized gas turbine engines of unmanned aerial vehicles and aerospace transport systems, as well as ground-based power plants", No. FZWF-2024-0004.

For citation: Bulat P.V., Vokin L.O., Volkov K.N., Nikitenko A.B., Prodan N.V., Renev M.E. Configurable combustion models of combustion chamber of microturbine engine with possibility of connecting various physico-chemical processes. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 4, pp. 645–653 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-645-653

Введение

На современном этапе развития газотурбинной техники остро стоит вопрос новых методов организации горения в камерах сгорания. Связано это с тем, что традиционные методы совершенствования газотурбинных двигателей (ГТД) давно исчерпаны. В микро-ГТД проблема стоит острее, так как накладывается несколько дополнительных факторов: сложность охлаждения турбины и, как следствие, низкая температура горения, большие относительные зазоры и связанные с этим сложности получения высоких давлений за компрессором. В больших энергетических турбинах, не имеющих серьезных ограничений на габариты и массу, находят применение технологии сжигания сверхбедных смесей, технологии плазменного горения [1, 2], промежуточное охлаждение воздуха между ступенями компрессора и перемешивание горячего и холодного газов при многостадийном сжигании топлива в камере сгорания. Для микро-ГТД все эти методы неприменимы в силу масштаба, габаритных и стоимостных ограничений.

Затруднено и экспериментальное изучение процессов горения.

Известны экспериментальные и численные исследования, в которых представлены подходы различной степени сложности к проектированию и совершенствованию микро-ГТД [3–5] для различных задач. Среди таких подходов можно выделить расчеты в нульмерной постановке [6, 7], и в динамической модели двигателя [8], результаты которых сравниваются с данными по удельному расходу топлива, полученному в ходе летных экспериментов.

В работе [5] рассмотрены особенности расчетов основных элементов проточной части микро-ГТД (центробежный компрессор, противопоточная камера сгорания, радиально-осевая турбина). Использована простая модель горения без сопряженного теплообмена для быстрого выяснения самых нагретых частей жаровой трубы. При этом исключена возможность охлаждения труб излучением и внутренними тепловыми потоками.

В работах [9–11] построены модели стационарных и нестационарных рабочих процессов в двигателе JetCat

P400, а численные расчеты проведены для различных скоростей вращения вала турбины и расхода воздуха. Различные исследователи экспериментируют со степенью сложности модели химической кинетики и количеством реакций. Так, в работе [12] использована модель, в которой учтены 1127 химических реакций для 127 компонент топливной смеси. При помощи данной модели получены распределения в камере сгорания параметров потока (давления, температуры и скорости), а также интегральные характеристики двигателя JetCat P200-RX. Высокая сложность моделей, требующих больших вычислительных ресурсов, не всегда практична и оправдана. Часто достаточно «инженерной» точности, как это показано в работе [13], в которой выполнено моделирование горения смеси керосина и жидкого водорода в ракетном двигателе РД-120. Целая серия работ посвящена изучению возможности численного моделирования работы энергетических наземных микро-ГТД на природном газе и его смеси с водородом [14, 15], биогазе и продуктах пиролиза [16, 17], синтез-газе (горючая смесь $\text{CO} + \text{H}_2$, получаемая из углеводородов, биомассы) [18], других типах топлива [19], в том числе с использованием усложненных и многостадийных схем сжигания [20]. В этих работах для водорода использовалась брутто-реакция горения, хотя известно, что горение водорода имеет цепной характер реакций. Отметим, что в данных работах не рассмотрено излучение и сопряженный теплообмен газа с металлом камеры сгорания.

В обзорных работах [21, 22] приведена подборка простых моделей для микро-ГТД, в том числе горения в камере сгорания. И отмечено, что известные модели не позволяют делать подробный анализ механизмов горения и получать достоверные объемные распределения полей газодинамических параметров в камере сгорания, однако пригодны для первичных и простых оценок.

В настоящем исследовании сформулирована цель построения компонентной математической и численной модели горения керосина в воздухе в камере сгорания микро-ГТД, в которой можно было бы подключать и отключать модели отдельных физико-химических процессов и, таким образом, изучать их влияние на локальные и интегральные характеристики камеры сгорания микро-ГТД.

Метод

В качестве объекта исследования выбраны камеры сгорания (рис. 1) известных микро-ГТД фирмы JetCat¹ — JetCat P100-RX и JetCat P550-PRO. Это малогабаритные турбореактивные двигатели, создающие тягу 100 и 550 Н соответственно, при расходах керосина 390 и 1650 мл/мин, смешанного с маслом для смазки подшипников в количестве 5 % от массы горючего. Степень сжатия воздуха в компрессоре 2,9 и 3,8, а расходы воздуха 0,23 и 0,93 кг/с соответственно.

Камера сгорания работает следующим образом. Воздух из диффузора компрессора 1 поступает под

давлением в зазоры: между корпусом двигателя 5 и стенками жаровой трубы 2 камеры сгорания, между жаровой трубой и втулкой 4. Керосин в смеси с маслом подается в испарительные трубки 3. В них керосин испаряется. Пары попадают из испарительных трубок в объем жаровой трубы 2. Через отверстия в жаровой трубе подается воздух. Внутри жаровой трубы имеется очаг горения, создаваемый свечой зажигания.

Выполнено сравнение части численных результатов на микро-ГТД JetCat P100-RX с результатами — JetCat P550-PRO. В качестве материала камер сгорания в расчетах принята нержавеющая сталь AISI 430. Математическая модель построена путем постепенного усложнения за счет добавления к исходной простой брутто-модели горения моделей, учитывающих дополнительные физико-химические процессы.

Модель 1. Стационарная задача. Решаются усредненные по Рейнольдсу уравнения Навье–Стокса ($k-\omega$ SST — Shear Stress Transport) для совершенного газа, представляющего собой смесь продуктов сгорания с учетом брутто-реакции горения (керосин-кислород, встроена в программу Ansys Fluent, в которой были выполнены все расчеты). Сопряженный теплообмен не учтен. На входе в камеру сгорания (после компрессора) задается воздух с полным давлением 294 кПа и температурой 450 К. В испарительные трубки подается извне чистый керосин с расходом 390 мл/мин на испарительные трубки. На выходе из камеры сгорания задается статическое давление так, чтобы полный поток воздуха соответствовал заявленному значению 0,23 кг/с. Разностная сетка состоит из 1,5 млн элементов и строится для 1/12 части расчетной области. Модель взаимодействия турбулентности и пламени — Eddy Dissipation Concept. Химический решатель — Stiff Solver.

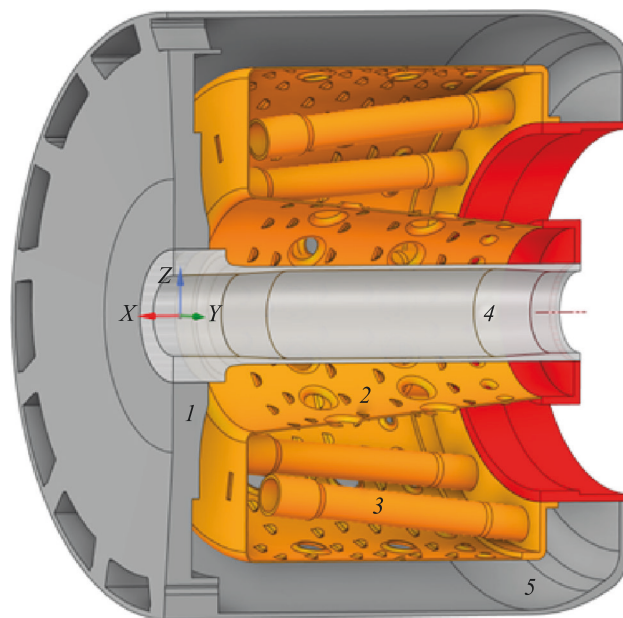


Рис. 1. Камера сгорания двигателя JetCat: 1 — диффузор; 2 — жаровая труба; 3 — испарительная трубка; 4 — втулка; 5 — корпус двигателя

Fig. 1. JetCat engine combustion chamber, 1 — diffuser, 2 — flame tube, 3 — evaporator tube, 4 — bushing, 5 — engine housing

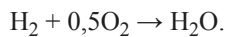
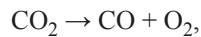
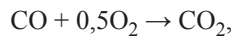
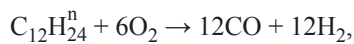
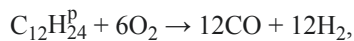
¹ [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://www.jetcat.de/en> (дата обращения: 16.07.2024).

Модель II. В дополнение к модели I учитывается сопряженный теплообмен. В качестве материала стенок жаровой трубы и испарительных трубок принята сталь с теплопроводностью 16 Вт/(м·К). Остальные части (втулка, диффузор, корпус) — из алюминия. Граничные условия дополнены условиями охлаждения корпуса двигателя снаружи излучением. Тепловой поток F_{rad} с учетом нормальной температуры среды и коэффициентов видимости и серости алюминия при температуре стенки T принят

$$F_{rad} = 0,1K_{SB}(T^4 - (293[K])^4),$$

где K_{SB} — постоянная Стефана–Больцмана.

Модель III с расширенной кинетикой. Рассматриваются 8 компонент смеси: два сорта керосина (парафиновый «р» и нафтенный «п»), молекулярный азот и кислород (O_2), углекислый газ (CO_2) и вода (H_2O), угарный газ (CO) и молекулярный водород (H_2)



Нафтенный сорт керосина сложнее воспламеняется, чем парафиновый, и их массовые доли в керосине равны 0,417 (р) и 0,583 (п). Коэффициенты и реакции описаны в работе [13].

Модель IV, излучение. Добавляется модель излучения Discrete Ordinate. Это модель, учитывающая излучение/поглощение поверхностями твердых тел и газообразной средой. Излучение переносится «лучами» с учетом направления. Для поверхностей твердых тел задается коэффициент серости (стальная жаровая труба — 0,9, алюминий — 0,2). Для расчета излучения пламени используется коэффициент поглощения WSGG-domain-based. Он автоматически рассчитывается по составу среды и ее термодинамическому состоянию.

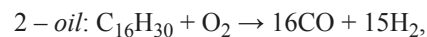
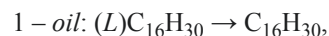
Модель V, испарительные трубки. В реальном двигателе испарительные трубки нагреваются в результате горения топливной смеси в объеме камеры сгорания, а при зажигании факелом — дополнительной запаленной трубки, оснащенной электрической свечой зажигания. Чтобы уйти от проблем, связанных с фазовым переходом керосина из жидкого состояния в газообразное, в модели V принято, что керосин подается в камеру сгорания уже в газообразном состоянии. Считается, что испарительные трубки выполняют свою функцию в полной мере, т. е. керосин испаряется в них полностью. Для этого внутри жаровой трубы во время горения к трубкам должна поступать тепловая энергия, равная энергии испарения керосина. В расчетах задается фиксированная равномерно распределенная поверхностная мощность охлаждения трубок, которая определяется расходом топлива, плотной его испарения и площадью поверхности трубок.

Модель VI, различные уравнения турбулентности. Проведено дополнительное исследование зави-

симости результатов решения от модели турбулентности. Рассматривались модели k - ϵ и k - ω SST. Основное отличие моделей в точности описания пристеночных процессов, определяющих тепловое состояние стенок жаровой трубы и их охлаждение. Модель k - ϵ считается приемлемой для расчета течения в «объеме» вдали от стенок и использует для расчета пограничных слоев и пристенных течений пристеночные функции. Модель k - ω SST может быть применена и для точного расчета течения вблизи стенок, но требует подробной разностной сетки для разрешения пограничного слоя.

Модель VII, закрученный поток. Во многих нуль- и одномерных моделях не учитывается, что за компрессором поток закручивается и отклоняется в цилиндрических координатах на угол порядка 30° относительно вектора e_φ . В данной модификации модели этот эффект учтен.

Модель VIII, масло в горючем. В микро-ГТД для экономии места и массы не используется отдельная система для смазки подшипников. Они смазываются смесью керосина (95 %) и машинного масла (5 %) из топливного бака. Расход топливной смеси на смазку составляет примерно 1/7 полного расхода топлива у двигателей JetCat P100-RX и 1/12 у JetCat P550-PRO. Масло имеет низшую теплотворную способность, равную 41 МДж/кг, в то время как керосин — 43 МДж/кг. Естественно предположить, что добавка масла к горючему может оказать влияние на температуру пламени и полноту сгорания. Молекула масла сложнее молекулы керосина, следовательно, процессы ее разложения до CO и H_2 должны идти дольше. Только после разложения молекулы начинают протекать наиболее экзотермические реакции образования H_2O и CO_2 . В методике уже имеется модель разложения керосина до синтез-газа и его последующего горения. Необходимо добавить реакции разложения машинного масла до синтез-газа. В работе [17] приведены данные по тепловому разложению отработанного машинного масла в кислородной среде с измерением скорости реакции. Реакция [17] проходила в два этапа и зависела от мощности нагрева капли-образца (L) и ее массы. На первом этапе — испарение, на втором — разложение:



$$\frac{S_{1-oil}}{[C_{16}H_{30}]} = 280 \times 10^3 \left[\frac{1}{c} \right] \exp \left(\frac{-38 \times 10^6 [Дж/кмоль]}{RT} \right),$$

$$\frac{S_{2-oil}}{[C_{16}H_{30}]} = 15,7 \times 10^6 \left[\frac{1}{c} \right] \times \left([O_2] \exp \left(\frac{-166 \times 10^6 [Дж/кмоль]}{RT} \right) \right),$$

где R — универсальная газовая постоянная; S_{1-oil} и S_{2-oil} — скорости реакции разложения масла с концентрацией $[C_{16}H_{30}]$.

Для пересчета скорости реакции под условия текущей задачи были сделаны следующие предположения. Считается, что капля вытекает из трубки дискретно с частотой один раз в миллисекунду и ее испарение на-

чинается с момента покидания испарительной трубки. Известный расход масла и заданная частота образования каплей позволяет вычислить размеры и массу капли. Нагрев капли масла происходит в пламени при температуре до 2000 К, что является типичной температурой в факеле. Необходимо отметить, что сделанные предположения никак не влияют на реакции разложения и на количество синтез-газа. Некоторые ошибки могут быть в скорости образования паров масла и, соответственно, в составе газа в окрестности выходных отверстий испарительных трубок. Однако доля масла в горючем мала и это влияние не может быть ощутимым.

Результаты

В результате расчетов получены распределения температуры (T) и давления (p) на стенках камеры сгорания и испарительных трубках, расчетные пятна побежалости на стенках камеры сгорания и профили средних параметров (V — скорость) по сечению камеры сгорания. Осреднение параметров производилось по площади поперечного сечения в разных сечениях по длине камеры сгорания. Распределения некоторых из этих результатов представлены на рис. 2, 3. Средние величины представлены на рис. 4.

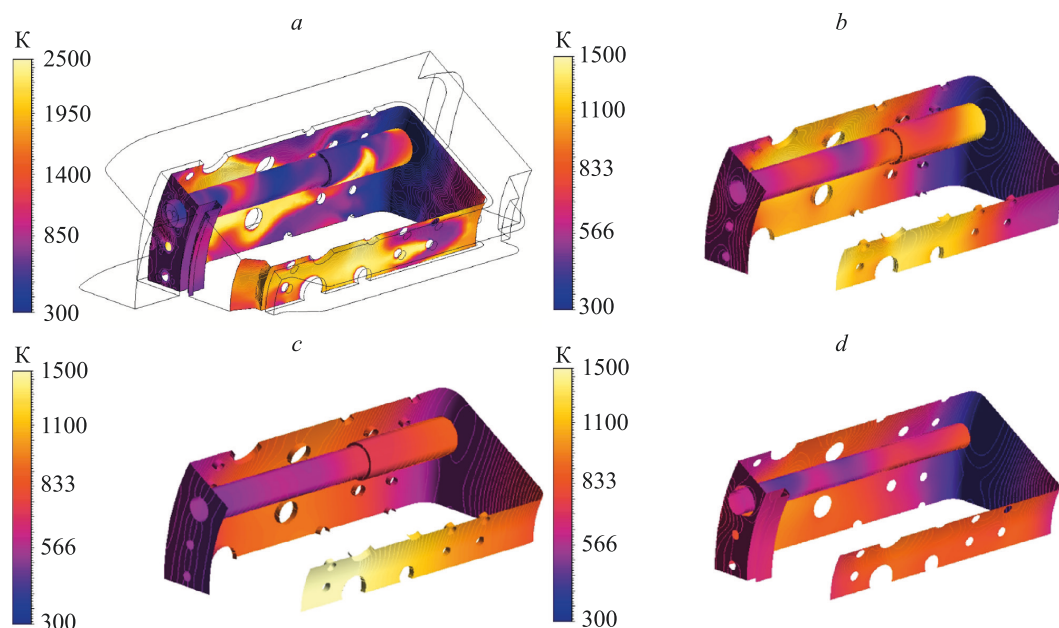


Рис. 2. Распределение температуры на стенках жаровой трубы для моделей: I (a); II (b); III (c); IV (d)

Fig. 2. Temperature distribution on the walls of the flame tube for models: I (a); II (b); III (c); IV (d)

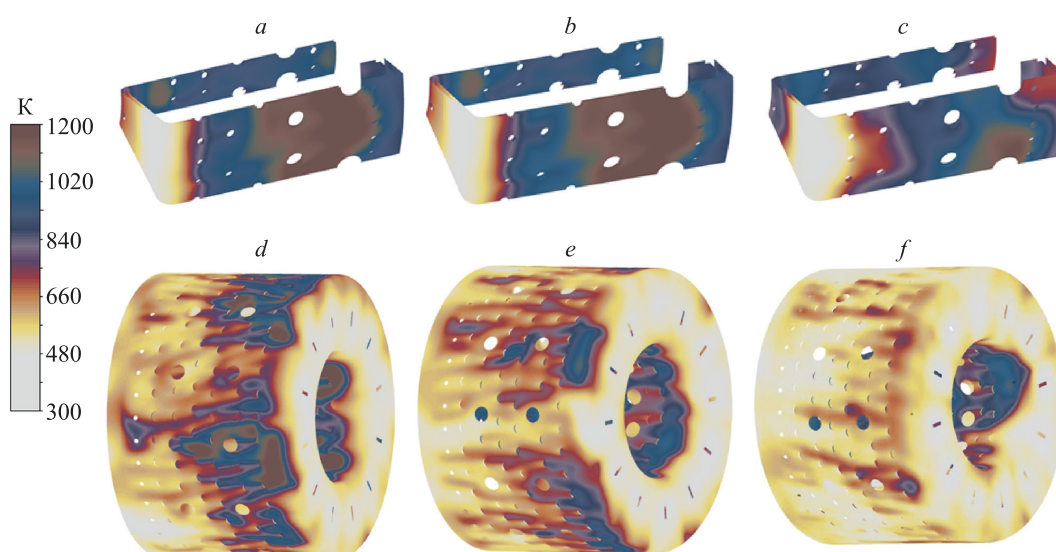


Рис. 3. Распределение пятен побежалости для жаровых труб двигателей JetCat P100-RX (a–c) и JetCat P550-PRO (d–f) для моделей турбулентности: k - ω (a, d); k - ϵ (модель VI) (b, e); k - ϵ и закрутка потока (модель VII) (c, f)

Fig. 3. Distribution of tarnish spots for flame tubes JetCat P100-RX (a–c) and JetCat P550-PRO (d–f) for turbulence models: k - ω (a, d); k - ϵ (model VI) (b, e); k - ϵ and flow swirl (model VII) (c, f)

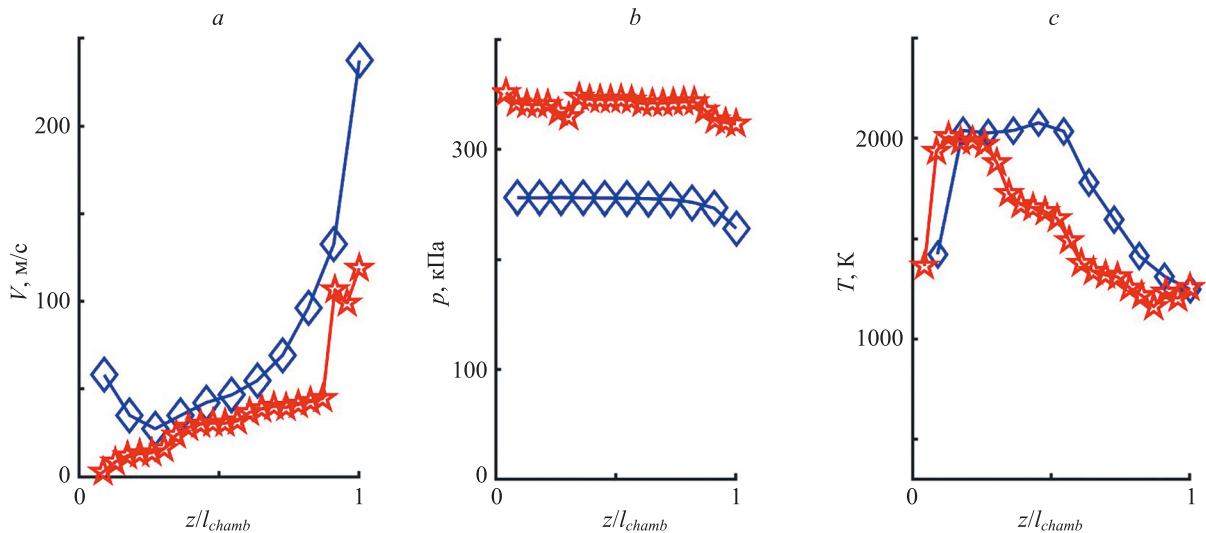


Рис. 4. Зависимости средних значений скорости V (a), давления p (b) и температуры T (c) по сечению внутри жаровой трубы камер сгорания двигателей JetCat P100-RX ($\diamond$) и JetCat P550-PRO ($\star$) от нормированной на длину трубы l_{chamb} координаты вдоль оси трубы z

Fig. 4. Dependences of the average mass flow rate through the section inside the flame tube of the characteristics — velocity (a), static pressure (b), static temperature (c) of the JetCat P100-RX ($\diamond$) and JetCat P550-PRO ($\star$) combustion chambers on the coordinates normalized to the length of the pipe l_{chamb} along the pipe axis z

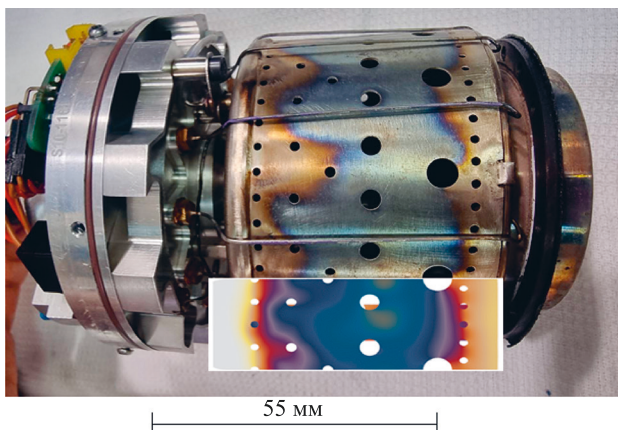


Рис. 5. Распределение цветов побежалости на поверхности жаровой трубы для камеры сгорания двигателя JetCat P100-RX (холостой ход)

Fig. 5. Distribution of tarnish colors on the surface of the flame tube for the combustion chamber of the JetCat P100-RX engine (idle)

Выполнено сравнение пятен побежалости из расчетов камеры сгорания с пятнами, физически образовавшимися на стенках камеры сгорания (рис. 5), а также с температурой газа за турбиной, которую выдавал датчик температуры, установленный на двигателе. Известная степень понижения давления на колесе турбины позволяла вычислить температуру перед турбиной и сравнить ее с данными численного расчета процессов горения.

Обсуждение

Полученные результаты позволили выявить степень влияния физико-химических процессов на горение и

формирование температурных полей. Самая простая модель (модель I) дает сильно завышенные температуры, которые превышают фактические более чем на 500 K. Учет теплообмена (модель II) позволяет моделировать охлаждение внутренних стенок и приводит к более реалистичному распределению температуры, но максимальная температура уменьшается всего на 100 K. Более подробная кинетика (модель III) позволяет вычислять степень полноты сгорания, при этом максимальные температуры еще незначительно понизились. Продольные размеры факела все еще значительно больше, чем следует из результатов эксперимента. В результате температура внутренней стенки жаровой трубы в районе выхода к направляющему аппарату турбины существенно выше, чем ожидается, исходя из известных характеристик материала камеры сгорания.

Учет излучения (модель IV) ожидаемо привел к уменьшению температуры в области горения и на стенках, так как интенсивность теплового потока излучения пропорциональна температуре в четвертой степени. Температура у выхода из камеры сгорания упала сразу на 500 K, по сравнению с моделью I. В экспериментах с двигателем JetCat P100-RX датчик температуры за турбиной на максимальном режиме работы (частота вращения 154 000 об/мин) определил значение 1010 K, что позволило по степени понижения давления на колесе турбины найти температуру перед ней — 1150 K. Среднее по сечению значение температуры, полученное в результате численного расчета, равнялось 1210 K, т. е. отличие составило всего 60 K. С учетом того, что речь идет именно о среднем значении, это очень хороший результат.

Дополнительно был изучен вопрос влияния на результаты расчетов модели VIII испарения смеси горючего и масла. Для этого в модель был добавлен эффект затрат тепла на фазовый переход. Поскольку теплота испарения керосина (240 кДж/кг) в 180 раз меньше,

чем теплота его сгорания (43 000 кДж/кг), то значимого эффекта не было обнаружено. Исследование влияния масла в горючем происходило следующим образом. Выполнялись расчеты в одинаковых условиях для смеси 100 % керосина с воздухом, 95 % керосина с воздухом (более бедная смесь), 95 % керосина и 5 % масла с воздухом. Добавление 5 % масла приводит к уменьшению полноты сгорания на 4 % для двигателя JetCat P100-RX и на 1 % для JetCat P550-PRO. Разница связана с тем, что у JetCat P100-RX топливо подается через 7 трубок, а у JetCat P550-PRO — через 12. Изначально лучшее смешение приводит к увеличению нахождения топливной смеси в области горения и масло успевает сгорать.

Закрутка потока (модель VII) приводит к увеличению гидравлических потерь с 8 до 14 % у JetCat P100-RX и с 5 до 9 % у JetCat P550-PRO за счет потерь на вихреобразование. Полнота сгорания при этом возросла с 98 и 92 % до 99 и 98 % соответственно, из-за большего времени нахождения топливной смеси в зоне горения. Температура жаровой трубы уменьшилась.

Исследование применимости моделей турбулентности выполнялось в секторе 1/12 с периодическими граничными условиями на сетке с 1,5 млн ячеек для JetCat P100-RX и 2 млн ячеек для JetCat P550-PRO. На одной и той же расчетной сетке со сгущениями вблизи металлических стенок в случае JetCat P100-RX модели турбулентности $k-\varepsilon$ (с пристеночными функциями) и $k-\omega$ SST (прямое разрешение течения у стенок) дали идентичный результат, что неудивительно, так как в этих условиях модели $k-\omega$ SST и $k-\varepsilon$ эквиваленты. В случае двигателя JetCat P550-PRO камера сгорания гораздо крупнее, сетка была построена грубая. Модель $k-\varepsilon$ дала результат согласующийся с экспериментом. Модель $k-\omega$ SST, в свою очередь, привела к, очевидно, завышенным температурам и показала признаки перегорания жаровой трубы, отличия в пятнах побежалости в то время, как известно, что двигатель работоспособен. Таким образом, можно сделать вывод, что даже на подробных сетках с количеством ячеек больше 1 млн использование приставочных функций в условиях горения является более предпочтительным, чем прямое разрешение пограничного слоя.

Учет всех физических явлений позволил получить очень хорошее качественное совпадение фактических цветов побежалости и расчетных (рис. 5). Качественно верно передаются и распределения средних параметров вдоль камеры сгорания (рис. 4). Давление в области горения остается примерно постоянным, что соответствует термодинамическому циклу горения при постоянном объеме. Профиль средней скорости примерно соответствует результатам одномерного расчета. У двигателя JetCat P550-PRO скорость в области горения монотонно растет и скачком увеличивается у входа в направляющий аппарат турбины, что объясняется посасывающим эффектом, который создает турбина. У JetCat P100-RX — более простой и менее совершенный диффузор компрессора, чем у JetCat P550-PRO, поэтому скорость на входе в камеру сгорания большая, и поток сначала тормозится, а потом разгоняется. Профиль температуры у обоих двигателей подобен друг другу. Имеется «полка» с постоянной температурой в области горения. Ее длина — величина размерная и определяется давлением и температурой, а также временем протекания химических реакций. В относительных величинах у более длинной камеры сгорания JetCat P550-PRO этот участок короче, хотя в абсолютных величинах он почти такой же, как у JetCat P100-RX. Падение температуры ниже по течению связано с перемешиванием продуктов горения, в которых продолжают идти химические реакции, с более холодным воздухом, поступающим через отверстия в стенках жаровой трубы камеры сгорания.

Результаты анализа влияния различных физико-химических процессов на качество моделирования сведены в таблицу. Время расчета простейшей модели I для JetCat P100-RX — менее 0,5 ч. Наиболее ресурсоемкая часть модели I — расчет излучения с учетом направления Discrete Ordinate (модель IV). Практически никак не сказалось на скорости расчета: учет тепловых потоков в стенках (модель II), охлаждение испарением (модель V), закрутка потока (модель VII). Время расчета полной модели (модель VIII) для JetCat P100-RX с использованными упрощениями и сеткой составляло около 8 ч. В случае JetCat P550-RX требовалось около 16 ч. Вычислительный процессор — Intel Xeon Gold 6248R.

Таблица. Эффект от подключения различных механизмов в модели

Table. The effect of adding different mechanisms in the model

Модель	Физический процесс	Эффект
I	Брутто-реакция	Температура пламени и жаровой трубы 2500 К
II	Добавлен сопряженный теплообмен	Температура внешнего кольца жаровой трубы уменьшилась до 1500 К, внутреннего — до 1200 К
III	Добавлена расширенная кинетика	Температура внешнего кольца жаровой трубы увеличилась до 1750 К, внутреннего уменьшилась до 1000 К. Средняя температура пламени — 2000 К
IV	Добавлено излучение	Температура внешнего кольца — 1200 К, внутреннего — 850 К, что близко к результатам эксперимента
V	Добавлено охлаждение испарением	Заметное влияние на температуру не выявлено
VI	Разные модели турбулентности	Модель $k-\omega$ SST завышает температуру стенки
VII	Добавлена закрутка потока	Температура стенок уменьшилась на 100–150 К
VIII	Добавлено масло в керосин	Полнота сгорания уменьшилась на 1–4 %

Заключение

Разработана математическая и численная модель горения топлива (керосина) в камере сгорания микротурбинного двигателя. Модель позволяет подключать и отключать различные компоненты и учитывать соответствующие эффекты: сопряженный теплообмен, расширенная кинетика, излучение, закрутка потока, влияние испарения топлива на температуру горения, наличие масла в горючем. Выполненные расчеты и сравнение их результатов с результатами эксперимента показали, что использование простых моделей горения приводит к неприемлемому завышению температуры стенок камеры сгорания. Само по себе использование расширенной кинетики также не дает удовлетворительного результата, хотя отличие от эксперимента становится меньше. И только совместный учет сопряженного теплообмена и излучения позволяет получить

приемлемое совпадение с экспериментом и качественно верный характер распределения параметров по длине камеры сгорания. Моделирование закрутки воздуха за компрессором приводит к улучшению охлаждения стенок, увеличению полноты сгорания, но появляются потери полного давления на вихреобразование. Затраты теплоты на испарение горючего в испарительных трубках практически не оказывают никакого влияния ни на процесс горения, ни на температуру стенок.

Выполненное исследование применимости моделей турбулентности $k-\omega$ SST и $k-\epsilon$ с пристеночными функциями показало, что даже на подробной сетке с 1,5–2 млн ячеек разрешение пограничного слоя в модели $k-\omega$ SST недостаточно. Температура пристеночного слоя завышается.

Таким образом, разработана модель, которая может применяться в инженерной практике для идентификации внутрикамерных процессов.

Литература

1. Starikovskaia S.M. Plasma assisted ignition and combustion // *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2006. V. 39. N 16. P. R265–R299. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/39/16/R01>
2. Bulat M.P., Bulat P.V., Denissenko P.V., Esakov I.I., Grachev L.P., Lavrov P.V., Volkov K.N., Volobuev I.A. Plasma-assisted ignition and combustion of lean and rich air/fuel mixtures in low- and high-speed flows // *Acta Astronautica*, 2020. V. 176. P. 700–709. <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2020.04.028>
3. Жданов И.А., Штаудахер С., Фалалеев С.В. Проблемы и перспективы развития микрогазотурбинных двигателей для беспилотных летательных аппаратов // *Вестник Самарского государственного аэрокосмического университета им. академика С.П. Королёва (национального исследовательского университета)*, 2011. № 3-1(27). С. 345–353.
4. Кузнецов А.В., Макарянц Г.М. Имитационная модель малоразмерного газотурбинного двигателя // *Вестник Самарского университета. Аэрокосмическая техника, технологии и машиностроение*, 2017. Т. 16. № 2. С. 65–74. <https://doi.org/10.18287/2541-7533-2017-16-2-65-74>
5. Сыченков В.А., Лиманский А.С., Юсеф В.М., Анкудимов В.В., Сейид-Джафари С.С. Малоразмерный газотурбинный двигатель для беспилотного летательного аппарата // *Известия вузов. Авиационная техника*, 2019. № 4. С. 115–123.
6. Hosseinalipour S.M., Abdolahi M., Razaghi E., Static and dynamic mathematical modeling of a micro gas turbine // *Journal of Mechanics*, 2013. V. 29. N 2. P. 327–335. <https://doi.org/10.1017/jmech.2013.3>
7. Asgari H., Chen X.Q., Morini M., Pinelli M., Sainudiin R., Spina P.R., Venturini M. NARX models for simulation of the start-up operation of a single-shaft gas turbine // *Applied Thermal Engineering*, 2016. V. 93. P. 368–376. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2015.09.074>
8. Erario M.L., De Giorgi M.G., Przysova R. Model-based dynamic performance simulation of a microturbine using flight test data // *Aerospace*, 2022. V. 9. N 2. P. 60. <https://doi.org/10.3390/aerospace9020060>
9. Teixeira M., Romagnosi L., Mezine M., Baux Y., Anker J., Claramunt K., Hirsch C. A methodology for fully-coupled CFD engine simulations, applied to a micro gas turbine engine // *Proceedings of the ASME Turbo Expo2C-2018*, 2018. P. GT2018-76870. <https://doi.org/10.1115/GT2018-76870>
10. Romagnosi L., Li Y., Mezine M., Teixeira M., Vilmin S., Anker J.E., Claramunt K., Baux Y., Hirsch C. A methodology for steady and unsteady full-engine simulations // *Proceedings of the ASME Turbo Expo 2C-2019*, 2019. P. GT2019-90110. <https://doi.org/10.1115/GT2019-90110>
11. Briones A.M., Caswell A.W., Rankin B.A. Fully coupled turbojet engine computational fluid dynamics simulations and cycle analyses along the equilibrium running line // *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 2021. V. 143. N 6. P. 061019. <https://doi.org/10.1115/1.4049410>

References

1. Starikovskaia S.M. Plasma assisted ignition and combustion. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2006, vol. 39, no. 16, pp. R265–R299. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/39/16/R01>
2. Bulat M.P., Bulat P.V., Denissenko P.V., Esakov I.I., Grachev L.P., Lavrov P.V., Volkov K.N., Volobuev I.A. Plasma-assisted ignition and combustion of lean and rich air/fuel mixtures in low- and high-speed flows. *Acta Astronautica*, 2020, vol. 176, pp. 700–709. <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2020.04.028>
3. Zhdanov I.A., Staudacher S., Falaleev S.V. Problems and prospect of microgasturbines development for unmanned aerial vehicle propulsion. *Vestnik of Samara State Aerospace University named after academician S.P. Korolev (National Research University)*, 2011, no. 3-1(27), pp. 345–353. (in Russian)
4. Kuznetsov A.V., Makaryants G.M. Micro gas turbine engine imitation model. *Vestnik of Samara University. Aerospace and Mechanical Engineering*, 2017, vol. 16, no. 2, pp. 65–74. (in Russian). <https://doi.org/10.18287/2541-7533-2017-16-2-65-74>
5. Sychenkov V.A., Limanskii A.S., Yousef W.M., Ankudimov V.V., Seyid Jafari S.S. Micro gas turbine engine for unmanned aerial vehicles. *Russian Aeronautics*, 2019, vol. 62, no. 4, pp. 651–660. <https://doi.org/10.3103/S1068799819040160>
6. Hosseinalipour S.M., Abdolahi M., Razaghi E., Static and dynamic mathematical modeling of a micro gas turbine. *Journal of Mechanics*, 2013, vol. 29, no. 2, pp. 327–335. <https://doi.org/10.1017/jmech.2013.3>
7. Asgari H., Chen X.Q., Morini M., Pinelli M., Sainudiin R., Spina P.R., Venturini M. NARX models for simulation of the start-up operation of a single-shaft gas turbine. *Applied Thermal Engineering*, 2016, vol. 93, pp. 368–376. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2015.09.074>
8. Erario M.L., De Giorgi M.G., Przysova R. Model-based dynamic performance simulation of a microturbine using flight test data. *Aerospace*, 2022, vol. 9, no. 2, pp. 60. <https://doi.org/10.3390/aerospace9020060>
9. Teixeira M., Romagnosi L., Mezine M., Baux Y., Anker J., Claramunt K., Hirsch C. A methodology for fully-coupled CFD engine simulations, applied to a micro gas turbine engine. *Proceedings of the ASME Turbo Expo2C-2018*, 2018, pp. GT2018-76870. <https://doi.org/10.1115/GT2018-76870>
10. Romagnosi L., Li Y., Mezine M., Teixeira M., Vilmin S., Anker J.E., Claramunt K., Baux Y., Hirsch C. A methodology for steady and unsteady full-engine simulations. *Proceedings of the ASME Turbo Expo 2C-2019*, 2019, pp. GT2019-90110. <https://doi.org/10.1115/GT2019-90110>
11. Briones A.M., Caswell A.W., Rankin B.A. Fully coupled turbojet engine computational fluid dynamics simulations and cycle analyses along the equilibrium running line. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 2021, vol. 143, no. 6, pp. 061019. <https://doi.org/10.1115/1.4049410>

12. Tikhonov A.S., Borovkov A.I., Tamm A.Yu. Numerical and experimental investigation of the main parameters of a small gas turbine engine // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. 2020. V. 986. P. 012052. <https://doi.org/10.1088/1757-899X/986/1/012052>
13. Wang T.-S. Thermophysics characterization of kerosene combustion // *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*. 2001. V. 15. N 2. P. 140–147. <https://doi.org/10.2514/2.6602>
14. Tuccillo R., Cameretti M.C., De Robbio R., Reale F., Chiariello F. Methane-Hydrogen Blends in Micro Gas Turbines: Comparison of Different Combustor Concepts // *Proceedings of the ASME Turbo Expo* 8. 2019. <https://doi.org/10.1115/GT2019-90229>
15. Reale F., Calabria R., Chiariello F., Pagliara R., Massoli P. A micro gas turbine fuelled by methane-hydrogen blends // *Applied Mechanics and Materials*. 2012. V. 232. P. 792–796. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMM.232.792>
16. Bazooyar B., Gohari Darabkhani H. The design strategy and testing of an efficient microgas turbine combustor for biogas fuel // *Fuel*. 2021. V. 294. P. 120535. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.120535>
17. Gómez-Rico M.F., Martín-Gullón I., Fullana A., Conesa F.A., Font R. Pyrolysis and combustion kinetics and emissions of waste lube oils // *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*. 2003. V. 68–69. P. 527–546. [https://doi.org/10.1016/S0165-2370\(03\)00030-5](https://doi.org/10.1016/S0165-2370(03)00030-5)
18. Cadorin M., Pinelli M., Vaccari A., Calabria R., Chiariello F., Massoli P., Bianchi E. Analysis of a Micro gas turbine fed by natural gas and synthesis gas: MGT test bench and combustor CFD analysis // *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*. 2012. V. 134. N 7. P. 071401. <https://doi.org/10.1115/1.4005977>
19. Calabria R., Chiariello F., Massoli P., Reale F. Part load behavior of a micro gas turbine fed with different fuels // *Proceedings of the ASME Turbo Expo* 1B. 2014. P. GT2014-26631. <https://doi.org/10.1115/GT2014-26631>
20. Meziane S., Bentebbiche A. Numerical study of blended fuel natural gas-hydrogen combustion in rich/quench/lean combustor of a micro gas turbine // *International Journal of Hydrogen Energy*. 2019. V. 44. N 29. P. 15610–15621. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.04.128>
21. Reale F., Sannino R. Numerical modeling of energy systems based on micro gas turbine: a review // *Energies*. 2022. V. 15. N 3. P. 900. <https://doi.org/10.3390/en15030900>
22. Banihabib R., Assadi M. The role of micro gas turbines in energy transition // *Energies*. 2022. V. 15. N 21. P. 8084. <https://doi.org/10.3390/en15218084>
12. Tikhonov A.S., Borovkov A.I., Tamm A.Yu. Numerical and experimental investigation of the main parameters of a small gas turbine engine. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2020, vol. 986, pp. 012052. <https://doi.org/10.1088/1757-899X/986/1/012052>
13. Wang T.-S. Thermophysics characterization of kerosene combustion. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 2001, vol. 15, no. 2, pp. 140–147. <https://doi.org/10.2514/2.6602>
14. Tuccillo R., Cameretti M.C., De Robbio R., Reale F., Chiariello F. Methane-Hydrogen Blends in Micro Gas Turbines: Comparison of Different Combustor Concepts. *Proceedings of the ASME Turbo Expo* 8, 2019. <https://doi.org/10.1115/GT2019-90229>
15. Reale F., Calabria R., Chiariello F., Pagliara R., Massoli P. A micro gas turbine fuelled by methane-hydrogen blends. *Applied Mechanics and Materials*, 2012, vol. 232, pp. 792–796. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMM.232.792>
16. Bazooyar B., Gohari Darabkhani H. The design strategy and testing of an efficient microgas turbine combustor for biogas fuel. *Fuel*, 2021, vol. 294, pp. 120535. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.120535>
17. Gómez-Rico M.F., Martín-Gullón I., Fullana A., Conesa F.A., Font R. Pyrolysis and combustion kinetics and emissions of waste lube oils. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 2003, vol. 68–69, pp. 527–546. [https://doi.org/10.1016/S0165-2370\(03\)00030-5](https://doi.org/10.1016/S0165-2370(03)00030-5)
18. Cadorin M., Pinelli M., Vaccari A., Calabria R., Chiariello F., Massoli P., Bianchi E. Analysis of a Micro gas turbine fed by natural gas and synthesis gas: MGT test bench and combustor CFD analysis. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 2012, vol. 134, no. 7, pp. 071401. <https://doi.org/10.1115/1.4005977>
19. Calabria R., Chiariello F., Massoli P., Reale F. Part load behavior of a micro gas turbine fed with different fuels. *Proceedings of the ASME Turbo Expo* 1B, 2014, pp. GT2014-26631. <https://doi.org/10.1115/GT2014-26631>
20. Meziane S., Bentebbiche A. Numerical study of blended fuel natural gas-hydrogen combustion in rich/quench/lean combustor of a micro gas turbine. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2019, vol. 44, no. 29, pp. 15610–15621. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.04.128>
21. Reale F., Sannino R. Numerical modeling of energy systems based on micro gas turbine: a review. *Energies*, 2022, vol. 15, no. 3, pp. 900. <https://doi.org/10.3390/en15030900>
22. Banihabib R., Assadi M. The role of micro gas turbines in energy transition. *Energies*, 2022, vol. 15, no. 21, pp. 8084. <https://doi.org/10.3390/en15218084>

Авторы

Булат Павел Викторович — доктор физико-математических наук, кандидат экономических наук, главный научный сотрудник, Балтийский государственный технический университет «ВОЕНМЕХ» им. Д.Ф. Устинова, Санкт-Петербург, 190005, Российская Федерация, [sc 55969578400](https://orcid.org/0000-0003-0099-9953), <https://orcid.org/0000-0003-0099-9953>, pavelbulat@mail.ru

Вокин Леонид Олегович — младший научный сотрудник, Балтийский государственный технический университет «ВОЕНМЕХ» им. Д.Ф. Устинова, Санкт-Петербург, 190005, Российская Федерация, [sc 57222385381](https://orcid.org/0000-0003-2944-1822), <https://orcid.org/0000-0003-2944-1822>, leonidvokin@mail.ru

Волков Константин Николаевич — доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Балтийский государственный технический университет «ВОЕНМЕХ» им. Д.Ф. Устинова, Санкт-Петербург, 190005, Российская Федерация, [sc 8663950000](https://orcid.org/0000-0001-6055-2323), <https://orcid.org/0000-0001-6055-2323>, k.volkov@kingston.ac.uk

Никитенко Александр Борисович — научный сотрудник, Балтийский государственный технический университет «ВОЕНМЕХ» им. Д.Ф. Устинова, Санкт-Петербург, 190005, Российская Федерация, [sc 57203228856](https://orcid.org/0009-0003-8070-3733), <https://orcid.org/0009-0003-8070-3733>, nikitenko_alex@mail.ru

Продан Николай Васильевич — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Балтийский государственный технический университет «ВОЕНМЕХ» им. Д.Ф. Устинова, Санкт-Петербург, 190005, Российская Федерация, [sc 56177927100](https://orcid.org/0000-0002-6383-039X), <https://orcid.org/0000-0002-6383-039X>, kolinti@mail.ru

Ренев Максим Евгеньевич — младший научный сотрудник, Балтийский государственный технический университет «ВОЕНМЕХ» им. Д.Ф. Устинова, Санкт-Петербург, 190005, Российская Федерация, [sc 57211271545](https://orcid.org/0000-0002-0583-0607), <https://orcid.org/0000-0002-0583-0607>, renewme@mail.ru

Authors

Pavel V. Bulat — D.Sc. (Physics & Mathematics), PhD (Economy), Chief Researcher, Baltic State Technical University “VOENMEH” named after D.F. Ustinov, Saint Petersburg, 190005, Russian Federation, [sc 55969578400](https://orcid.org/0000-0003-0099-9953), <https://orcid.org/0000-0003-0099-9953>, pavelbulat@mail.ru

Leonid O. Vokin — Junior Researcher, Baltic State Technical University “VOENMEH” named after D.F. Ustinov, Saint Petersburg, 190005, Russian Federation, [sc 57222385381](https://orcid.org/0000-0003-2944-1822), <https://orcid.org/0000-0003-2944-1822>, leonidvokin@mail.ru

Konstantin N. Volkov — D.Sc. (Physics & Mathematics), Leading Researcher, Baltic State Technical University “VOENMEH” named after D.F. Ustinov, Saint Petersburg, 190005, Russian Federation, [sc 8663950000](https://orcid.org/0000-0001-6055-2323), <https://orcid.org/0000-0001-6055-2323>, k.volkov@kingston.ac.uk

Alexander B. Nikitenko — Scientific Researcher, Baltic State Technical University “VOENMEH” named after D.F. Ustinov, Saint Petersburg, 190005, Russian Federation, [sc 57203228856](https://orcid.org/0009-0003-8070-3733), <https://orcid.org/0009-0003-8070-3733>, nikitenko_alex@mail.ru

Nikolay V. Prodan — PhD (Physics & Mathematics), Baltic State Technical University “VOENMEH” named after D.F. Ustinov, Saint Petersburg, 190005, Russian Federation, [sc 56177927100](https://orcid.org/0000-0002-6383-039X), <https://orcid.org/0000-0002-6383-039X>, kolinti@mail.ru

Maksim E. Renev — Junior Researcher, Baltic State Technical University “VOENMEH” named after D.F. Ustinov, Saint Petersburg, 190005, Russian Federation, [sc 57211271545](https://orcid.org/0000-0002-0583-0607), <https://orcid.org/0000-0002-0583-0607>, renewme@mail.ru

doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-654-660

УДК 004.94

Многоуровневое расщепление в методе Монте-Карло для оценки вероятностей редких событий в пермутационных тестах

Владимир Дмитриевич Сухов^{1✉}, Геннадий Владимирович Короткевич²,
Алексей Александрович Сергушичев³

^{1,3} Университет Вашингтона в Сент-Луисе, Сент-Луис, 63110, США

^{2,3} Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

¹ vdsukhov@ya.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-5169-1433>

² gkorotkevitch@yandex.ru, <https://orcid.org/0009-0004-5941-2816>

³ alsergbox@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1159-7220>

Аннотация

Введение. Пермутационные тесты широко применяются при проведении статистического анализа, например, когда нарушаются предположения параметрических тестов или распределение данных неизвестно. Заметим, что в случае применения классических пермутационных тестов могут возникнуть проблемы при попытке оценки вероятностей редких событий с высокой относительной точностью. Это приводит к трудностям при использовании поправки на множественную проверку статистических гипотез. В работе предлагается оригинальный метод оценки произвольно малых P -значений в пермутационных тестах, который основан на многоуровневом расщеплении в методе Монте-Карло. **Метод.** Представленный метод включает дробление исходного пространства перестановок на непересекающиеся уровни по значениям статистики. Метод дает возможность свести задачу оценки исходной вероятности редкого события к задаче оценки обычных условных вероятностей для каждого уровня. Использование метода позволяет эффективным образом оценивать искомые P -значения, сохраняя баланс между временем работы и уровнем относительной ошибки. **Основные результаты.** Работа метода продемонстрирована в применении к задаче оценки произвольных P -значений двухвыборочного теста Колмогорова–Смирнова. Сравнение результатов работы метода с истинными P -значениями подтвердило практическую сходимость метода. Показаны примеры превосходства предлагаемого метода над альтернативными асимптотическими подходами. **Обсуждение.** Предлагаемый метод выявил существенный потенциал применения в широком спектре научных областей, таких как системная биология, иммунология и других. Метод может быть адаптирован для использования в различных случаях статистического анализа, который требует работы с вероятностями редких событий в пермутационных тестах.

Ключевые слова

проверка статистических гипотез, P -значение, методы Монте-Карло, пермутационные тесты, редкие события

Ссылка для цитирования: Сухов В.Д., Короткевич Г.В., Сергушичев А.А. Многоуровневое расщепление в методе Монте-Карло для оценки вероятностей редких событий в пермутационных тестах // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2024. Т. 24, № 4. С. 654–660. doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-654-660

Multilevel splitting for rare events estimation in permutation tests

Vladimir D. Sukhov^{1✉}, Gennady V. Korotkevich², Alexey A. Sergushichev³

^{1,3} University in St. Louis, Saint Louis, 63110, USA

^{2,3} ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

¹ vdsukhov@ya.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-5169-1433>

² gkorotkevitch@yandex.ru, <https://orcid.org/0009-0004-5941-2816>

³ alsergbox@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1159-7220>

© Сухов В.Д., Короткевич Г.В., Сергушичев А.А., 2024

Abstract

Permutation tests are widely employed in statistical analysis, especially when the assumptions of parametric tests are violated, or the data distribution is unknown. However, classical permutation tests encounter challenges when attempting to estimate the probabilities of rare events with high relative accuracy, leading to difficulties in applying corrections for multiple hypothesis testing. In this study, we propose an original method for estimating arbitrarily small P -values in permutation tests, which is based on multilevel splitting for Monte Carlo method. The proposed method involves splitting the original permutation space into non-overlapping levels based on the statistic values. This approach allows the problem of estimating the original probability of a rare event to be reduced to estimating ordinary conditional probabilities for each level. Utilizing such an approach enables efficient estimation of the desired P -values while maintaining a balance between computation time and the level of relative error. The efficacy of the method is demonstrated in its application to the task of estimating arbitrary P -values in the two-sample Kolmogorov-Smirnov test. Comparing the method results with true P -values has shown practical convergence of the method. Moreover, examples of the superiority of the proposed method over alternative asymptotic approaches have been provided. Thus, the proposed method shows significant potential for application across a broad spectrum of scientific fields, such as systems biology, immunology, and others. Furthermore, the method can be adapted for use in various statistical analysis scenarios that require handling probabilities of rare events in permutation tests.

Keywords

statistical hypothesis test, P -value, Monte Carlo method, permutation test, rare events

For citation: Sukhov V.D., Korotkevich G.V., Sergushichev A.A. Multilevel splitting for rare events estimation in permutation tests. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 4, pp. 654–660 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-654-660

Введение

Одной из фундаментальных задач при проведении научных исследований является проверка статистических гипотез, которая позволяет делать выводы о свойствах вероятностных распределений на основе их ограниченных выборок. Важный аспект при проверке статистических гипотез — выбор между параметрическими и непараметрическими тестами. Параметрические тесты предполагают, что данные соответствуют известному параметризованному семейству распределений, например, нормальному распределению, с некоторыми неизвестными параметрами. В свою очередь, непараметрические тесты не требуют каких-либо предположений о распределении для наблюдаемых значений в эксперименте. Основные преимущества непараметрических тестов: отсутствие предположений о вероятностном распределении для данных; применимость для выборок небольших размеров; возможность обработки данных с выбросами.

В настоящей работе рассмотрен специальный класс непараметрических тестов — пермутационные тесты (от англ. permutation — перестановка) [1, 2]. Эти тесты основаны на исследовании случайных перестановок исходных данных для построения распределения статистики критерия, которое используется для последующего принятия или отклонения нулевой гипотезы. В таком случае P -значение для теста можно определить как отношение числа перестановок, для которых значение статистики больше или равно значению статистики для исходных наблюдений, к числу всех возможных перестановок. Нулевая гипотеза отклоняется, если P -значение меньше некоторого заранее заданного порога значимости, например 0,05. Для проверки этого критерия на практике часто применяются методы Монте-Карло [3, 4]. Эти методы не требуют рассмотрения всех возможных перестановок, а используют их случайное подмножество небольшого фиксированного размера. Методы Монте-Карло зарекомендовали себя на практике за счет простоты их реализации.

Заметим, что в ряде задач требуется оценить экстремально малые P -значения с высокой относительной точностью. Примерами областей, где встречаются такие задачи, являются молекулярная динамика, физика элементарных частиц и др. [5, 6]. В данных задачах истинное P -значение может быть меньше 10^{-10} , в этом случае применение классических методов Монте-Карло требует огромных вычислительных ресурсов. Возможное решение задачи оценки P -значения — использование методов оценки вероятностей редких событий [7]. Одним из таких методов является многоуровневое расщепление в методе Монте-Карло [8, 9]. В отличие от классического метода Монте-Карло, который требует генерирования большого числа перестановок, многоуровневое расщепление позволяет получать необходимую относительную ошибку при использовании значительно меньшего числа перестановок.

Цель работы — решение задачи оценки экстремально малых P -значений в пермутационных тестах, когда применение классических методов является непрактичным. Для выполнения поставленной задачи предложен метод, основанный на использовании многоуровневого расщепления в методе Монте-Карло. Осуществлена апробация метода в применении для задачи оценки P -значений для двухвыборочного теста Колмогорова–Смирнова.

Постановка задачи вычисления малых P -значений в пермутационных тестах

Рассмотрим две выборки $\mathbf{X} = (X_1, X_2, \dots, X_{N_1})$ и $\mathbf{Y} = (Y_1, Y_2, \dots, Y_{N_2})$ со значениями из пространства Ω и с функциями распределений F и G соответственно. Пусть задана статистика на множестве вещественных чисел $\mathbb{R}$:

$$D: \Omega^{N_1+N_2} \rightarrow \mathbb{R},$$

которая не зависит от порядка следования элементов внутри выборок $\mathbf{X}$ и $\mathbf{Y}$.

Тогда сформулируем задачу вычисления P -значения вида $P(D \geq \gamma | H_0)$, где γ — наблюдаемое значение статистики для исходных выборок $\mathbf{X}$ и $\mathbf{Y}$; H_0 — нулевая гипотеза о совпадении распределений $F = G$. На практике часто для этой вероятности неизвестно аналитическое выражение. В связи с этим вместо задачи о вычислении искомого P -значения рассматривают задачу его оценки.

Классический подход решения данной задачи — применение методов Монте-Карло. Суть этих методов заключается в генерировании M случайных перестановок исходных элементов вида:

$$\pi_j: \Omega^{N_1+N_2} \rightarrow \Omega^{N_1+N_2}, j \in \{1, 2, \dots, M\}.$$

Рассмотрим в качестве оценки искомой вероятности величину:

$$\hat{p}_{MC} = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M I\{D_j \geq \gamma\},$$

где I — индикаторная функция; D_j — значение статистики, полученное для j -ой перестановки π_j .

Отметим, что недостатком классического подхода является высокая относительная ошибка [10] для P -значений много меньших единицы. Это следует из выражения относительной ошибки для приведенной оценки:

$$\frac{\sqrt{\mathbf{D}(\hat{p}_{MC})}}{\mathbf{E}\hat{p}_{MC}} = \sqrt{\frac{1 - P(D \geq \gamma | H_0)}{MP(D \geq \gamma | H_0)}},$$

где $\mathbf{E}$ и $\mathbf{D}$ — операторы математического ожидания и дисперсии. Следовательно, для получения относительной ошибки, например, в 100 % при оценивании вероятности 10^{-10} необходимо построить выборку размером $M \approx 10^{10}$. Генерирование такого числа случайных перестановок является вычислительно сложной задачей. Для решения задачи оценки малых P -значений в пермутационных тестах необходимы новые методы, которые позволят получать результаты с хорошей относительной точностью даже для таких малых значений.

Многоуровневое расщепление в методе Монте-Карло для оценки малых P -значений в пермутационных тестах

Для решения поставленной задачи в настоящей работе исследовано применение многоуровневого расщепления в методе Монте-Карло для оценки малых P -значений в пермутационных тестах. Метод основан на рассмотрении дробления диапазона возможных значений статистики D по некоторым границам l_j (уровням):

$$-\infty = l_0 < l_1 < \dots < l_t = \gamma.$$

Тогда искомая вероятность может быть переписана в виде:

$$P(D \geq \gamma) = \prod_{j=1}^t P(D \geq l_j | D \geq l_{j-1}) = \prod_{j=1}^t p_j,$$

где $p_j = P(D \geq l_j | D \geq l_{j-1})$. Таким образом, задачу оценки P -значения можно свести к определению уровней l_j и получению оценок $\hat{p}_j$ для сомножителей p_j .

Предположим, есть возможность получать выборку из условного распределения вида $P(D \in \cdot | D \geq l_{j-1})$. Тогда сформулируем следующий алгоритм для одновременной оценки сомножителей p_j и построения уровней l_j , $j \in \{1, 2, \dots, t\}$.

Шаг 1. Для j -го уровня генерируется выборка статистик $D_1^j, D_2^j, \dots, D_M^j$ нечетного размера M из условного распределения $P(D \in \cdot | D \geq l_{j-1})$.

Шаг 2. В качестве нового потенциального уровня рассматривается медиана выборки $\tilde{l}_j = \text{med}(D_1^j, D_2^j, \dots, D_M^j)$.

Шаг 3. Если $\tilde{l}_j > \gamma$, то шаги останавливаются и в качестве l_j принимается значение γ . Иначе, если $\tilde{l}_j = l_{j-1}$, то дальнейшая работа метода завершается с ошибкой. Если оба эти условия не выполняются, то $l_j := \tilde{l}_j$ и происходит переход к шагу 1.

По построению уровней имеем, что оценка $\hat{p}_j \approx 1/2$ для $1 \leq j \leq t-1$. Получим значение оценки $\hat{p}_t$ в виде:

$$\hat{p}_t = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M I\{D_i^t \geq \gamma\}.$$

В результате искомую вероятность оценим следующим выражением:

$$P(D \geq \gamma) \approx \frac{1}{2^{t-1}} \sum_{i=1}^M \frac{I(D_i^t \geq \gamma)}{M}.$$

Рассмотрим задачу генерирования выборки из условного распределения $P(D \in \cdot | D \geq l_{j-1})$, где $j \geq 1$. Данная задача соответствует задаче генерирования перестановок π равномерно случайно из множества $\pi: D(\pi) \geq l_{j-1}$. Отметим, что значение статистики D не зависит от порядка элементов, и, таким образом, все перестановки можно разбить в равномошные классы эквивалентности, соответствующие N_1 -сочетаниям из множества $\{X_1, \dots, X_{N_1}, Y_1, \dots, Y_{N_2}\}$. Далее, рассматриваемую задачу представим, как генерацию равномерно случайных N_1 -сочетаний, для которых значение статистики не меньше l_{j-1} . Для решения этой задачи используем алгоритм Метрополиса–Гастингса [11, 12], который представляет собой один из вариантов методов Монте-Карло по схеме марковской цепи. В рамках данного алгоритма состояниями цепи являются N_1 -сочетания из $\{X_1, \dots, X_{N_1}, Y_1, \dots, Y_{N_2}\}$, а переход между двумя состояниями возможен, если пересечение пары соответствующих N_1 -сочетаний имеет размер $N_1 - 1$.

Заметим, что для получения выборки $D_1^1, D_2^1, \dots, D_M^1$ из распределения $P(D \in \cdot | D \geq l_0)$ на шаге 1 алгоритма достаточно сгенерировать случайные сочетания без наложения каких-либо условий. Действительно, для любого N_1 -сочетания и соответствующему значению статистики заведомо выполнено условие $D_i^1 \geq l_0$, $i \in \{1, 2, \dots, M\}$ так как $l_0 = -\infty$.

Рассмотрим процесс получения выборки $P(D \in \cdot | D \geq l_{j-1})$ для $j \geq 2$. Пусть имеется выборка $D_1^{j-1}, D_2^{j-1}, \dots, D_M^{j-1} \sim P(D \in \cdot | D \geq l_{j-2})$. В качестве начальных кандидатов для сочетаний на уровне j применим

сочетания, соответствующие следующим значениям статистики:

$$\tilde{D}_i^j = \begin{cases} D_{(M+1-i)}^{j-1}, & i < d, \\ D_{(i)}^{j-1}, & i \geq d, \end{cases}$$

где $d = \lceil M/2 \rceil$ и $D_{(i)}^j$ — i -й элемент из вариационного ряда. По построению имеем, что $\tilde{D}_i^j \geq l_{j-1}$ для всех j . Однако при таком подходе изначально сочетания не являются независимыми. Для решения этой проблемы для каждого N_1 -сочетания $\{\tilde{X}_1, \tilde{X}_2, \dots, \tilde{X}_{N_1}\}$ и его дополнения $\{\tilde{Y}_1, \tilde{Y}_2, \dots, \tilde{Y}_{N_2}\}$ на шаге $j-1$ выполним некоторое число итераций алгоритма Метрополиса–Гастингса вида:

шаг 1. выбирается случайный индекс $k \in \{1, 2, \dots, N_1\}$;
шаг 2. выбирается случайный индекс $m \in \{1, 2, \dots, N_2\}$;
шаг 3. рассматривается сочетание вида: $\{\tilde{X}_1, \dots, \tilde{X}_{k-1}, \tilde{Y}_m, \tilde{X}_{k+1}, \dots, \tilde{X}_{N_1}\}$.

В случае, если значение статистики сочетания на шаге 3 алгоритма Метрополиса–Гастингса является большим либо равным значению l_{j-1} , то данная замена элементов сохраняется. В противном случае замена отклоняется.

Основное свойство алгоритма Метрополиса–Гастингса — сходимость распределения цепи к стационарному при росте числа итераций к бесконечности. Однако для применения алгоритма на практике требуется правило останова, позволяющее достигнуть достаточной сходимости при ограниченном времени работы.

Предложим правило останова, зависящее от параметра α . Итерации алгоритма, выполняются параллельно для каждого сочетания, и повторяются до тех пор, пока число успешных замен T не станет большим или равным $T \geq \alpha \cdot N_1 \cdot M$ (т. е. доля успешных замен для каждого сочетания не меньше, чем $\alpha \cdot N_1$). Параметр α позволяет контролировать баланс между временем работы предлагаемого метода и степенью независимости и равномерности полученной выборки (большее значение соответствует лучшему качеству выборки).

Многоуровневое расщепление в методе Монте-Карло для двухвыборочного теста Колмогорова–Смирнова

Приведем пример использования предложенного метода и рассмотрим его применение для распределения статистики непараметрического двухвыборочного теста Колмогорова–Смирнова [13, 14]. Данный тест определяется в следующем виде.

Пусть имеются две выборки $X_1, X_2, \dots, X_{N_1}$ и $Y_1, Y_2, \dots, Y_{N_2}$, для которых вычислена статистика Колмогорова–Смирнова:

$$\gamma = \sup_x |F_{1,N_1}(x) - F_{2,N_2}(x)|,$$

где F_{1,N_1} и F_{2,N_2} — соответствующие эмпирические функции распределения для исследуемых выборок. Требуется вычислить вероятность следующего вида:

$$P(D \geq \gamma),$$

где D — случайная величина значений статистик Колмогорова–Смирнова, построенных на случайных перестановках исходных наблюдений.

Для оценки искомой вероятности, согласно предложенному методу, рассмотрим дробление исходного пространства значений статистики D и перепишем P -значение в виде:

$$P(D \geq \gamma) = \prod_{j=1}^t P(D \geq l_j | D \geq l_{j-1}) = \prod_{j=1}^t p_j.$$

На практике удобно перейти от оценки исходной вероятности к оценке логарифма вероятности. Тогда эту оценку можно представить в виде суммы логарифмов оценок для каждого уровня:

$$\log P(D \geq \gamma) \approx \sum_{j=1}^t \log \hat{p}_j.$$

В этом случае общая оценка является случайной величиной, которую — как сумму t независимых случайных величин $\log \hat{p}_j$ — можно приблизить нормальным распределением. Параметры данного распределения — математическое ожидание и дисперсия — могут быть оценены в виде суммы соответствующих параметров распределений на каждом уровне.

Для оценки логарифма сомножителя p_j воспользуемся свойствами непрерывных распределений. Во-первых, для непрерывной случайной величины η , с заданной функцией распределения $F_\eta(x) = P(\eta < x)$, случайная величина $F_\eta(x)$ имеет стандартное равномерное распределение. Во-вторых, m -я порядковая статистика выборки размера M из стандартного равномерного распределения является случайной величиной из бета-распределения $B(m, M+1-m)$. Наконец, математическое ожидание логарифма случайной величины $\xi \in B(m, M+1-m)$ выразим следующим образом:

$$E(\log \xi) = \psi(m) - \psi(M+1),$$

где ψ — дигамма-функция.

Рассмотрим выборку $D_1^j, D_2^j, \dots, D_M^j$ из распределения с функцией распределения $F^j(D') := P(D < D' | D \geq l_{j-1})$, полученную на уровне j .

Тогда

$$p_j = P(D \geq D_{M_j}^j | D \geq l_{j-1}) = 1 - P(D < D_{M_j}^j | D \geq l_{j-1}) = 1 - F^j(D_{M_j}^j),$$

где $M_j = \sum_{i=1}^M I(D_i^j < l_j)$.

Предположим, что расхождение между функцией распределения $F_{U_i^j}$ случайной величины $U_i^j = F^j(D_i^j)$ и функцией распределения G стандартного равномерного распределения ограничено некоторым малым значением ε :

$$\sup_x |F_{U_i^j}(x) - G(x)| \leq \varepsilon \ll 1. \quad (1)$$

Тогда запишем выражение для оценки p_j в виде:

$$p_j = 1 - F^j(D_{M_j}^j) \approx 1 - U_{(M_j)}^j = U_{(M-M_j)}^j,$$

где $U_{(M_j)}^j$ — M_j -я порядковая статистика из выборки U_i^j , $1 \leq i \leq M$.

Соответственно, в качестве оценки логарифма p_j используем выражение:

$$\log p_j \approx \psi(M - M_j) - \psi(M + 1).$$

Аналогично определим оценку для последнего уровня $l_j = t$. В результате получим полное выражение для оценки:

$$\log P(D \geq \gamma) \approx \sum_{j=1}^t (\psi(M - M_j) - \psi(M + 1)).$$

Соответственно получим оценку дисперсии случайной величины, используя формулу для дисперсии логарифма случайной величины бета-распределения: $D(\log \xi) = \psi_1(m) - \psi_1(M + 1)$, где ψ_1 — тригамма-функция.

Заметим, что по построению для каждого уровня $m \geq (M + 1)/2$, возможно оценить дисперсию на каждом уровне сверху выражением $\psi_1\left(\frac{M+1}{2}\right) - \psi_1(M + 1)$

в силу монотонности тригамма-функции на положительной полуоси вещественных чисел $\mathbb{R}_+$. Выполним суммирование дисперсии для каждого уровня, получим общую оценку дисперсии и, следовательно, оценку для стандартного отклонения:

$$sd = \sqrt{t \cdot \left(\psi_1\left(\frac{M+1}{2}\right) - \psi_1(M + 1) \right)}.$$

Таким образом, предложенный метод позволяет оценить логарифм произвольно малого P -значения для случая двухвыборочного теста Колмогорова–Смирнова. Также введенное выражение для стандартного отклонения может быть использовано для приближения 95 % доверительного интервала в предположении нормальности оценки логарифма P -значения:

$$(\log \hat{p} - 2sd, \log \hat{p} + 2sd),$$

где $\log \hat{p}$ — оценка искомого логарифма.

Анализ практической сходимости оценок P -значений для двухвыборочного теста Колмогорова–Смирнова

Рассмотрим вопрос практической сходимости результатов работы предлагаемого метода при применении его для двухвыборочного теста Колмогорова–Смирнова. Для этого при заданных значениях N_1 , N_2 и γ исследуем 100 независимых запусков метода для оценки логарифма искомой вероятности. В качестве критерия оценки работы метода зафиксируем число раз, когда истинное значение $\log p$ принадлежит используемому приближению 95 % доверительного интервала ($\log \hat{p} - 2sd, \log \hat{p} + 2sd$).

Рассмотрим случай $N_1 + N_2$, который равен 1001, а значения N_1 выберем из множества $\{50, 100, 250, 500\}$. Для каждого значения N_1 изучим значения статистики γ , которым соответствуют P -значения следующих порядков: 10^{-10} , 10^{-20} , 10^{-30} , 10^{-40} , 10^{-50} . Результаты работы метода для данных параметров приведены на рис. 1, а. По оси абсцисс отложены значения параметра α , а по оси ординат — доля доверительных интервалов, содержащих истинное значение. Для определения истинных P -значений используем библиотеку SciPy [15] языка программирования Python. В результате выполненного исследования можно утверждать о практической сходимости полученных оценок при значениях параметра $\alpha \geq 1$. При этом в более чем 95 % случаев оказалось, что истинное значение логарифма вероятности принадлежит приближению 95 % доверительного интервала для полученных оценок.

В отличие от случая $N_1 + N_2 = 1001$, при $N_1 + N_2 = 1000$ нарушается предположение о малости расхождения между функциями распределений в выражении (1) для двухвыборочного теста Колмогорова–Смирнова. На практике это выражается в том, что на шаге 3 предложенного алгоритма для одновременной оценки сомножителей p_j и построения уровней l_j возникает ситуация, когда $l_j = l_{j-1}$, что приводит к завершению метода с ошибкой. Такие случаи выходят за пределы применимости метода. На рис. 1, б представлены результаты работы

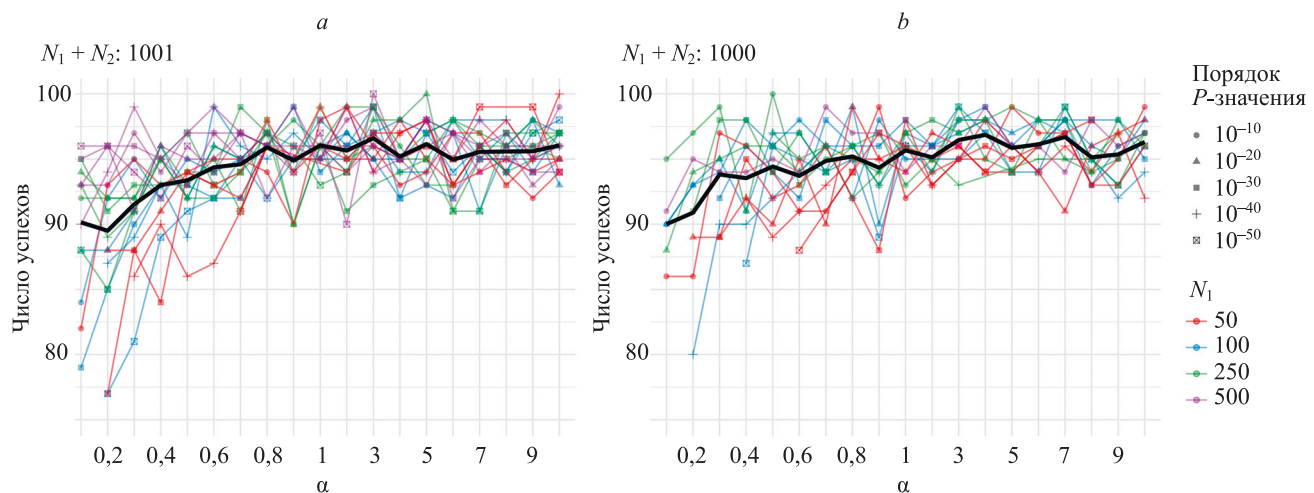


Рис. 1. Результаты работы метода в зависимости от параметра α при $N_1 + N_2 = 1001$ (а) и $N_1 + N_2 = 1000$ (б).

Усреднение результатов для различных комбинаций параметров N_1 , N_2 и γ (черная кривая)

Fig. 1. The results of the method performance depending on the parameter α for $N_1 + N_2 = 1001$ (a) and $N_1 + N_2 = 1000$ (b)

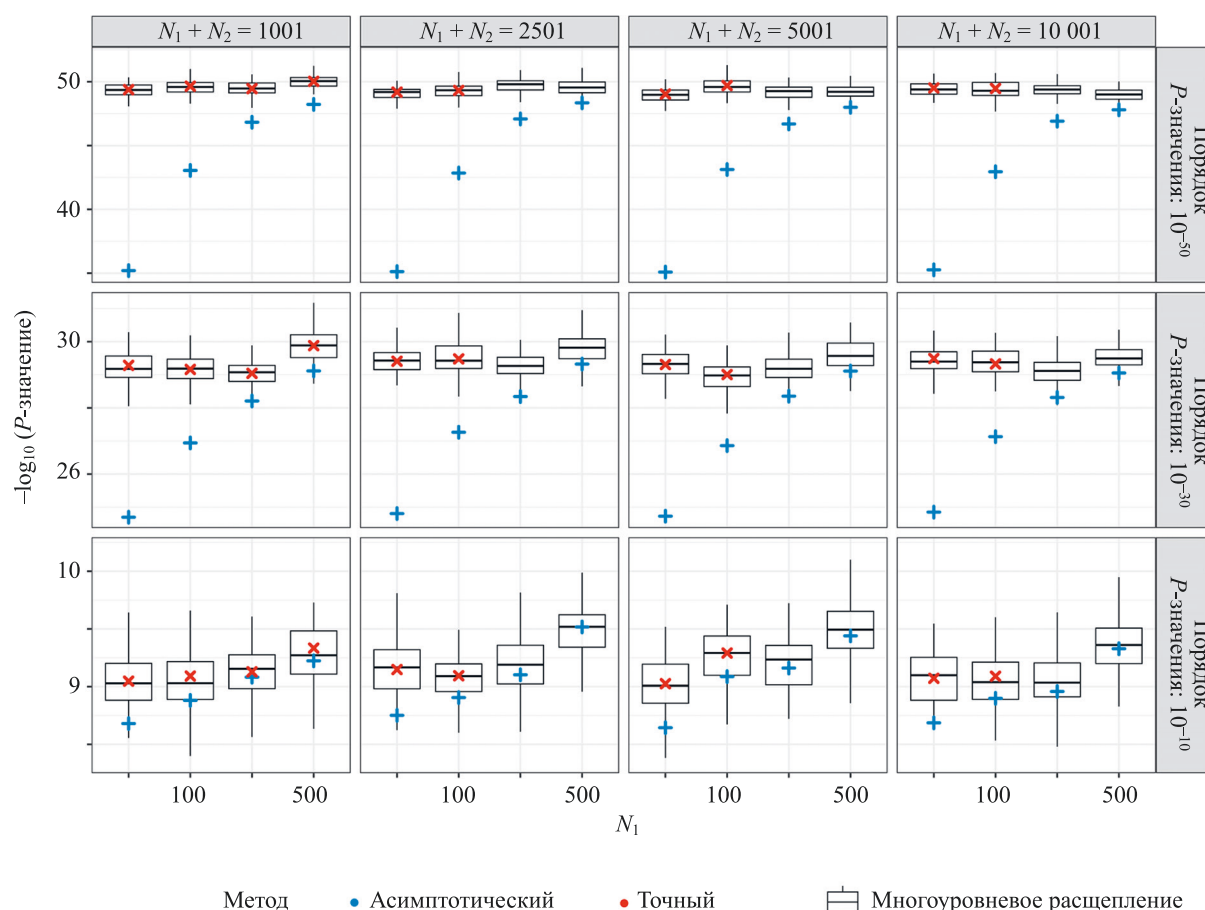


Рис. 2. Сравнение результатов работы предложенного метода с асимптотическим и точным методами из библиотеки SciPy
Fig. 2. Comparison of the method results with asymptotic and exact methods from the SciPy package

метода в случаях, когда метод завершился без ошибок. Заметим, что, как и на рис. 1, a , истинное значение логарифма вероятности принадлежит приближению 95 % доверительного интервала для полученных оценок.

Отметим, что, когда рассматриваемый метод успешно завершил свое выполнение для обоих случаев $N_1 + N_2 = 1001$ и $N_1 + N_2 = 1000$, получена практическая сходимость метода при значениях параметра $\alpha \geq 1$.

Проведенный анализ подтвердил, что установка значения параметра $\alpha = 1$ является необходимым условием для достижения практической сходимости. Рассмотрим результаты работы метода при постоянном значении $\alpha = 1$. В качестве суммы $N_1 + N_2$ используем значения из набора $\{1001, 2501, 5001, 10\,001\}$, оставляя множество значений для N_1 неизменным. Для каждого значения N_1 возьмем значения статистики γ , соответствующие P -значениям следующих порядков 10^{-10} , 10^{-30} , 10^{-50} . Результаты работы метода при 100 независимых запусках для всех возможных комбинаций входных данных показаны на рис. 2. «Ящики с усами» отображают распределение полученных оценок для логарифма искомой вероятности. Также на графике представлены результаты работы точного и асимптотического методов из библиотеки SciPy.

Заметим, что использование точного метода ограничено и не применимо для всех возможных входных данных. В то время как результаты работы асимпто-

тического метода демонстрируют систематическую ошибку, проявляющуюся в случаях, когда удается получить истинные значения для логарифмов P -значений. При этом в отличие от асимптотического приближения результаты работы предложенного метода характеризуются хорошим соответствием между средней оценкой и истинным значением.

Результаты выполненных исследований подтвердили высокую степень соответствия между полученными в работе оценками и истинными значениями. Также обнаружено отсутствие избыточной систематической ошибки, которая характерна для результатов при применении асимптотического метода. Эти наблюдения говорят о надежности и эффективности представленного метода в сравнении с альтернативными асимптотическими подходами.

Закключение

Многоуровневое расщепление в методе Монте-Карло показало свою эффективность в задаче оценки вероятностей редких событий в пермутационных тестах. Применение данного метода решает проблемы, связанные с оценкой экстремальных вероятностей хвостов распределений, которые имеют важное значение при проведении проверки гипотез во множестве научных областей.

Применив метод к пермутационным тестам, получены оценки искомых P -значений с высокой относительной точностью даже для небольших выборок и сложной структуры данных. Полученные результаты показали превосходство многоуровневого расщепления в методе Монте-Карло над традиционными методами

Монте-Карло, а также асимптотическими подходами при работе с редкими событиями. Предложенный метод открывает новые возможности для получения статистических выводов в различных областях, таких как системная биология, иммунология и др.

Литература

1. Good P. *Permutation Tests: A Practical Guide to Resampling Methods for Testing Hypotheses*. Springer Science & Business Media, 2013.
2. Pesarin F., Salmaso L. *Permutation Tests for Complex Data: Theory, Applications and Software*. John Wiley & Sons, 2010. 448 p.
3. Hammersley J. *Monte Carlo Methods*. Springer Science & Business Media, 2013. 178 p.
4. Kalos M.H., Whitlock P.A. *Monte Carlo Methods*. John Wiley & Sons, 2009. 215 p.
5. Trendelkamp-Schroer B., Noé F. Efficient estimation of rare-event kinetics // *Physical Review X*. 2016. V. 6. N 1. P. 011009. <https://doi.org/10.1103/physrevx.6.011009>
6. Lestang T., Ragone F., Bréhier C.-E., Herbert C., Bouchet F. Computing return times or return periods with rare event algorithms // *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*. 2018. V. 2018. N 4. P. 043213. <https://doi.org/10.1088/1742-5468/aab856>
7. Caron V., Guyader A., Zuniga M.M., Tuffin B. Some recent results in rare event estimation // *ESAIM: Proceedings*. 2014. V. 44. P. 239–259. <https://doi.org/10.1051/proc/201444015>
8. L'Ecuyer P., Demers V., Tuffin B. Splitting for rare-event simulation // *Proc. of the 2006 Winter Simulation Conference*. 2006. P. 137–148. <https://doi.org/10.1109/wsc.2006.323046>
9. Glasserman P., Heidelberger P., Shahabuddin P., Zajic T. Multilevel splitting for estimating rare event probabilities // *Operations Research*. 1999. V. 47. N 4. P. 585–600. <https://doi.org/10.1287/opre.47.4.585>
10. Botev Z.I., Kroese D.P. An efficient algorithm for rare-event probability estimation, combinatorial optimization, and counting // *Methodology and Computing in Applied Probability*. 2008. V. 10. N 4. P. 471–505. <https://doi.org/10.1007/s11009-008-9073-7>
11. Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., Teller A.H., Teller E. Equation of state calculations by fast computing machines // *The Journal of Chemical Physics*. 1953. V. 21. N 6. P. 1087–1092. <https://doi.org/10.1063/1.1699114>
12. Hastings W.K. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications // *Biometrika*. 1970. V. 57. N 1. P. 97–109. <https://doi.org/10.2307/2334940>
13. Kolmogorov A. Sulla determinazione empirica di una legge di distribuzione // *Giornale dell'Istituto Italiano degli Attuari*. 1933. V. 4. P. 83–91.
14. Smirnov N. Sur les Écarts de la courbe de distribution empirique // *Matematicheskii Sbornik*. 1939. V. 48. N 1. P. 3–26.
15. Virtanen P., Gommers R., Oliphant T.E., Haberland M., Reddy T., Cournapeau D., Burovski E., Peterson P., Weckesser W., Bright J. et. al. SciPy 1.0: fundamental algorithms for scientific computing in Python // *Nature Methods*. 2020. V. 17. N 3. P. 261–272. <https://doi.org/10.1038/s41592-019-0686-2>

Авторы

Сухов Владимир Дмитриевич — исследователь, Университет Вашингтона в Сент-Луисе, Сент-Луис, 63110, США, [sc 57219925767](https://orcid.org/0000-0002-5169-1433), <https://orcid.org/0000-0002-5169-1433>, vsukhov@ya.ru

Короткевич Геннадий Владимирович — ассистент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, <https://orcid.org/0009-0004-5941-2816>, gkorotkevitch@yandex.ru

Сергушичев Алексей Александрович — кандидат технических наук, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация; профессор, Университет Вашингтона в Сент-Луисе, Сент-Луис, 63110, США, [sc 55772694000](https://orcid.org/0000-0003-1159-7220), <https://orcid.org/0000-0003-1159-7220>, alsergbox@gmail.com

References

1. Good P. *Permutation Tests: A Practical Guide to Resampling Methods for Testing Hypotheses*. Springer Science & Business Media, 2013.
2. Pesarin F., Salmaso L. *Permutation Tests for Complex Data: Theory, Applications and Software*. John Wiley & Sons, 2010. 448 p.
3. Hammersley J. *Monte Carlo Methods*. Springer Science & Business Media, 2013. 178 p.
4. Kalos M.H., Whitlock P.A. *Monte Carlo Methods*. John Wiley & Sons, 2009. 215 p.
5. Trendelkamp-Schroer B., Noé F. Efficient estimation of rare-event kinetics. *Physical Review X*, 2016, vol. 6, no. 1, pp. 011009. <https://doi.org/10.1103/physrevx.6.011009>
6. Lestang T., Ragone F., Bréhier C.-E., Herbert C., Bouchet F. Computing return times or return periods with rare event algorithms. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2018, vol. 2018, no. 4, pp. 043213. <https://doi.org/10.1088/1742-5468/aab856>
7. Caron V., Guyader A., Zuniga M.M., Tuffin B. Some recent results in rare event estimation. *ESAIM: Proceedings*, 2014, vol. 44, pp. 239–259. <https://doi.org/10.1051/proc/201444015>
8. L'Ecuyer P., Demers V., Tuffin B. Splitting for rare-event simulation. *Proc. of the 2006 Winter Simulation Conference*, 2006, pp. 137–148. <https://doi.org/10.1109/wsc.2006.323046>
9. Glasserman P., Heidelberger P., Shahabuddin P., Zajic T. Multilevel splitting for estimating rare event probabilities. *Operations Research*, 1999, vol. 47, no. 4, pp. 585–600. <https://doi.org/10.1287/opre.47.4.585>
10. Botev Z.I., Kroese D.P. An efficient algorithm for rare-event probability estimation, combinatorial optimization, and counting. *Methodology and Computing in Applied Probability*, 2008, vol. 10, no. 4, pp. 471–505. <https://doi.org/10.1007/s11009-008-9073-7>
11. Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., Teller A.H., Teller E. Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, 1953, vol. 21, no. 6, pp. 1087–1092. <https://doi.org/10.1063/1.1699114>
12. Hastings W.K. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications. *Biometrika*, 1970, vol. 57, no. 1, pp. 97–109. <https://doi.org/10.2307/2334940>
13. Kolmogorov A. Sulla determinazione empirica di una legge di distribuzione. *Giornale dell'Istituto Italiano degli Attuari*, 1933, vol. 4, pp. 83–91.
14. Smirnov N. Sur les Écarts de la courbe de distribution empirique. *Matematicheskii Sbornik*, 1939, vol. 48, no. 1, pp. 3–26.
15. Virtanen P., Gommers R., Oliphant T.E., Haberland M., Reddy T., Cournapeau D., Burovski E., Peterson P., Weckesser W., Bright J. et. al. SciPy 1.0: fundamental algorithms for scientific computing in Python. *Nature Methods*, 2020, vol. 17, no. 3, pp. 261–272. <https://doi.org/10.1038/s41592-019-0686-2>

Authors

Vladimir D. Sukhov — Researcher, Washington University in St. Louis, Saint Louis, 63110, USA, [sc 57219925767](https://orcid.org/0000-0002-5169-1433), <https://orcid.org/0000-0002-5169-1433>, vsukhov@ya.ru

Gennady V. Korotkevich — Assistant, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, <https://orcid.org/0009-0004-5941-2816>, gkorotkevitch@yandex.ru

Alexey A. Sergushichev — PhD, Assistant Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation; Professor, Washington University in St. Louis, Saint Louis, 63110, USA, [sc 55772694000](https://orcid.org/0000-0003-1159-7220), <https://orcid.org/0000-0003-1159-7220>, alsergbox@gmail.com

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

BRIEF PAPERS

doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-661-664

УДК 004.891

**Метод сегментации мышечной ткани на снимках компьютерной томографии
на базе предобработанных трехканальных изображений**

**Анастасия Романовна Теплякова¹✉, Роман Владимирович Шершнеv²,
Сергей Олегович Старков³**

^{1,2,3} Обнинский институт атомной энергетики — филиал федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (ИАТЭ НИЯУ МИФИ), Обнинск, 249039, Российская Федерация

¹ anastasija-t23@mail.ru✉, <https://orcid.org/0000-0001-8612-3850>

² rvshershnev@yandex.ru, <https://orcid.org/0009-0000-2324-5893>

³ sergeystarkov56@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0420-7856>

Аннотация

Представлены результаты исследования влияния метода предобработки, основанного на формировании трехканальных изображений, на точность моделей сегментации мышечной ткани на срезах компьютерной томографии, соответствующих уровням позвонков грудного и поясничного отделов позвоночника. На данных масштабного набора Sparsely Annotated Region and Organ Segmentation обучено и протестировано 10 моделей. Получены значения коэффициента схожести Дайса и пересечения над объединением в диапазонах 0,9339–0,9421 и 0,8737–0,8885. Применение трехканального подхода к формированию входных данных повысило точность моделей четырех архитектур из пяти рассмотренных. Обученные модели могут применяться для быстрой и точной разметки мышечной ткани в процессе диагностики.

Ключевые слова

компьютерное зрение, сегментация, компьютерная томография, мышечная ткань, диагностика, U-Net

Ссылка для цитирования: Теплякова А.Р., Шершнеv Р.В., Старков С.О. Метод сегментации мышечной ткани на снимках компьютерной томографии на базе предобработанных трехканальных изображений // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2024. Т. 24, № 4. С. 661–664. doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-661-664

**Method of muscle tissue segmentation in computed tomography images based
on preprocessed three-channel images**

Anastasia R. Teplakova¹✉, Roman V. Shershnev², Sergey O. Starkov³

^{1,2,3} Obninsk Institute for Nuclear Power Engineering, Obninsk, 249039, Russian Federation

¹ anastasija-t23@mail.ru✉, <https://orcid.org/0000-0001-8612-3850>

² rvshershnev@yandex.ru, <https://orcid.org/0009-0000-2324-5893>

³ sergeystarkov56@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0420-7856>

Abstract

The results of a study of a preprocessing influence method based on the formation of three-channel images on the accuracy of muscle tissue segmentation models on the computed tomography scans corresponding to the levels of the vertebrae of the thoracic and lumbar spine are presented. Ten models have been trained and tested on the Sparsely Annotated Region and Organ Segmentation dataset. The values of the Dice similarity coefficient and the Intersection over Union in the ranges of 0.9353–0.9421 and 0.8737–0.8885 were obtained. The use of a three-channel approach to the formation of input data increased the accuracy of models of four of the five architectures considered. Trained models can be used to quickly and accurately annotate muscle tissue during the diagnostic process.

Keywords

computer vision, segmentation, computed tomography, muscle tissue, diagnostics, U-Net

For citation: Teplyakova A.R., Shershnev R.V., Starkov S.O. Method of muscle tissue segmentation in computed tomography images based on preprocessed three-channel images. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 4, pp. 661–664 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-661-664

Результаты исследования, описанного в работе [1], подтвердили целесообразность применения методов компьютерного зрения для решения задачи сегментации мышечной ткани на снимках компьютерной томографии (КТ) на уровне позвонка L3: даже при использовании в процессе обучения выборки малого объема модели продемонстрировали высокие значения коэффициента схожести Дайса (Dice similarity coefficient, DSC) и пересечения над объединением (Intersection over Union, IoU). В настоящей работе модели обучались уже на масштабном наборе данных, который включает в себя срезы КТ на уровнях всех позвонков грудного (Th1–Th12) и поясничного (L1–L5) отделов. Срезы на этих уровнях могут быть использованы для оценки количественных и качественных показателей мышечной ткани при отсутствии срезов на уровне позвонка L3 [2–5], что делает модели более универсальными. Предложенный подход к предобработке основан на формировании трехканальных снимков, каналы которых представляют вариации исходного снимка: с маскированием всего, что выходит за пределы тела пациента; с применением адаптивного выравнивания гистограмм с ограниченным усилением контраста; с применением анизотропного диффузного фильтра. Этот подход позволил повысить точность сегментации легковесной модели U-Net на малой обучающей выборке, в настоящей работе осуществляется оценка его влияния на точность моделей, обученных на масштабном наборе данных.

За основу взят набор данных Sparsely Annotated Region and Organ Segmentation (SAROS), опубликованный в 2023 году¹. Он создан с использованием данных из The Cancer Imaging Archive (TCIA) [6] и включает 13 семантических меток областей тела, в число которых входит мышечная ткань. Разметка сначала выполнялась автоматически, затем вручную корректировалась ординаторами; в отобранных 900 сериях DICOM ей подвергался каждый пятый аксиальный срез [7]. Несмотря на недавнее появление набора SAROS, данные из него уже используются исследователями [8]. В настоящей работе из набора SAROS было отобрано 597 серий КТ, исходные снимки которых взяты из коллекций с открытым доступом. В выборку вошли 273 исследования пациентов мужского и 324 — женского пола. Далее из каждой серии выбраны аксиальные срезы, ограниченные уровнями позвонков Th1–Th12, L1–L5 и имеющие соответствующие маски сегментации. В результате сформирован набор, содержащий 5851 пару срезов и

соответствующих масок бинарной сегментации мышечной ткани в обучающей выборке (488 исследований), 651 пару — в валидационной (49 исследований) и 716 пар — в тестовой (60 исследований).

Для экспериментов в рамках исследования выбраны архитектуры U-Net, ResU-Net, Attention U-Net, U-Net++, Dense U-Net. В программе для обучения моделей сегментации мышечной ткани по снимкам КТ [9] произведена предварительная обработка снимков обучающей, валидационной и тестовой выборок. Для каждой из пяти выбранных архитектур обучено по две модели на входных данных в исходном и трехканальном видах. Все 10 моделей протестированы на данных тестовой выборки. На рисунке показаны примеры троек, состоящих из исходных снимков КТ тестовой выборки, соответствующих им истинных бинарных масок мышечной ткани из набора данных SAROS и бинарных масок, предсказанных моделью.

Для оценки точности обученных моделей использованы две метрики: DSC и IoU. При расчете их значений (таблица) сопоставлялись истинные маски сегментации и маски, предсказанные обученными моделями. Произведено сравнение значений метрик для моделей одних и тех же архитектур, обученных на исходных (одноканальных) и предобработанных (трехканальных) снимках. Для архитектур ResU-Net, Attention U-Net и U-Net++ применение трехканальных входных данных повысило значения DSC и IoU, для Dense U-Net — только IoU. Увеличения значений метрик DSC и IoU для моделей с архитектурами U-Net, ResU-Net, Attention U-Net для всей тестовой выборки лежат в диапазонах 0,0011–0,0015 и 0,0012–0,0014. Отметим, что при визуальной оценке результатов сегментации отдельных срезов моделями, работающими с одно- и трехканальными снимками, выявлено уменьшение количества артефактов и повышение точности для трехканальных модификаций. Замечено, что эти срезы соответствуют преимущественно уровням позвонков Th1–Th2, L5. Количество срезов, для которых наблюдается увеличение DSC и IoU более 0,01, составляет 11–14 % от всей тестовой выборки для моделей с архитектурами ResU-Net, Attention U-Net и U-Net++. Для остальных срезов точность сегментации с предобработкой остается близкой к точности сегментации без предобработки. Это говорит о целесообразности применения предлагаемого метода предобработки при работе с моделями этих архитектур преимущественно для срезов на уровнях Th1–Th2, L5. Подчеркнем, что для модели с архитектурой U-Net применение трехканальных входных данных при обучении не на малом, а на масштабном наборе данных не дало увеличения значений DSC и IoU по всей тестовой выборке, при этом для отдельных подвыборок тестовых срезов (для уровней Th1–Th2, L5) точность сегментации повысилась, для других — понизилась. Максимальные значе-

¹ Koitka S., Baldini G., Kroll L., van Landeghem N., Haubold J., Sung Kim M., Kleesiek J., Nensa F., Hosch R. SAROS A large, heterogeneous, and sparsely annotated segmentation dataset on CT imaging data (SAROS) (Version 2) [Data set]. The Cancer Imaging Archive. 2023. <https://doi.org/10.25737/SZ96-ZG60>

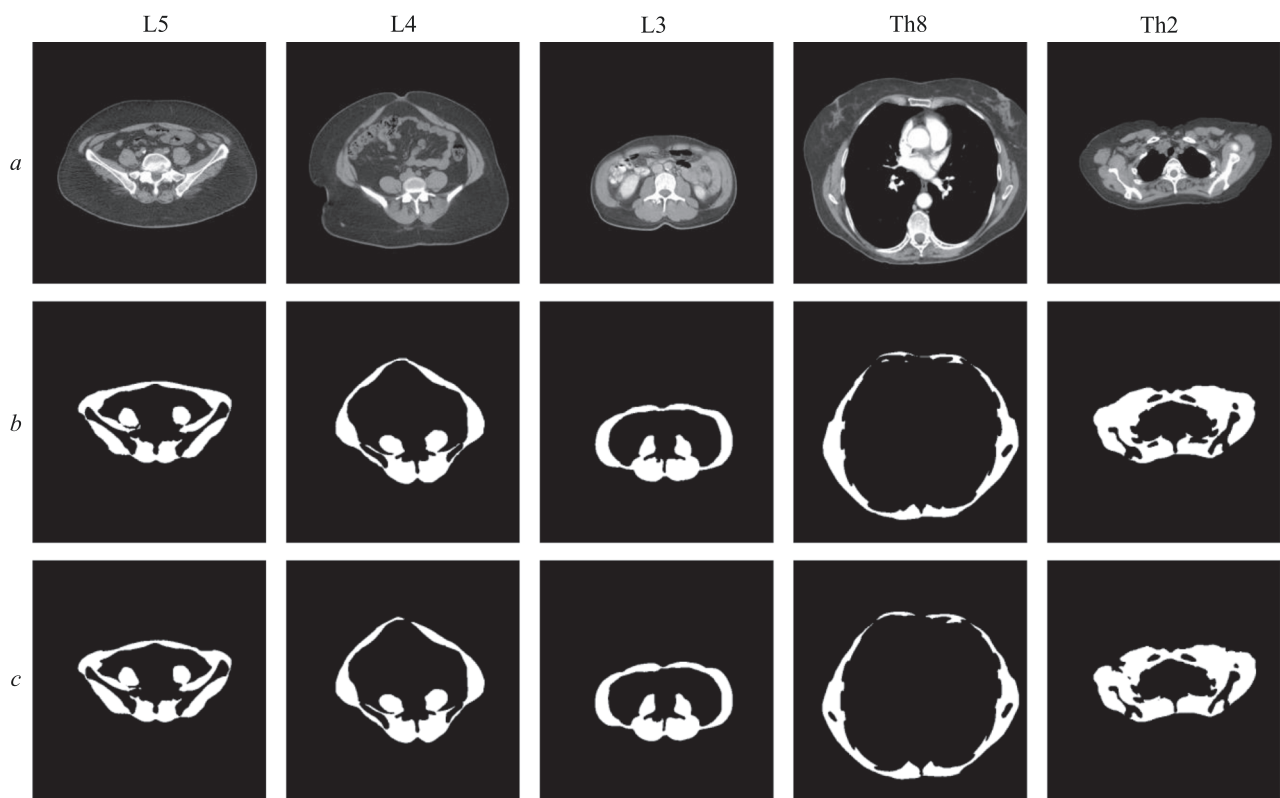


Рисунок. Примеры снимков компьютерной томографии на уровнях разных позвонков и соответствующие маски сегментации: исходные снимки (a); истинные (b) и предсказанные (c) маски

Figure. Examples of computed tomography scans at different vertebral levels and corresponding segmentation masks: scans (a); true masks (b); predicted masks (c)

ния метрик DSC и IoU продемонстрировала модель с архитектурой Dense U-Net, имеющая значительно больше обучаемых параметров по сравнению с остальными рассмотренными и требующая больше вычислительных ресурсов. В ходе визуальной оценки результатов сегментации отдельных срезов установлено, что за счет большого количества обучаемых параметров модель Dense U-Net, работающая с одноканальными снимками, так же четко сегментирует мышечную ткань, как и работающая с трехканальными. Можно сделать вывод о равнозначности двух рассмотренных модификаций Dense U-Net (DSC различаются незначительно, IoU выше у трехканальной).

Полученные результаты позволяют применять предлагаемый метод для анализа снимков КТ всего диапазона уровней, соответствующих грудному и поясничному отделам позвоночника. В дальнейшем планируется разработать модуль автоматического нахождения снимков на уровнях, соответствующих позвонкам, которые могут быть сегментированы новыми моделями, а также модуль анализа получаемых результатов сегментации. Также предполагается выполнение оценки влияния предложенного метода формирования трехканальных входных данных, повысившего точность бинарной сегментации мышечной ткани для нескольких архитектур, на точность бинарной и мультиклассовой сегментации других тканей или органов.

Таблица. Значения метрик DSC и IoU

Table. DSC and IoU values

Тип входных снимков	Архитектуры моделей сегментации				
	U-Net	ResU-Net	Attention U-Net	U-Net++	Dense U-Net
DSC					
одноканальные	0,9386	0,9380	0,9378	0,9339	0,9421
трехканальные	0,9386	0,9395	0,9389	0,9353	0,9419
IoU					
одноканальные	0,8822	0,8802	0,8815	0,8737	0,8874
трехканальные	0,8819	0,8816	0,8828	0,8749	0,8885

Литература

1. Теплякова А.Р., Шершнева Р.В., Старков С.О., Агабабян Т.А., Кукарская В.А. Сегментация мышечной ткани на снимках компьютерной томографии на уровне позвонка L3 // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2024. Т. 24. № 1. С. 124–132. <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2024-24-1-124-132>
2. Van den Broeck J., Sealy M.J., Brussaard C., Koosman J., Jager-Wittenaar H., Scafoglieri A. The correlation of muscle quantity and quality between all vertebra levels and level L3, measured with CT: An exploratory study // *Frontiers in Nutrition*. 2023. V. 10. P. 1148809. <https://doi.org/10.3389/fnut.2023.1148809>
3. Arayne A.A., Gartrell R., Qiao J., Baird P.N., Yeung J.M. Comparison of CT derived body composition at the thoracic T4 and T12 with lumbar L3 vertebral levels and their utility in patients with rectal cancer // *BMC Cancer*. 2023. V. 23. N 1. P. 56. <https://doi.org/10.1186/s12885-023-10522-0>
4. Molwitz I., Ozga A.K., Gerdes L., Ungerer A., Köhler D., Ristow I., Leiderer M., Adam G., Yamamura J. Prediction of abdominal CT body composition parameters by thoracic measurements as a new approach to detect sarcopenia in a COVID-19 cohort // *Scientific Reports*. 2022. V. 12. N 1. P. 6443. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-10266-0>
5. Vangelov B., Bauer J., Kotevski D., Smee R.I. The use of alternate vertebral levels to L3 in computed tomography scans for skeletal muscle mass evaluation and sarcopenia assessment in patients with cancer: a systematic review // *British Journal of Nutrition*. 2022. V. 127. N 5. P. 722–735. <https://doi.org/10.1017/S0007114521001446>
6. Clark K., Vendt B., Smith K., Freymann J., Kirby J., Koppel P., Moore S., Phillips S., Maffitt D., Pringle M., Tarbox L., Prior F. The Cancer Imaging Archive (TCIA): maintaining and operating a public information repository // *Journal of Digital Imaging*. 2013. V. 26. N 6. P. 1045–1057. <https://doi.org/10.1007/s10278-013-9622-7>
7. Koitka S., Baldini G., Kroll L., van Landeghem N., Pollok O.B., Haubold J., Pelka O., Kim M., Kleesiek J., Nensa F., Hosch R. SAROS: A dataset for whole-body region and organ segmentation in CT imaging // *Scientific Data*. 2024. V. 11. N 1. P. 483. <https://doi.org/10.1038/s41597-024-03337-6>
8. Hou B., Mathai T.S., Liu J., Parnell C., Summers R.M. Enhanced muscle and fat segmentation for CT-based body composition analysis: a comparative study // *International Journal of Computer Assisted Radiology and Surgery*. 2024. in press. <https://doi.org/10.1007/s11548-024-03167-2>
9. Теплякова А.Р., Шершнева Р.В. Программа для обучения моделей сегментации мышечной ткани по снимкам компьютерной томографии: Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ RU2024612322. 31.01.2024. Бюл. № 2.

Авторы

Теплякова Анастасия Романовна — преподаватель, аспирант, Обнинский институт атомной энергетики — филиал федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (ИАТЭ НИЯУ МИФИ), Обнинск, 249039, Российская Федерация, [sc 57220985322](mailto:anastasija-t23@mail.ru), <https://orcid.org/0000-0001-8612-3850>, anastasija-t23@mail.ru

Шершнева Роман Владимирович — старший преподаватель, Обнинский институт атомной энергетики — филиал федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (ИАТЭ НИЯУ МИФИ), Обнинск, 249039, Российская Федерация, sc 58703693700, <https://orcid.org/0009-0000-2324-5893>, rvshershnev@yandex.ru

Старков Сергей Олегович — доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, профессор, Обнинский институт атомной энергетики — филиал федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (ИАТЭ НИЯУ МИФИ), Обнинск, 249039, Российская Федерация, sc 6701907645, <https://orcid.org/0000-0002-0420-7856>, sergeystarkov56@mail.ru

References

1. Teplyakova A.R., Shershnev R.V., Starkov S.O., Agababian T.A., Kukarskaya V.A. Segmentation of muscle tissue in computed tomography images at the level of the L3 vertebra. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 1, pp. 124–132. (in Russian). <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2024-24-1-124-132>
2. Van den Broeck J., Sealy M.J., Brussaard C., Koosman J., Jager-Wittenaar H., Scafoglieri A. The correlation of muscle quantity and quality between all vertebra levels and level L3, measured with CT: An exploratory study. *Frontiers in Nutrition*, 2023, vol. 10, pp. 1148809. <https://doi.org/10.3389/fnut.2023.1148809>
3. Arayne A.A., Gartrell R., Qiao J., Baird P.N., Yeung J.M. Comparison of CT derived body composition at the thoracic T4 and T12 with lumbar L3 vertebral levels and their utility in patients with rectal cancer. *BMC Cancer*, 2023, vol. 23, no. 1, pp. 56. <https://doi.org/10.1186/s12885-023-10522-0>
4. Molwitz I., Ozga A.K., Gerdes L., Ungerer A., Köhler D., Ristow I., Leiderer M., Adam G., Yamamura J. Prediction of abdominal CT body composition parameters by thoracic measurements as a new approach to detect sarcopenia in a COVID-19 cohort. *Scientific Reports*, 2022, vol. 12, no. 1, pp. 6443. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-10266-0>
5. Vangelov B., Bauer J., Kotevski D., Smee R.I. The use of alternate vertebral levels to L3 in computed tomography scans for skeletal muscle mass evaluation and sarcopenia assessment in patients with cancer: a systematic review. *British Journal of Nutrition*, 2022, vol. 127, no. 5, pp. 722–735. <https://doi.org/10.1017/S0007114521001446>
6. Clark K., Vendt B., Smith K., Freymann J., Kirby J., Koppel P., Moore S., Phillips S., Maffitt D., Pringle M., Tarbox L., Prior F. The Cancer Imaging Archive (TCIA): maintaining and operating a public information repository. *Journal of Digital Imaging*, 2013, vol. 26, no. 6, pp. 1045–1057. <https://doi.org/10.1007/s10278-013-9622-7>
7. Koitka S., Baldini G., Kroll L., van Landeghem N., Pollok O.B., Haubold J., Pelka O., Kim M., Kleesiek J., Nensa F., Hosch R. SAROS: A dataset for whole-body region and organ segmentation in CT imaging. *Scientific Data*, 2024, vol. 11, no. 1, pp. 483. <https://doi.org/10.1038/s41597-024-03337-6>
8. Hou B., Mathai T.S., Liu J., Parnell C., Summers R.M. Enhanced muscle and fat segmentation for CT-based body composition analysis: a comparative study. *International Journal of Computer Assisted Radiology and Surgery*, 2024, in press. <https://doi.org/10.1007/s11548-024-03167-2>
9. Teplyakova A.R., Shershnev R.V. Program for training muscle tissue segmentation models from computed tomography images. *Certificate of state registration of a computer program RU2024612322*, 31.01.2024. (in Russian)

Authors

Anastasia R. Teplyakova — PhD Student, Lecturer, Obninsk Institute for Nuclear Power Engineering, Obninsk, 249039, Russian Federation, sc 57220985322, <https://orcid.org/0000-0001-8612-3850>, anastasija-t23@mail.ru

Roman V. Shershnev — Senior Lecturer, Obninsk Institute for Nuclear Power Engineering, Obninsk, 249039, Russian Federation, sc 58703693700, <https://orcid.org/0009-0000-2324-5893>, rvshershnev@yandex.ru

Sergey O. Starkov — D.Sc. (Physics & Mathematics), Senior Researcher, Professor, Obninsk Institute for Nuclear Power Engineering, Obninsk, 249039, Russian Federation, sc 6701907645, <https://orcid.org/0000-0002-0420-7856>, sergeystarkov56@mail.ru

doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-665-667

УДК 538.9

Модель адсорбции на эпитаксиальном графене: аналитические результаты

Сергей Юрьевич Давыдов¹, Александр Александрович Лебедев²✉

^{1,2} Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, 194021, Российская Федерация

^{1,2} Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

¹ sergei_davydov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3845-4780>

² shura.lebe@mail.ioffe.ru✉, <https://orcid.org/0000-0003-0829-5053>

Аннотация

Рассмотрена система атом/графен/подложка и предложена схема получения аналитических выражений для чисел заполнения адатома. Учитывалась возможность наличия щели в электронном спектре графена. В качестве подложек рассматривались простые и переходные металлы и полупроводники, для описания плотностей состояний которых использовались простые теоретические модели.

Ключевые слова

адатом, графен, щель в спектре, металлические и полупроводниковая подложки

Благодарности

Авторы признательны поддержке Российского научного фонда, грант № 22-12-00134 (С.Ю. Давыдов) и финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 075-15-2021-1349) (А.А. Лебедев).

Ссылка для цитирования: Давыдов С.Ю., Лебедев А.А. Модель адсорбции на эпитаксиальном графене: аналитические результаты // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2024. Т. 24, № 4. С. 665–667. doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-665-667

Model of adsorption on epitaxial graphene: analytical results

Sergey Yu. Davydov¹, Alexander A. Lebedev²✉

^{1,2} Ioffe Institute, Saint Petersburg, 194021, Russian Federation

^{1,2} ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

¹ sergei_davydov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3845-4780>

² shura.lebe@mail.ioffe.ru✉, <https://orcid.org/0000-0003-0829-5053>

Abstract

The atom/graphene/substrate system is considered and a scheme for obtaining analytical expressions for the adatom occupation numbers is proposed. The possibility of the presence of a gap in the electronic spectrum of graphene was taken into account. Simple and transition metals and semiconductors were considered as substrates, and simple theoretical models were used to describe their densities of states.

Keywords

adatom, graphene, gap in spectrum, metallic and semiconducting substrates

Acknowledgements

The authors are grateful to the support of the Russian Science Foundation, grant No. 22-12-00134 (S.Yu. Davydov) and the financial support of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (project No. 075-15-2021-1349) (A.A. Lebedev).

For citation: Davydov S.Yu., Lebedev A.A. Model of adsorption on epitaxial graphene: analytical results. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 4, pp. 665–667 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-665-667

Постоянный интерес к адсорбционным процессам обусловлен не только практическими достоинствами получаемых результатов для нужд микро- и нанотехнологий, но и возможностью получения фундаментальной информации об элементарных физико-химических процессах образования конденсированных структур [1, 2]. Одно из уникальных свойств графена [3–6] — способность регистрировать наличие единственной адсорбированной молекулы [7]. Данное свойство привело к разработке резистивных газовых и биосенсоров на основе графена [8].

В настоящей работе предложен аналитический подход к определению электронного состояния частицы, адсорбированной на эпитаксиальном графене (эпиграфене), сформированном на металлах и полупроводниках. При этом рассмотрены графены со сплошным спектром разрешенных состояний (бесщелевой) и со щелью в электронном спектре (щелевой).

Адсорбцию одиночного атома, содержащего один электрон в состоянии с энергией ε_a , опишем функцией Грина G_a вида

$$G_a^{-1}(\omega) = \omega - \varepsilon_a - \Lambda(\omega) + i\Gamma(\omega), \quad (1)$$

где ω — энергетическая переменная; $\Gamma(\omega) = \pi V_{a/sub}^2 \rho_{sub}(\omega)$ — функция уширения квазиуровня адатома вследствие взаимодействия с подложкой, $V_{a/sub}$ — матричный элемент взаимодействия адатома с подложкой, $\rho_{sub}(\omega)$ — плотность состояний подложки; $\Lambda(\omega)$ — функция сдвига квазиуровня адатома, являющаяся гильберт-трансформантой функции $\Gamma(\omega)$ [1].

Исходя из выражения (1), рассчитаем плотность состояний на адатоме $\rho_a(\omega)$ и число заполнения адатома n_a

$$\rho_a(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma(\omega)}{[\omega - \varepsilon_a - \Lambda(\omega)]^2 + \Gamma^2(\omega)}, \quad (2)$$

$$n_a(T) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \rho_a(\omega) f(\omega) d\omega,$$

где $f(\omega) = \{1 + \exp[(\omega - \mu)/T]\}^{-1}$ — функция распределения Ферми–Дирака; μ — химический потенциал; T — температура в энергетических единицах [1, 2].

Рассмотрим адсорбцию на свободном щелевом графене, задав его функцию Грина в виде:

$$g_{\Delta}^{\pm}(\omega, \mathbf{k}) = (\omega - \varepsilon_{\Delta}^{\pm}(\mathbf{k}) + i0^+)^{-1}, \quad (3)$$

где $\varepsilon_{\Delta}^{\pm}(\mathbf{k}) = \varepsilon_D \pm \sqrt{\Delta^2 + (3tka/2)^2}$, ε_D — энергия точки Дирака, принимаемая далее за нуль, t — матричный элемент перехода электрона между ближайшими соседями в графене, находящимися на расстоянии a , Δ — полуширина щели; $\mathbf{k}$ — волновой вектор; верхний (нижний) знак соответствует зоне проводимости (валентной зоне). Положив в (3) $\Delta = 0$, получим функцию Грина бесщелевого графена.

Рассчитаем плотность состояний щелевого графена

$$\rho_{\Delta}(\omega) = \begin{cases} 2|\omega|/\xi^2, & \Delta \leq |\omega| \leq R, \\ 0, & |\omega| < \Delta, |\omega| > R, \end{cases} \quad (4)$$

где $R = \sqrt{\Delta^2 + \xi^2}$ и $\xi = t\sqrt{2\pi\sqrt{3}}$ — энергия обрезания (при $\Delta = 0$ получим плотность состояний бесщелевого графена $\rho_0(\omega)$).

Воспользовавшись формулами (3) и (4), введем в функцию Грина $G_a(\omega)$ и плотность состояний $\rho_a(\omega)$ вместо $\Gamma(\omega)$ и $\Lambda(\omega)$ значения $\Gamma_{\Delta}(\omega) = \pi V_{a/FG}^2 \rho_{\Delta}(\omega)$ и $\Lambda_{\Delta}(\omega) = (2\omega V_{a/FG}^2/\xi^2) \ln|(\omega^2 - \Delta^2)/(\omega^2 - \Delta^2 - \xi^2)|$, где V_{FG} — матричный элемент связи адатома со свободным графеном (FG — free graphene) [9]. Далее, вводя $\varepsilon_a^{\Delta} = \varepsilon_a + \Lambda_{\Delta}(\varepsilon_a^{\Delta})$ и $\Gamma_{\Delta}(\varepsilon_a^{\Delta})$ [1, 2], из (2) при $T = 0$ получим зонный вклад n_a^{band} в суммарное число заполнения адатома n_a в виде:

$$n_a^{band} \approx (2/\pi) \arctg[(\varepsilon_a^{\Delta} - \mu)/\Gamma(\varepsilon_a^{\Delta})]. \quad (5)$$

Учтем, что если «уровень» ε_a^{Δ} перекрывается со щелью ($|\varepsilon_a^{\Delta}| \leq \Delta$), то при $T = 0$ возникает дополнительный локальный вклад $n_a^{loc} = v_a^{loc} \Theta(\mu - \varepsilon_a^{\Delta})$, где $\Theta(\dots)$ — функция Хэвисайда и $v_a^{loc} = [1 - d\Lambda_{\Delta}(\omega)/d\omega]_{\varepsilon_a^{\Delta}}^{-1}$ [1, 2]. При $T \neq 0$ получим $n_a^{loc} = v_a^{loc} f(\varepsilon_a^{\Delta})$. Результирующее число заполнения адатома $n_a = n_a^{band} + n_a^{loc}$. В случае адсорбции на бесщелевом графене при $\varepsilon_a^0 = \varepsilon_a + \Lambda(\varepsilon_a^0) \sim 0$ в плотности состояний $\rho_a^0(\omega)$ вблизи точки Дирака $\varepsilon_D = 0$ возникает резкий пик, проявляющийся в температурной зависимости чисел заполнения [10].

Перейдем к адсорбции на щелевом эпиграфене, функция Грина которого имеет вид

$$\tilde{g}_{\Delta}^{\pm}(\omega, \mathbf{q}) = (\omega - \varepsilon_{\Delta}^{\pm}(\mathbf{k}) - \Sigma_{EG}(\omega))^{-1},$$

где $\Sigma_{EG}(\omega) = \Lambda_{EG}(\omega) - i\Gamma_{EG}(\omega)$ — наведенная подложкой, на которой находится графен, собственно-энергетическая часть, $\Gamma_{EG}(\omega) = \pi V_{EG}^2 \rho_{sub}(\omega)$ — функция уширения состояний графена, $\Lambda_{EG}(\omega)$ — функция сдвига состояний эпитаксиального графена (EG — epitaxial graphene), являющаяся гильберт-трансформантой функции $\Gamma_{EG}(\omega)$, $\rho_{sub}(\omega)$ — плотность состояний подложки, V_{EG} — матричный элемент взаимодействия эпиграфена с подложкой.

Рассмотрим возможные подложки. Для простых sp -металлов положим $\rho_{sub}(\omega)$ равным $\rho_m = \text{const}$ (модель Андерсона) [1, 2], так что $\Gamma_m = \pi V_m^2 \rho_m$ и $\Lambda_m(\omega) = 0$, где V_m — матричный элемент взаимодействия графен — sp -металл (далее исключим индексы Δ и 0). Для описания $\rho_{sub}(\omega)$ d -металлов примем модель Фриделя: $\rho_d(\omega) = \bar{\rho}_d = 10/W_d$ при $|\omega - \bar{\omega}_d| \leq W_d/2$, $\rho_d(\omega) = 0$ при $|\omega - \bar{\omega}_d| > W_d/2$, где W_d — ширина d -зоны, центр которой расположен в точке $\bar{\omega}_d$. Отсюда получим $\Gamma_d(\omega) = \pi V_d^2 \rho_d(\omega)$ и $\Lambda_d(\omega) = (\bar{\rho}_d V_d^2) \ln|(\omega - W_d/2)/(\omega + W_d/2)|$, где V_d — матричный элемент взаимодействия графен — d -металл.

Для плотности состояний полупроводников $\rho_{sc}(\omega)$ воспользуемся моделью Халдейна–Андерсона: $\rho_{sc}(\omega) = \bar{\rho}_{sc} = \text{const}$ при $|\omega| \leq E_g/2$, $\rho_{sc}(\omega) = 0$ при $|\omega| > E_g/2$. В результате получим $\Lambda_{sc}(\omega) = (\bar{\rho}_{sc} V_{sc}^2) \ln|(\omega - E_g/2)/(\omega + E_g/2)|$, где V_{sc} — матричный элемент взаимодействия графен — полупроводник.

Отметим, что даже в рамках приближенного подхода плотности состояний эпиграфена представляют собой довольно громоздкие выражения. Однако, если пренебречь затуханием электронных состояний, положив $\Gamma_{EG}(\omega) = 0$, то для плотностей состояний щелевого эпиграфена $\tilde{\rho}_{\Delta}(\Omega)$ справедлива формула (4) с заменой ω на $\Omega = \omega - \Lambda_{EG}(\omega)$, где $\Lambda_{EG}(\omega) = \Lambda_m(\omega)$, $\Lambda_d(\omega)$ или $\Lambda_{sc}(\omega)$. Перепишем формулу (5) в виде:

$$\tilde{n}_a^{band} \approx (2/\pi) \arctg[(\tilde{\epsilon}_a^{EG} - \mu)/\Gamma(\tilde{\epsilon}_a^{EG})],$$

$$\tilde{n}_a^{loc} = \tilde{v}_a^{loc} f(\tilde{\epsilon}_a^{EG}), \quad \tilde{v}_a^{loc} = |1 - d\Lambda_{EG}(\omega)/d\omega|_{\tilde{\epsilon}_a^{EG}}^{-1},$$

где $\tilde{\epsilon}_a^{EG} = \epsilon_a + \Lambda_{EG}(\tilde{\epsilon}_a^{EG})$. Заметим, что учет сдвига электронных состояний $\Lambda(\omega)$ и пренебрежением их затуханием $\Gamma(\omega)$ эквивалентно стандартной теории возмущений в нерелятивистской квантовой механике.

В работе представлен алгоритм рассмотрения сложной системы атом/графен/подложка, заключающийся в последовательности шагов: атом $\leftrightarrow$ свободный графен $\leftrightarrow$ подложка. Возможна и инверсия: подложка $\leftrightarrow$ графен $\leftrightarrow$ атом. Выбор направления шагов зави-

сит от имеющейся экспериментальной информации. Из рассмотренных подложек наиболее интересными представляются полупроводниковые субстраты, так как интерфейс щелевой графен/полупроводник представляет собой гетеропереход. Среди d -металлов предпочтительными являются $3d$ -магнетики (Fe, Co, Ni), так как вследствие эффекта близости они могут создавать намагниченность эпитаксиального графена. Подчеркнем, что выбор адсорбатов широк: от малых газовых молекул до макро- и биомолекул. Примеры конкретного использования предложенной в настоящей работе схемы для сложных систем приведены в работах [11, 12].

Литература

1. Давыдов С.Ю., Трошин С.В. Адсорбция на металлах и полупроводниках: модели Андерсона–Ньюна и Халдейна–Андерсона // *Физика твердого тела*. 2007. Т. 49. № 8. С. 1508–1513.
2. Давыдов С.Ю., Лебедев А.А., Посредник О.В. Элементарное введение в теорию наносистем. СПб.: Лань, 2014. С. 142–162.
3. Geim A.K., Novoselov K.S. The rise of graphene // *Nature Materials*. 2007. V. 6. N 3. С. 183–191. <https://doi.org/10.1038/nmat1849>
4. Castro Neto A.H., Guinea F., Peres N.M.R., Novoselov K.S., Geim A.K. The electronic properties of graphene // *Reviews of Modern Physics*. 2009. V. 81. N 1. P. 109–162. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109>
5. Sun Y., Wang R., Liu K. Substrate induced changes in atomically thin 2-dimensional semiconductors: Fundamentals, engineering, and applications // *Applied Physics Reviews*. 2017. V. 4. N 1. P. 011301. <https://doi.org/10.1063/1.4974072>
6. Liu Y., Pharr M., Salvatore G.A. Lab-on-skin: a review of flexible and stretchable electronics for wearable health monitoring // *ACS Nano*. 2017. V. 11. N 10. P. 0614–0635. <https://doi.org/10.1021/acsnano.7b04898>
7. Schedin F., Geim A.K., Morozov S.V., Hill E.W., Blake P., Katsnelson M.I., Novoselov K.S. Detection of individual gas molecules adsorbed on graphene // *Nature Materials*. 2007. V. 6. N 9. P. 652–665. <https://doi.org/10.1038/nmat1967>
8. Kumar V., Kumar A., Lee D.-J., Park S.-S. Estimation of number of graphene layers using different methods: a focused review // *Materials*. 2021. V. 14. N 16. P. 4590. <https://doi.org/10.3390/ma14164590>
9. Давыдов С.Ю. К теории адсорбции на графеноподобных соединениях // *Физика и техника полупроводников*. 2017. Т. 51. № 2. С. 226–233. <https://doi.org/10.21883/FTP.2017.02.44110.8336>
10. Давыдов С.Ю. О роли температуры в задаче об адсорбции на графене // *Журнал технической физики*. 2016. Т. 86. № 7. С. 145–147.
11. Давыдов С.Ю. К модельному описанию электронного спектра графеноподобных Янус-структур // *Физика твердого тела*. 2022. Т. 64. № 2. С. 262–268. <https://doi.org/10.21883/FTT.2022.02.51939.218>
12. Давыдов С.Ю. Влияние межслойного взаимодействия на электронный спектр вертикальной сверхрешетки // *Физика твердого тела*. 2022. Т. 64. № 11. С. 1828–1833. <https://doi.org/10.21883/FTT.2022.11.53342.392>

Авторы

Давыдов Сергей Юрьевич — доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник, Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, 194021, Российская Федерация; ведущий инженер, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 7103364563](https://orcid.org/0000-0003-3845-4780), <https://orcid.org/0000-0003-3845-4780>, sergei_davydov@mail.ru

Лебедев Александр Александрович — доктор физико-математических наук, профессор, руководитель отделения, Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, 194021, Российская Федерация; профессор практики, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 55136581600](https://orcid.org/0000-0003-0829-5053), <https://orcid.org/0000-0003-0829-5053>, shura.lebe@mail.ioffe.ru

References

1. Davydov S.Yu., Troshin S.V. Adsorption on metals and semiconductors: Anderson-Newns and Haldane-Anderson models. *Physics of the Solid State*, 2007, vol. 49, no. 8, pp. 1583–1588. <https://doi.org/10.1134/s1063783407080318>
2. Davydov S.Yu., Lebedev A.A., Posrednik O.V. *An Elementary Introduction to Nanosystem Theory*. St. Petersburg, Lan' Publ., 2014, pp. 142–162. (in Russian)
3. Geim A.K., Novoselov K.S. The rise of graphene. *Nature Materials*, 2007, vol. 6, no. 3, pp. 183–191. <https://doi.org/10.1038/nmat1849>
4. Castro Neto A.H., Guinea F., Peres N.M.R., Novoselov K.S., Geim A.K. The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*, 2009, vol. 81, no. 1, pp. 109–162. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109>
5. Sun Y., Wang R., Liu K. Substrate induced changes in atomically thin 2-dimensional semiconductors: Fundamentals, engineering, and applications. *Applied Physics Reviews*, 2017, vol. 4, no. 1, pp. 011301. <https://doi.org/10.1063/1.4974072>
6. Liu Y., Pharr M., Salvatore G.A. Lab-on-skin: a review of flexible and stretchable electronics for wearable health monitoring. *ACS Nano*, 2017, vol. 11, no. 10, pp. 0614–0635. <https://doi.org/10.1021/acsnano.7b04898>
7. Schedin F., Geim A.K., Morozov S.V., Hill E.W., Blake P., Katsnelson M.I., Novoselov K.S. Detection of individual gas molecules adsorbed on graphene. *Nature Materials*, 2007, vol. 6, no. 9, pp. 652–665. <https://doi.org/10.1038/nmat1967>
8. Kumar V., Kumar A., Lee D.-J., Park S.-S. Estimation of number of graphene layers using different methods: a focused review. *Materials*, 2021, vol. 14, no. 16, pp. 4590. <https://doi.org/10.3390/ma14164590>
9. Davydov S.Y. On the theory of adsorption on graphene-like compounds. *Semiconductors*, 2017, vol. 51, no. 2, pp. 217–224. <https://doi.org/10.1134/S1063782617020051>
10. Davydov S.Y. On the role of temperature in the problem of adsorption on graphene. *Technical Physics*, 2016, vol. 61, no. 7, pp. 1106–1108. <https://doi.org/10.1134/S1063784216070100>
11. Davydov S.Yu. To the model description of electronic spectrum for the graphene-like Janus structures. *Physics of the Solid State*, 2022, vol. 64, no. 2, pp. 270–276. <https://doi.org/10.21883/PSS.2022.02.52975.218>
12. Davydov S.Yu. Effect of interlayer coupling on the electron spectra of vertical superlattice. *Physics of the Solid State*, 2022, vol. 64, no. 11, pp. 1792–1797. <https://doi.org/10.21883/PSS.2022.11.54209.392>

Authors

Sergey Yu. Davydov — D.Sc. (Physics & Mathematics), Professor, Leading Researcher, Ioffe Institute, Saint Petersburg, 194021, Russian Federation; Leading Engineer, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, [sc 7103364563](https://orcid.org/0000-0003-3845-4780), <https://orcid.org/0000-0003-3845-4780>, sergei_davydov@mail.ru

Alexander A. Lebedev — D.Sc. (Physics & Mathematics), Professor, Head of Department, Ioffe Institute, Saint Petersburg, 194021, Russian Federation; Professor of Practice, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, [sc 55136581600](https://orcid.org/0000-0003-0829-5053), <https://orcid.org/0000-0003-0829-5053>, shura.lebe@mail.ioffe.ru

Поправка

В статье Садин Д.В. Управление численной диссипацией гибридного метода крупных частиц в задачах с вихревой неустойчивостью // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 4. С. 785–791. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-4-785-791 на странице 787 уравнение для Ψ_{SC} следует читать как

$$\Psi_{SC} = \begin{cases} \min(2r/|c|, 1), & 0 \leq r \leq 1, \\ \min(r, 2/(1 - |c|)), & r > 1, \\ 0, & r < 0. \end{cases}$$

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 на 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.

OPTICAL ENGINEERING

Organic-inorganic light-absorbing composites for near infrared part of spectrum

Evstropiev S.K., Volynkin V.M., Bulyga D.V., Ostrovskii V.A., 529*Makarov K.N., Dukelskii K.V., Polishchuk G.S.*

Study of pyroelectric effect and creation of modified design of phase modulator based on lithium niobate

Shulepova A.V., Shulepov V.A., Strigalev V.E. 538**PHOTONICS AND OPTOINFORMATICS**

Contrast change of the test object image in single-pixel and focal-plane array imaging through a scattering medium

Oparin E.N., Lappo-Danilevskaia A.K., Chernykh A.V., 548
*Tsyarkin A.N.***AUTOMATIC CONTROL AND ROBOTICS**

Synthesis of adaptive observer for nonlinear nonstationary systems

Nguyen K.T., Vlasov S.M., Pyrkin A.A., Kalinin K.Yu., 554
*Nguyen M.H., Nguyen V.V., Bui V.H.***MATERIAL SCIENCE AND NANOTECHNOLOGIES**

Automation of search for optimal values of the ethylene oligomerization process parameters

Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. 563Electroluminescence of new coordination compounds of europium ions with β -diketones, acetic and butyric acids*Osadchenko A.V., Ambrozovich S.A., Zakharchuk I.A.,* 571
Vashchenko A.A., Daibagya D.S., Ryzhov A.V., Pevtsov D.N.,
*Pevtsov N.V., Sehyukov A.S.***COMPUTER SCIENCE**

Method for generating multimedia files for the tasks of facial biometrics and its applications

Kaziyeva N.M., Kukharev G.A., Maulenov K.S. 578

Advanced methods for knowledge injection in large language models (in English)

Kulin N.I., Muravyov S.B. 588

Predicting gene-disease associations using a heterogeneous graph neural network

Sidorenko D.A., Shalyto A.A. 594**MODELING AND SIMULATION**

Computer simulation of the interaction between a shock wave and a wall shielded by an inhomogeneous gas suspension layer

Sadin D.V. 602

Flexible and tractable modeling of multivariate data using composite Bayesian networks

Deeva I.Yu., Shakhkhan K.A., Kaminsky Yu. K. 608

Method for obtaining two-component composite materials with a given thermal conductivity

Zarichnyak Yu.P., Khodunkov V.P. 615

Computer simulation of heat and mass transfer processes during water vapor condensation from natural gas combustion products on smooth cylindrical tubes

Bryzgunov P.A., Rogalev A.N., Kindra V.O., Komarov I.I., 620
Zlyvko O.V.

Instability of a rectangular CCCC-nanoplate

Sukhoterlin M.V., Sosnovskaya A.A. 629

Using genetic algorithms to solve the problem of finding the optimal composition of the reaction mixture

Miftakhov E.N., Kashnikova A.P., Ivanov D.V. 637

Configurable combustion models of combustion chamber of microturbine engine with possibility of connecting various physico-chemical processes

Bulat P.V., Vokin L.O., Volkov K.N., Nikitenko A.B., 645
Prodan N.V., Renev M.E.

Multilevel splitting for rare events estimation in permutation tests

Sukhov V.D., Korotkevich G.V., Sergushichev A.A. 654**BRIEF PAPERS**

Method of muscle tissue segmentation in computed tomography images based on preprocessed three-channel images

Teplyakova A.R., Shershnev R.V., Starkov S.O. 661

Model of adsorption on epitaxial graphene: analytical results

Davydov S.Yu., Lebedev A.A. 665