

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное образовательное
учреждение высшего образования
ОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ им. Ф.М. ДОСТОЕВСКОГО
Омский филиал Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН

ФМХ ОмГУ – 2019

**СБОРНИК СТАТЕЙ
VII РЕГИОНАЛЬНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
МАГИСТРАНТОВ, АСПИРАНТОВ И МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ
ПО ФИЗИКЕ, МАТЕМАТИКЕ И ХИМИИ**

(Омск, 20 мая – 14 июня 2019 г.)

© ФГБОУ ВО «ОмГУ им. Ф.М. Достоевского», 2020

ISBN 978-5-7779-2442-1



2020

УДК 53+51+54
ББК 22я43+24я43
Ф739

Рецензенты:

канд. биол. наук *М. Г. Потуданская*,
канд. физ.-мат. наук *С. А. Сычев*

Ответственные за выпуск:

А. А. Романова, Г. М. Серомян, В. И. Вершинин

Ф739 **ФМХ ОмГУ – 2019** : сборник статей VII Региональной конференции магистрантов, аспирантов и молодых ученых по физике, математике и химии (Омск, 20 мая – 14 июня 2019 г.). – Электрон. текст. дан. – Омск : Изд-во Ом. гос. ун-та, 2020. – 1 электрон. опт. диск (CD-ROM) ; 12 см.

ISBN 978-5-7779-2442-1

Представлены статьи участников конференции, посвященные исследованиям в области математического моделирования, дискретной оптимизации, прикладной теоретической физики, экспериментальной физики, химии и химической технологии.

Для молодых ученых, магистрантов, аспирантов физико-математических и химических специальностей и направлений.

УДК 53+51+54
ББК 22я43+24я43

Текстовое электронное издание
Самостоятельное электронное издание

Минимальные системные требования:
процессор с частотой 1,3 ГГц или выше; ОЗУ 512 Мб;
Microsoft Windows XP/Vista/7/8/10; Adobe Acrobat Reader 8.0 и выше;
CD-ROM; мышь

© ФГБОУ ВО «ОмГУ
им. Ф.М. Достоевского», 2020

Издается в соответствии с оригиналом,
предоставленным организационным комитетом.
Макет подготовлен в Издательстве ОмГУ

Технический редактор *Е.В. Лозовая*

Дата выпуска: 11.02.2020.
1 электрон. опт. диск (CD-ROM); 12 см.
Тираж 10 копий. Объем 5,5 Мб.

Издательство
Омского государственного университета
им. Ф.М. Достоевского
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а
тел.: 8 (3812) 67-32-55, 64-30-61, 64-13-07

СОДЕРЖАНИЕ

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ	8
-------------------------------	---

СЕКЦИЯ

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ДИСКРЕТНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ

<i>Вексельман Л. А.</i> Эвристическая процедура идентификации 2-дольных неравенств для одной задачи теории расписаний	9
<i>Горбунов Н. В.</i> Задача поиска оптимальной базы матроида при немонотонном субмодулярном функционале	13
<i>Капарова Ж.</i> Идентификация кликовых фасет и алгоритм отсечения для задачи о связном k -факторе	17
<i>Куроедова А. А.</i> Неравенства путей в алгоритме отсечения для упаковки вершин ациклического орграфа в полосу заданной ширины	21
<i>Пащина С. А.</i> Алгоритм динамического программирования при оптимизации финансовых схем	25
<i>Рудометова М. В.</i> Алгоритм решения задачи построения циклического расписания с технологическими ограничениями	29
<i>Рядовой С. А.</i> Минимизация затрат задачи календарного планирования со складываемыми ресурсами	33
<i>Сахно М. А., Сосновская М. Ю.</i> Составление расписания работы операторов центра обработки вызовов	37
<i>Сосновская М. Ю., Сахно М. А.</i> Построение расписаний процессора с учетом ограниченной пропускной способности шины данных	40
<i>Тавченко В. Ю.</i> Приближенное решение задачи минимизации общего времени выполнения работ при наличии частичного порядка	44
<i>Тюнин Н. Н.</i> Невыпуклые задачи квадратичного программирования в оптимизации коротковолновых антенных решеток	48
<i>Цаплина А. С.</i> Задача оптимизации стоимости маршрута транспортных средств	53
<i>Черных К. А.</i> Задача минимизации средневзвешенного времени завершения работ при наличии прерываний	57

**СЕКЦИЯ
ПРИКЛАДНАЯ ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА**

<i>Борзилов В. О.</i> Моделирование критических свойств мультислойных структур, описываемых анизотропной моделью Гейзенберга	61
<i>Евсин Д. В.</i> Моделирование одноосного кирального гелимагнетика с взаимодействием Дзялошинского – Мория методами Монте-Карло	65
<i>Самошилова А. А.</i> Влияние размытия межфазных границ раздела на магнитосопротивление трехпленочных магнитных структур	69
<i>Кайданович К. Ю.</i> Компьютерное моделирование критических свойств спиновых систем параллельным методом Ванга – Ландау	75
<i>Шарипова Ж. Б.</i> Исследование критического поведения неупорядоченной двумерной модели Изинга с подвижными дефектами методом коротковременной динамики	79
<i>Аугалиева А. Б.</i> Первопринципные расчеты энергии адсорбции монослойной пленки Fe_xNi_{1-x} в зависимости от ориентации грани подложки	83
<i>Будько С. Н.</i> Расчеты постоянных обменного взаимодействия для ферромагнитных металлов и их сплавов в объеме	87
<i>Ложников В. Е.</i> Моделирование магнитных характеристик трехмерной модели Гейзенберга параллельным методом Ванга – Ландау	91
<i>Попов В. А.</i> Компьютерное моделирование поведения магнитных структур при динамическом фазовом переходе во внешнем периодическом поле	95
<i>Чемерис С. П.</i> Влияние замороженного структурного беспорядка на значение динамического критического индекса z неравновесной критической релаксации двумерной XY-модели	100

**СЕКЦИЯ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА**

<i>Аманкулова Д. А.</i> Исследование синтеза монокристаллических образцов $YBaCuO$	104
<i>Байсова Б. Т.</i> Прикладные задачи в обучении математике	108
<i>Гирько К. Г.</i> Моделирование интегральных индуктивных и емкостных LTCC элементов ВЧ диапазона	112

<i>Дубинин Р. А.</i> Микроэлектронные резонаторы и фильтры на объемных акустических волнах.....	117
<i>Жандецакая Н. В.</i> Миниатюризация интегральных LC-элементов СВЧ-диапазона.....	121
<i>Киселева Е. В.</i> Метод конечных разностей для расчета распределений электрического и магнитного полей световых волн в диэлектрических волноводах.....	126
<i>Кутафина Я. Р.</i> Формирование проектной компетенции у студентов средствами образовательной робототехники	130
<i>Лизогуб Д. С.</i> Индивидуальный подход к дозиметрическому планированию радиойодтерапии на основе ФК моделирования	134
<i>Майненгер К. А.</i> Электродинамический подход к решению задачи ЭМС антенн в ближней зоне	138
<i>Малиновская Н.Д.</i> Изучение теплопереноса различными типами сосудов в организме человека	143
<i>Михайлов С. П.</i> Фармакокинетическое моделирование при радионуклидном исследовании почек	147
<i>Постовая В. И.</i> Исследование корреляции производных гемоглобина и содержания глюкозы в крови методом спектрофотометрии	151
<i>Тачитдинова Н. Р.</i> Адгезия тонких пленок нитрида алюминия к кремнию	155
<i>Шмидт А. А.</i> Окисление меди и бронзы после облучения мощным ионным пучком	159

СЕКЦИЯ

ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

<i>Бабидорич М. И.</i> Разработка программного продукта для пинч-анализа ХТС.....	163
<i>Бабидорич М. И., Павлюченко Б. В.</i> 3D-печать моделей аппаратов нефтеперерабатывающей промышленности	166
<i>Гноевых Ю. С.</i> Современные технологии очистки сточных вод НПЗ	169
<i>Гро Е. П.</i> Спектрофотометрическое определение липидов и продуктов их окисления в разных условиях	172
<i>Криванкова М. А.</i> Спектрофотометрическое определение альдегидов и кетонов в водных средах.....	176
<i>Петров Я. С.</i> Моделирование установки производства водорода.....	180

<i>Цыганова А. А., Еловский А. Н.</i> Синтез композиционного материала на основе смеси фосфатов кальция и хитозана.....	186
<i>Чикунова А. С., Белова Е. В.</i> Определение суммарного содержания фенольных антиоксидантов с помощью сильных окислителей.....	190
<i>Шибитова А. В.</i> Получение углерод-углеродных нанокompозитов на основе поливинилхлорида и исследование их текстурных характеристик.....	194
<i>Штеблау У. К.</i> Синтез пористых углеродных материалов на основе поливинилхлорида с различными текстурными характеристиками	198

Организационный комитет

Сервах Владимир Вицентьевич	д-р физ.-мат. наук, профессор, старший научный сотрудник Омского филиала Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН, профессор кафедры прикладной и вычислительной математики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского
Прудников Владимир Васильевич	д-р физ.-мат. наук, профессор, заведующий кафедрой теоретической физики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского
Потуданская Мария Геннадьевна	канд. биол. наук, доцент, декан физического факультета ОмГУ им. Ф.М. Достоевского
Вершинин Вячеслав Исаакович	д-р хим. наук, профессор кафедры аналитической химии ОмГУ им. Ф.М. Достоевского
Усова Светлана Владимировна	канд. пед. наук, доцент кафедры аналитической химии ОмГУ им. Ф.М. Достоевского
Серопян Геннадий Михайлович	канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры общей физики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского
Леванова Татьяна Валентиновна	канд. физ.-мат. наук, доцент, старший научный сотрудник Омского филиала Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН, и.о. заведующего кафедрой прикладной и вычислительной математики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского
Романова Анна Анатольевна	канд. физ.-мат. наук, доцент, доцент кафедры прикладной и вычислительной математики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского

Секция

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ДИСКРЕТНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ

ЭВРИСТИЧЕСКАЯ ПРОЦЕДУРА ИДЕНТИФИКАЦИИ 2-ДОЛЬНЫХ НЕРАВЕНСТВ ДЛЯ ОДНОЙ ЗАДАЧИ ТЕОРИИ РАСПИСАНИЙ

Л. А. Вексельман

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент И. В. Уразова

Аннотация. На этапе включения правильных неравенств в алгоритмы отсечения важную роль играет задача идентификации (Separation problem). Задача идентификация заключается в том, чтобы в заданном классе неравенств найти неравенство, отделяющее полученную дробную точку от многогранника, или доказать, что такого неравенства в этом классе не существует [1; 2]. В работе [4] описан класс неравенств, правильных относительно многогранника задачи обслуживания единичных требований параллельными приборами. В данной работе предложена эвристическая процедура поиска 2-дольного неравенства, отсекающего заданную нецелочисленную точку.

Ключевые слова: расписание, параллельные машины, правильные неравенства, задача идентификации.

Введение

В работе рассматриваются расписания обслуживания идентичных требований, параллельными приборами, которые описываются следующим образом. Задано конечное множество требований V . Все требования имеют единичные длительности обслуживания. Между требованиями заданы отношения предшествования. Требования обслуживаются на m ($m = 3$) параллельных приборах.

Задача заключается в минимизации общего времени обслуживания всех требований, т. е.

$$\max_{i \in V} \sigma(i) \rightarrow \min_{\sigma \in \Sigma_d}$$

В обозначениях, принятых в теории расписаний, эта задача имеет вид $P3|prec; p_j = 1|C_{max}$ [3-7].

Рассматриваемая задача является открытой в смысле теории сложности. Известно лишь, что в общем виде задача NP-трудна. А в некоторых частных случаях задача полиномиально разрешима. Например, когда приборов ровно два, или когда граф предшествования является деревом [5-7].

Пусть $G = (V, E)$ – ациклический орграф. Расписанию $\sigma: V \rightarrow D$ сопоставим $(0,1)$ -вектор $x \in R^{nd}$ по правилу:

$$x_{ik} = \begin{cases} 1, & \text{если } \sigma(i) = k, \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases}$$

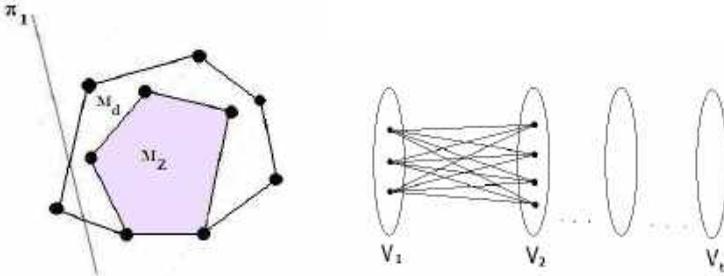
Выпишем модель целочисленного программирования для задачи.

$$\begin{aligned} \sum_{k \in D_i} x_{ik} &= 1, \quad i \in V; \\ \sum_{i \in V_k} x_{ik} &\leq 3, \quad k \in D; \\ x_{ik} &\leq \sum_{l \in D_j, l > k} x_{jl}, \quad (i, j) \in E(G), \quad k \in D_i; \\ 0 &\leq x_{ik} \leq 1, \quad i \in V, \quad k \in D; \\ x_{ik} &= 0, \quad i \in V, \quad k \in D \setminus D_i. \end{aligned}$$

$$\square(x) = \sum_{k=1}^d \lambda_k \sum_{i \in V_k} x_{ik} \rightarrow \min_{x \in M_d}$$

Построение правильных t-дольных неравенств

Неравенство $ax \leq a_0$ называется правильным к многограннику M_Z , если для всех $x \in M_Z$ выполнено $ax \leq a_0$.



Теорема. [4]. Пусть $V_1, V_2, \dots, V_t \subset V$ – вершинно-непересекающиеся подмножества множества вершин из V в орграфе G , $k \in D$. При этом для $\forall i \in \{1, 2, \dots, t-1\}$ множества V_i, V_{i+1} индуцирует полный двудольный граф с началами дуг в V_i и концами в V_{i+1} . Тогда неравенство

$$\sum_{i \in V_1} \sum_{l=k}^d x_{il} + \sum_{j=1}^t \sum_{i \in V_j} x_{ik} + \sum_{i \in V_t} \sum_{l=1}^k x_{il} \leq \max(|V_1|, \dots, |V_t|)$$

будет правильным к многограннику M_Z .

Эвристическая процедура идентификации 2-дольных неравенств

Дано: $\bar{x} \in M_d \setminus M_Z$, B_1, B_2, \dots, B_t – разбиение орграфа G на базы.

Опишем k -ую итерацию, $k=1, \dots, d$.

ШАГ 1. Если $k > d$, то выход – неравенство, отсекающее точку \bar{x} , не найдено. Иначе – шаг 2.

ШАГ 2. Полагаем $s = 1$.

ШАГ 3. Если $s = t$, то переходим на $(k+1)$ -ю итерацию. Иначе – шаг 4.

ШАГ 4. Находим полный двудольный подграф $H = (V_1, V_2; E(H))$ такой, что $V_1 \in B_s$, $V_2 \in B_{s+1}$. Если $E(H) = 1$, то $s = s + 1$ и на шаг 3. Иначе – шаг 5.

ШАГ 5. Если $\sum_{l=k}^d \sum_{i \in V_1} \bar{x}_{il} + \sum_{l=1}^k \sum_{i \in V_2} \bar{x}_{il} > \max(|V_1|, |V_2|)$

то шаг 6. Иначе $s = s + 1$ и на шаг 3.

ШАГ 6. Конец: неравенство

$$\sum_{l=k}^d \sum_{i \in V_1} x_{il} + \sum_{l=1}^k \sum_{i \in V_2} x_{il} \leq \max(|V_1|, |V_2|)$$

является искомым неравенством, отсекающим точку \bar{x} .

ЛИТЕРАТУРА

[1] Симанчев Р.Ю., Уразова И.В. О фасетах комбинаторных многогранников // Kochetov, Yu. et al (eds.) DOOR-2016. LNCS. Springer, Heidelberg. 2016. Vol. 9869. P. 233–243.

[2] *Simanchev R.Yu. , Urazova I.V.* On the Polytope Faces of the Graph Approximation Problem // Journal of Applied and Industrial Mathematics. 2015. Vol. 9, № 2. P. 283–291.

[3] *Симанчѐв Р.Ю., Уразова И.В.* Целочисленная модель задачи минимизации общего времени обслуживания параллельными приборами единичных требований с предшествованиями // Автоматика и телемеханика. 2010. № 10. С. 100–106.

[4] *Симанчев Р.Ю., Уразова И.В.* Класс t-дольных неравенств для многогранника расписаний обслуживания требований параллельными приборами // Сборник трудов конференции DATA, MODELING AND SECURITY: DMS, 2017.

[5] Симанчѐв Р. Ю., Уразова И. В. Многогранник расписаний обслуживания идентичных требований параллельными приборами // Дискретн. анализ и исслед. опер. 2011. Т. 18, № 1. С. 85–97.

[6] *Уразова И.В.* Класс правильных неравенств для задачи упаковки вершин ациклического орграфа в полосу заданной ширины // Вестник Омского университета, 2:60, 2011, 510, С. 48–52.

[7] *Уразова И.В., Симанчев Р.Ю.* Применение дихотомии для решения задачи обслуживания единичных требований параллельными приборами // Вестник Омского университета, 4:60, 2011, 510, С. 26–31.

Вексельман Людмила Андреевна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
II курс магистратуры, ИМИТ,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, e-lyudik_95@mail.ru

ЗАДАЧА ПОИСКА ОПТИМАЛЬНОЙ БАЗЫ МАТРОИДА ПРИ НЕМОНОТОННОМ СУБМОДУЛЯРНОМ ФУНКЦИОНАЛЕ

Н. В. Горбунов

Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, профессор В. П. Ильев

Аннотация. Рассматривается задача максимизации субмодулярной функции на матроиде. В общем случае эта задача является NP-трудной. В литературе подробно исследована задача с монотонной целевой функцией [1–3]. Задача с немонотонной целевой функцией исследована гораздо хуже. Так, в статье [4] получена гарантированная оценка точности приближенного алгоритма для задачи максимизации немонотонной субмодулярной функции на матроиде разбиения. В настоящей работе получена другая гарантированная оценка точности жадного алгоритма для общей задачи максимизации субмодулярной функции (не обязательно монотонной) на произвольном матроиде.

Ключевые слова: субмодулярная функция, жадный алгоритм, матроид, обобщенная кривизна, априорная оценка точности алгоритма.

1. Постановка задачи и алгоритм

Пусть $\mathcal{A} \subset 2^I$ – семейство подмножеств конечного множества I обладающее свойствами:

1. Если $X \in \mathcal{A}$ и $Y \subseteq X$, то $Y \in \mathcal{A}$;

2. Если $X, Y \in \mathcal{A}$ и $|Y| = |X| + 1$, то $\exists u \in Y \setminus X: X \cup \{u\} \in \mathcal{A}$.

Множества семейства \mathcal{A} называются *независимыми*. Пара $M = (I, \mathcal{A})$ называется *матроидом* на I .

Базами матроида M называют его максимальные по включению независимые множества. Известно, что все базы матроида имеют одинаковую мощность. *Рангом матроида* называют мощность любой его базы.

Функция множеств $f: 2^I \rightarrow \mathbf{R}$ называется *субмодулярной*, если для любых $X, Y \subseteq I$

$$f(X \cup Y) + f(X \cap Y) \leq f(X) + f(Y).$$

Замечание. Несложно показать, что f субмодулярна тогда и только тогда, когда для любых $X, Y \subset I$ и для любого $u \in I \setminus Y$

$$X \subseteq Y \Rightarrow d_x(X) \geq d_x(Y),$$

где $d_x(Y) = f(Y \cup \{x\}) - f(Y)$.

Рассмотрим задачу комбинаторной оптимизации с матроидными ограничениями:

$$\max\{f(X): X \in \mathbf{A}\}, \quad (1)$$

где \mathbf{A} – семейство независимых множеств матроида $M = (I, \mathbf{A})$ ранга r . $f: 2^I \rightarrow \mathbf{R}$ – субмодулярная функция, $f(\emptyset) = 0$.

В статье [4] для исследования поведения немонотонной субмодулярной функции вводится следующая характеристика, названная авторами *обобщенной кривизной*. Она определяется как наименьшее число α такое, что для всех $S, G \subseteq I$ и $x \in G \setminus S$

$$d_x((S \cup G) \setminus \{x\}) \geq (1 - \alpha)d_x(G \setminus \{x\}).$$

Замечание. В общем случае $\alpha \geq 0$ и для монотонных функций всегда $\alpha \leq 1$.

Для приближенного решения задачи (1) будем применять следующий вариант жадного алгоритма.

Алгоритм GA

Шаг 0. $G_0 \leftarrow \emptyset$; перейти на шаг 1.

Шаг i ($i \geq 1$). Если $i - 1 = r$, то $G \leftarrow G_{i-1} = G_r$. **СТОП.**

Если $i - 1 < r$, то выберем такой элемент $a_i \notin G_{i-1}$, что

$$d_{a_i}(G_{i-1}) = \max_{\substack{x \notin G_{i-1}, \\ d_x(G_{i-1}) > 0}} d_x(G_{i-1}).$$

Если такой элемент a_i найден, то $G_i \leftarrow G_{i-1} \cup \{a_i\}$ и перейти на шаг $i + 1$.

Если нет ни одного элемента $x \notin G_{i-1}$ такого, что $d_x(G_{i-1}) > 0$, то $G \leftarrow G_{i-1}$. **СТОП.**

2. Гарантированная оценка точности жадного алгоритма

Пусть жадный алгоритм остановится на шаге $k + 1$, т. е. $G = G_k = \{a_1, \dots, a_k\}$ – жадное решение ($k \leq r$), $G_i = \{a_1, \dots, a_i\}$ – множество, построенное алгоритмом GA на шаге i ($i = 1, 2, \dots, k$).

Лемма 1. Элементы оптимального решения $S^* = \{b_1, b_2, \dots, b_m\}$ задачи (1) можно упорядочить так, что:

а) Для $i \leq k$ $d_{b_i}(G_{i-1}) \leq d_{a_i}(G_{i-1})$, причем $b_i = a_i$, если $b_i \in S^* \cap G$;

б) Для $i > k$ (в случае $|S^*| > |G|$) $d_{b_i}(G) \leq 0$.

Лемма 2. $f(S^*) \leq \alpha f(G) + \sum_{a_i \in G \cap S^*} d_{a_i}(G_{i-1}) + \sum_{b_i \in S^* \setminus G} d_{b_i}(G)$.

Теорема 1. Имеет место следующая оценка точности алгоритма GA:

$$\frac{f(G)}{f(S^*)} \geq \frac{1}{1 + \alpha},$$

где S^* – оптимальное решение задачи (1), а G – допустимое решение, найденное алгоритмом GA.

Доказательство. Пусть $\{b_1, b_2, \dots, b_m\}$ – порядок элементов из S^* , гарантированный леммой 1. По лемме 2.

$$f(S^*) \leq \alpha f(G) + \sum_{a_i \in G \cap S^*} d_{a_i}(G_{i-1}) + \sum_{b_i \in S^* \setminus G} d_{b_i}(G).$$

Рассмотрим два случая:

а) Пусть $|S^*| \leq |G|$. Из субмодулярности f следует, что $d_{b_i}(G) \leq d_{b_i}(G_{i-1})$. Поэтому

$$f(S^*) \leq \alpha f(G) + \sum_{a_i \in G \cap S^*} d_{a_i}(G_{i-1}) + \sum_{b_i \in S^* \setminus G} d_{b_i}(G_{i-1}).$$

По лемме 1 $d_{b_i}(G_{i-1}) \leq d_{a_i}(G_{i-1})$, поэтому

$$\begin{aligned} f(S^*) &\leq \alpha f(G) + \sum_{a_i \in G \cap S^*} d_{a_i}(G_{i-1}) + \sum_{a_i \in G \setminus S^*} d_{a_i}(G_{i-1}) = \\ &= \alpha f(G) + \sum_{b_i \in G} d_{a_i}(G_{i-1}) = \alpha f(G) + f(G) = (\alpha + 1)f(G). \end{aligned}$$

б) Пусть $|S^*| > |G|$. Тогда

$$f(S^*) \leq \alpha f(G) + \sum_{a_i \in G \cap S^*} d_{a_i}(G_{i-1}) + \sum_{\substack{b_i \in S^* \setminus G, \\ i \leq k}} d_{b_i}(G) + \sum_{\substack{b_i \in S^* \setminus G, \\ i > k}} d_{b_i}(G).$$

Из субмодулярности f следует, что $d_{b_i}(G) \leq d_{b_i}(G_{i-1})$, по лемме 1 для $i \leq k$ $d_{b_i}(G_{i-1}) \leq d_{a_i}(G_{i-1})$, а для $i > k$ $d_{b_i}(G) \leq 0$.

Следовательно,

$$\begin{aligned} f(S^*) &\leq \alpha f(G) + \sum_{a_i \in G \cap S^*} d_{a_i}(G_{i-1}) + \sum_{b_i \in S^* \setminus G, i \leq k} d_{a_i}(G_{i-1}) = \\ &= \alpha f(G) + \sum_{\substack{a_i \in G, \\ i \leq k}} d_{a_i}(G_{i-1}) = \alpha f(G) + f(G) = (\alpha + 1)f(G). \end{aligned}$$

Что и требовалось доказать.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Conforti M., Cornuejols G.* Submodular set functions, matroids and greedy algorithm: Tight worst-case bounds and some generalizations of the Rado-Edmonds theorem // *Discrete Applied Mathematics*. 1984. Vol. 7, no. 3. P. 251–274.
- [2] *Calinescu G., Chekuri C., Pal M., Vondrak J.* Maximizing a submodular set function subject to a matroid constraint // *Proceedings of 12th IPCO, 2007*. P. 182–196.
- [3] *Sviridenko M., Vondrak J., Ward J.* Optimal approximation for submodular and supermodular optimization with bounded curvature // *Mathematics of Operations Research*. 2017. Vol. 42, no. 4, P. 1197–1218.
- [4] *Friedrich T., Gobel A., Neuman F., Quinzan F., Rothenberger R.* Greedy maximization of functions with bounded curvature under partition matroid constraints // *arXiv:1211.05351v1 [cs.DM]* 13 Nov 2018.

Горбунов Никита Викторович,
Омский филиал Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН,
аспирант I курса,
644043, Омск, ул. Певцова, 13, gorbunov_nikita_v@mail.ru

ИДЕНТИФИКАЦИЯ КЛИКОВЫХ ФАСЕТ И АЛГОРИТМ ОТСЕЧЕНИЯ ДЛЯ ЗАДАЧИ О СВЯЗНОМ К-ФАКТОРЕ

Ж. Капарова

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент И. В. Уразова

Аннотация. Вопрос актуальности поиска фасетных неравенств для многогранников комбинаторных задач вызван использованием их в алгоритмах на задачах большой размерности [1–3]. На этапе включения фасетных неравенств в алгоритмы отсечения важную роль играет задача идентификации (Separation problem) [6–8]. Задача идентификация заключается в том, чтобы в заданном классе неравенств найти неравенство, отделяющее полученную дробную точку от многогранника, или доказать, что такого неравенства нет. В работе [4] описан класс неравенств, фасетных относительно многогранника связанных k -факторов. В статье [5] предложено решение задачи идентификации кликовых неравенств. В данной работе разработан и реализован алгоритм поиска кликового неравенства, отсекающего заданную нецелочисленную точку. В основе алгоритма лежит задача поиска минимального разреза. Проведен вычислительный эксперимент, одной из цели которого было выяснить, как часто встречаются кликовые неравенства.

Ключевые слова: полиэдральная комбинаторика, фасетное неравенство, задача идентификации, многогранник, k -фактор.

1. Постановка задачи и кликовые неравенства

Пусть $K_n = (V, E)$ – полный неориентированный граф без петель и кратных ребер с множеством вершин V и множеством ребер E , причем каждому $e \in E$ сопоставлен его вес $c_e \in R$. Весом подграфа $H \subseteq K_n$ назовем величину $c(H) = \sum_{e \in EG} c_e$.

Пусть k – натуральное число, удовлетворяющее условиям $2 \leq k \leq n - 1$ и kn –четно. Подграф H называется k -фактором, если степень каждой вершины из V относительно подграфа H равна k . Множество всех связанных k -факторов в K_n обозначим через \mathcal{H} . Задача о взвешенном связанном k -факторе формулируется следующим образом: найти такой $H^* \in \mathcal{H}$, что $c(H^*) \geq c(H)$ для всех $H \in \mathcal{H}$. Заметим, что при $k = 2$ множество всех связанных k -факторов есть множество всех гамильтоновых циклов графа K_n .

Многогранником связанных k -факторов называется множество $P_{\mathcal{H}} = \text{conv}\{x^H \in R^E \mid H \in \mathcal{H}\}$.

Многогранник, ассоциированный с семейством \mathcal{H} , обозначим через $P_{\mathcal{H}}$. Аффинной оболочкой многогранника P — $\text{aff}P$ — называется множество всевозможных аффинных комбинаций точек из P . Линейное неравенство $a^T x \leq a_0$ называется опорным к P , если

- 1) для всякой $x \in P$ выполняется $a^T x \leq a_0$;
- 2) \exists такие $x', x'' \in P$, что $a^T x' = a_0$ и $a^T x'' < a_0$.

Всякое опорное к P неравенство порождает множество $\{x \in P \mid a^T x = a_0\}$, которое называется гранью многогранника P . Фасетами многогранника P — грани размерности $\dim P - 1$, а порождающие их неравенства называются фасетами [4; 5].

Теорема [4]. Пусть $\bar{x} \in \text{aff}P_{\mathcal{H}}$. В классе кликовых неравенств, порождающих фасеты многогранника $P_{\mathcal{H}}$, найдется неравенство, отсекающее точку \bar{x} тогда и только тогда, когда в K_n \exists такой разрез $\gamma [W, V \setminus W]$, что

$$\sum_{e \in \gamma [W, V \setminus W]} \bar{x}_e < 2 + \left\lfloor \frac{k|W|}{2} \right\rfloor - \left\lfloor \frac{k|W|}{2} \right\rfloor.$$

При этом отсекающее неравенство порождается кликой на множестве вершин W . При четном k задача идентификации кликовых неравенств для многогранника связанных k -факторов сводится к задаче о разрезе минимального веса. Задача о поиске минимального разреза полиномиально разрешима.

На этапе использования неравенств в алгоритмах отсекающей задачи идентификации выходит на передний план. Будем говорить, что опорное к многограннику P неравенство $a^T x \leq a_0$ отсекает точку $\bar{x} \in R^E$, если $a^T \bar{x} > a_0$. В работе предложен и запрограммирован алгоритм отсекающей задачи, в который встроено решение задачи идентификации кликовых неравенств. Проведен вычислительный эксперимент.

2. Вычислительный эксперимент

Всего было решено 200 задач. Размерность варьируется от 10 до 70 и $k = 2, 4, 6$. В таблице представлен фрагмент вычислительного эксперимента.

В первом столбце – номер задачи и ее размерность. Во втором – значение k . В третьем – количество отсечений, которые добавлены в ограничения. В четвертом – оптимальное значение целевой функции и в пятом время работы алгоритма. Там, где стоит прочерк, задача считается нерешенной. Если время решения ограничивалось 3 часами и алгоритм не давал ответ, то задача считалась нерешенной, а также если задача идентификации давала ответ «нет».

$N\bar{n}$	k	Количество отсечений	$f(\bar{x})$	t, c
1_10	2	1	173	0, 187
2_40	2	3	153	13, 222
3_70	2	1	-	97, 177
4_50	4	0	-	10, 109
5_70	4	0	-	66, 261
6_60	6	0	1099	10, 773
7_70	6	0	-	55, 841

В результате вычислительного эксперимента было замечено, что при $k = 4$ и при $k = 6$ кликовые неравенства встречаются значительно реже, чем при $k = 2$, то есть их использование недостаточно для решения данной задачи на большой размерности.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Симанчев Р.Ю., Уразова И.В.* О фасетах комбинаторных многогранников // Kochetov, Yu. et all (eds.) DOOR-2016. LNCS, vol. 9869, Springer, Heidelberg, 2016, P. 233–243.

[2] *Simanchev R.Yu., Urazova I.V.* On the Polytope Faces of the Graph Approximation Problem // Journal of Applied and Industrial Mathematics, 9:2, 2015, P. 283–291.

[3] *Симанчѳв Р. Ю., Уразова И. В.* О гранях многогранника задачи аппроксимации графа // Дискретн. анализ и исслед. опер., 22:2, 2015, С. 86–101.

[4] *Simanchev R.Yu., Urazova I.V.* Cutting Planes Algorithm for the Connected k -factor Problem Using the Facet Inequalities. Petrovac,

Montenegro, October 2–7, 2017. <http://ceur-ws.org/Vol-1987/paper74.pdf>.

[5] *Симанчев Р.Ю.* О ранговых неравенствах, порождающих фасеты многогранника связных k -факторов // Дискретный анализ и исследование операция. Новосибирск, ИМ СО РАН, 1996. Т. 3, № 3. С. 84–110.

[6] *Симанчѳв Р.Ю., Уразова И.В.* Многогранник расписаний обслуживания идентичных требований параллельными приборами // Дискретн. анализ и исслед. опер. 2011. Т. 18, № 1. С. 85–97.

[7] *Симанчѳв Р.Ю., Уразова И.В.* Целочисленная модель задачи минимизации общего времени обслуживания параллельными приборами единичных требований с предшествованиями // Автомат. и телемех. 2010. № 10. 100–106.

[8] *Уразова И.В.* Класс правильных неравенств для задачи упаковки вершин ациклического орграфа в полосу заданной ширины // Вестник Омского университета, 2011, 510, С. 48–52.

Капарова Жанар,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
II курс магистратуры, ИМИТ,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, kaparova_zhanar@bk.ru

НЕРАВЕНСТВА ПУТЕЙ В АЛГОРИТМЕ ОТСЕЧЕНИЯ ДЛЯ УПАКОВКИ ВЕРШИН АЦИКЛИЧЕСКОГО ОРГРАФА В ПОЛОСУ ЗАДАННОЙ ШИРИНЫ

А. А. Куроедова

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент И. В. Уразова

Аннотация. На этапе включения правильных неравенств в алгоритмы отсекающего отсека важную роль играет задача идентификации (Separation problem) [1–3]. В работах [4–6] описаны классы неравенств, опорных относительно многогранника задачи обслуживания единичных требований параллельными приборами. В данной работе описан и реализован алгоритм поиска неравенств путей, отсекающих заданную нецелочисленную точку. Проведен вычислительный эксперимент на различных ациклических орграфах.

Ключевые слова: правильные неравенства, задача идентификации, теория расписаний.

Дан ациклический ориентированный граф G с множеством вершин V , $|V| = n$. Множество дуг орграфа G будем обозначать $E(G)$. Дуга (i, j) называется транзитивной, если существует путь из i в j , отличный от дуги (i, j) . Будем полагать, что орграф G не имеет транзитивных дуг. Через $i \triangleleft j$ обозначим предшествование вершины i вершине j . Упаковкой вершин орграфа G в полосу ширины m назовем функцию $\sigma : V \rightarrow D = \{1, \dots, d\}$, удовлетворяющую условиям:

- соотношение $i \triangleleft j$ влечет неравенство $\sigma(i) < \sigma(j)$; (1)
- для любого $k \in D$ имеется не более m вершин $i \in V$ таких что $\sigma(i) = k$. (2)

Множество упаковок, определенных условиями (1) – (2), обозначим через Σ . Задача заключается в размещении вершин ациклического орграфа в полосе фиксированной ширины m .

Упаковке $\sigma : V \rightarrow D$ сопоставим $(0, 1)$ -вектор $x^\sigma = (x_{ik}^\sigma, i \in V, k \in D) \in R^{nd}$ по правилу

$$x_{ik}^\sigma = \begin{cases} 1, & \sigma(i) = k; \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases} \quad (3)$$

Построенный таким образом вектор x^σ также будем называть упаковкой. Многогранником будем называть выпуклую оболочку конечного числа точек в конечномерном пространстве, полиэдром – множество решений конечной системы линейных уравнений и неравенств, если оно ограничено.

Рассмотрим систему линейных уравнений и неравенств:

$$\sum_{k \in D_i} x_{ik} = 1, \quad i \in V; \quad (4)$$

$$\sum_{i \in V_k} x_{ik} \leq m, \quad k \in D; \quad (5)$$

$$x_{ik} \leq \sum_{\substack{l \in D_j \\ l > k}} x_{jl}, \quad (i, j) \in E(G), \quad k \in D_i; \quad (6)$$

$$0 \leq x_{ik} \leq 1, \quad i \in V, \quad k \in D_i; \quad (7)$$

$$x_{ik} = 0, \quad i \in V, \quad k \in D \setminus D_i. \quad (8)$$

В работе [4] было показано, что целочисленные вершины полиэдра (4)–(8) и только они являются упаковками. Кроме того, в нем были найдены вершины, отличные от целочисленных. Полиэдр, определяемый условиями (4)–(8), обозначим через M , а выпуклую оболочку упаковок обозначим через M_Z .

Правильные неравенства

Неравенство $ax \leq a_0$ называется правильным относительно M_Z , если для всех $x \in M_Z$ выполнено $ax \leq a_0$. Будем говорить, что неравенство $ax \leq a_0$ отсекает точку $\tilde{x} \in M$, если $a\tilde{x} > a_0$.

Теорема [5]. Пусть $P \subset G$ – путь, $k \in D, i \in V(P)$ – первая вершина пути $P, z \in V(P)$ – последняя вершина пути P . Тогда неравенство $\sum_{l=1}^{k-1} x_{zl} + \sum_{j \in V(P)} x_{jk} + \sum_{l=k+1}^d x_{il} \leq 1$ является правильным к M_Z .

Решение задачи идентификации

Решение задачи идентификации состоит в следующем: дана точка $\bar{x} \in M_d \setminus M_Z$. Необходимо либо найти в классе неравенств неравенство, отсекающее точку \bar{x} , либо доказать, что в данном классе такого неравенства нет.

Теорема [6]. Среди неравенств класса IZ найдется неравенство, отсекающее точку $\bar{x} \in M_d \setminus M_z$ тогда и только тогда, когда есть такой $k \in D$, что вес пути $P_{\bar{x},k} \subset \tilde{G}_{\bar{x},k}$, больше 1. При этом в качестве отсекающего неравенства можно взять неравенство

$$\sum_{l=1}^{k-1} x_{zl} + \sum_{j \in V(P_{\bar{x},k}) \setminus \{u(i), V(z)\}} x_{jk} + \sum_{l=k+1}^d x_{il} \leq 1.$$

Ниже приведен алгоритм решения задачи идентификации.

Алгоритм SPZ решения задачи идентификации неравенства класса IZ

Дано $\bar{x} \in M_d \setminus M_z$. k -я итерация $k=1, 2, \dots, n$.

Шаг 1. В графе $\tilde{G}_{\bar{x},k}$ находим максимальный по весу путь $P_{\bar{x},k}$. Пусть $u(i)$ -первая вершина в пути $P_{\bar{x},k}$. $v(z)$ -последняя вершина в пути $P_{\bar{x},k}$.

Шаг 2. Если $\sum_{l=1}^{k-1} x_{zl} + \sum_{j \in V(P_{\bar{x},k}) \setminus \{u(i), V(z)\}} x_{jk} + \sum_{l=k+1}^d x_{il} > 1$, то **Шаг 4**.

Иначе – **Шаг 3**.

Шаг 3. Если $k < d$, то переход на $(k+1)$ итерацию. Иначе – конец: в классе IZ нет неравенства, отсекающего точку \bar{x} .

Шаг 4. Конец: неравенство, отсекающее точку \bar{x}

$$\sum_{l=1}^{k-1} x_{zl} + \sum_{j \in V(P_{\bar{x},k}) \setminus \{u(i), V(z)\}} x_{jk} + \sum_{l=k+1}^d x_{il} \leq 1.$$

Ниже приведен фрагмент таблицы с решенными задачами. Так как для данных задач не существует тестовых примеров, то мы брали задачи из открытых библиотек. Время на решение давалось 3 часа, если за это время решение получено не было, то задача считалась нерешенной. Если неравенство не было найдено, то задача тоже считается нерешенной.

Всего было решено 70 задач с числом вершин от 10 до 20. Число ребер в графах было от 10 до 40. Заметим, что чем насыщенней граф и чем больше количество вершин, тем дольше решалась задача.

<i>Имя файла</i>	<i>Количество вершин</i>	<i>Время решения, в сек.</i>	<i>Количество найденных неравенств</i>
1-10	10	54	12
1-12	12	120	10
1-13	13	300	31
1-18	18	8040	345
2-10	10	1200	88

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Симанчев Р.Ю., Уразова И.В.* О фасетах комбинаторных многогранников // Kochetov, Yu. et all (eds.) DOOR-2016. LNCS, vol. 9869, Springer, Heidelberg, 2016, P. 233–243.

[2] *Simanchev R.Yu., Urazova I.V.* On the Polytope Faces of the Graph Approximation Problem // Journal of Applied and Industrial Mathematics. 2015. Vol. 9, № 2. P. 283–291.

[3] *Симанчев Р.Ю., Уразова И.В.* О гранях многогранника задачи аппроксимации графа // Дискретн. анализ и исслед. опер. 2015. Т. 22, № 2. С. 86–101.

[4] *Симанчев Р.Ю., Уразова И.В.* Целочисленная модель задачи минимизации общего времени обслуживания параллельными приборами единичных требований с предшествованиями // Автомат. и телемех. 2010. № 10. С. 100–106.

[5] *Симанчев Р.Ю., Уразова И.В.* Многогранник расписаний обслуживания идентичных требований параллельными приборами // Дискретн. анализ и исслед. опер. 2011. Т. 18, № 1. С. 85–97.

[6] *Уразова И.В.* Класс правильных неравенств для задачи упаковки вершин ациклического орграфа в полосу заданной ширины // Вестник Омского университета, 2011, 2:60, 510, С. 48–52.

Куроедова Анна Алексеевна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
II курс магистратуры, ИМИТ,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, a.a.kuroedova@gmail.com

АЛГОРИТМ ДИНАМИЧЕСКОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ ПРИ ОПТИМИЗАЦИИ ФИНАНСОВЫХ СХЕМ

С. А. Пашина

*Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук,
старший научный сотрудник В. В. Сервах*

Аннотация. В статье метод динамического программирования развивается для решения задач комбинаторной оптимизации, имеющих современные экономические приложения. Основной акцент сделан на задачах максимизации прибыли. Алгоритм проиллюстрирован на примере задачи максимизации прибыли при замене оборудования.

Ключевые слова: динамическое программирование, финансовая схема, задача о замене оборудования.

Динамическое программирование – это эффективный инструмент решения задач комбинаторной оптимизации [3]. Метод динамического программирования, предложенный Ричардом Беллманом [1], получил широкое распространение. Например, в [2] этот метод используется для таких задач как распределение ресурсов, о рюкзаке, о ближайшем соседе, управление запасами, замена оборудования, сетевое планирование, коммивояжера и других. Быстрое развитие современной экономики, высокая конкуренция на рынке, постоянное обновление производства на базе новых технологий приводит к необходимости исследования новых постановок задач, многие из которых могут быть решены методом динамического программирования.

По сравнению с предыдущими работами в данной статье основным критерием является получение прибыли. Это приводит к задачам, связанным с оптимизацией различных финансовых схем. Под финансовой схемой будем понимать некоторые действия, которые можно отобразить в финансовом эквиваленте потоком платежей

$$\begin{pmatrix} t_0 & t_1 & \dots & t_k & \dots & t_n \\ c_0 & c_1 & \dots & c_k & \dots & c_n \end{pmatrix},$$

где t_k – момент совершения действия, а c_k – финансовый результат в этот момент. Если $c_k > 0$, то в t_k получаем доход в размере c_k . Если $c_k < 0$, то осуществляем вложения в размере $|c_k|$. Под чистой приведенной прибылью понимаем величину $NPV = \sum_{k=0}^n \frac{c_k}{(1+r_0)^{t_k}}$, где r_0 – ставка альтернативного безрискового ликвидного размещения капитала, а $1/(1+r_0)$ – коэффициент дисконтирования.

В работе построены модели и предложены алгоритмы решения таких задач как максимизация удельной прибыли в моделях управления запасами, оптимальное распределение бюджета между потреблением и инвестициями, распределение капиталовложений, календарное планирование инвестиционных проектов и так далее. В предложенных моделях учитывается дисконтирование потока платежей, реинвестирование получаемого дохода, возможность кредитования. Предложенный подход к решению этих задач ниже иллюстрируется на примере максимизации прибыли при замене оборудования.

Задача замены оборудования состоит в определении оптимальных сроков замены используемого на производстве оборудования на новое. С течением времени растут производственные затраты на обслуживание, текущий и капитальный ремонт оборудования, снижаются производительность труда, ликвидная стоимость. Поэтому в определенный момент времени возникает экономическая целесообразность замены старого оборудования на новое. Время идет, оборудование совершенствуется, улучшаются его технические показатели, повышается надежность, меняется цена. Поэтому новое оборудование может иметь другие характеристики. Введем следующие обозначения:

T – период планирования;

t – текущий момент времени, $t = 0, 1, \dots, T$;

τ – возраст оборудования;

θ – момент выпуска оборудования;

$\varphi_0(\theta)$ – стоимость нового оборудования, выпущенного в момент θ ;

$\varphi_\tau(\theta)$ – остаточная стоимость оборудования возраста τ , выпущенного в момент θ ;

$d_\tau(\theta)$ – доход в единичном временном интервале $[\theta + \tau, \theta + \tau + 1]$ от использования оборудования возраста τ , выпущенного в момент θ ;

$\psi_\tau(\theta)$ – эксплуатационные затраты в течении единичного интервала времени $[\theta + \tau, \theta + \tau + 1]$, где τ возраст оборудования выпущенного в момент θ .

Требуется на временном интервале $[0, T]$ определить моменты времени, в которые старое оборудование меняется на новое. Считаем, что на момент $t = 0$ оборудования нет, а в момент T продаем оборудование по остаточной стоимости. Если оборудование меняем в моменты t_1, t_2, \dots, t_k , то целевая функция Π будет иметь вид:

$$\sum_{m=1}^k \left(-\varphi_0(t_{m-1}) + \sum_{\tau=1}^{t_m} d_{\tau-1}(t_m - 1) - \sum_{\tau=1}^{t_m} \psi_{\tau-1}(t_{m-1}) + \varphi_{t_m - t_{m-1}}(t_{m-1}) \right),$$

где $t_0 = 0$.

Для максимизации прибыли используем метод динамического программирования. Пусть $\Pi_t(\tau)$ – оптимальная прибыль на отрезке $[t, T]$, если в момент t имеется машина возраста τ . Параметр θ в определении $\Pi_t(\tau)$ вводить не надо, так как момент приобретения θ по значению t и τ определяется однозначно, как $\theta = t - \tau$. В момент t имеется две альтернативы.

1. Продолжать эксплуатацию оборудования возраста τ . Тогда эксплуатационные затраты составят $\psi_\tau(t - \tau)$ и к моменту $t + 1$ будем иметь машину возраста $\tau + 1$. Полученный в интервале $[t, t + 1]$ доход будет равен $d_\tau(t - \tau)$. Величина максимальной прибыли на интервале $[t + 1, T]$ была вычислена ранее и равна

$\Pi_{t+1}(\tau+1)$. Таким образом, при продолжении эксплуатации, прибыль составит $d_\tau(t-\tau) - \psi_\tau(\tau-t) + \Pi_{t+1}(\tau+1)$.

2. Меняем оборудование. Тогда

– продаем оборудование по остаточной стоимости $\varphi_\tau(t-\tau)$;

– покупаем новое по цене $\varphi_0(t)$;

– получаем доход $d_0(t)$;

– эксплуатационные затраты составляют $\psi_0(t)$;

– к моменту $t+1$ будем иметь оборудование возраста $\tau=1$.

Величина $\Pi_1(\tau+1)$ была вычислена ранее. Тогда прибыль будет равна $-\varphi_\tau(t-\tau) + \varphi_0(t) + d_0(t) - \psi_1(t) + \Pi_1(t+1)$. Остается выбрать лучший из двух вариантов. Получаем уравнение Беллмана:

$$\Pi_\tau(t) = \max \left\{ \begin{array}{l} -\varphi_\tau(t-\tau) + \varphi_0(t) + d_0(t) - \psi_1(t) + \Pi_1(t+1), \\ d_\tau(t-\tau) - \psi_\tau(\tau-t) + \Pi_{t+1}(\tau+1). \end{array} \right.$$

Для реализации этого уравнения достаточно положить $\Pi_T(\tau) = -\varphi_\tau(T-\tau)$ и в двойном цикле $t=T-1, T-2, \dots, 0$, $\tau=1, 2, \dots, t$ реализовать выписанное выше соотношение. Трудоемкость алгоритма составляет $O(T^2)$ операций.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Беллман Р. Динамическое программирование. М.: Изд-во иностр. литературы, 1960. 401 с.

[2] Гимади Э.Х., Глебов Н.И. Математические модели и методы принятия решений. Новосибирск: НГУ, 2008. 162 с.

[3] Гэри М., Джонсон Д. Вычислительные машины и трудно-решаемые задачи. М.: Мир, 1982. 416 с.

Пашина Сергей Александрович,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
II курс магистратуры, ИМИТ,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, Pashina.Sergej@yandex.ru

АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ПОСТРОЕНИЯ ЦИКЛИЧЕСКОГО РАСПИСАНИЯ С ТЕХНОЛОГИЧЕСКИМИ ОГРАНИЧЕНИЯМИ

М. В. Рудометова

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент А. А. Романова

Аннотация. В статье рассматривается задача составления циклического расписания обработки идентичных деталей с минимальным временем цикла и ограничением на количество одновременно обрабатываемых деталей в случае произвольных отношений предшествования между операциями деталями. Предложены алгоритмы локального спуска и поиска с запретами, основанные на ряде окрестностей. Проведен вычислительный эксперимент, выявлены виды окрестностей с наилучшими результатами.

Ключевые слова: циклическое расписание, время цикла, граф предшествования, локальный спуск, поиск с запретами.

Рассматривается задача составления циклического расписания в следующей постановке. Имеется неограниченное количество идентичных деталей, которые необходимо выполнить на производственной линии, состоящей из m машин. Обработка каждой детали заключается в выполнении n операций, на множестве которых задан частичный порядок. Частичный порядок задан с помощью ациклического ориентированного графа $G = (V, E)$, в котором V – это множество операций детали, а дуга $(i, j) \in E$, если операция j не может начаться раньше, чем закончится операция i . Операция i выполняется в течение p_i единиц времени на машине $M_i \in \{1, \dots, m\}, i = 1, \dots, n$.

Пусть $\langle i, k \rangle$ – операция i детали k . Обозначим $t(i, k)$ – время начала операции $\langle i, k \rangle, i \in V, k \in Z$. Расписание называется циклическим со временем цикла α , если $t(i, k) = t(i, 0) + k\alpha$, для всех $i \in V, k \in Z$.

Задача минимизации времени цикла с ограничением на число одновременно обрабатываемых деталей NP-трудна в сильном смысле [1] при нефиксированном H . В случае графа G , представляющего собой цепь, задача минимизации времени цикла полиномиально разрешима, для фиксированного H задача псевдо-

полиномиально разрешима и NP-трудна при $H \geq 4$ [2]. Также в [3] предложен алгоритм локального поиска [3]. Целью данной работы является обобщение ряда описанных результатов на случай произвольного графа G .

В работе показано, что для произвольного графа G без ограничения на H задача остается полиномиально разрешимой за $O(n)$ операций. Минимальное время цикла в этом случае равно $\alpha_{min} = \max_{l=1, \dots, m} \sum_{i \in N_l} p_i$, то есть времени выполнения всех операций на самой загруженной машине. Здесь N_l – множество операций всех деталей, выполняемых на машине $l, l = 1, \dots, m$. Для нахождения оптимального расписания необходимо рассмотреть операции в порядке неубывания рангов графа предшествования и выполнить их тогда, когда освобождается нужная машина. Если при этом нарушается отношение предшествования операций, то переносим выполнение текущей операции вперед на время, равное α_{min} .

Пусть $E' = E \cup \{(j, i) | (i, j) \in E, M_i = M_j\}$. Для дуг $(i, j) \in E$ порядка полагаем $H_{ij} = 0$, для остальных дуг множества E' полагаем $H_{ij} = 1$. Пусть $D = \{(i, j) | i \neq j, M_i = M_j\} \setminus E'$. Дуги множества D называются дизъюнктивными. Для пар операций множества D введем переменные K_{ij} , равные разности номеров соответствующих деталей в расписании. Таким образом, эти величины отвечают за порядок выполнения операций i и j на одной машине.

Весовая функция HX_{ij} определяется следующим образом:

$$HX_{ij} = \begin{cases} H_{ij}, & (i, j) \in E'; \\ K_{ij}, & (i, j) \in D. \end{cases}$$

Длина цикла α и весовая функция $HX: E' \cup D \rightarrow Z$ должны удовлетворять следующим условиям: (1) $HX_{ij} + HX_{ji} = 1$ для всех $(i, j) \in D$; (2) Все контуры μ в $(V, E' \cup D)$ имеют положительный вес; (3) Для всех контуров μ амплитуды $P(\mu) - \alpha HX(\mu)$ должны быть неположительны. Здесь $P(\mu)$ – сумма длительностей операций цикла μ , $HX(\mu)$ – сумма весов дуг цикла μ .

При фиксированной весовой функции HX соответствующее минимальное время цикла можно найти за полиномиальное время [3]. Опишем используемый в работе способ его нахождения. Кон-

тур μ называется критическим, если его величина $P(\mu)/HX(\mu)$ максимальна среди всех контуров. В этом случае минимальное время цикла равно величине критического контура. Значение α^* может быть найдено с помощью дихотомии в интервале $[\alpha_{min}, P_{\Sigma}]$. Для каждого нового значения: 1) рассматриваем сеть G_{α} , в которой вес $d_{ij} = p_i - \alpha HX_{ij}$ назначается для каждой дуги $(i, j) \in E' \setminus D$; 2) используем алгоритм Флойда для нахождения максимальных путей между всеми парами вершин в сети G_{α} , получаем матрицу \bar{D} ; 3) ищем контур наибольшей длины, перебирая пары i и j ($i < j$) и вычисляя максимальную из сумм $\bar{d}_{ij} + \bar{d}_{ji}$. Таким образом, выбирается контур μ с наибольшим значением $P(\mu) - \alpha HX(\mu)$; 4) Если $P(\mu) - \alpha HX(\mu) < 0$, то α становится верхней границей рассматриваемого интервала; если $P(\mu) - \alpha HX(\mu) > 0$, то α становится верхней границей. Иначе искомое значение длины цикла найдено.

Пусть HX – некоторая весовая функция, тогда сосед \overline{HX} этой функции получается выбором произвольной дуги $(i, j) \in D$ и увеличением соответствующего значения HX_{ij} на некоторую величину. При этом должно быть выполнено $HX_{ij} \leq \overline{HX} \leq HX_{ij}^+$, где $HX_{ij}^+ = \min\{HX(\tau) \mid \tau - \text{путь из } i \text{ в } j \text{ в графе } (V, E' \cup D\{(i, j)\})\}$. Окрестность N получается сопоставлением весовой функции HX множества $N(HX)$ допустимых весовых функций, называемых соседями функции HX . Перечислим окрестности использующиеся в данной работе:

- Окрестность N_1 получается сопоставлением весовой функции HX множества допустимых весовых функций, полученных из HX выбором дуги $(i, j) \in D$, входящей в критический контур, и увеличением ее веса на единицу.

- При рассмотрении окрестности N_2 вес дуги $(i, j) \in D$ критического контура увеличивается на величину $HX_{ij}^+ - HX_{ij}$.

- Окрестность N_3 основывается на увеличении веса первой и последней дуг самого длинного блока(-ов) на величину $HX_{ij}^+ - HX_{ij}$. Здесь блоком называется последовательность дизъюнктивных дуг критического контура, состоящая по крайней мере из одной дуги,

- Окрестность N_4 аналогична N_3 , но вместо рассмотрения дуг блоков только максимального размера в рассмотрение включаются первая и последняя дуга во всех блоках критического контура; увеличение веса происходит на величину $HX_{ij}^+ - HX_{ij}$.

В работе реализованы стандартный алгоритм локального спуска и алгоритм поиска с запретами, частично использующий настройки алгоритма, предложенного в [3]. Проведен вычислительный эксперимент по сравнению значений целевой функции, полученных алгоритмами, с нижней границей длины цикла, вычисленной пакетом CPLEX. В ходе эксперимента решались задачи размерности 30, 60 и 90 операций с графами, взятыми из библиотеки PSPLib. Окрестности N_1 и N_2 показывают почти одинаковый высокий процент погрешности во всех сериях задач (от 20 % до 50%). Среди всех окрестностей наименьшую погрешность обеспечивает использование окрестности N_4 . Для всех размерностей использование этой окрестности в алгоритме поиска с запретами обеспечило погрешность не более 10 %; при $H = 3$ и размерности 30 найдено оптимальное решение во всех задачах.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Hanan C.* Study of a NP-hard cyclic scheduling problem: The recurrent job-shop // *European Journal of Operational Research*. 1994. Vol. 72. P. 82–101.

[2] *Романова А.А., Сервах В.В.* Оптимизация выпуска однотипных деталей на основе циклических расписаний // *Дискретный анализ и исследование операций*. 2008. Т. 15, № 5. С. 47–60.

[3] *Brucker P., Kampmeyer T.* Tabu search algorithms for cyclic machine scheduling problems // *Journal of Scheduling*. July 2005, Vol. 8, Issue 4. P. 303–322.

Рудометова Марина Викторовна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
II курс магистратуры, ИМИТ,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, marinarudometova59@gmail.com

МИНИМИЗАЦИЯ ЗАТРАТ ЗАДАЧИ КАЛЕНДАРНОГО ПЛАНИРОВАНИЯ СО СКЛАДИРУЕМЫМИ РЕСУРСАМИ

С. А. Рядовой

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент А. А. Романова

Аннотация. В работе рассматривается задача календарного планирования со складываемыми ресурсами и критерием минимизации суммарных затрат на их приобретение при условии, что стоимость ресурса меняется во времени. Показана полиномиальная разрешимость задачи с неограниченным складом. Для случая ограниченного склада предложен алгоритм нахождения приближенного решения. Выделены псевдополиномиально разрешимые случаи задачи.

Ключевые слова: календарное планирование, динамическое программирование, расписание, складываемые ресурсы.

В работе рассматривается задача календарного планирования в следующей постановке. Имеется проект, состоящий из множества $V = \{1, \dots, n\}$ взаимосвязанных работ. Для каждой работы $j \in V$ известна длительность p_j ее выполнения. Прерывания выполнения работ не допускаются. Взаимосвязь между работами определяется технологией выполнения проекта и задается с помощью ациклического ориентированного графа $G = (V, E)$, в котором вершины соответствуют работам, а дуги – отношениям предшествования $i \rightarrow j$, что означает, что работа j не может начаться до завершения работы i . Задан директивный срок T выполнения проекта, к которому все работы должны быть завершены.

Для выполнения работ требуются складываемые ресурсы m видов. Известна потребность q_{rj} работы j в ресурсе вида r в каждый период времени ее выполнения, $r = 1, \dots, m; j = 1, \dots, n$. Ресурсы для выполнения работ проекта необходимо приобретать. В силу целочисленности длительностей работ будем считать, что покупка ресурсов производится в целочисленные моменты времени. Предполагаем, что приобретение ресурсов происходит в начале

периода $t, t = 1, \dots, T$. Складируемые ресурсы характеризуются тем, что суммарное количество ресурса, закупленного к периоду времени t , не должно быть меньше суммарного требуемого ресурса к периоду t для всех $t = 1, \dots, T$.

Можно рассматривать классический случай неограниченного склада, когда излишек ресурса можно хранить в любом количестве. В случае ограниченного склада излишек ресурса r , то есть ресурс, который предполагается потратить позже, в каждый период времени не должен превышать размера склада для ресурса r – величины $V_r, r = 1, \dots, m$.

Каждый ресурс r в любой момент времени может иметь разную стоимость. Пусть c_{rt} – стоимость ресурса r в период времени $t, r = 1, \dots, m; j = 1, \dots, n$. Изменение стоимости может происходить в связи с колебанием курса валют, с усложнением внедряемых технологий в производство ресурса, или, наоборот, с оптимизацией производственного процесса.

Пусть $s_j \in \mathbb{Z}^+$ – время начала выполнения работы $j \in V$. Пусть $y_{rt} \in \mathbb{Z}^+$ – объем закупаемого ресурса $r \in R$ в периоде времени t . Решением задачи является расписание S и план закупок Y . Решение (S, Y) называется допустимым, если выполняются ограничения предшествования, время завершения всего проекта не превышает T , суммарный объем потребления каждого ресурса к моменту времени t не превосходит объема закупленного ресурса, и объем ресурса r , хранящегося на складе, не превышает V_r в каждый период времени $t, t = 1, \dots, T$. Допустимое решение (S, Y) оптимально, если суммарные затраты на приобретение ресурсов минимальны.

Задача календарного планирования с рассматриваемым критерием и возобновляемыми ресурсами NP-трудна [4]. Задача календарного планирования со складываемыми ресурсами с критерием C_{\max} полиномиально разрешима [1], с критериями C_{Σ} и NPV NP-трудна в сильном смысле [3]. Данная работа является продолжением исследований, начатых в [2].

Расписание S назовем T -поздним, если (1) соблюдаются условие предшествования, (2) любая работа завершается не позже директивного срока, и увеличение любого момента s_j приводит к нарушению хотя бы одного из условий (1)–(2).

Рассмотрим случай неограниченного склада. В работе показано, что T -позднее расписание является оптимальным, а сама за-

дача – полиномиально разрешимой. Предлагается следующий алгоритм решения данной задачи (алгоритм приведен для случая одного ресурса).

Шаг 1: С помощью алгоритма Форда находим T -позднее расписание работ; пусть s_j – время начала работы j , $j = 1, \dots, n$.

Шаг 2: Для всех $r = 1, \dots, m$ выполняем:

Находим наименьший период времени t_0 , в котором стоимость c_{r,t_0} ресурса минимальна. Для всех работ j , которые начинаются не раньше момента t_0 , то есть, $s_j \geq t_0$, покупаем ресурс по цене c_{r,t_0} в количестве $y_{r,t_0} = \sum_{j: s_j \geq t_0} p_j q_{rj}$.

Полагаем $k = 0$.

Пока $t_k > 1$ выполняем:

- Полагаем $k = k + 1$.

- Находим наименьший период времени t_k из множества $\{1, \dots, t_{k-1} - 1\}$ с минимальной стоимостью ресурса c_{r,t_k} .

- Для всех работ j , для которых $t_k \leq s_j \leq t_{k-1} - 1$, покупаем ресурс по цене c_{r,t_k} в количестве $y_{r,t_k} = \sum_{j: t_k \leq s_j \leq t_{k-1} - 1} p_j q_{rj}$.

Трудоёмкость алгоритма составляет $O(rnT)$ операций.

Таким образом, в случае неограниченного склада доказана полиномиальная разрешимость задачи.

Для случая неограниченного склада доказана следующая

Теорема:

1) Если $c_{r1} \leq c_{r2} \dots \leq c_{rT}$ для всех r , то раннее расписание является оптимальным.

2) Если $c_{r1} \geq c_{r2} \dots \geq c_{rT}$ для всех r , то T -позднее расписание является оптимальным.

Для нахождения оптимального плана закупки ресурса по известному расписанию применяем алгоритм динамического программирования (ДП) псевдополиномиальной трудоёмкости, описанный в [2]. Для общего случая задачи разработан алгоритм жадного типа для приближенного решения.

Шаг 1: Сортируем работы по неубыванию рангов.

Шаг 2: С помощью алгоритма Форда находим раннее и T -позднее расписания работ.

Шаг 3: Составляем вспомогательную таблицу D , состоящую из 0 и 1, где $D_{it}=1$, если работа i может выполняться в момент t .

Шаг 4: Перебираем моменты времени в порядке неубывания стоимостей ресурса. Для каждого из этих моментов: 1) фиксируем выполнение работ в этот момент времени, фиксируя единицу в матрице D и зануляя соответствующие элементы строк матрицы; 2) пересчитываем матрицу D для сохранения допустимости. Переходим к следующему моменту времени. В итоговой матрице в каждой строке останется количество единиц, равное длительности соответствующей работы. Столбец, в котором стоит первая единица в строке, определяет время начала соответствующей работы.

Шаг 5: Запускаем алгоритм ДП для нахождения плана закупок ресурса.

Алгоритм реализован, проведен вычислительный эксперимент на задачах из библиотеки тестовых примеров PSPLib. Отклонение от оптимума для решенных задач составило не более 20 %.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Гимади Э.Х., Залюбовский В.В., Севастьянов С.В.* Полиномиальная разрешимость задач календарного планирования со складываемыми ресурсами и директивными сроками // Дискретный анализ и исследование операций. Январь-июнь 2000. Серия 2. Т. 7, № 1. С. 9–34.

[2] *Романова А.А.* Минимизация затрат в задаче календарного планирования со складываемыми ресурсами и ограниченным складом // Танаевские чтения: Доклады Восьмой Международной научной конференции. 2018. С. 143–148.

[3] *Сервах В.В., Щербинина Т.А.* О сложности одной задачи календарного планирования со складываемыми ресурсами // Вестник НГУ. Серия: Математика, механика, информатика. 2008. Т. 8, вып. 3. С. 105–111.

[4] *Möhring R.H.* Minimizing Costs of Resource Requirements in Project Networks Subject to a Fixed Completion Time // Operations Research. 1984. Vol. 32. P. 89–120.

Рядовой Сергей Андреевич,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
I курс магистратуры, ИМИТ,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, ryadovoysergey@gmail.com

СОСТАВЛЕНИЕ РАСПИСАНИЯ РАБОТЫ ОПЕРАТОРОВ ЦЕНТРА ОБРАБОТКИ ВЫЗОВОВ

М. А. Сахно, М. Ю. Сосновская

Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, доцент А. В. Еремеев

Аннотация. В данной статье представлены постановка задачи и математическая модель для задачи составления расписаний работы операторов центра обработки вызовов. Одним из главных условий задачи является то, что операторы имеют различную эффективность обработки разных типов вызовов. Требуется составить расписание работы операторов с учетом их эффективности в обработке вызовов разных типов.

Ключевые слова: расписание, математическая модель.

В данной работе рассматривается задача составления расписаний для операторов центра обработки вызовов. Необходимо учитывать графики работы как операторов, так и графики поступления разных типов вызовов, а также учитывать потребность операторов в перерывах на обед. Особенностью задачи является то, что операторы могут обрабатывать разные типы вызовов с разной эффективностью.

Перейдем к постановке задачи.

Дано: n операторов, m типов вызовов. Для каждого оператора для каждого типа вызова известно, может ли данный оператор обработать данный тип вызова, и если может, то с какой эффективностью. В один момент времени оператор может обрабатывать не более чем L типов вызовов. Рабочий день делится на интервалы времени одинаковой длины. Для каждого интервала времени известно необходимое количество операторов для обработки вызовов каждого типа. Известен интервал времени, когда оператор может пойти на обед. У всех операторов одинаковое время на обед, равное интервалу времени, на которые разделен рабочий день. Когда оператор выходит на обед, оставшихся операторов должно быть достаточно для обработки вызовов всех типов. В течение интервала времени выхода на обед, каждый оператор должен выйти на обед ровно один раз.

Необходимо составить расписание работы операторов в каждый интервал времени с учетом ожидаемого количества вызовов разных типов и условий по выходу операторов на обед, максимизировав сумму коэффициентов эффективности работы операторов.

Теперь рассмотрим математическую модель.

Дано:

$E = \{0, 1, \dots, e - 1\}$ – множество операторов.

$C = \{0, 1, \dots, c - 1\}$ – множество типов вызовов.

L – максимальное количество типов вызовов, которые может обрабатывать оператор в один интервал времени.

$m_{ec} = 1$, если оператор e может обрабатывать вызов типа c , иначе 0 .

$s_{ec} \in [0, 1]$ – эффективность оператора e в обработке вызова типа c .

В случае, когда нет обеда, можно составлять расписание для каждого такого интервала времени отдельно.

Дано:

n_c – необходимое количество операторов для обработки вызовов типа c .

Переменные:

$a_{ec} = 1$, если оператор e назначен на обработку вызова типа c , иначе 0 .

Модель:

$$\sum_{a \in E} \sum_{c \in C} a_{ec} \cdot s_{ec} \rightarrow \max, \quad (1)$$

$$\sum_{c \in C} a_{ec} \leq L \quad \forall e \in E, \quad (2)$$

$$\sum_{e \in E} a_{ec} \geq n_c \quad \forall c \in C, \quad (3)$$

$$a_{ec} \leq m_{ec} \quad \forall e \in E \quad \forall c \in C, \quad (4)$$

$$a_{ec} \in \{0, 1\} \quad \forall e \in E \quad \forall c \in C. \quad (5)$$

Целевая функция (1) задает критерий максимизации суммы коэффициентов эффективности операторов. Благодаря неравенству (2) оператор назначен на обработку вызовов не более чем L типов. Неравенство (3) удовлетворяет требованию о необходимом количестве операторов для обработки вызовов каждого типа. Неравенство (4) гарантирует, что оператор назначен на обработку только тех типов вызовов, которые он может обработать.

В случае, когда оператор может пойти на обед, не представляется возможным рассматривать интервалы времени по отдельности,

поскольку оператор может выйти на обед лишь один раз. Таким образом, будем рассматривать последовательность интервалов времени.

Дано:

$T = \{0, 1, \dots, t - 1\}$ – номера интервалов, когда оператор может выйти на обед.

n_{ct} – необходимое количество операторов для обработки вызовов типа c на протяжении интервала времени t .

Переменные:

$a_{ect} = 1$, если оператор e назначен на обработку вызова типа c в интервал времени t , иначе 0.

$l_{et} = 1$, если оператор e выходит на обед в интервал времени t , иначе 0.

Модель:

$$\sum_{e \in E} \sum_{c \in C} \sum_{t \in T} a_{ect} \rightarrow \max, \quad (6)$$

$$\sum_{c \in C} a_{ect} \leq L \quad \forall e \in E \quad \forall t \in T, \quad (7)$$

$$\sum_{e \in E} a_{ect} \geq n_{ct} \quad \forall c \in C \quad \forall t \in T, \quad (8)$$

$$a_{ect} \leq m_{ect} \quad \forall e \in E \quad \forall c \in C \quad \forall t \in T, \quad (9)$$

$$\sum_{t \in T} l_{et} = 1 \quad \forall e \in E, \quad (10)$$

$$\sum_{c \in C} a_{ect} \leq (1 - l) L \quad \forall e \in E \quad \forall t \in T, \quad (11)$$

$$a_{ect} \in \{0, 1\} \quad \forall e \in E \quad \forall c \in C \quad \forall t \in T, \quad (12)$$

$$l_{et} \in \{0, 1\} \quad \forall e \in E \quad \forall t \in T. \quad (13)$$

Ограничения 6–9 имеют тот же смысл, что и в предыдущей модели. Неравенство (10) гарантирует, что оператор выходит на обед ровно один раз. Неравенство (11) позволяет оператору не обслуживать ни один из типов вызовов во время выхода на обед.

В данной работе были представлены постановка задачи и ее математическая модель. Решение рассмотренной задачи может повысить эффективность работы центра обработки вызовов благодаря оптимально составленному расписанию работы операторов.

Сахно Максим Алексеевич,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
I курс магистратуры, ИМИТ,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, maxim.sakhno@gmail.com

Сосновская Мария Юрьевна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
I курс магистратуры, ИМИТ,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, sosnovskayamy@gmail.com

ПОСТРОЕНИЕ РАСПИСАНИЙ ПРОЦЕССОРА С УЧЕТОМ ОГРАНИЧЕННОЙ ПРОПУСКНОЙ СПОСОБНОСТИ ШИНЫ ДАННЫХ

М. Ю. Сосновская, М. А. Сахно

Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, доцент А. В. Еремеев

Аннотация. В данной работе рассматривается задача составления расписаний с ресурсными ограничениями. За основу взята задача разработки программы для выполнения на многоядерном процессоре. В этом случае необходимо составить расписание выполнения программных модулей на ядрах процессора, учитывая ограничения на загрузку шины данных и на объем кэша процессора. В статье приведены постановка задачи и ее математическая модель.

Ключевые слова: возобновимые ресурсы, многоядерный процессор, шина данных, конфигурация.

Наша работа заключается в исследовании задач составления расписаний с ресурсными ограничениями, возникающих, например, при разработке программы для выполнения на многоядерном процессоре. В качестве машин выступают ядра, а работами являются исполняемые программные модули (процедуры). Первый ресурс возобновимого типа представляет объем кэша процессора, а второй возобновимый ресурс описывает ограничения на загрузку шины данных. Шина данных – это часть системной шины, предназначенная для передачи данных между компонентами компьютера. Отличительной особенностью является то, что каждая работа может выполняться с различной скоростью в зависимости от загрузки ядер другими работами, что определяет индивидуальное потребление ресурса этой работой.

Перейдем к постановке задачи.

Дано: p процедур, u ядер, 2 ресурса возобновимого типа: шина данных и кэш процессора. Загрузка шины данных указывается в процентах. Объем кэша – в единицах измерения памяти (байтах, мегобайтах...). Память, необходимая для процедуры, выделяется целиком один раз, в начале выполнения процедуры.

Все процедуры делятся на два типа: ограниченные шиной данных (memory-bounded) и ограниченные процессором (CPU-bounded). Для каждой работы известны загрузка шины данных и объем кэша процессора, необходимые ей для выполнения, при условии, что вместе с ней не выполняются другие работы. Эти величины остаются неизменными в процессе выполнения процедуры. Если выполняется одновременно две или более работы, то шина данных делится между ними на паритетной основе. Процедуры выполняются непрерывно. Присутствует частичный порядок. Для каждой работы известно, сколько тактов процессора ей нужно для полного выполнения.

Необходимо составить расписание выполнения процедур с минимальным общим временем завершения.

При переходе к математической модели мы свели задачу к выполнению конфигураций. Конфигурация – это набор процедур, выполняющихся одновременно. На этапе препроцессинга конфигурации уже рассчитаны с учетом ограничений на количество ядер и объем памяти.

Теперь рассмотрим математическую модель.

Дано:

P – множество процедур.

$M = \{0, 1, \dots, k\}$ – множество конфигураций. При этом в нулевой конфигурации ни одна процедура не выполняется.

s_p – количество тактов процессора, необходимое до полного выполнения процедуры p .

v_{pm} – скорость выполнения процедуры p в конфигурации m . Измеряется в количестве тактов процессора в единицу времени.

$q_{pm} = 1 \Leftrightarrow$ процедура p выполняется в конфигурации m , 0 иначе.

$a_{ij} = 1 \Leftrightarrow$ конфигурация i выполняется после конфигурации j , 0 иначе.

T_{max} – оценка сверху продолжительности выполнения конфигурации в точке событий.

Обозначим через $N = \{0, 1, 2, \dots, e\}$ – множество точек событий. Точка событий – это номер интервала времени, в котором выполняется одна конфигурация.

Введем переменные:

t_{nm} – продолжительность выполнения конфигурации m в точке событий n .

$d_{nm} = 1 \forall n = 1, \dots, e \forall m = 1, \dots, k \Leftrightarrow$ в точке событий n выполняется конфигурация m , 0 иначе. Кроме того, $d_{00} = 1$ и $d_{0m} = 0 \forall m = 1, \dots, k$.

Тогда модель может быть записана следующим образом:

$$C_{max} \rightarrow \min, \quad (1)$$

$$\sum_{n \in N} \sum_{m \in M} t_{nm} \leq C_{max}, \quad (2)$$

$$t_{nm} \geq 0 \forall n \in N \forall m \in M, \quad (3)$$

$$t_{nm} \leq d_{nm} \cdot T_{max}, \quad (4)$$

$$\sum_{m \in M} d_{nm} = 1 \forall n \in N, \quad (5)$$

$$\sum_{n \in N} \sum_{m \in M} t_{nm} \cdot v_{pm} = s_p \forall p \in P, \quad (6)$$

$$\sum_{m \in M} d_{nm} \cdot q_{pm} - \sum_{m \in M} d_{n-1,m} \cdot q_{pm} \leq y_{pn} \forall p \in P \forall n \in N \quad (7)$$

$$\sum_{n \in N} y_{pn} = 1 \forall p \in P, \quad (8)$$

$$a_{ij} \cdot d_{jn_1} \cdot (n_1 + 1) \leq a_{ij} \cdot d_{in_2} \cdot n_2 \forall i, j \in M \forall n_1, n_2 \in N, \quad (9)$$

$$d_{nm} \in \{0, 1\}, n \in N m \in M. \quad (10)$$

Целевая функция (1) и неравенство (2) задают критерий минимизации момента окончания выполнения всех конфигураций. Неравенство (3) гарантирует неотрицательность продолжительности выполнения конфигурации m в точке событий n , а неравенство (4) – что продолжительность выполнения конфигурации m будет равна нулю только в том случае, если эта конфигурация не выполняется в точке событий n , иначе она будет не больше T_{max} . Равенство (5) выражает, что в каждой точке событий выполняется одна и только одна конфигурация, а равенство (6) – что каждая процедура должна выполняться полностью. Неравенство (7) и равенство (8) гарантируют непрерывность выполнения процедур. Неравенство (9) задает частичный порядок между конфигурациями. Условие (10) описывает область определения переменной d_{nm} .

В данной работе были представлены постановка задачи и ее математическая модель. Решение этой задачи может значительно повысить эффективность работы программ в многоядерном про-

цессоре, так как составленное расписание выполнения различных процедур в процессоре позволит оптимально использовать такие ресурсы, как кэш процессора и шина данных.

Сосновская Мария Юрьевна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
I курс магистратуры, ИМИТ,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, sosnovskayamy@gmail.com

Сахно Максим Алексеевич,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
I курс магистратуры, ИМИТ,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, maxim.sakhno@gmail.com

ПРИБЛИЖЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ МИНИМИЗАЦИИ ОБЩЕГО ВРЕМЕНИ ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТ ПРИ НАЛИЧИИ ЧАСТИЧНОГО ПОРЯДКА

В. Ю. Тавченко

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент А. А. Романова

Аннотация. В работе рассматривается задача составления расписания выполнения операций на двух машинах при наличии частичного порядка. Составлена модель целочисленного линейного программирования, предложены алгоритмы нахождения приближенного решения. Алгоритмы реализованы; проведен вычислительный эксперимент.

Ключевые слова: расписание, частичный порядок, целочисленное линейное программирование, приближенное решение.

1. Постановка задачи

За прошедшие десятилетия появление новых методов материально-технического обеспечения в распределительных отраслях привело к необходимости решения задачи обработки деталей на двух станках в системе конвейерного типа при наличии частичного порядка между операциями. В таких системах, называемых cross-docking [3], идея заключается в том, чтобы перемещать товары прямо с привозящих автоприцепов на увозящие без хранения на складе.

На производственной линии, состоящей из двух машин, необходимо выполнить $m + n$ операций. При этом m операций A_1, A_2, \dots, A_m необходимо выполнить на первой машине, а n операций B_1, B_2, \dots, B_n – на второй машине. Прерывания и одновременное выполнение двух и более операций на одной машине не допускаются. На выполнение операции A_i требуется a_i единиц времени, а на выполнение операции B_j требуется b_j единиц времени. С помощью двудольного ориентированного графа $G = (V, E)$, где $V = V_1 \cup V_2$ – множество вершин графа, $V_1 = \{A_1, A_2, \dots, A_m\}$; $V_2 = \{B_1, B_2, \dots, B_n\}$; $E = \{(A_i, B_j) | A_i \rightarrow B_j, A_i \in V_1, B_j \in V_2\}$ задан частичный порядок на множестве операций, выполняемых на машинах. Если операция A_i связана с операцией

B_j отношением предшествования $A_i \rightarrow B_j$, то операцию B_j нельзя начинать выполнять на второй машине до тех пор, пока не будет выполнена операция A_i на первой машине.

Расписание S выполнения операций на машинах определяется заданием времени начала каждой операции. Пусть s_i^A – время начала операции A_i , $i = 1, \dots, m$, s_j^B – время начала операции B_j , $j = 1, \dots, n$. Заметим, что операции на первой машине могут выполняться без простоев, поэтому расписание выполнения операций на первой машине определяется последовательностью их выполнения. Расписание S является допустимым, если к началу выполнения каждой из операций на второй машине выполнены все операции на первой машине, связанные с ней отношениями предшествования. Обозначим $C_{max}(S) = \max \left\{ \max_{j=1, \dots, n} (s_j^B + b_j), \max_{i=1, \dots, m} (s_i^A + a_i) \right\}$ – время завершения выполнения всех операций. В задаче требуется найти допустимое расписание S , при котором $C_{max}(S)$ минимально. Задача является NP -трудной в сильном смысле как для произвольных, так и для единичных длительностей операций [1]. В следующем параграфе построена модель целочисленного линейного программирования для рассматриваемой задачи.

2. Модель целочисленного линейного программирования

Построим модель целочисленного линейного программирования (ЦЛП) для задачи с произвольными длительностями. Введем переменные.

$$\begin{aligned}
 & s_i - \text{время начала выполнения работы } i \text{ на первой машине;} \\
 & t_j - \text{время начала выполнения работы } j \text{ на второй машине;} \\
 & x_{ik} = \begin{cases} 1, \text{ если операция } i \text{ предшествует операции } k \\ \text{на первой машине;} \\ 0, \text{ иначе;} \\ i = 1, \dots, m, k = 1, \dots, m, i \neq k \end{cases} \\
 & y_{jr} = \begin{cases} 1, \text{ если операция } j \text{ предшествует операции } r \\ \text{на второй машине;} \\ 0, \text{ иначе;} \\ j = 1, \dots, n, r = 1, \dots, n, j \neq r \end{cases}
 \end{aligned}$$

Тогда модель ЦЛП выглядит следующим образом:

$$f \rightarrow \min \tag{1}$$

$$f \geq s_i + a_i, i = 1, \dots, m; \quad (2)$$

$$f \geq t_j + b_j, j = 1, \dots, n; \quad (3)$$

$$s_i + a_i \leq t_j, (i, j) \in E; \quad (4)$$

$$s_k \geq s_i + a_i - W(1 - x_{ik}), i, k = 1, \dots, m, i \neq k; \quad (5)$$

$$s_i \geq s_k + a_k - Wx_{ik}, i, k = 1, \dots, m, i \neq k; \quad (6)$$

$$t_r \geq t_j + b_j - W(1 - y_{jr}), j, r = 1, \dots, n, j \neq r; \quad (7)$$

$$t_j \geq t_r + b_r - Wy_{jr}, j, r = 1, \dots, n, j \neq r; \quad (8)$$

$$s_i \geq 0, i = 1, \dots, m; \quad (9)$$

$$t_j \geq 0, j = 1, \dots, n; \quad (10)$$

$$x_{ik} \in \{0,1\}, i, k = 1, \dots, m, i \neq k; \quad (11)$$

$$y_{jr} \in \{0,1\}, j, r = 1, \dots, n, j \neq r. \quad (12)$$

Целевая функция f выражает момент завершения выполнения последней операции. Ограничение (4) обеспечивает соблюдение частичного порядка. Неравенства (5) – (6) задают порядок выполнения работ на первой машине, неравенства (7) – (8) на второй. Здесь W – достаточно большое число.

К сожалению, время решения данной задачи пакетом CPLEX является приемлемым лишь для небольших размерностей – 10–12 операций на каждой машине. Поэтому для нахождения оптимального решения был изучен и реализован алгоритм ветвей и границ [2].

3. Алгоритмы нахождения приближенного решения

В силу того, что на первой машине операции выполняются без простоев, для построения расписания достаточно задать порядок выполнения операций на первой машине. В работе предложены следующие способы определения последовательности выполнения операций на первой машине:

1. Упорядочение по невозрастанию количества исходящих дуг.

2. Упорядочение по неубыванию величин $\frac{a_i}{deg(A_i)}$. Идея состоит в том, что чем меньшая длительность приходится в среднем на одну исходящую дугу, тем раньше операция должна выполняться.

3. Для каждой операции B_j определим сумму длительностей операции A_i , связанных с ней отношениями предшествования. Выполним операции на первой машине, соответствующие наименьшей сумме, и соответствующую операцию на второй машине. Ис-

ключим из рассмотрения эти операции и дуги, им инцидентные. Повторим процесс для оставшихся операций на второй машине.

При заданной последовательности выполнения операций на первой машине, расписание на второй машине, при котором общее время выполнения минимально, находится за полиномиальное время [1].

Предложенные алгоритмы реализованы, проведен вычислительный эксперимент. По результатам вычислительного эксперимента можно сделать вывод о том, что алгоритм приближенного решения A в большинстве случаев находит оптимальное решение задачи $F2/CD/C_{max}$ при использовании третьей процедуры. Алгоритм ветвей и границ затрачивает на вычисление существенно меньше времени по сравнению с CPLEX.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Романова А.А.* Алгоритмы решения одной задачи построения расписания минимальной длины для двух машин // Дискретный анализ и исследование операций. Июль-август 2015. Т. 22, № 4. С. 63–79.

[2] *Chen F., Lee C.* Discrete Optimization: Minimizing the makespan in a two-machine cross-docking flow-shop problem // European Journal of Operational Research. 2009. Vol. 193. P. 59–72.

[3] *Chen F., Song K.* Minimizing makespan in two-stage hybrid cross-docking scheduling problem // Computers and Operational Research. 2009. Vol. 36. P. 2066–2073.

Тавченко Вероника Юрьевна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
I курс магистратуры, ИМИТ,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, nikapolicheva@mail.ru

НЕВЫПУКЛЫЕ ЗАДАЧИ КВАДРАТИЧНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ В ОПТИМИЗАЦИИ КОРОТКОВОЛНОВЫХ АНТЕННЫХ РЕШЕТОК

Н. Н. Тюнин

Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, доцент А. В. Еремеев

Аннотация. Рассмотрены постановки задач для трех антенных решеток различных структур, включающих до 25 излучателей. Проведены вычислительные эксперименты оценки эффективности алгоритма, основанного на градиентном методе, с пакетом «BARON». Экспериментально изучены множества локальных оптимумов задачи. Выявлено, что в большинстве случаев большинству локальных оптимумов соответствует одно и то же значение целевой функции.

Ключевые слова: квадратичное программирование, локальные оптимумы, антенные решетки, градиентная оптимизация, вычислительный эксперимент.

Фазированными антенными решетками (ФАР) называются регулярные решетки излучателей, соединенные со специальными устройствами, обеспечивающими распределение фаз и амплитуд. Использование таких систем в КВ диапазоне дает возможность повышения энергетического канала связи, что привлекает к ним повышенное внимание [3–5]. При этом значительное влияние излучателей друг на друга сильно осложняет процесс оптимизации. Как и в работах [6; 8], мы изучаем антенные решетки высоких частот, состоящие из широкополосных вертикальных излучателей (ШВИ) и широкополосных вертикальных диполей (ШВД). Кроме того, в рассмотрение включены решетки вертикальных штырей (ВШ). В данной работе мы исследовали проблему оптимизации ФАР с ограничениями по каждому входу [7]. Задача оптимизации с ограничениями сводилась к задаче оптимизации без ограничений методом внешней точки [1]. Таким образом, итоговую постановку задачи в действительных числах можно сформулировать в виде (1).

$$\mathbf{x}^T \mathbf{G} \mathbf{x} - r \sum_{k=1}^n \left(\begin{array}{l} \min(0, \mathbf{x}^T \mathbf{H}^{(k)} \mathbf{x}) + \\ + \min(0, 1 - 0, \mathbf{x}^T \mathbf{H}^{(k)} \mathbf{x}) \end{array} \right)^4 \rightarrow \max, \quad (1)$$

где \mathbf{G} – вещественное расширение матрицы парциальных компонент полей, $\mathbf{H}^{(k)}$ – вещественное расширение матрицы ограничений по k -му входу, r – параметр штрафной функции, \mathbf{x} – вещественное расширение вектора оптимизируемой величины (ток или напряжение). Вещественное расширение строится по правилу (2).

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \text{Re}(\mathbf{L}) & -\text{Im}(\mathbf{L}) \\ \text{Im}(\mathbf{L}) & \text{Re}(\mathbf{L}) \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где $\mathbf{L} \in \mathbb{C}^{n^2}$, $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{(2n)^2}$.

Далее приводятся результаты сравнений разработанного нами метода градиентного подъема с квадратичной аппроксимацией в качестве линейного поиска [2] и решателя «BARON» в режиме по умолчанию. Расчеты проводились на локальной машине с процессором Intel i7, на всех экспериментах выставлялось ограничение по времени в 1000с. В градиентном методе за это время проводилась серия рестартов из случайной точки, а за решение принималось лучшее из найденных таким образом. Кроме того, для некоторых задач решателем «BARON» удавалось доказать глобальность оптимума (в результатах такие задачи приводятся в графе «BARON *»).

Таблица 1

Процессорное время и целевая функция решеток ШВИ и ШВД, состоящих из 4 излучателей

Решатель	ШВИ		ШВД	
	Время	Целевая функция	Время	Целевая функция
Gradient	0,058	138,2	0,14	459,7
BARON	0,12	139,2	0,27	463,6
BARON*	0,69	139,2	1,14	463,6

Таблица 2

Процессорное время и целевая функция решеток ВШ, состоящих из 4 излучателей

Решатель	Время	Целевая функция
Gradient	3,3	303
BARON	26,62	306

Таблица 3

**Процессорное время и целевая функция решеток ШВИ и ШВД,
состоящих из 9 излучателей**

<i>Решатель</i>	<i>ШВИ</i>		<i>ШВД</i>	
	<i>Время</i>	<i>Целевая функция</i>	<i>Время</i>	<i>Целевая функция</i>
Gradient	0,68	575,7	40	1954,8
BARON	0,34	580,6	0,56	1980,7
BARON*	1873,83	580,6	–	–

Таблица 4

**Процессорное время и целевая функция решеток ВШ,
состоящих из 25 излучателей**

Решатель	Время	Целевая функция
Gradient	1000	1382,7
BARON	217,94	33,5

В табл. 5 приведена общая статистика исследования множества локальных оптимумов различных задач.

Таблица 5

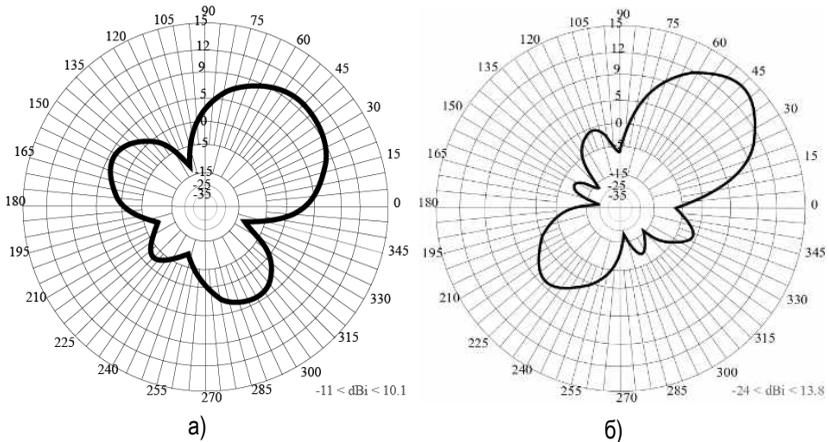
Структура локальных оптимумов

<i>Решетка</i>	<i>Всего оптимумов</i>	<i>Уникальных оптимумов</i>	<i>Значений целевой функции</i>
ШВИ (2x2)	31691	340	1
ШВД (2x2)	9531	194	1
ВШ (2x2)	305	302	24
ШВИ (3x3)	1551	94	1
ШВД (3x3)	94	52	52

На изображенных на рисунке диаграммах направленности можно увидеть, что максимум излучения приходится на оптимизируемое направление 45° .

В заключение следует отметить, что как разработанный нами градиентный метод, так и решатель «BARON», имеют свои преимущества и недостатки. Выявлено, что не все найденные локальные оптимумы уникальны, хотя многим из них соответствует одно и то же значение целевой функции. Объяснение причины та-

кого многообразия локальных оптимумов с идентичным значением целевой функции подлежит дальнейшему изучению.



Горизонтальный план диаграммы направленности квадратной решетки ШВД, состоящей из 4 (а) и 9 (б) излучателей

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Aoki M.* Introduction to optimization techniques. Fundamentals and applications of nonlinear programming // Tech. rep., California Univ Los Angeles dept of system science, 1971.

[2] *Himmelblau D.M.* Applied nonlinear programming // McGraw-Hill Companies, 1972.

[3] *Kudzin V.P., Lozovsky V.N., Shlyk N.I.* The compact linear antenna array system of the short-wave band consisting of “butterfly” radiators // IX International Conference on Antenna Theory and Techniques. IEEE, 2013. P. 252–253.

[4] *Wilensky R.* High-power, broad-bandwidth HF dipole curtain array with extensive vertical and azimuthal beam control // IEEE transactions on broadcasting 34(2), 1988. P. 201–209.

[5] *Yin Y., Deng J.* Design of short wave communication system with phased array antenna // Electronic Engineer. 2007. 3(9). P. 31–33.

[6] *Юрков А.С.* О влиянии потерь в земле на работу четырехэлементной ФАР КВ диапазона // Техника радиосвязи. 2014. № 1. С. 78–81.

[7] *Юрков А.С.* Оптимизация возбуждения передающих фазированных антенных решеток декаметрового диапазона длин волн. ONIP, Omsk, 2014.

[8] *Yurkov A.S.* Directivity maximization of the short wave band phased antenna array // *Tehnika radiosvyazi*. 2016. Vol. 2. P. 46–53.

Тюнин Николай Николаевич,
Омский филиал Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН,
аспирант II курса,
644043, Омск, ул. Певцова, 13, nik.tyunin.92@mail.ru

ЗАДАЧА ОПТИМИЗАЦИИ СТОИМОСТИ МАРШРУТА ТРАНСПОРТНЫХ СРЕДСТВ

А. С. Цаплина

*Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук,
старший научный сотрудник В. В. Сервах*

Аннотация. В статье рассматривается задача оптимизации стоимости маршрута транспортных средств с учетом цен топлива на заправках. Первая постановка посвящена задаче минимизации затрат на топливо для заранее заданного маршрута. Предложен полиномиальный алгоритм ее решения. Во второй постановке рассматривается задача с учетом вариантов передвижения по сети. В частности, исследуется случай двух параллельных дорог, соединенных несколькими поперечными участками. Предложен алгоритм решения этой задачи.

Ключевые слова: задача о кратчайшем пути, динамическое программирование.

Задача о кратчайшем пути является одной из самых популярных задач дискретной оптимизации [3]. Она возникает в разных областях экономики и производства: на транспорте, при обработке деталей на сложных технологических линиях, сети интернет, интегрированных логистических системах и тому подобное. Многочисленные алгоритмы ее решения широко представлены в литературе. В основном исследуемые задачи связаны с оптимизацией аддитивного критерия, когда длина пути задается суммой длин дуг, из которых этот путь состоит. В последнее время появились новые постановки, обобщающие данную задачу. В частности, при передвижении по городу, время перемещения по дугам может меняться, в зависимости от загрузки транспортной сети в разное время суток. Такая же ситуация возникает и в сети интернет. В данной статье рассматривается более сложная постановка задачи связанная с доставкой грузов автомобильным транспортом. В ней необходимо минимизировать стоимость перемещения автомобиля между заданными пунктами. Стоимость зависит не только от длины пути, но и от качества дорог, сборов на большегрузные автомобили, цены на топливо и так далее. Данная задача возникла при

внедрении предприятием «Верста» сервисных программ, учитывающих скидки на топливо и обслуживание большегрузов. Одним из элементов этого сервиса является расчет маршрута минимальной стоимости между заданными пунктами, с указанием мест и объема заправок автомобиля. В статье рассмотрено две постановки, для заданного маршрута и общая задача выбора оптимального маршрута.

Рассмотрим сначала постановку задачи, в которой маршрут поездки фиксирован. Автомобиль едет из пункта А в пункт В по заранее определенному маршруту. Вдоль дороги расположены заправки, причем расположение может быть неравномерным. Известна емкость бака автомобиля и цена горючего на каждой заправке с учетом скидок. Необходимо определить на какой заправке сколько литров топлива заливать в бак, чтобы на пути из А в В суммарная стоимость затрат на топливо была минимальной.

Число заправок обозначим через n . Путь из А в В будем задавать отрезком $[0, s]$, а расположение заправки i координатой $a_i \in [0, s]$, $i = 1, 2, \dots, n$. Известны емкость бака v , расход топлива на километр пути g , цена топлива на каждой заправке p_i . Требуется определить объемы покупки топлива x_i на заправках.

Утверждение 1. Пусть i_0 номер заправки, на которой цена на топливо минимальна. В оптимальном решении автомобиль должен подъезжать к i_0 с пустым баком и заправляться полностью, то есть $x_{i_0} = \min\{v, (s - a_{i_0}) \cdot g\}$.

Таким образом, задача декомпозируется на две подзадачи. Первая подзадача на отрезке $[0, a_{i_0}]$ для множества заправок $\{1, 2, \dots, i_0 - 1\}$ аналогична исходной. Вторая возникает при $v < (s - a_{i_0}) \cdot g$, и решается на отрезке $[a_j, s]$, где j последняя по ходу движения заправка, для которой $a_j \in [a_{i_0}, a_{i_0} + v/g]$. Причем при подъезде к j бак будет заполнен в объеме $v - (a_j - a_{i_0}) \cdot g$ и этого объема не хватает, чтобы доехать до следующей заправки. Далее задачи также распадаются, но общее число подзадач заве-

домо не превосходит n . Следовательно, алгоритм имеет линейную трудоемкость от количества заправок на маршруте.

В общей постановке имеется сеть дорог и множество заправок на этой сети. Необходимо найти маршрут движения между заданными пунктами, определить места и объемы заправок. При ограничении на объем бака такая задача, вероятнее всего, является NP-трудной [2]. В настоящее время нами рассмотрена постановка, в которой между А и В существует две основные параллельные дороги, с участками переезда с одной дороги на другую. Транспортная сеть такого вида характерна, например, для южной Сибири. Помимо основной федеральной магистрали с дорогами заправками и сбором на большегрузные автомобили, имеется дублирующая трасса на которой передвижение дешевле. Фактически необходимо определить, где воспользоваться основной трассой, а где дублиром с учетом всех имеющихся затрат.

Для сети такой конфигурации построим алгоритм псевдополиномиальной трудоемкости [1; 2]. Под узлами будем понимать точки ветвления дорог и заправки вдоль дорог. Причем в каждый узел входит одна или две дуги. Состоянием (k, w) назовем ситуацию, в котором достигнут узел k с объемом оставшегося в баке горючего w . Через x_k обозначим объем дозаправки в узле k . Если в k нет заправки, то $x_k = 0$. Пусть $\varphi(k, w)$ минимальные затраты на пути из k в В. Никакие затраты до приезда в k не учитываем. Перебираем возможные значения x_k и достижимые из k узлы без дозаправки. Минимальное расстояние l_{kj} до каждого достижимого узла j известно. Соответствующие затраты топлива равны $l_{kj} \cdot g$. Поэтому, если из узла k без дозаправок доехать до узла j , то остаток горючего в баке будет равен $w + x_k - l_{kj} \cdot g$. Таким образом, затраты на участке от k до В через узел j составят $x_k \cdot p_k + \varphi(j, w + x_k - l_{kj} \cdot g)$. Для поиска минимума $\varphi(k, w)$ необходимо перебрать значения x_k от 0 до $v - w$, и для каждого из x_k перебрать достижимые узлы. Множество таких узлов обозначим

$D(w + x_k)$. Если в узле k есть заправка, то получаем следующую формулу

$$\varphi(k, w) = \min_{x_k=0,1,\dots,v-w} \{x_k \cdot p_k + \min_{j \in D(x_k)} \varphi(j, w + x_k - l_{kj} \cdot g)\}.$$

Если в узле k заправки нет, то

$$\varphi(k, w) = \min_{j \in D(x_k)} \varphi(j, w - l_{kj} \cdot g).$$

Перебор состояний (k, w) необходимо проводить в порядке удаления узлов k от конечного пункта В. В сети рассматриваемой конфигурации такой порядок просмотра узлов приводит к оптимальному решению.

Трудоёмкость алгоритма составляет $O(n^2v^2)$ операций. Таким образом, задача с двумя параллельными дорогами и участками перемещения между ними является псевдополиномиально разрешимой.

Обобщить данный результат пока не удастся, так как в произвольной сети порядок перебора вершин по удаленности от конечного пункта не гарантирует построение оптимального решения задачи. Также пока остается открытым вопрос об учете в модели и алгоритме сбора на большегрузные автомобили.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Гимади Э.Х., Глебов Н.И.* Математические модели и методы принятия решений. Новосибирск: НГУ, 2008. 162 с.

[2] *Гэри М., Джонсон Д.* Вычислительные машины и трудно-решаемые задачи. М.: Мир, 1982. 416 с.

[3] *Кристофидес Н.* Теория графов. Алгоритмический подход. М.: Мир, 1978. 432 с.

Цаплина Анастасия Сергеевна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
I курс магистратуры, ИМИТ,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, as.tsaplina@gmail.com

ЗАДАЧА МИНИМИЗАЦИИ СРЕДНЕВЗВЕШЕННОГО ВРЕМЕНИ ЗАВЕРШЕНИЯ РАБОТ ПРИ НАЛИЧИИ ПРЕРЫВАНИЙ

К. А. Черных

*Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук,
старший научный сотрудник В. В. Сервах*

Аннотация. Рассматривается задача минимизации средневзвешенного времени завершения выполнения работ на одном или нескольких идентичных станках. Для каждой работы известен срок поступления работ в систему и длительность выполнения. Возможны прерывания. В работе излагаются важные свойства задачи, в частности доказана лемма об «окаймлении» при прерывании работы.

Ключевые слова: параллельные машины, NP-трудная задача, динамическое программирование.

На m идентичных машинах требуется выполнить n работ. Заданы моменты поступления работ в систему r_i , длительности их выполнения p_i и веса ω_i , $i=1,2,\dots,n$. Каждая машина в каждый момент времени может выполнять только одну работу. Возможны прерывания работ. Требуется найти расписание выполнения работ, при котором взвешенная сумма моментов их завершения $\sum \omega_i C_i$ будет наименьшей.

Данная задача в принятой в теории расписаний классификации обозначается как $P | r_i; pmtn | \sum \omega_i C_i$. Она является NP-трудной в сильном смысле [1]. Для задачи с одним станком и равными весами $1 | r_i; pmtn | \sum C_i$ существует полиномиальный алгоритм [2], но для произвольных весов задача $1 | r_i; pmtn | \sum \omega_i C_i$ остается NP-трудной в сильном смысле [3]. Сложность задачи с одинаковыми длительностями $1 | r_i; p_i = p; pmtn | \sum \omega_i C_i$ неизвестна. Ниже описываются свойства этой задачи.

При возможности прерываний оптимальному набору моментов завершения работ могут соответствовать различные расписания. Чтобы избежать такой множественности рассматриваются

оптимальные расписания с фиксированными свойствами. Эти свойства не являются взаимоисключающимися, то есть **существует** оптимальное расписание, обладающее всеми перечисленными ниже свойствами.

Свойство 1. Существует оптимальное расписание, в котором все моменты прерываний работ принадлежат множеству $\{r_1, r_2, \dots, r_n\}$. Если в таком расписании имеется прерывание в момент r_i , то в этот момент начинается выполнение работа i . Соответственно, число прерываний не может быть больше чем $n - 1$.

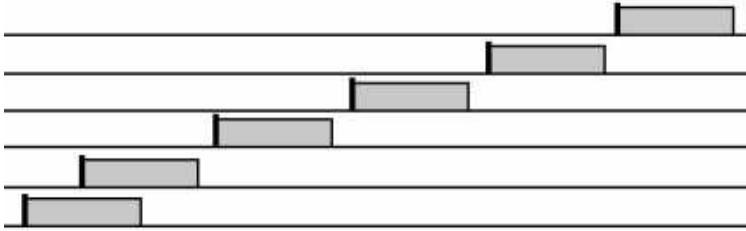
Свойство 4. Если $\omega_i < \omega_j$ и $r_i \geq r_j$, то в оптимальном расписании работа j целиком выполняется раньше работы i .

Работы с таким условием не конкурируют между собой. Работы i и j , для которых $\omega_i < \omega_j$ и $r_i < r_j$, будем называть *конкурентными*.

Лемма (об окаймлении). Пусть $\omega_i < \omega_j$ и $r_i < r_j$. Если существует оптимальное расписание, в котором работа j прерывает работу i , то существует оптимальное расписание, в котором работа j целиком завершится до возобновления работы i . Эта лемма позволяет сократить число подозрительных на оптимальность расписаний. Ниже приведен полиномиально разрешимый случай рассматриваемой задачи.

Рассмотрим подзадачу, в которой все работы конкурентны, интервалы $(r_i, r_i + p)$ попарно не пересекаются, кроме двух работ с наименьшими весами. Переупорядочим работы по неубыванию весов. Тогда имеем $\omega_1 < \omega_2 < \dots < \omega_n$ и $r_1 < r_2 < \dots < r_n$. По условию $r_2 - r_1 < p$ и $r_{i+1} - r_i > p, i = 2, 3, \dots, n - 1$. Входные данные для такой подзадачи изображены на рисунке.

Обозначим через $\varepsilon = p - (r_2 - r_1)$ длину фрагмента первой работы, не завершённой к моменту r_2 , а через $\alpha_i = r_{i+1} - r_i - p$ — длину пустого временного интервала между работами i и $i + 1$. Без ограничения общности будем считать, что $\varepsilon > \sum_{i=1}^n \alpha_i$. Тогда все интервалы в конечном расписании будут заполнены.



Вход подзадачи

В момент r_2 возникает альтернатива между конкурентными работами 2 и 1. В соответствии с леммой одна из этих работ до момента r_3 должна завершиться. Другие работы до момента r_3 выполняться не могут. Ветвим задачу на две в зависимости от того, какой работе отдаем приоритет.

При ветвлении получается две задачи аналогичные исходной. В момент r_3 возникает проблема выбора между 2 и 3 или между 1 и 3 работами. Каждую из новых подзадач вновь ветвим. И так далее. Альтернатива возникает в каждый их моментов r_i и заключается в выборе между работой i длительностью p и остатком некоторой предшествующей работы длительностью $\varepsilon - \alpha_1 - \alpha_2 - \dots - \alpha_{i-1}$.

Обозначим через $\varphi(i, j)$ оптимальное значение взвешенной суммы работ, завершившихся после момента r_i , если в этот момент из ранее начатых не завершена работа $j \in \{1, 2, \dots, i-1\}$. Напомним, что такая работа только одна. Нам нужно найти $\varphi(2, 1)$. Начинаем с конца с момента r_n . Для всех $j \in \{1, 2, \dots, n-1\}$

$$\varphi(n, j) = \min \begin{cases} (r_n + p) \cdot \omega_n + (r_n + p + \varepsilon - \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i) \cdot \omega_j, \\ (r_n + \varepsilon - \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i) \cdot \omega_j + (r_n + p + \varepsilon - \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i) \cdot \omega_n, \end{cases}$$

Далее для всех $i = n-1, n-2, \dots, 2$ и всех $j = 1, 2, \dots, i-1$

$$\varphi(i, j) = \min \begin{cases} (r_i + p) \cdot \omega_i + \omega(i+1, j), \\ (r_i + \varepsilon - \sum_{k=1}^{i-1} \alpha_k) \cdot \omega_j + \omega(i+1, i). \end{cases}$$

Трудоёмкость реализации алгоритма составляет $O(n^2)$ операций.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Leung J.Y.-T., Young G.H.* Preemptive scheduling to minimize mean weighted flow time // Т. Inform. Process. Lett. 1990. 34(1). P. 47–50.

[2] *Baker K.R.* Introduction to Sequencing and Scheduling // John Wiley and Sons, New York, 1974.

[3] *Labetoulle J., Lawler E.L., Lenstra J.K., Rinnooy Kan A.H.G.* Preemptive scheduling of uniform machines subject to release dates // In Progress in combinatorial optimization (Waterloo, Ont., 1982). P. 245–261. Academic Press, Toronto, Ont. 1984.

Черных Ксения Андреевна,
Омский филиал Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН,
II год аспирантуры,
644099, Омск, ул. Певцова, 13, (3812)236567, ksech@bk.ru

Секция

ПРИКЛАДНАЯ ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МУЛЬТИСЛОЙНЫХ СТРУКТУР, ОПИСЫВАЕМЫХ АНИЗОТРОПНОЙ МОДЕЛЬЮ ГЕЙЗЕНБЕРГА

В. О. Борзилов

Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, профессор П. В. Прудников

Аннотация. В данной работе проводились расчеты намагниченности мультислойной магнитной структуры, определялись критические температуры, исследовались эффекты гистерезиса.

Ключевые слова: мультислойная магнитная структура, эффекты гистерезиса, кумулянт Биндера, одноионная анизотропия, модель Гейзенберга.

Исследование мультислойных структур на основе сверхтонких магнитных пленок микроскопического масштаба имеет существенное прикладное значение в области спинотроники. Структура антиферромагнитно связанных магнитных слоев получила название «синтетические антиферромагнетики» [1]. В настоящее время синтетические антиферромагнетики используются при конструировании в магнитных запоминающих устройствах с произвольным доступом (MRAM) с целью уменьшения плотности тока и промежутка времени, необходимого для переключения магнитного состояния [2].

Моделируемая мультислойная система состоит из двух ферромагнитных слоев толщины N_1 и N_2 , разделенных немагнитной прослойкой. Толщина немагнитной прослойки подобрана таким

образом, чтобы косвенное обменное взаимодействие РККИ носило эффективный антиферромагнитный характер. В данной работе было исследовано влияние одноионной анизотропии на форму петли гистерезиса как для случая симметричной магнитной структуры с $N_1 = N_2 = 3, 5, 6, 7, 9$ ML, так и для несимметричной структуры $N_1 = 2$ ML, $N_2 = 6$ ML. Для моделирования свойств мультислойной структуры применялась анизотропная модель Гейзенберга, описываемая гамильтонианом [3]

$$\begin{aligned}
 H = & -J_1 \sum_{i,j} [(S_i^x S_j^x - S_i^y S_j^y) + (1 - \Delta(N)) S_i^z S_j^z] - \\
 & -J_2 \sum_{\alpha \in N_1, \beta \in N_2} [(S_\alpha^x S_\beta^x + S_\alpha^y S_\beta^y) - (1 - \Delta(N)) S_\alpha^z S_\beta^z] + \\
 & + A \sum_{i \in N_1, N_2} (S_i^z)^2 + \vec{h} \sum_{i \in N_1, N_2} \vec{S}_i
 \end{aligned} \quad (1)$$

Намагниченность всей системы

$$M(T) = \left\langle \frac{1}{lNL^2} \sum_{n=0}^l \sum_{k=0}^N \sum_{i=0}^L \sum_{j=0}^L S_{nkij}^x{}^2 - S_{nkij}^y{}^2 + S_{nkij}^z{}^2 \right\rangle^{1/2} \quad (2)$$

Кумулянт Биндера 4-го порядка

$$U_4(T) = 1/2 \left\langle 3 - \frac{\langle m(T)^4 \rangle}{\langle m(T)^2 \rangle^2} \right\rangle, \quad (3)$$

где \vec{S}_i – трехмерный спин в i -ом узле решетки, J_1 – константа обменного взаимодействия, J_2 – константа РККИ, $\Delta(N)$ – анизотропия системы типа легкая плоскость, A – константа, характеризующая одноионную анизотропию, создаваемую подложкой, \vec{h} – внешнее магнитное поле направленное вдоль оси Z , l – количество пленок, N – количество моноатомных слоев в пленке, $L \times L$ – число спинов в каждом моноатомном слое.

Методом кумулянтов Биндера 4-го порядка (см. рис. 1) был определен набор критических температур приведенный в табл. 1 в случае одноионной анизотропии и табл. 2 для случая анизотропии легкая плоскость. Представленные в данной работе результаты исследования указывают на важность учета эффектов анизотропии и

межслоевого взаимодействия при моделировании процессов быстрого переключения магнитного состояния в мультислойных магнитных структурах. Наличие промежуточных стадий при переключении оказывается ключевым моментом при проектировании устройств магнитной памяти.

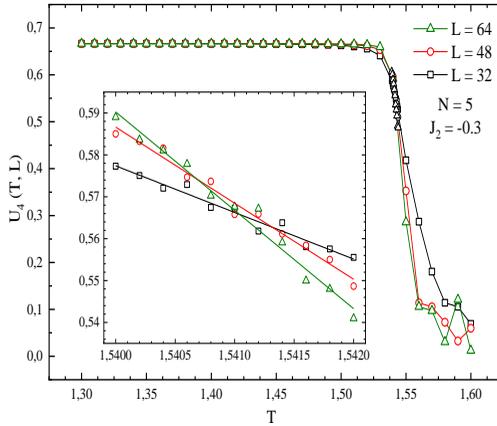


Рис. 1. Температурная зависимость кумулянта Биндера $U_4(T, L)$ для различных размеров системы $L = 32, 48, 64$ с толщиной пленки $N = 5$

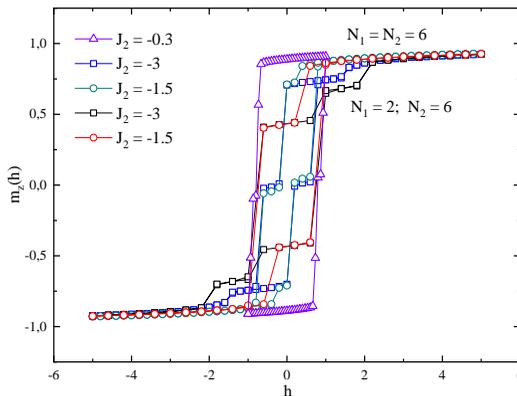


Рис. 2. Влияние изменения толщины ферромагнитной пленки на гистерезисные эффекты при $N_1 = N_2 = 6$ и $N_1 = 2, N_2 = 6$

Таблица 1

**Значения критических температур полученные
при некоторых значениях одноионной анизотропии**

A	-1,0	-0,1	0,1	1,0	2,0
T_c	1,356(2)	1,356(2)	1,273(2)	1,551(5)	1,765(5)

Таблица 2

**Значения критических температур в случае анизотропии
всей системы для различных значений обменного взаимодействия
и толщин пленок**

$\Delta(N)$	$N = 5$	$N = 7$	$N = 9$
$J_2 = -0,3$	1,541	1,585	1,609
$J_2 = -0,6$	1,562		
$J_2 = -1,0$	1,590		
$J_2 = -1,5$	1,623		
$J_2 = -3,0$	1,710		

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты № 17-02-00279, № 18-42-550003) и грантом МД-6868.2018.2 Президента РФ. Для выполнения расчетов были использованы ресурсы вычислительной лаборатории прикладной теоретической физики и параллельных вычислений ОмГУ и ЦКП «Центр данных ДВО РАН».

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Duine R.A., Lee K.-J., Parkin S.S.P., Stiles M.D.*, Nat. Phys. 14, 217 (2018).
 [2] *Apalkov D., Dieny B., Slaughter J.M.*, Proc. IEEE 104, 1796 (2016).
 [3] *Prudnikov P.V., Prudnikov V.V., Borzilov V.O. et al.*, EPI Web Conf. 185, 11009 (2018).

Борзилов Вадим Олегович,
 Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
 II курс аспирантуры, физический факультет,
 644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, borzilovvo@omsu.ru.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ОДНООСНОГО КИРАЛЬНОГО
ГЕЛИМАГНЕТИКА
С ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ДЗЯЛОШИНСКОГО – МОРИЯ
МЕТОДАМИ МОНТЕ-КАРЛО**

Д. В. Евсин

Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, профессор П. В. Прудников

Аннотация. В данной работе проведено численное моделирование термодинамических свойств одноосного кирального гелимагнетика CrNb_3S_6 методами Монте-Карло. Построена температурная зависимость намагниченности при различных значениях поля. Выявлен пик намагниченности, который соответствует состоянию солитонной решетки.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, методы Монте-Карло, киральность, гелимагнетик, взаимодействие Дзялошинского – Мория.

Экспериментальное наблюдение необычных магнитных топологических состояний – магнитных скирмионов, в киральных магнетиках вызвало повышенный интерес к ним. Такое внимание мотивировано надеждой использовать их уникальные свойства, такие как высокая подвижность в электрическом токе, в новых спинтронных устройствах и их топологически обусловленные характеристики, интересные для фундаментальной физики конденсированных сред [1]. В киральных магнетиках магнитные скирмионы естественным образом стабилизируются слабым взаимодействием Дзялошинского – Мория и скирмионы могут существовать только внутри узкой температурной области, которая препятствует их применению. Таким образом, поиск возможности стабилизации скирмиона в обычных магнитных материалах при комнатной температуре является актуальной научной задачей.

В магнитных кристаллах, принадлежащих к киральной пространственной группе, например, MnSi , $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, $\text{Cr}_{1/3}\text{NbS}_3$, CsCuCl_3 , и молекулярные магниты, орбитали движения локализованных электронов со спиновыми магнитными моментами проходят геликоидальным образом в киральной структуре атомов и

связывает соседние спины посредством релятивистского спин-орбитального взаимодействия, названного взаимодействием Дзялошинского – Морья (DMI)[2].

В данной работе проводилось моделирование одноосного кирального гелимагнетика CrNb_3S_6 методами Монте-Карло, в которых выполняется статистическое моделирование на ЭВМ систем со многими степенями свободы. В их основе лежит использование случайных чисел для машинной имитации распределений вероятности [3].

Гамильтониан одноосного кирального гелимагнетика [4]:

$$H = -J_{\perp} \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \cdot (\vec{S}_{i+x} + \vec{S}_{i+y}) - J_{\parallel} \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+z} - D \sum_{i=1}^N \left[\vec{S}_{i+x} \times \vec{S}_{i+z} \right] \vec{n}_z - H^{\perp} \vec{S}_i \cdot \vec{n}_x,$$

где каждый узел на кубической решетке задается безразмерным вектором $i = i_x \hat{x} + i_y \hat{y} + i_{\parallel} \hat{z}$, где $i_x, i_y, i_{\parallel} \in \mathbb{Z}$. Базисные векторы $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ соответственно обозначают единичные векторы в направлениях x, y и z . Кубическая решетка рассматривается, как набор слоев, каждый из которых помечен i_{\parallel} . Символ $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ представляет собой классический Гейзенберговский спин с величиной S в точке i . Через $J^{\perp} > 0$ обозначается ферромагнитное обменное взаимодействие между соседними спинами внутри одного слоя, $J_{\parallel} > 0$ ферромагнитное обменное взаимодействие между парой соседних спинов в соседних слоях, а D величина DMI. Верхние индексы \parallel и \perp означают параллельные и перпендикулярные направления относительно оси z . $J_{\parallel} = 16 \text{ K}$; $J_{\perp} = 154 \text{ K}$; $D = 2.9 \text{ K}$ [5].

Пик теплоемкости при $T = 1.4$ в отсутствие внешнего поля говорит о возникновении гелимагнитного упорядочения (рис. 2).



Рис. 1. Модель одноосного гелимагнетика

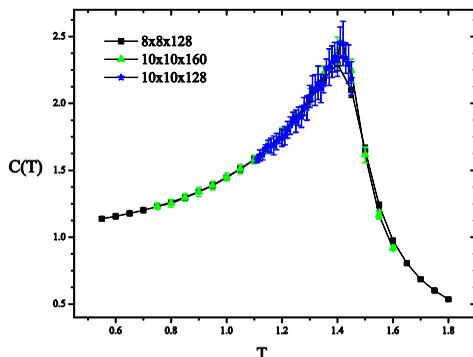


Рис. 2. Температурная зависимость теплоемкости одноосного кирального гелимагнетика

Наличие пиков зависимости намагниченности в постоянном поле может быть связано с возникновением в системе состояния солитонной решетки (рис. 3).

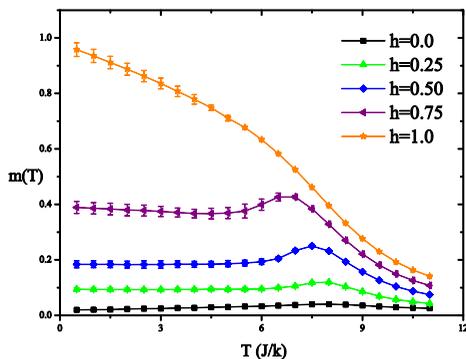


Рис. 3. Температурная зависимость намагниченности гелимагнетика для различных значений поля h

Проведено численное моделирование термодинамических свойств одноосного кирального гелимагнетика CrNb_3S_6 методами Монте-Карло. Построена зависимость намагниченности от температуры, при внешнем магнитном поле $h = 0.75$ и $T = 1.4$ (рис. 3). Выявлен пик намагниченности, который соответствует состоянию солитонной решетки.

В дальнейшем планируется исследование фазового перехода, сопровождающегося плавлением солитонной решетки при изменении внешнего магнитного поля и температуры.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты № 17-02-00279, № 18-42-550003) и грантом МД-6868.2018.2 Президента РФ. Для выполнения расчетов были использованы ресурсы вычислительной лаборатории прикладной теоретической физики и параллельных вычислений ОмГУ и ЦКП «Центр данных ДВО РАН».

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Rossler U.K., Bogdanov N., Pleiderer C.* Anisotropic Superexchange Interaction and Weak Ferromagnetism // *Nature*. 2006. Vol. 442. P. 797–801.

[2] *Togawa Y., Kishine J., Nosov P.A., Koyama T., Paterson G.W., McVitie S., Kousaka Y., Akimitsu J., Ogata M., Ovchinnikov A.S.* Anomalous Temperature Behavior of the Chiral Spin Helix in CrNb_3S_6 Thin Lamellae // *Phys. Rev. Lett.* 2019. Vol. 122. 017204.

[3] *Прудников В.В., Вакилов А.Н., Прудников П.В.* Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования: учебное пособие. Омск : Изд-во Ом. гос. ун-та, 2007. 288 с.

[4] *Shinozaki M., Hoshino S., Masaki Y., Kishine J-I., Kato Y.* Finite-Temperature Properties of Three-Dimensional Chiral Helimagnets // *J. Phys.Soc. Jpn.* 2016. Vol. 85. 074710.

[5] *Miyadai T., Kikuchi K., Kondo H., Sakka S., Arai M., Ishikawa Y.* Magnetic Properties of CrNbS // *J. Phys. Soc. Jpn.* 1983. Vol. 52. P. 1394–1401.

Евсин Дмитрий Владимирович,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
I курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, EvsinDV@stud.omsu.ru

ВЛИЯНИЕ РАЗМЫТИЯ МЕЖФАЗНЫХ ГРАНИЦ РАЗДЕЛА НА МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕ ТРЕХПЛЕНОЧНЫХ МАГНИТНЫХ СТРУКТУР

А. А. Самошилова

Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, профессор В. В. Прудников

Аннотация. Осуществлено численное исследование влияния размытия межфазных границ раздела магнитной и немагнитной пленок на величину коэффициента магнитосопротивления. Для трехпленочных магнитных наноструктур $\text{Co}/\text{Cu}(100)/\text{Co}$ и $\text{Pt}/\text{Co}/\text{Cu}(100)/\text{Co}/\text{Pt}$ с толщиной пленок кобальта $N = 11$ монослоев проведен расчет температурной зависимости магнитосопротивления. Выявлено заметное влияние размытия границ раздела на величину магнитосопротивления.

Ключевые слова: мультислойные магнитные структуры, коэффициент магнитосопротивления.

Эффект гигантского магнитосопротивления наблюдается в трехпленочных наноструктурах, в которых ферромагнитные пленки на основе переходных металлов (Fe, Co, Ni и др.) разделены немагнитной пленкой (Cr, Cu, Ir) с толщиной в несколько нанометров [1]. Значения магнитосопротивления, достигающие более 100 % при низких температурах, обуславливают перспективность таких структур для создания нового поколения магнитных головок и магнитных сенсоров, элементов спиновой электроники и магниторезистивной памяти [2].

В работах [3; 4] была разработана методика определения коэффициента магнитосопротивления с применением метода Монте-Карло и проведен расчет его температурной зависимости для магнитных наноструктур при разных толщинах ферромагнитных пленок. В модельных представлениях методики закладывалось предположение о существовании резких межфазных границ раздела ферромагнитной и немагнитной пленок. Известно, что качество межфазных границ раздела ферромагнитной и немагнитной пленок существенно влияет на величину магнитосопротивления структуры, приводя к существенному понижению ее магнитосопротивления в случае размытых (диффузных) межфазных границ

раздела. Качество межфазных границ раздела в меньшей степени зависит от термодинамических условий, в которых находится магнитная структура, а главным образом определяется применяемой технологией напыления пленок. В данной работе ставится задача исследовать методами Монте-Карло влияние размытия межфазной границы раздела магнитной и немагнитной пленок в наноструктурах Co/Cu(100)/Co и Pt/Co/Cu(100)/Co/Pt с различным типом магнитной анизотропии на величину коэффициента магнитосопротивления.

Магнитные свойства ультратонких пленок на основе Fe, Co и Ni на немагнитных металлических подложках можно описывать с использованием анизотропной модели Гейзенберга [5; 6]. Гамильтониан модели в случае вектора намагниченности, лежащего в плоскости пленки, задается для структуры Co/Cu(100)/Co в виде:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \{ (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + (1 - \Delta_1(N)) S_i^z S_j^z \}, \quad (1)$$

а в случае вектора намагниченности, ориентированного перпендикулярно плоскости пленки, для структуры Pt/Co/Cu(100)/Co/Pt характеризуется выражением:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \{ (1 - \Delta_2(N)) (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z \}. \quad (2)$$

Здесь $S_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ – трехмерный единичный вектор спина, зафиксированный в i -ом узле ГЦК – решетки пленки кобальта, $J > 0$ – обменный интеграл, характеризующий обменное взаимодействие ближайших спинов пленке, $\Delta_{1,2}(N)$ – параметры, учитывающие эффективное влияние анизотропии, создаваемой кристаллическим полем подложки, на магнитные свойства пленки в зависимости от ее толщины N в единицах монослоев.

Рассматривались мультислойные наноструктуры, состоящие из двух ферромагнитных пленок, разделенных пленкой немагнитного металла (рис. 1), обменный интеграл $J_1 > 0$ определяет взаимодействие соседних спинов внутри отдельных ферромагнитных пленок, а обменный интеграл $J_2 < 0$ – межслоевое взаимодействие между спинами N_1 монослоя первой пленки и спинами N_2 монослоя второй пленки кобальта. Моделирование осуществлялось для пленок кобальта с размерами $L \times L \times N$ и наложенными периодическими граничными условиями в плоскости пленки. Значения об-

менных интегралов выбирались как $J_1/k_B T = 1$, а $J_2/J_1 = -0,3$. Температура T системы измеряется при этом в единицах обменного интеграла J_1/k_B . Шкала температур задавалась через величину интеграла обменного взаимодействия для кобальта $J_1 = 4.4 \cdot 10^{-14}$ эрг.

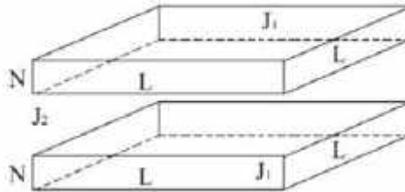


Рис. 1. Модель мультислойной структуры, состоящей из двух ферромагнитных пленок, разделенных пленкой немагнитного металла.
 N, L – линейные размеры пленок

Для магнитных наноструктур нами был рассчитан коэффициент магнитосопротивления, вводимый соотношением:

$$\delta = \frac{R_{AP} - R_P}{R_P}, \quad (3)$$

где R_{AP} – сопротивление образца при антипараллельной ориентации намагниченностей ближайших ферромагнитных слоев, а R_P – сопротивление образца при параллельной ориентации намагниченностей слоев. Для трехпленочных структур с антиферромагнитной обменной связью ферромагнитных пленок R_{AP} характеризует сопротивление образца при отсутствии магнитного поля, а R_P – во внешнем магнитном поле, большем величины поля насыщения. Расчет коэффициента магнитосопротивления проводился для ТПП геометрии (ток перпендикулярен плоскости), когда электрический ток распространяется перпендикулярно слоям структуры.

На первом этапе исследований проводился расчет магнитосопротивления δ для структур Pt/Co/Cu(100)/Co/Pt и Co/Cu(100)/Co с толщинами пленок Co $N=11$ и 13 МС при задании резких межфазных границ пленок кобальта с пленкой меди. Результаты расчета для структур с линейными размерами $L = 64$ представлены на рис. 2 (кривые 1 и 2). На следующем этапе для структур с толщиной пленок кобальта $N=11$ МС вводилась модель размытых межфазных границ.

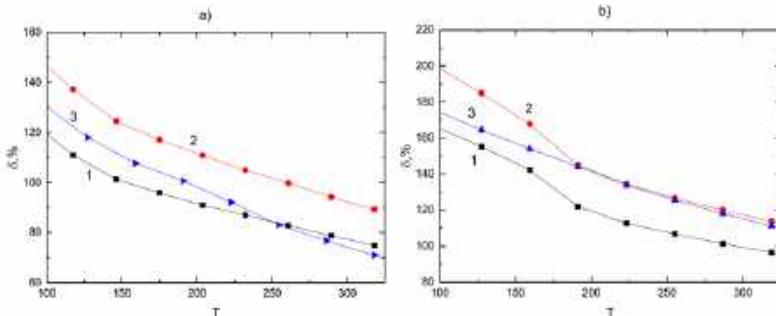


Рис. 2. Температурная зависимость магнитосопротивления для структур $\text{Co}/\text{Cu}(100)/\text{Co}$ (a) и $\text{Pt}/\text{Co}/\text{Cu}(100)/\text{Co}/\text{Pt}$ (b) с толщинами пленок Co $N = 11$ (кривая 1) и 13 МС (кривая 2) при задании резких межфазных границ и структуры с $N = 11$ МС (кривая 3) при задании размытых межфазных границ

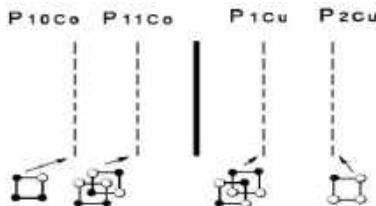


Рис. 3. Модель размытой межфазной границы для структуры $\text{Co}/\text{Cu}(100)/\text{Co}$ между пленкой кобальта (слева) и пленкой меди (справа).

Зачерненные кружки соответствуют ионам кобальта, пустые кружки – ионам меди

На рис. 3 представлена схема расположения ионных плоскостей для пленок кобальта и меди, параллельных межфазной границе раздела с ориентацией поверхностной грани меди (100). Эффекты диффузного размытия межфазной границы раздела для ГЦК решеток пленок кобальта и меди мы представили как частичное взаимное замещение магнитными ионами кобальта из ионных плоскостей с $N_{\text{Co}} = 10$ и 11 немагнитных ионов меди в ионных плоскостях с $N_{\text{Cu}} = 1, 2$ и наоборот. В результате, в межфазной области раздела вводится разбавленная магнитная среда с замороженными дефектами структуры, случайное положение которых не меняется в течение времени измерения характеристик структуры. Для описания распределения магнитных ионов кобальта по двум приповерхностным ионным плоскостям пленки кобальта и двум приповерхностным плоскостям пленки меди вводятся величины

спиновых концентраций $p_{10\text{Co}} = 0,75$ и $p_{11\text{Co}} = 0,5$ для ионных плоскостей пленки кобальта с $N_{\text{Co}}=10, 11$ и $p_{1\text{Cu}} = 0,5$ $p_{2\text{Cu}} = 0,25$ для ионных плоскостей пленки меди с $N_{\text{Cu}}=1, 2$, соответствующих представленным на рис. 3 изображениям.

На основе данной модели был проведен расчет температурной зависимости магнитосопротивления $\delta(T)$ при условии пренебрежения влиянием температуры на характер размытия межфазной границы. Для моделирования поведения структуры был применен алгоритм Метрополиса. На релаксацию системы в состояние равновесия отводилось 10 000 шагов Монте-Карло на спин (MCS/s), еще 10 000 MCS/s применялось для расчета коэффициента магнитосопротивления при фиксированной температуре. Результаты расчета магнитосопротивления для каждой конфигурации дефектов структуры в межфазной области раздела усреднялись по 10 прогонам и дополнительно проводилось усреднение по 10 различным реализациям распределения дефектов структуры в межфазной области раздела.

Расчитанная температурная зависимость магнитосопротивления $\delta(T)$ структур с толщиной пленок кобальта $N=11$ МС и размытыми межфазными границами раздела представлена на рис. 2 (кривые 3). Сопоставление с результатами расчета магнитосопротивления $\delta(T)$ структур с резкими межфазными границами раздела при $N=11$ МС показывает, что кривые температурной зависимости магнитосопротивления $\delta(T)$ для этих двух случаев пересекаются для структуры $\text{Co/Cu}(100)/\text{Co}$ при температуре $T^* \approx 250$ К. При температурах $T < T^*$ магнитосопротивление в структуре с размытыми межфазными границами раздела оказывается выше магнитосопротивления структуры с резкими межфазными границами, приближаясь к магнитосопротивлению структуры с толщиной пленок кобальта $N = 13$ МС, в то время как для более высоких температур $T > T^*$ магнитосопротивление структуры с размытыми межфазными границами уменьшается с ростом температуры по сравнению с магнитосопротивлением структуры с резкими межфазными границами. Для структуры $\text{Pt/Co/Cu}(100)/\text{Co/Pt}$ размытие межфазной границы приводит к увеличению магнитосопротивления и $\delta(T)$ меняется от значений, характерных для структуры с резкими межфазными границами при $N \approx 12$ МС в области низких темпера-

тур ($T = 100\text{--}150\text{ K}$), к значениям для структуры с $N \approx 13$ МС в области температур близких к комнатным ($T = 200\text{--}325\text{ K}$).

Таким образом, в данной работе выявлено заметное влияние размытия границ раздела на величину магнитосопротивления, которое зависит от типа магнитной анизотропии в структуре.

Исследования поддержаны грантом РФФИ № 17-02-00279.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Fert A.* Происхождение, развитие и перспективы спинтроники // УФН. 2008. Т. 178. С. 1336–1348.

[2] *Prinz G.A.* Magnetoelectronics applications // J. Magn. Magn. Mater. 1999. Vol. 200. P. 57–68.

[3] *Прудников В.В., Прудников П.В., Романовский Д.Е.* Моделирование методами Монте-Карло мультислойных магнитных структур и расчет коэффициента магнитосопротивления // Письма в ЖЭТФ. 2015. Т. 102. С. 759–765.

[4] *Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Romanovskiy D.E.* Monte Carlo calculations of the magnetoresistance in magnetic multilayer structures with giant magnetoresistance effects // J. Phys. D: Appl. Phys. 2016. Vol. 49. 235002.

[5] *Прудников П.В., Прудников В.В., Медведева М.А.* Размерные эффекты в ультратонких магнитных пленках // Письма в ЖЭТФ. 2014. Т. 100. С. 501–505.

[6] *Prudnikov P.V., Prudnikov V.V., Menshikova M.A., Piskunova N.I.* Dimensionality crossover in critical behaviour of ultrathin ferromagnetic films // J. Magn. Magn. Mater. 2015. Vol. 387. P. 77–82.

Самошилова Анна Андреевна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
I курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, samoshilovaaa@stud.omsu.ru

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СПИНОВЫХ СИСТЕМ ПАРАЛЛЕЛЬНЫМ МЕТОДОМ ВАНГА – ЛАНДАУ

К. Ю. Кайданович

Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, профессор П. В. Прудников

Аннотация. В данной работе, был применен параллельный метод Ванга – Ландау к исследованию критических свойств трехмерной модели Гейзинберга. Разработан параллельный алгоритм, при помощи которого были получены плотности энергетических состояний для систем с размером $L = 8, 16, 32$ и термодинамические величины, такие как внутренняя энергия, свободная энергия, энтропия и теплоемкость, намагниченность и восприимчивость.

Ключевые слова: алгоритм Ванга – Ландау, термодинамические величины, критические свойства.

В настоящее время существует достаточно много алгоритмов для исследования критических свойств спиновых систем. К ним можно отнести многосеточные алгоритмы, оверрелаксационные, алгоритмы, основанные на идеях ренормализационной группы, кластерные алгоритмы [1]. Также для повышения эффективности используют различные гибридные алгоритмы. В частности, активно используются такие алгоритмы, как алгоритм Метрополиса [2], однокластерный алгоритм Вольфа [3], многокластерный алгоритм Свендсен – Ванга [4].

В приведенных выше алгоритмах реализуется марковский процесс блуждания в конфигурационном пространстве системы. Помимо вышеуказанных, существует метод, позволяющий путем единичного моделирования получить значения термодинамических величин в широком температурном интервале – это алгоритм Ванга – Ландау [5]. За счет того, что в процессе немарковского блуждания по энергетическому спектру системы он не попадает в метастабильное состояние локального энергетического минимума – не возникает проблемы критического замедления. Данный метод позволяет единожды вычислив плотность энергетических состояний системы получить основные термодинамические величины в широком температурном интервале.

Данная работа посвящена вычислению различных термодинамических характеристик, так как внутренняя энергия, свободная энергия, энтропия и теплоемкость, а также намагниченность и восприимчивость системы с помощью алгоритма Ванга – Ландау. Используя данный алгоритм, мы получили равномерное распределение по энергиям и добились плоскости гистограммы посещений энергетических уровней. Подобрав вероятности перехода такими, что посещение всех энергетических состояний стало бы равномерным, мы смогли вычислить ранее известную плотность состояний.

Нами был реализован параллельный метод Ванга – Ландау для применения к исследованию критических свойств спиновых систем. На данном этапе он позволяет использовать до 16 потоков выполнения для разделения и обработки исходного энергетического интервала. Существует возможность масштабирования алгоритма. Моделирование проводилось при следующих параметрах:

1. Уточняющий параметр $f \approx \exp \approx 2.7182818284$.
2. Минимальное значение параметра $f_{min} = 10^{-8}$.
3. Критерий плоскости $flat_{threshold} = 0,8$.
4. Количество параллельных потоков $PP = 1 - 16$.
5. Количество шагов Монте-Карло, на которых выполняется проверка плоскости гистограммы $skip_{msc} = 10^4$.
6. Перекрытие соседних энергетических интервалов $overlap = 0,95$.
7. Размеры исследуемых решеток $L = 8, 16, 32$.
8. Размер общего энергетического интервала $top_b = 2L^D$, где D – размерность системы.

Далее была использована статистическая сумма, так как алгоритм Ванга – Ландау основан на ее представлении в виде разложения по числу уровней с данной энергией E :

$$Z = \sum_E G(E) \exp \left\{ -\frac{E}{k_B T} \right\}. \quad (1)$$

Это позволило получить плотность энергетических состояний, из которых возможно вычислить все температурные зависимости наблюдаемых величин по формулам для статистической суммы и среднего значения наблюдаемой величины [6].

$$Z(T) = \sum_E G(E) \exp \left\{ -\frac{E}{k_B T} \right\} g(E) dE. \quad (2)$$

$$\langle A \rangle_T = \frac{1}{Z(T)} \int \tilde{A}(E) \exp\left\{-\frac{E}{k_B T}\right\} g(E) dE. \quad (3)$$

Внутренняя энергия вычисляется по следующей формуле:

$$U(T) = \frac{\sum_E E G(E) \exp\left\{-\frac{E}{k_B T}\right\}}{\sum_E G(E) \exp\left\{-\frac{E}{k_B T}\right\}} = \langle E \rangle. \quad (4)$$

Теплоемкость:

$$C(T) = \frac{dU(T)}{dT} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}. \quad (5)$$

Свободная энергия:

$$F(T) = -k_B T \ln \sum_E g(E) \exp\left\{-\frac{E}{k_B T}\right\}. \quad (6)$$

Энтропия:

$$S(T) = \frac{U(T) - F(T)}{T}. \quad (7)$$

Данные графики были получены с использованием параллельного алгоритма Ванга – Ландау. Все графики представлены в зависимости от температуры.

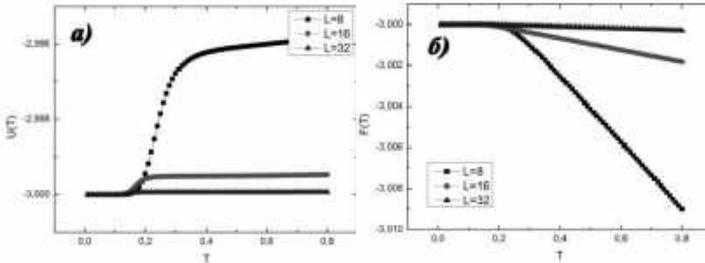


Рис. 1. Графики зависимости

а) внутренней энергии U и б) свободной энергии F от температуры T для $L = 8, 16, 32$

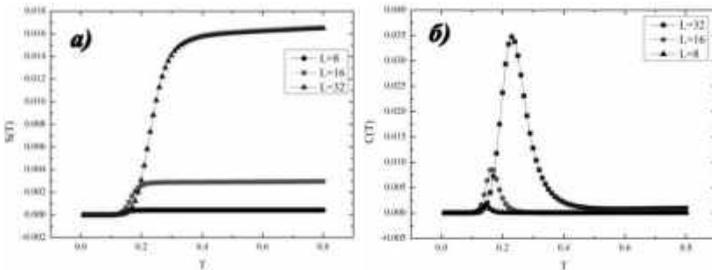


Рис. 2. Графики зависимости

а) энтропии S и б) теплоемкости C от температуры T для $L = 8, 16, 32$

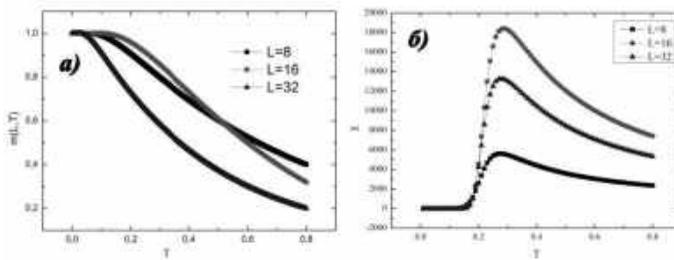


Рис. 3. Графики зависимости
 а) намагниченности M и б) восприимчивости χ от температуры T
 для $L = 8, 16, 32$

ЛИТЕРАТУРА

[1] Камиллов И.К., Муртазаев А.К., Алиев Х.К. Исследование фазовых переходов и критических явлений методами Монте-Карло // УФН. 1999. Т. 169. Вып. 7. С. 773–795.

[2] Прудников В.В., Вакилов А.Н., Прудников П.В. Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования // ФИЗМАТЛИТ. 2009. 224 с.

[3] Wolf U. Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems // Phys. Rev. Lett. 1989. Vol. 62. P. 361.

[4] Edwards R.G., Sokal A.D. Generalization of the Fortuin-Kasteleyn-Swendsen-Wang representation and Monte Carlo algorithm // Phys. Rev. D. 1988. Vol. 38. P. 6.

[5] Wang F., Landau D.P. Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 86. P. 2050.

[6] Vogel T., Li Y.W., Wust T., Landau D.P. Generic, Hierarchical Framework for Massively Parallel Wang-Landau Sampling // Phys. Rev. Letters. 2013. P. 5.

Кайданович Кристина Юозефовна,
 Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
 I курс магистратуры, физический факультет,
 644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, kaidanovich.kristina@mail.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА С ПОДВИЖНЫМИ ДЕФЕКТАМИ МЕТОДОМ КОРОТКОВРЕМЕННОЙ ДИНАМИКИ

Ж. Б. Шарипова

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент А. Н. Вакилов

Аннотация. В данной работе проводилось исследование методом коротковременной динамики систем с замороженными дефектами. Произведена оценка критического индекса z при критической температуре $T_c = 0.539$ методом кумулянта Биндера второго. Исследовано критическое поведение модели.

Ключевые слова: двумерная модель Изинга, метод коротковременной динамики, замороженные дефекты структур, критические индексы.

Исследование неупорядоченной двумерной модели Изинга позволяет получить и оценить значения критических индексов. Определению значений критических индексов оказано немалое внимание, так как они позволяют описывать степенное поведение различных интересующих нас термодинамических и корреляционных функций вблизи критической точки [1; 2].

Данное исследование посвящено вычислению критического индекса z для данной системы, нахождению температуры бесконечной системы, с помощью которой найден критический индекс ν .

Двумерная модель Изинга описывается гамильтонианом вида:

$$H = - \sum_{i,j=j\pm 1} p_i p_j (J_1 s_i s_j - \varphi_1) + \sum_{i,j=j\pm 2} p_i p_j (J_2 s_i s_j - \varphi_2), \quad (1)$$

где J_1, φ_1, J_2 и φ_2 характеризуют обменное и молекулярное взаимодействие для ближайших соседей и следующих за ближайшими соответственно. Данный вид гамильтониана применяется при моделировании процессов адсорбции на поверхности твердых тел [4].

Моделирование проводилось при ряде параметров $T = 0,534; 0,544; 0,539$ с; $p = \theta$; $p_s = 0,8$; MCS = 1000 для решетки

$L = 48$. Вычисляемыми величинами являются временная зависимость $U(T)$, а также средняя намагниченность $\langle M \rangle$ с помощью которых были найдены значения критических индексов и критическая температура бесконечной системы.

Замороженными дефектами называют дефекты, не успевшие прийти в термодинамическое равновесие с решеткой и как бы «замораживаются» в ней в виде определенной конфигурации, которая несет память о способе приготовления системы. Такие дефекты принято называть замороженными.

Временную зависимость кумулянта Биндера 2-го порядка возможно использовать для нахождения критического динамического индекса z , который описан по формуле $U_2 = \frac{M^{(2)}}{M^2} - 1$ со скейлинговой зависимостью $U_2(t, L) \sim t^{d/z}$, где d – размерность системы, M^2 – второй момент намагниченности.

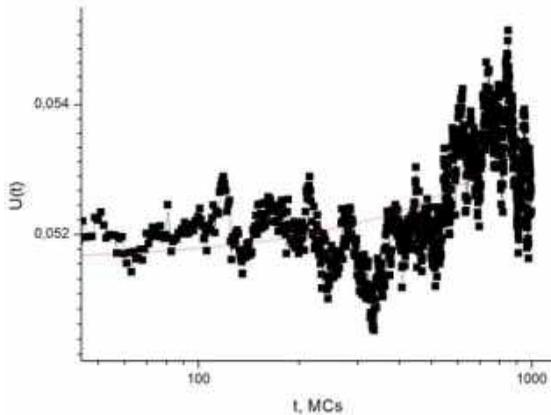


Рис. 1. Временная зависимость кумулянта Биндера 2-го порядка $L = 48$

На рис. 1 изображена временная зависимость кумулянта Биндера 2-го порядка, с помощью которой получено значение критического индекса $z = 1,876$.

Индекс ν был найден путем построения зависимости в двойном логарифмическом масштабе, проведенная линейная аппроксимация, характеризуемая углом наклона равным $\frac{1}{\nu}$, отсюда и найден индекс корреляционной длины $\nu = 0,62(5)$.

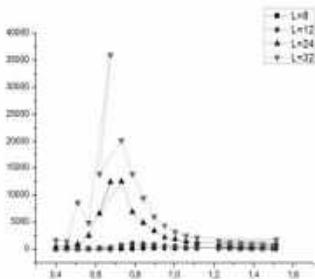


Рис. 2. Температурная зависимость восприимчивости $\chi(T)$ для $L = 12, 24$ и $L = 32$, при $T = 0,4 \dots 1,5$ с шагом $0,055$

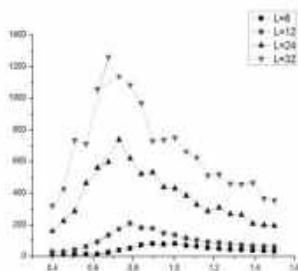


Рис. 3. Температурная зависимость теплоемкости $C(T)$ для $L = 12, 24$ и $L = 32$, при $T = 0,4 \dots 1,5$ с шагом $0,055$

Значения критических индексов и сравнение их с результатами компьютерного моделирования

	<i>метод</i>	<i>v</i>
Heuer, 1993, $p = 0,8$	(MC)	0,68(2)
Calabrese et. Al, 2003, $p = 0,8$	(MC)	0,68(3)
Результаты данной работы $p = 0,8$	(MC)	0,62(5)

Сопоставление результатов данной работы со значениями критических индексов показывает хорошее согласие для двумерных систем с замороженными дефектами, моделируемых методом Монте-Карло.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Вакилов А.Н., Прудников П.В., Прудников В.В. Суперкомпьютерные технологии в образовании и науке. Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та, 2013. С. 246.

[2] Муртазаев А.К. Исследование критических явлений в спиновых решеточных системах методами Монте-Карло // PACS numbers: 05.10.Ln, 05.70.Jk, 75.40.Cx.

[3] Прудников В.В., Дорофеев С.В. Критическое поведение модели Изинга с дальнедействующей корреляцией дефектов: метод коротковременной динамики // Вестник Омского университета. 2006. № 1. С. 27–29.

[4] Прудников В.В., Вакилов А.Н. Компьютерное моделирование процессов адсорбции на поверхности твердых тел и образования поверхностных нано-структур // Вестник Омского университета. 2011. № 2. С. 70–75.

[5] Harris A.B. Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models // J. Phys. C. 1974. Vol. 7. № 6. P. 1671–1692.

[6] Jan N., Moseley L.L., Stauffer D. Dynamic Monte Carlo renormalization group. // J. Stat. Phys. 1983. Vol. 33. № 1. P. 1–11.

[7] Stauffer D. Coarse graining, Monte Carlo renormalization, percolation threshold and critical temperature in the Ising model // nJ. Phys A. 1984. Vol. 17. P. L. 925–928.

Шарипова Жанна Бейсембаевна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
I курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, zhannacooperation@yandex.ru

ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЕТЫ ЭНЕРГИИ АДсорбЦИИ МОНОСЛОЙНОЙ ПЛЕНКИ Fe_xNi_{1-x} В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ОРИЕНТАЦИИ ГРАНИ ПОДЛОЖКИ

А. Б. Аугалиева

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент М. В. Мамонова

Аннотация. В данной работе проводится исследование адсорбции ферромагнитных пленок в рамках вариационного метода функционала спиновой плотности (МФСП) с учетом температурных эффектов и неоднородного распределения намагниченности. Представлены результаты расчета магнитный момент, полная энергия и энергия адсорбции для систем Fe_xNi_{1-x}/Au и Fe_xNi_{1-x}/Ag с параметром покрытия в зависимости от концентрации компонент сплава.

Ключевые слова: энергия адсорбции, метод функционала спиновой плотности, VASP, монослойные пленки.

Ультратонкие ферромагнитные пленки являются объектом интенсивных исследований [1–2], что во многом определяется возможностями их применения. Важное практическое применение находят не только пленки чистых металлов, но и их сплавы, чьи свойства тесно связаны с магнитным состоянием. Сплав Fe и Ni и называют пермаллой. Классический пермаллой – это сплав с концентрацией никеля около 75 %. Такой классический пермаллой обладает самыми высокими магнитными свойствами, которые достигаются за счет специального метода производства.

В настоящей работе была применена методика расчета энергетических характеристик активированной адсорбции ферромагнитных пленок, основанная на использовании метода функционала спиновой плотности и программного комплекса VASP с учетом температурных эффектов [3] на случай двухкомпонентных сплавов на базе представлений о бинарных системах. Исходные параметры для сплава определялись как суперпозиция соответствующих параметров для компонент сплава с коэффициентами пропорциональными концентрации компонент.

Модельная система представляет собой пленку толщиной h адсорбируемую на плоской металлической поверхности с областью перемешивания толщиной l , задаваемых соотношениями:

$$h = pd^a + (1 - p)d^s l = p'd^a + (1 - p')d^s, \quad (1)$$

где d^a, d^s – расстояние между плотноупакованными гранями, p, p' – относительная доля магнитных атомов в пленке и в подложке.

Энергии адсорбции соответствует работа, приходящаяся на один адсорбированный атом, необходимая для удаления адсорбированной частицы с поверхности подложки [3]:

$$E_{ads}(\theta) = (\sigma(\infty) - \sigma)/n_s^a, \quad (2)$$

где межфазная энергия σ и поверхностная концентрация n_s^a являются функцией параметра покрытия θ , определяющим степень заполнения атомами адсорбата поверхности подложки.

Для описания температурной зависимости относительной намагнитченности $m(T)$ применялась двумерная XY-модель. Для температуры Кюри использовалось выражение:

$$T_c(\theta) = \theta[xT_c^{Fe}(\theta = 1) + (1 - x)T_c^{Ni}(\theta = 1)]. \quad (3)$$

На рис. 1 представлены графики зависимости доли адатомов в пленке от параметров покрытия θ при концентрации компонент сплава $X = 0,5; 0,75$ при $T = 300K$ для систем Fe_xNi_{1-x}/Au и Fe_xNi_{1-x}/Ag для различных ориентаций поверхностной грани. Из рис. 1 видно, что для данных систем поведение зависимости носит скачкообразный характер.

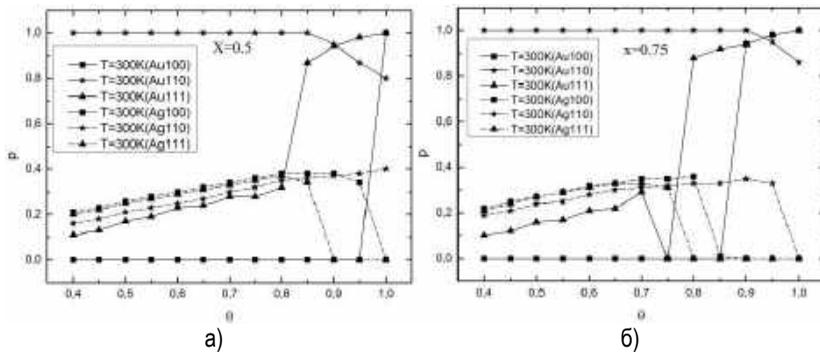


Рис. 1. Зависимость доли адатомов в пленке от параметров покрытия θ при концентрации компонент сплава: а) $X = 0,5$; б) $X = 0,75$

На рис. 2 представлены графики зависимости доли адатомов в пленке от концентрации компонент сплава X при $\theta = 1$.

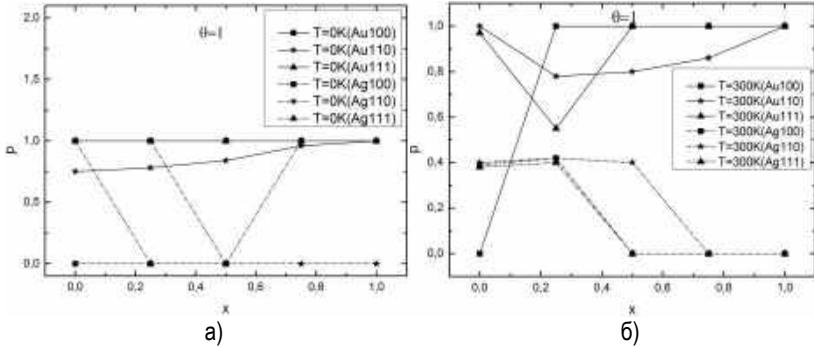


Рис. 2. Зависимость доли адатомов в пленке от концентрации компонент сплава адсорбции от концентрации компонент сплава X при $\theta = 1$
а) $T = 0K$; б) $T = 300K$

Можем заметить, что при $\theta = 1$ пленка сплава образуется на подложке из Au для любой концентрации компонент сплава. При $T = 300K$ для пленки сплава на Ag наблюдается сильное перемешивание и образование «сэндвич» структуры при $x > 0,5$.

Зависимость энергии адсорбции от параметра покрытия θ представлены на рис. 3. Энергия адсорбции уменьшается с ростом θ . Энергия адсорбции атомов сплава на подложке Au больше, чем на подложке Ag для соответствующих граней.

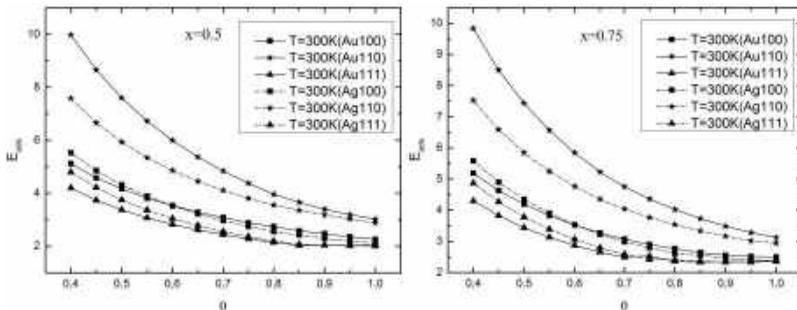


Рис. 3. Зависимость энергии адсорбции от параметра покрытия θ при концентрации компонент сплава а) $X = 0,5$; б) $X = 0,75$ $T = 300K$

На рис. 4 представлено сравнение значений энергии адсорбции в зависимости от концентрации компонент сплава рассчитанных при $\theta = 1$ $T = 0K$ в рамках вариационного и первопринципного (VASP) подходов. Наблюдается качественное согласие результатов и видно, что энергия адсорбции увеличивается с ростом концентрации железа в сплаве.

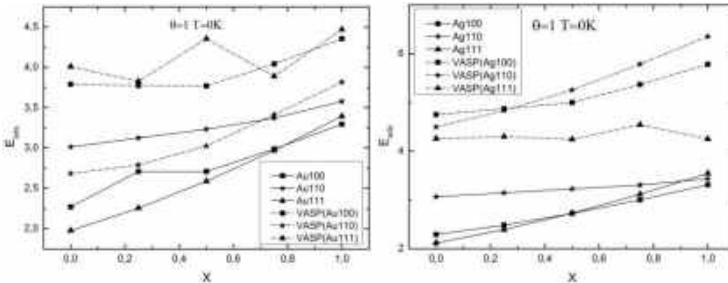


Рис. 4. Результаты расчетов энергии адсорбции разными методами

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Pepperhoff W.* Acet M. Constitution and Magnetism of Iron and Its Alloys. Springer: Berlin, 2010.

[2] *Vaz C.A.F., Bland J.A.C., Lauhoff G.* Magnetism in ultrathin film structures // Reports on Progress in Physics. 2008. Vol. 71. P. 056501–056578.

[3] *Мамонова М.В., Прудников В.В., Прудникова И.А.* Теоретические и экспериментальные методы в физике поверхности. Омск, 2009.

Аугалиева Алия Булатовна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
II курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, email: augalievaa@mail.ru

РАСЧЕТЫ ПОСТОЯННЫХ ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ ФЕРРОМАГНИТНЫХ МЕТАЛЛОВ И ИХ СПЛАВОВ В ОБЪЕМЕ

С. Н. Бутько

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент М.В. Мамонова

Аннотация. В данной работе, в рамках первопринципных расчетов с использованием программных комплексов VASP и SPR-KKR, исследовано влияние постоянных решетки на параметры обменного взаимодействия для ферромагнитных металлов: железа, кобальта, никеля. Исследовано влияние концентрации Ni в сплаве $Co_{1-x}Ni_x$ на обменное взаимодействие.

Ключевые слова: VASP, SPR-KKR, постоянные обменного взаимодействия, магнитные ультратонкие пленки.

В ферромагнетиках при температуре меньше критической магнитные моменты атомов ориентируется параллельно друг другу [1]. Вследствие этого в твердом теле имеются области – домены с большими спонтанными магнитными моментами. Поэтому ферромагнитные пленки применяют в микроэлектронике и вычислительной технике в качестве магнитных носителей для записи и хранения информации в запоминающих устройствах. Яркими представителями ферромагнетиков являются железо, кобальт и никель. Исследование этих металлов позволяет получать ценную информацию о магнитных свойствах ферромагнетиков, углублять наши знания по многим вопросам в области магнетизма.

В данной работе с применением программного комплекса VASP [2] методом проекционно-присоединенных волн (PAW) и псевдопотенциалом в приближении GGA PBE проводились расчеты постоянных решетки для ОЦК Fe, ГЦК Co и ГЦК Ni. Рассчитанные значения в сравнении с экспериментальными данными для чистых ферромагнетиков и для сплава $Co_{1-x}Ni_x$ представлены в таблице 1.

Расчеты интегралов обменного взаимодействия проводились с использованием пакета SPR-KKR (спин-поляризованный релятивистский метод Корринги – Кона – Ростокера). Пакет SPR-KKR позволяет рассчитать электронную структуру произвольных трехмерных периодических систем [3].

Расчеты выполнялись в два этапа. На первом проводились самосогласованные расчеты (SCF) потенциала и волновых функций многоэлектронной системы. На втором вычислялись функции Грина, которые применялись для вычисления обменного интеграла системы J_{ij} . Основная идея метода ККР заключается в определении функции Грина для системы с фиксированной энергией. Для этого задается t -матрица, которая описывает рассеивание, охарактеризованное неперекрывающимися и пространственно ограниченными потенциалами. Совместное применение уравнения Дайсона, атомных t -матриц и структурных констант G позволяет задать так называемый оператор пути рассеяния τ^{ij} .

Для вычислений параметров магнитного обменного взаимодействия в методе Коринги – Кона – Ростокера (ККР), между парами атомов в рамках теории многократного рассеяния применяются формулы Лихтенштейна:

$$J_{ij} = \frac{1}{4\pi} \text{Im} \int^{E_f} dE \text{Trace} (t_{i\uparrow}^{-1} - t_{i\downarrow}^{-1}) \tau_{\uparrow}^{ij} (t_{j\uparrow}^{-1} - t_{j\downarrow}^{-1}) \tau_{\downarrow}^{ij}. \quad (1)$$

В табл. 1 представлены результаты расчета с помощью пакета SPR-KKR спинового μ_{spin} и орбитального магнитного момента μ_{orb} .

Таблица 1

Результаты расчетов магнитных моментов и постоянных решетки для ферромагнетиков и сплава $Co_{1-x}Ni_x$

	μ_{spin}, μ_B	μ_{orb}, μ_B	$a_{vasp}, \text{Å}$	$a_{exp}, \text{Å}$
Fe (ОЦК)	2,2372	0,0513	2,833	2,866[3]
Co (ГЦК)	1,5827	0,0713	3,517	3,42[4]
$Co_{0,75}Ni_{0,25}$	1,6644	0,0799	3,514	
$Co_{0,5}Ni_{0,5}$	1,6906	0,0811	3,516	
$Co_{0,25}Ni_{0,75}$	1,7267	0,1016	3,510	
Ni (ГЦК)	0,5985	0,0497	3,513	3,52 [5]

Расчитанные в пакете SPR-KKR с экспериментальными a_{exp} и полученными нами a_{vasp} постоянными решетки (табл. 1) средние значения обменного интеграла для ближайших соседей \bar{J}_1 и для следующих за ближайшими \bar{J}_2 приведены в табл. 2 и 3.

Таблица 2

Результаты расчетов обменных интегралов

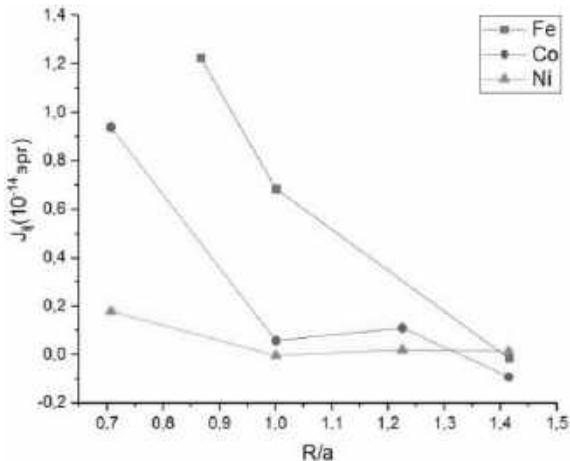
	$\bar{J}_1, 10^{-14}$ эрг			$\bar{J}_2, 10^{-14}$ эрг		
	Fe	Co	Ni	Fe	Co	Ni
a_{exp}	2,758	1,831	0,389	1,862	0,082	-0,009
a_{vasp}	2,674	2,047	0,179	1,493	0,127	-0,004

Таблица 3

Результаты расчетов обменных интегралов

	$Co_{0,75}Ni_{0,25}$	$Co_{0,5}Ni_{0,5}$	$Co_{0,25}Ni_{0,75}$
$\bar{J}_1^{(Ni-Co)}, 10^{-14}$ эрг	0,843	1,211	1,338
$\bar{J}_1^{(Co-Co)}, 10^{-14}$ эрг	2,885	3,411	
$\bar{J}_1^{(Ni-Ni)}, 10^{-14}$ эрг		0,471	0,419
$\bar{J}_2^{(Co-Co)}, 10^{-14}$ эрг	0,015	-0,026	-0,058
$\bar{J}_2^{(Ni-Ni)}, 10^{-14}$ эрг	-0,037	-0,069	-0,056

На рисунке изображена зависимость параметров обменного взаимодействия от расстояния между атомами ($R_1 = 0,866 \times a$ для ОЦК, $R_1 = 0,707 \times a$ для ГЦК, $R_2 = 1,00 \times a$).



Зависимость обменных интегралов от расстояния

По результатам расчетов, приведенным в табл. 2 и 3, можно сделать следующие выводы. Наибольшим обменным взаимодействием обладает Fe. Для Fe и Co обменное взаимодействие носит ферромагнитный характер. У Ni же обменное взаимодействие следующих за ближайшими соседями имеет очень слабый антиферромагнитный характер. Изменение постоянной решетки тем сильнее сказывается на значении обменного интеграла, чем он меньше. Так изменение постоянной решетки для кобальта на $\Delta a = 0,1\text{\AA}$, а для никеля всего на $\Delta a = 0,007\text{\AA}$ приводит к изменению J_1 на $0,2 \times 10^{-14}$ эрг, что соответствует 10 % для кобальта и 54 % для никеля. Для железа $\Delta a = 0,03\text{\AA}$ приводит к $\Delta J_1 = 3\%$.

В сплаве $Co_{1-x}Ni_x$ с увеличением концентрации никеля обменное взаимодействие ближайших соседей, значительно увеличивается. Обменное взаимодействие следующих за ближайшими соседями имеет антиферромагнитный характер.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Прудников В.В., Прудников П.В., Мамонова М.В. Квантово-статистическая теория твердых тел. Омск, 2014. 492 с.
- [2] Marsman G., Kresse M. VASP the GUIDE. Wien, 2000. P. 208.
- [3] Huhne T., Zecha C., Ebert H. Full-potential spin-polarized relativistic Korringa-Kohn-Rostoker method implemented and applied to bcc Fe, fcc Co, and fcc Ni // Phys. Rev. 1998. B 58. 10238.
- [4] Haglund J., Fernandez-Guillermot A., Grimvall G., Korling M., Theory of bonding in transition-metal carbides and nitrides // Phys. Rev. B 1993. 48. 11685
- [5] Wijn H. P. J. Magnetic Properties of Metals. Berlin: Springer, 1991. P. 190.

Будько Сергей Николаевич,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
I курс магистратуры, физический факультет,
44077, г. Омск, пр. Мира, 55а, serg.b.n@mail.ru.

МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ТРЕХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА ПАРАЛЛЕЛЬНЫМ МЕТОДОМ ВАНГА – ЛАНДАУ

В. Е. Ложников

Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, профессор П. В. Прудников

Аннотация. В данной работе были получены результаты моделирования критических свойств трехмерной изотропной модели Гейзенберга параллельным алгоритмом Ванга – Ландау. Результаты, полученные для параметра порядка, показывают сильную зависимость данной величины от результирующей плотности энергетических состояний системы.

Ключевые слова: алгоритм Ванга – Ландау, энтропическое моделирование, параллельное программирование.

Алгоритм Ванга – Ландау [1] является одним из новых методов Монте-Карло, который нашел применение во многих областях, таких как исследование фазовых переходов в полимерных цепях, процессах сворачивания белка, а также в исследовании спиновых стекол и тонких магнитных пленок. Его идея состоит в том, что имея известную плотность энергетических состояний системы возможно получить многие интересующие нас термодинамические величины, такие как внутренняя энергия, теплоемкость, свободная энергия, энтропия и намагниченность.

В процессе случайного блуждания в энергетическом пространстве системы строится гистограмма посещений энергетических уровней. Данный энергетический уровень посещается при условии того, что энтропия нового состояния меньше предыдущего или, если она имеет большие значения, то принимается с заданной вероятностью и производится переворот спина. При каждом посещении происходит инкремент логарифма плотности состояний и гистограммы посещений энергетических уровней на заданную величину. Если гистограмма становится существенно плоской, то данная величина уменьшается и так производится N итераций. Таким образом вычисляется логарифм плотности энергетических состояний, который используется для расчета термо-

динамических величин, в том числе намагниченности и восприимчивости [2].

Намагниченность может быть получена из следующих соотношений:

$$\langle M(T, 0) \rangle = \left(\frac{1}{Z} \right) \sum_E \overline{M}(E) g(E) \exp\left(-\frac{E}{kT}\right),$$

где $\overline{M}(E)$ – статистическое среднее $\overline{M}\{S_i\}$ для конфигураций с энергией E

$$\overline{M}(E) = \frac{\sum_{S_i} |M_{S_i}| \delta(E - E\{S_i\})}{\sum_{S_i} \delta(E - E\{S_i\})}.$$

Восприимчивость может быть получена из следующего соотношения:

$$\chi(T, H) = \frac{dM}{dH} = \frac{1}{kT} \left[\langle M^2(T) \rangle - \langle M(T) \rangle^2 \right].$$

Модель Гейзенберга имеет бесконечное число возможных состояний спина, вследствие чего ширина общего энергетического интервала спиновой системы достаточно велика и может варьироваться, что сказывается на конечной плотности энергетических состояний системы. Ширина общего энергетического интервала рассчитывалась как $\theta \cdot N$, где θ – множитель, регулирующий ширину энергетического интервала, N – размер исследуемой системы.

Расчет намагниченности и восприимчивости параллельным [3] алгоритмом Ванга – Ландау показывает, что на результирующую температурную зависимость существенным образом влияет логарифм плотности энергетических состояний. На рис. 1 показаны графики логарифмов плотности состояний. В первом случае (слева) термодинамические величины, такие как намагниченность (см. рис. 2) и восприимчивость (см. рис. 3) показывают ожидаемое поведение. Во втором (см. рис. 1, справа) – наблюдаются отклонения, при которых график намагниченности инвертируется и сглаживается пик восприимчивости.

Представленные результаты показывают, что логарифм плотности энергетических состояний оказывает существенное влияние на результирующие термодинамические величины, такие

как намагниченность и восприимчивость. Для оценки ширины исследуемого энергетического интервала необходима дискретизация возможных состояний спина в модели Гейзенберга.

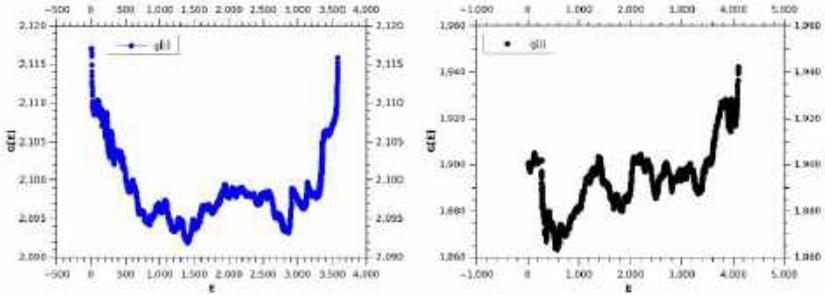


Рис. 1. Зависимость логарифма плотности энергетических состояний от энергии

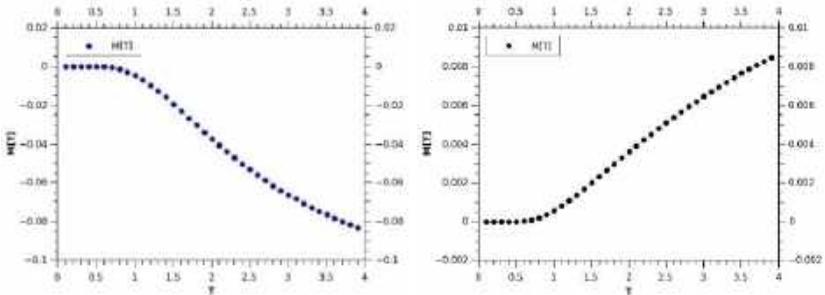


Рис. 2. Зависимость намагниченности спиновой системы от температуры

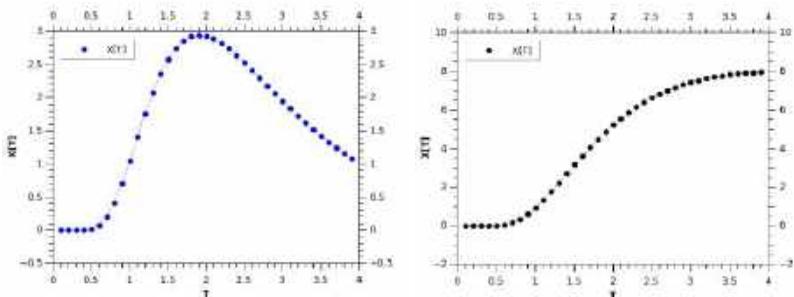


Рис. 3. Зависимость восприимчивости спиновой системы от температуры

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты № 17-02-00279, № 18-42-550003) и грантом МД-6868.2018.2 Президента РФ. Для выполнения расчетов были использованы ресурсы вычислительной лаборатории прикладной теоретической физики и параллельных вычислений ОмГУ и ЦКП «Центр данных ДВО РАН».

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Wang F., Landau D.P.* Phys. Rev. Lett. 86, 2050 (2001).
- [2] *Brown G., Schulthess T.C.* J. Appl. Phys. 97, 10E303 (2005).
- [3] *Vogel T., Li Y.W., Wust T., Landau D.P.* Phys. Rev. Lett. 110, 210603 (2013).

Ложников Вячеслав Евгеньевич,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
III курс аспирантуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, vereskanthem@gmail.com

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ МАГНИТНЫХ СТРУКТУР ПРИ ДИНАМИЧЕСКОМ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ ВО ВНЕШНЕМ ПЕРИОДИЧЕСКОМ ПОЛЕ

В. А. Попов

Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, профессор П. В. Прудников

Аннотация. В работе проводится моделирование динамического поведения изингоподобной пленки во внешнем периодическом магнитном поле методами Монте-Карло. Осуществлено исследование магнитных свойств системы при динамическом фазовом переходе. Исследовали пленку с сильной поверхностной связью, а также петли гистерезиса для $\theta < \theta_c$.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, модель Изинга, петли гистерезиса.

Исследование динамического фазового перехода в мультислойных магнитных структурах и тонких пленках является чрезвычайно актуальной задачей. Явление динамического фазового перехода, впервые, было выявлено для двумерной кинетической модели Изинга в работе. В работе было экспериментально показано существование динамического фазового перехода в мультислойной магнитной структуре $[\text{Co}(0.4 \text{ нм})/\text{Pt}(0.7 \text{ нм})]_3$ с сильной перпендикулярной анизотропией.

Процесс неравновесной релаксации намагниченности системы во внешнем осциллирующем поле может характеризоваться параметром порядка $Q(z)$:

$$Q(z) = \frac{1}{2t_{1/2}} \oint m(t, z) dt,$$

где $m(t, z)$ – намагниченность в слое z , $t_{1/2}$ – полупериод внешнего магнитного поля.

В данной работе исследовалось поведение тонкой изингоподобной пленки конечной толщины с числом слоев $N = 5$ во внешнем осциллирующем поле.

$$H = -J_b \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j - J_s \sum_{\{i, j\}} S_i S_j - H(t) \sum_i S_i,$$

где $S_i = \pm 1$ – изинговские спины, $\langle \dots \rangle$ – суммирование по узлам в объеме материала, $\{ \dots \}$ – суммирование по узлам на поверхности пленки.

На рис. 1 показана временная зависимость намагниченности во внешнем осциллирующем поле. При $\Theta = \Theta_c$ происходит динамический фазовый переход.

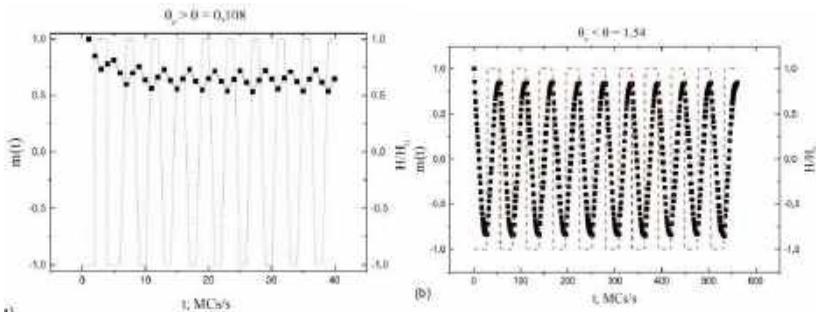


Рис. 1. Зависимость намагниченности от времени в поверхностном слое при $\Theta = 0,108 < \Theta_c$ и $\Theta = 1,54 > \Theta_c$ для системы с $L = 32$.

График слева демонстрирует динамически упорядоченную фазу, справа – динамически неупорядоченную фазу

В работе было исследовано поведение поверхностного параметра порядка в зависимости от величины амплитуда внешнего поля.

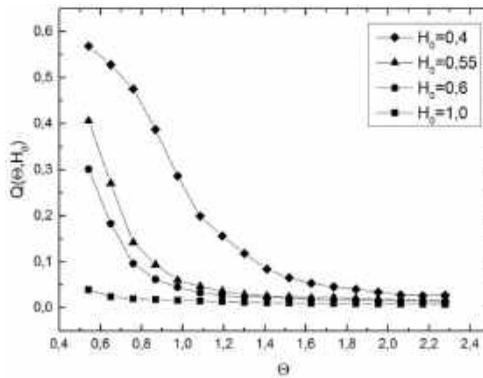


Рис. 2. Зависимость поверхностного параметра порядка от Θ для системы с $L = 32$ при различных амплитудах внешнего поля

На рис. 3. изображены общие графики зависимости параметра порядка Q от θ . Параметр порядка демонстрирует поведение, характерное для фазового перехода второго рода в области $\theta = 0,1-0,6$.

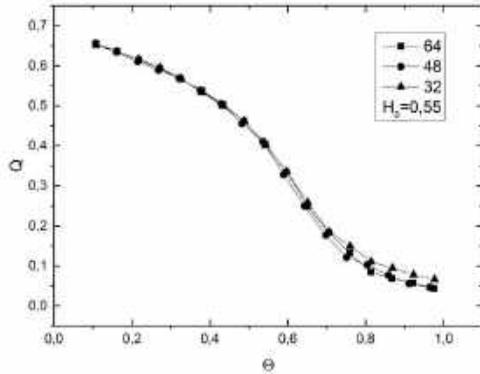


Рис. 3. Общий график зависимость параметров порядка Q от θ в поверхностном слое для разных линейных размеров решетки

Были получены кумулянты Биндера поверхностного слоя для разных линейных размеров решетки.

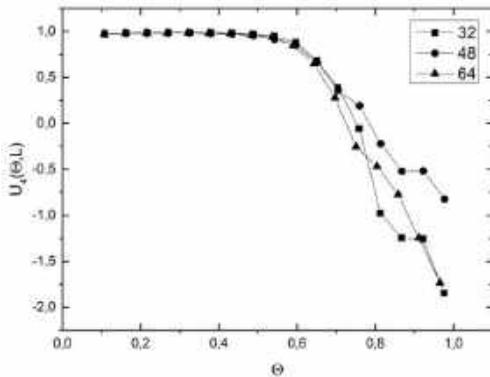


Рис. 4. Кумулянты Биндера поверхностного слоя для разных линейных размеров решетки

Параметр порядка демонстрирует поведение для сильной поверхностной связи ($J_s = 2J_b$).

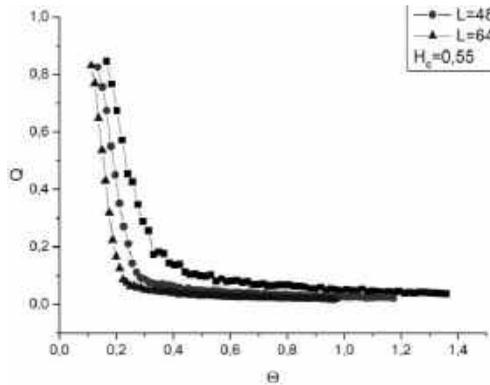


Рис. 5. Зависимость параметров порядка Q от θ в поверхностном слое для различных линейных размеров решетки

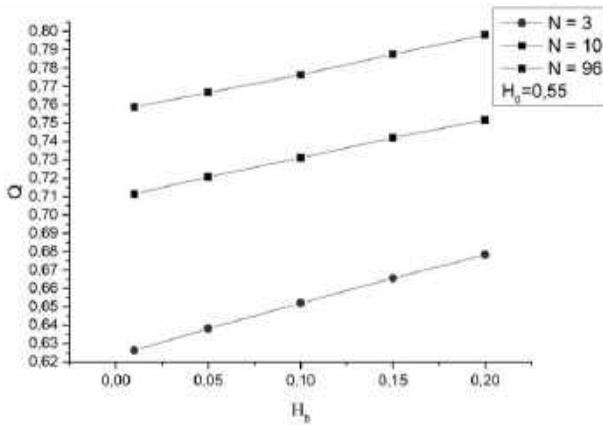


Рис. 6. Зависимость параметра порядка от поля $\theta = \theta_c$ для сравнения различных значений N

В данной работе проведено численное исследование динамического фазового перехода в изингоподобной пленки во внешнем периодическом магнитном поле с выделенной поверхностью и числом слоев $N = 5$, находящейся во внешнем периодическом поле. Произведены исследования поведения системы во внешнем магнит-

ном поле с различными амплитудами. Все расчеты проводились при $H_0=0,55$. На основе поведения восприимчивости и кумулянтов Биндера было показано существование динамического фазового перехода. Все усреднения проводились по 100 прогонкам.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Lo W.S., Pelcovits R.A.* Ising model in a time-dependent magnetic field // *Phys. Rev. A.* 1990. Vol. 42. P. 7471.

[2] *Robb D.T., Xu Y.H., Hellwig O., McCord J., Berger A., Novotny M.A., Rikvold P.A.* Evidence for a dynamic phase transition in Co Pt magnetic multilayers // *Phys. Rev. B.* 2008. Vol. 78. P. 134422.

[3] *Parnaste M., Marcellini M., Holmstrom E., Bock N., Fransson J., Eriksson O., Hjorvarsson B.* Dimensionality crossover in the induced magnetization of Pd layers // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2007. Vol. 19. P. 246213.

[4] *Korniss G., White C.J., Rikvold P.A., Novotny M.A.* Dynamic Phase transition, universality, and finite-size scaling in the two-dimensional kinetic Ising model in an oscillating field // *Phys. Rev. E.* 2000. Vol. 63. P. 016120.

[5] *Прудников В.В., Вакилов А.Н., Прудников П.В.* Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. 224 с.

[6] *Park H., Pleimling M.* Surface Criticality at a Dynamic Phase Transition 31 // *Phys. Rev. Lett.* 2012. Vol. 109. P. 175703.

[7] *Pleimling M.* Critical Phenomena at perfect and non-perfect surfaces // *J. Phys. A.* 2004. Vol. 37. P. R79.

[8] *Прудников П.В., Попов В.А.* Моделирование критических свойств магнитных структур во внешнем периодическом поле // XLI региональная научно-практическая конференция. Молодежь третьего тысячелетия: сборник научных статей. Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та, 2017.

Попов Владислав Александрович,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
II курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, tower96@mail.ru.

ВЛИЯНИЕ ЗАМОРОЖЕННОГО СТРУКТУРНОГО БЕСПОРЯДКА НА ЗНАЧЕНИЕ ДИНАМИЧЕСКОГО КРИТИЧЕСКОГО ИНДЕКСА Z НЕРАВНОВЕСНОЙ КРИТИЧЕСКОЙ РЕЛАКСАЦИИ ДВУМЕРНОЙ XY-МОДЕЛИ

С. П. Чемерис

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент И. С. Попов

Аннотация. В результате проведенного исследования показано, что для процесса релаксации структурно неупорядоченной двумерной XY-модели имеют место неравновесные эффекты памяти.

Ключевые слова: двумерная XY-модель, критическая релаксация, эффект памяти.

Исследование неравновесного критического поведения низкоразмерных спиновых статистических систем вызывает в последние годы значительный научный интерес. Особое место среди таких систем занимают двумерные системы с непрерывной симметрией основного состояния [1; 2]. Это связано, с одной стороны, с аномально сильными поперечными флуктуациями спиновой плотности, приводящими к разрушению дальнего порядка при всех конечных температурах, а с другой стороны, с существованием в таких системах топологических элементарных возбуждений, таких как вихри. Двумерная XY-модель, в этом плане, совмещает приятное с полезным [1], реализуя топологический фазовый переход Березинского – Костерлица – Таулесса (ВКТ) при температуре $T_{\text{ВКТ}}$, и обладая низкотемпературной фазой Березинского при температурах $T < T_{\text{ВКТ}}$. Физическая природа фазового перехода ВКТ связана с диссоциацией связанных вихревых пар в точке перехода $T = T_{\text{ВКТ}}$. В тоже время в низкотемпературной фазе Березинского $T < T_{\text{ВКТ}}$ каждая температура T является критической точкой, что позволяет наблюдать непрерывный каскад фазовых переходов и проводить определенные аналогии с низкотемпературными свойствами спинового стекла.

Неравновесная критическая релаксация двумерной XY-модели при температуре замораживания в низкотемпературной фазе

Березинского $T < T_{\text{вкт}}$ сопровождается [2] медленной динамикой, эффектами старения и нарушением флуктуационно-диссипативной теоремы, вследствие чего возникает существенная зависимость динамических свойств системы от выбранных начальных неравновесных состояний. Высокотемпературное начальное состояние готовится в контакте с термостатом с температурой $T_0 \gg T_{\text{вкт}}$, в то время как низкотемпературное – при $T_0 = 0$. Вихревая динамика из высокотемпературного начального состояния системы сопровождается процессами рождения и уничтожения, движения и аннигиляции вихрей. Спин-волновая динамика из низкотемпературного начального состояния сопровождается ангармоническим взаимодействием спиновых волн как между собой, так и с вихревыми парами.

Введение в двумерную XY-модель структурного беспорядка приводит к возникновению неравновесного пиннинга вихрей на дефектах структуры [3]. Пиннинг существенно модифицирует и усложняет неравновесные свойства вихревой динамики системы, при этом существенно замедляя релаксационные процессы.

Эффекты памяти в неравновесной критической релаксации представляют нетривиальные явления, когда система возвращается к изначальной временной зависимости динамической характеристики после кратковременного воздействия на систему. В двумерной однородной XY-модели эффекты памяти исследовались в работе [4].

Целью настоящей работы было исследование эффектов памяти в неравновесной критической релаксации двумерной структурно неупорядоченной XY-модели. Получение двухвременных динамических зависимостей спин-спиновой автокорреляционной функции $C_{ss}(t, t_w)$ и обобщенной динамической восприимчивости $\chi(t, t_w)$ для процесса неравновесной критической релаксации двумерной структурно неупорядоченной XY-модели из начального высокотемпературного состояния.

Результаты моделирования приведены на рис. 1 и 2. Из полученных результатов для двухвременной зависимости спин-спиновой автокорреляционной функции $C_{ss}(t, t_w)$ видно, что эффекты памяти достаточно плохо проявляются на выбранных динамических интервалах. В то же время двухвременная зависимость для

обобщенной динамической восприимчивости $\chi(t, t_w)$ и построенная параметрическая зависимость $T\chi(t, t_w)$ от $C_{SS}(t, t_w)$ достаточно хорошо отражают эффекты памяти.

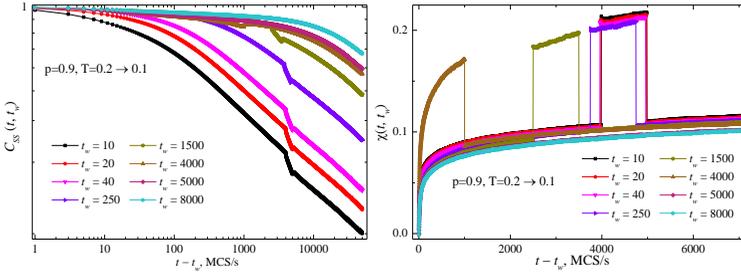


Рис. 1. Эффекты памяти в двухвременной зависимости от обобщенности спин-спиновой автокорреляционной функции $C_{SS}(t, t_w)$ и обобщенной динамической восприимчивости $\chi(t, t_w)$ для процесса неравновесной критической релаксации двумерной структурно неупорядоченной XY-модели из начального высокотемпературного состояния

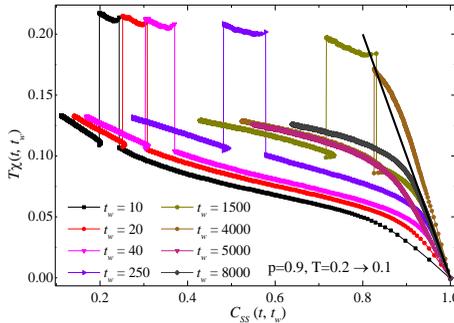


Рис. 2. Эффекты памяти в параметрической зависимости $T\chi(t, t_w)$ от $C_{SS}(t, t_w)$ для процесса неравновесной критической релаксации двумерной структурно неупорядоченной XY-модели из начального высокотемпературного состояния

В результате проведенного исследования были получены двухвременные динамические зависимости спин-спиновой автокорреляционной функции $C_{SS}(t, t_w)$ и обобщенной динамической восприимчивости $\chi(t, t_w)$ для процесса неравновесной критической релаксации двумерной структурно неупорядоченной XY-модели из начального высокотемпературного состояния. Показано, что

для процесса релаксации структурно неупорядоченной двумерной XY-модели имеют место неравновесные эффекты памяти. Выбранные динамические интервалы плохо подходят для исследования эффектов памяти в двухвременной зависимости спин-спиновой автокорреляционной функции $C_{ss}(t, t_w)$.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Korshunov S.E.* Phase transitions in two-dimensional systems with continuous degeneracy // *Phys. Usp.* 2006. 49. 225.

[2] *Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Mamonova M.V.* Nonequilibrium critical behavior of model statistical systems and methods for the description of its features // *Phys. Usp.* 2017. 60. 762.

[3] *Prudnikov P.V., Prudnikov P.V., Popov I.S.*, Nonequilibrium aging effects in the critical behavior of structurally disordered planar magnets // *JETP Lett.* 2015. 101. 596.

[4] *Krzakalaa F., Ricci-Tersenghib F.* Aging, memory and rejuvenation: some lessons from simple models // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2006. 40. 42.

Чемерис Степан Петрович,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
I курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а

Секция

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА

ИССЛЕДОВАНИЕ СИНТЕЗА МОНОДОМЕННЫХ КЕРАМИЧЕСКИХ ОБРАЗЦОВ YBCO

Д. А. Аманкулова

Научный руководитель: канд. физ-мат. наук, доцент С. А. Сычев

Аннотация. В статье подробно описана методика синтеза монодоменных сверхпроводящих образцов. Приведена зависимость силы левитации магнита с фиксированным магнитным полем над поверхностью сверхпроводника.

Ключевые слова: монодоменный сверхпроводник, затравочные кристаллы, кислородная стехиометрия, направленная кристаллизация.

Массивные монодоменные иттрий-бариевые (YBCO) сверхпроводники находят все более широкое применение в различных устройствах. Эффект магнитной левитации уже имеет перспективы широкого применения. В криогенной технике изготавливают устройства, использующие сверхпроводящие магнитные подшипники. Монодоменные сверхпроводники получают разными методами одним, из которых является метод направленной кристаллизации с использованием готовых затравок, которые при выбранных термических режимах процесса позволяют выращивать крупный кристалл практически во всем объеме образца [1].

Исследование посвящено поиску оптимальных термических режимов направленной кристаллизации YBCO с готовой затравкой для выращивания монодоменного сверхпроводника. На качество полученных сверхпроводников сильное влияние оказывают состояние исходного порошка (чистота исходных реактивов, гра-

нулометрический состав), условия термической обработки, давление прессования, совершенство структуры затравочного кристалла и др.

Процесс изготовления YBaCuO керамики включает два основных этапа: формирование (с затравочным кристаллом) псевдомономенной (псевдомонокристаллической) YBa_2Cu_3O или Y123 структуры с распределенными в ней мелкодисперсными включениями несверхпроводящей фазы Y_2BaCuO_5 (Y211) – так называемый процесс текстурирования при плавлении и последующее насыщение кислородом матричной структуры $YBa_2Cu_3O_{7-8}$ [2].

В качестве исходного материала использовалась смесь реактивов квалификации «хч» и «осч» Y_2O_3 , CuO и $Ba(NO_3)_2$, соответствующих общей формуле $Y_{1,8}Ba_{2,4}Cu_{3,4}O_y$. Все реагенты тщательно перемешаны, помещены в серебряный тигель в муфельную печь и прокалены несколько раз при $T \approx 890$ °C с промежуточной гомогенизацией. Отожженные порошки прессовались в диски диаметром 33 мм и толщиной от 10 до 15 мм и помещались в муфельную печь на корундовых подложках. Режим отжига управляется персональным компьютером и приведен на рис. 1.

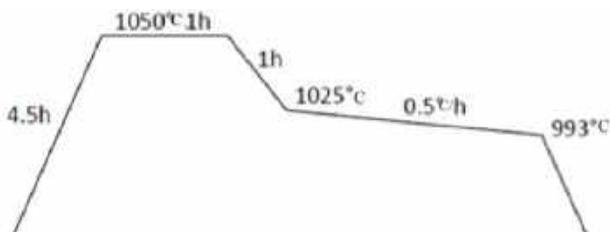


Рис. 1. Один из графиков отжига монодоменных керамических образцов YBCO

Образцы нагреваются в течение 4,5 часов до 1050 °C, выдерживаются 1 ч после чего температура равномерно убывает за 1 ч до 1025 °C. Начиная с этого значения, скорость снижения температуры составляет 0,5 °C/ч вплоть до 993 °C и дальше охлаждается с выключенной печью. По окончании процесса отжига образцы извлекались, визуально оценивался размер выросшего кристалла полученного монодоменного сверхпроводника.

Для появления сверхпроводимости в образцах, они помещались в кварцевый реактор, где в течение 48 ч насыщались кислородом.

дом при 420–450 °С и давлении кислорода 1,3–1,5 атм. Окончание процесса насыщения фиксируется манометром по прекращению изменения давления кислорода в реакторе. Извлеченные из реактора образцы представляли собой монодоменные сверхпроводники (рис. 2).



Рис. 2. Фотографии образцов:

а) $Y_{1.8}Ba_{2.4}Cu_{3.4}O_y$; б) YBCO с добавкой 1 % SeO_2 . Диаметры готовых образцов около 30 мм. Слева хорошо виден монодомен размером 20 x 20 мм². В центре образцов находятся монокристаллические затравки $SmBa_2Cu_3O_y$, вплавленные в поверхность

Для оценки качества сверхпроводящих свойств полученных образцов измерялась сила левитации постоянного магнита (магнитное поле на поверхности магнита 0,32 Тл) в зависимости от расстояния до поверхности (рис. 3).

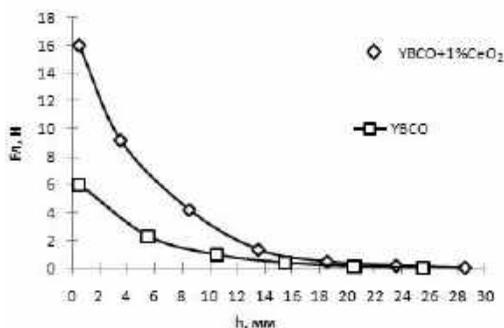


Рис. 3. График зависимости силы левитации постоянного магнита от расстояния до поверхности монодоменного сверхпроводника

Образцы с добавкой 1 % CeO_2 показали, что сила левитации на расстоянии 1 мм от поверхности равна около 16 Н, а без CeO_2 : 5–6 Н. Из чего делается вывод, что добавки CeO_2 существенно улучшают магнитные свойства сверхпроводника. Поиск новых добавок для улучшения магнитных свойств монокристаллических сверхпроводников открывает широкое поле деятельности.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Полуценко О.Л., Матвеев В.А., Нижельский Н.А., Шавкин С.В.* Рост кристаллов и структура иттрий-бариевых сверхпроводников при направленной кристаллизации // Физика и химия обработки материалов: сборник научных статей. М.: Изд-во Моск. гос. ун-та, 2003. № 1. С. 77–82.

[2] *Прихна Т.А., Власенко А.В., Дуб С.Н., Мельников В.С., Савчук Я.М., Моциль В.Е., Сергиенко Н.В., Нагорный П.А., Свездун В.Б., Шо Кс, Гавалек В., Лицендорф Д., Хабисреутер Т., Рабьер Ж., Жола А.* Повышение сверхпроводящих и механических свойств массивной и тонкостенной ПТ-УВСО керамики при насыщении кислородом // Сверхтвердые материалы: сборник научных статей. 2008. № 4. С. 3–22.

Аманкулова Динара Абаевна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
II курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, amankulova123@mail.ru

ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ В ОБУЧЕНИИ МАТЕМАТИКЕ

Б. Т. Байсова

Научный руководитель: канд. пед. наук, доцент С. Н. Скарбич

Аннотация. Рассматривается понятие прикладной задачи, описана схема их решения и требования, предъявляемые к ним. Приведен пример прикладной задачи и ее решение. Указана необходимость использования задач данного типа при обучении математике.

Ключевые слова: математика, прикладная задача.

Математика является значительной и важной частью общечеловеческой культуры, особенностью которой является ее прикладной характер. Благодаря своей универсальности математика знакомит учащихся с методами познания других наук и показывает применимость математических методов в широкой области окружающей действительности. Однако, несмотря на это, многие выпускники школ за время обучения не научились применять математические знания в конкретных учебных или жизненных ситуациях, т. е. они не осознали прикладного характера математики.

Конечно, рассмотреть все области применения математики и ее методов в будущей профессиональной деятельности учащихся практически невозможно. Это возможно лишь в процессе выявления связи математики с другими науками и сферами деятельности путем приобретения умений и навыков применения математических знаний при решении прикладных задач.

Вопросам обучения учащихся решению прикладных задач по математике занимались такие ученые как П.Т. Апанасов [1], В.А. Далингер [2], В.А. Петров [3], Н.А. Терешин [4], И.М. Шапиро [5], Е.В. Шульга [6] и др.

Под прикладной задачей понимают задачу, которая своим сюжетом раскрывает приложение математики в смежных дисциплинах, знакомит с использованием ее в быту, при организации производства, в экономике, в сфере обслуживания и т. п.

К прикладным задачам предъявляются следующие требования [5]:

- познавательная ценность задачи;

- доступность школьникам используемого в задаче нематематического материала;

- реальность описываемой в условии задачи ситуации, числовых значений данных, постановки вопроса и полученного решения.

Решение прикладных задач происходит по известной трехэтапной схеме [5]. На первом этапе (этапе формализации) осуществляется переход от прикладной задачи, которую предстоит решить, к построению ее математической модели. На втором этапе решается математическая задача, сформулированная на первом этапе. На третьем этапе (этапе интерпретации) полученное решение математической задачи переводится на язык исходной прикладной задачи.

Среди прикладных задач можно выделить задачи по определению оптимальных размеров и формы предметов. Данные задачи наглядно показывают применение математики в практической деятельности. Примером задач такого вида служит задача, приведенная ниже.

Задача: Для покрытия теплицы имеется 100 м^2 пленки. Проект теплицы представлен на рис. 1. Размеры теплицы: высота $h = 2 \text{ м}$, длина $l = 5 \text{ м}$, наклон крыши 45° . Определить ширину теплицы, при которой расход пленки будет оптимальным.

Решение. Этап I. На первом этапе необходимо построить математическую модель. Исходными данными для построения модели являются форма теплицы и требование оптимального расхода пленки.

Введем некоторые обозначения: S – площадь покрываемой поверхности теплицы; x – ширина теплицы. Таким образом, задача на языке математики формулируется следующим образом: Определить такую ширину x геометрической фигуры, изображенной на рис. 2, при которой ее площадь поверхности была бы равна 100 м^2 .

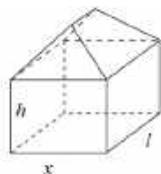


Рис. 1. Проект теплицы

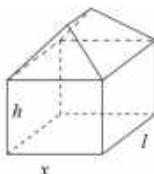


Рис. 2. Фигура, описывающая форму теплицы

Этап II. Определим площадь поверхности теплицы.

Площадь торцов равна соответственно:

$$S_m = 2 \left(xh + \frac{x^2}{4} \right) = 2xh + \frac{x^2}{2} = 4x + \frac{x^2}{2}.$$

Площадь боковых стен: $S_{\sigma} = 2lh = 2 \cdot 5 \cdot 2 = 20 \text{ м}^2$.

Площадь крыши: $S_{\kappa} = \frac{2lx}{\sqrt{2}} = \sqrt{2}lx = 5\sqrt{2}x$.

Таким образом, полная площадь поверхности теплицы равна:

$$S = S_m + S_{\sigma} + S_{\kappa} = 4x + \frac{x^2}{2} + 20 + 5\sqrt{2}x = \frac{1}{2}x^2 + (5\sqrt{2} + 4)x + 20.$$

Таким образом, получаем уравнение вида:

$$\frac{1}{2}x^2 + (5\sqrt{2} + 4)x + 20 = 100.$$

Решая уравнение, получаем два корня: $x_1 = -27,88$; $x_2 = 5,73$.

Таким образом, при ширине теплицы равной 5,73 м расход пленки будет оптимальным.

Этап III. При $x = 5,73$ площадь поверхности теплицы $S = 99,85 \text{ м}^2$. При $x = 5,74$ площадь поверхности теплицы $S = 100,02 \text{ м}^2$. При $x = 5,72$ площадь поверхности теплицы $S = 99,69 \text{ м}^2$.

Как показали вышеприведенные расчеты незначительное изменение ширины теплицы (на 1 см) приводит к существенному изменению расхода пленки. При увеличении ширины теплицы на 0,01 м, расход увеличивается на 0,17 м².

Решение данной задачи отчетливо указывает на необходимость использования прикладных задач в процессе обучения математике, что позволяет раскрыть школьникам все многообразие применения математики, а также способствует активизации познавательной деятельности, закреплению и углублению знаний, а также формированию практических умений и навыков учащихся.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Апанасов П.Т., Апанасов Н.П.* Сборник математических задач с практическим содержанием: кн. для учителя. М.: Просвещение, 1987. 110 с.

[2] *Далингер В.А.* Текстовые задачи на проценты, смеси, сплавы, концентрацию: учебное пособие. Омск: Изд-во ОмГПУ, 2006. 170 с.

[3] *Петров В.А.* Математические задачи из сельскохозяйственной практики. Пособие для учителей. М.: Просвещение, 1980. 64 с.

[4] *Терешин Н.А.* Прикладная направленность школьного курса математики: кн. для учителя. М.: Просвещение, 1990. 96 с.

[5] *Шапиро И.М.* Использование задач с практическим содержанием в преподавании математики: кн. для учителя. М.: Просвещение, 1990. 96 с.

[6] *Шульга Е.В.* Прикладная направленность задач в курсе математики: учебное пособие. Омск: Изд-во ОмГПУ, 2006. 104 с.

Байсова Бибигуль Тулегеновна,
Омский государственный педагогический университет,
I курс магистратуры, МИФИТ,
644099, Омск, Набережная Тухачевского, 14, baysova@yandex.ru

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНТЕГРАЛЬНЫХ ИНДУКТИВНЫХ И ЕМКОСТНЫХ LTCC ЭЛЕМЕНТОВ ВЧ ДИАПАЗОНА

К. Г. Гирько

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук Н. Н. Струнина

Аннотация. Проведен обзор различных катушек индуктивности и конденсаторов. Обоснован выбор и способ их реализации. Проведено электромагнитное моделирование интегральных индуктивных и емкостных LTCC элементов. Получены частотные зависимости индуктивных и емкостных элементов в дециметровом диапазоне, результаты были проверены на макете фильтра.

Ключевые слова: LTCC технология, интегральные индуктивности, интегральные емкости, моделирование в среде AWR DE.

Современная аппаратура содержит множество электронных и механических элементов. В связи с этим основными требованиями являются снижение габаритов и массы устройства, повышение надежности. Один из путей решения – повышение интеграции пассивной части схем (объединения нескольких дискретных элементов или устройств в одно) с помощью новых технологий. Решению этих задач совершенствования конструкций и технологических процессов изготовления устройства способствует комплексная микроминиатюризация их элементов, важнейшей частью которой является разработка и совершенствование интегральных схем. В настоящее время быстро развивается и успешно применяется технология низкотемпературной керамики (LTCC, Low Temperature Co-fired Ceramics) для различных приложений, например, для производства ВЧ и СВЧ микросхем низкой и средней степени интеграции. Данная технология обеспечивает недорогое решение в массовом производстве электронных устройств для коммерческой и военной областей электронной промышленности. В ближайшее время актуальность использования LTCC как для спецтехники, так и для широкого гражданского применения будет только возрастать.

Перечень конструкций индуктивностей и конденсаторов

Конструкции трехмерных катушек могут быть выполнены в виде круглой, квадратной спирали, 3D Г-образной спирали (рис. 1).

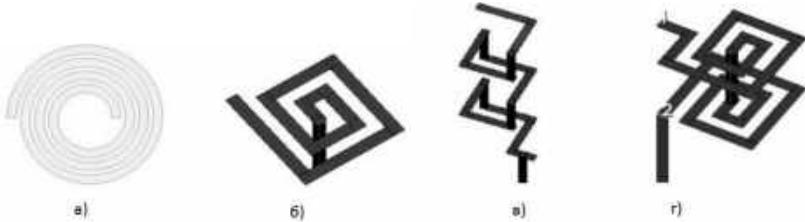


Рис. 1. Конструкции трехмерных катушек:

- а) круглая спираль, б) квадратная плоская спираль, в) 3D Г-образная спираль, г) квадратная «стековая» спираль

В работе использовались квадратные индуктивности, они наиболее просты по технологии изготовления. Произведя сравнение трех конструкций спиралей на определенных частотах, определили влияние конструкторских решений на индуктивность и добротность (табл.).

Максимальные значения индуктивности и добротности трех конструкций спиралей

Конструкция спирали	Частота, МГц							
	500		1000		1500		2000	
	$L, \text{нГн}$	Q	$L, \text{нГн}$	Q	$L, \text{нГн}$	Q	$L, \text{нГн}$	Q
Стековая квадратная спираль	90	273,2	771	322,7	265,2	365,2	6,08	308,8
3D Г-образная спираль	4,64	206,3	4,79	304,40	5,07	301,9	5,54	262,10
3D Г-образная сужающаяся спираль	2,53	206,1	2,57	303,70	2,62	300,9	2,70	261,30

Наиболее добротной и обладающей большей индуктивностью конструкцией является катушка в виде стековой квадратной спирали.

Интегральные конденсаторы также могут быть выполнены двумя способами: в планарном исполнении и многослойные на основе трехмерных структур (металл-диэлектрик-металл), различающиеся топологией. На рис. 2 изображены некоторые конструкции конденсаторов.

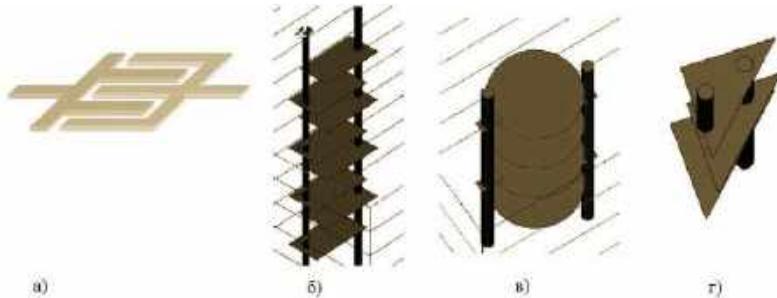


Рис. 2. Конструкции конденсаторов:

а) встречно-штыревой, б) прямоугольный, в) в форме круга, г) треугольный

Интересными способами реализации конденсаторов являются плоскопараллельные, встречно-штыревые и стековые конденсаторы. Главным критерием в выборе конструкции конденсатора является достижение его минимальных габаритов. В этой связи целесообразно использовать стековый конденсатор, габариты которого при одинаковом значении емкостей минимальны за счет расположения обкладок в нескольких слоях.

Моделирование индуктивностей и емкостей в среде AWR DE

Произведя ЭМ моделирование индуктивностей и емкостей, получили графики зависимости индуктивности и добротности от частоты, емкости и добротности от частоты (рис. 3, 4).

Результаты моделирования L элементов показали, что увеличение ширины полоска/зазора приводит к увеличению индуктивности и добротности. Увеличение витков и слоев катушки приводит к увеличению индуктивности и уменьшению добротности. Изменение ширины полоска или увеличение слоев и витков приводит к смещению резонанса.

Результаты моделирования показали, что с увеличением площади обкладок емкость увеличивается, добротность и резонанс уменьшаются.

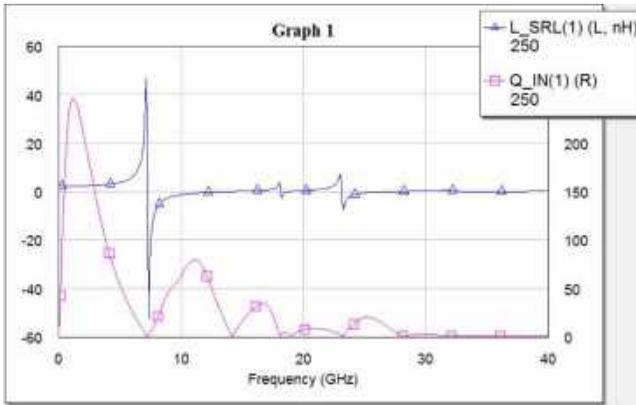


Рис. 3. Графики зависимости индуктивности и добротности от частоты

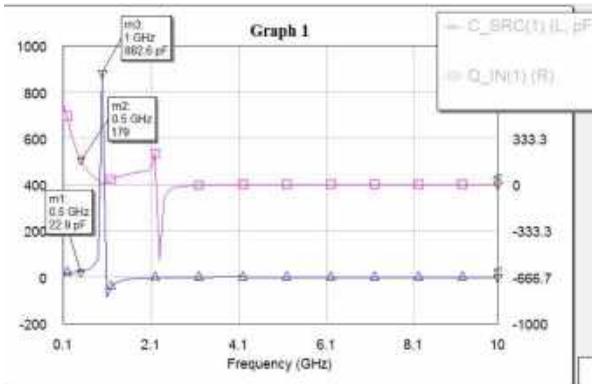


Рис. 4. Графики зависимости емкости и добротности от частоты

Проверка результатов. Изготовление фильтра.

Результаты моделирования фильтра показали, что моделирование LC – элементов произведено верно. На примере широкополосного ШПФ показана эффективность использования LTCC технологии, в результате чего спроектировано устройство, не нуждающееся в настройке.

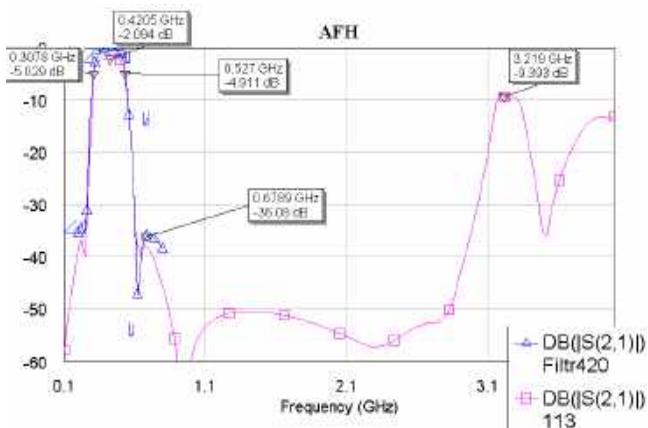


Рис. 5. Результат моделирования в AWR Design Environment

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Bahl I.* Lumped Elements for RF and Microwave Circuits // Artech House. 2003. 488 p.

[2] *Петренко И.М., Иванов А.А.* Миниатюризация широкополосных трактов промежуточной частоты // Обмен опытом в области создания сверхширокополосных РЭС (СВЧ-2010): материалы конференции / ОАО «Центральное конструкторское бюро автоматики».

Гирько Кристина Геннадьевна,
 Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
 II курс магистратуры,
 644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, kristina.girko.96@mail.ru

МИКРОЭЛЕКТРОННЫЕ РЕЗОНАТОРЫ И ФИЛЬТРЫ НА ОБЪЕМНЫХ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛНАХ

Р. А. Дубинин

Научный руководитель: д-р техн. наук, доцент А. Г. Козлов

Аннотация. В данной статье на основе литературных данных рассматривается конструкция фильтров на объемных акустических волнах, применение этих фильтров в современных технологиях, а также конструкция и свойства резонаторов на объемных акустических волнах, из которых состоят фильтры.

Ключевые слова: фильтр на ОАВ, микроэлектронный резонатор, брэгговский отражатель.

Радиочастотные фильтры являются ключевым компонентом любой системы связи. Эти фильтры требуются для того, чтобы выделить или отклонить определенный частотный диапазон. На сегодняшний день большинство полос частот заняты телевизионным вещанием, мобильной телефонией, Bluetooth-технологией, беспроводными локальными сетями (WLAN), а также промышленными и военными приложениями [1]. Во избежание помех между применяемыми устройствами очень важны высокоселективные фильтры, которые поддерживают запас безопасности между двумя соседними полосами. Пленочный фильтр, основанный на резонаторах на объемных акустических волнах (ОАВ), имеет следующие преимущества по сравнению с другими фильтрами: низкие вносимые потери, небольшой размер и широкий диапазон рабочих частот (от 0,5 ГГц до 30 ГГц) [2]. Производство фильтров на ОАВ имеет ряд сдерживающих факторов:

1) сложность технологического производства резонаторов с отражателем для фильтров на ОАВ;

2) методы проектирования не позволяют управлять характеристиками резонаторов при построении фильтров.

Цель данной статьи – рассмотреть современные способы получения, конструкцию и перспективы применения полосовых фильтров на ОАВ по данным мировой технической литературы.

Фильтры на ОАВ можно разделить на следующие типы: лестничный, решетчатый и смешанный [3]. Конструктивно лучшие показатели предоставляют фильтры лестничного типа. Как показывают исследования, характеристики лестничных фильтров ОАВ в основном определяются характеристиками резонаторов, из которых состоит фильтр [4].

С появлением новых технологий интерес ученых привлекают ранее не востребованные методы производства тонкопленочных резонаторов. Недавние публикации сообщают, что разработанные технологии позволяют получить тонкую пленку таких пьезоэлектрических материалов, как AlN, ZnO и др. [4,5]. При изготовлении устройств на ОАВ применяются те же технологические приемы: магнетронное напыление и выращивание тонких пленок пьезоматериалов с различными физическими и химическими свойствами, фотолитография и др. [4].

Существует несколько типов конструкций резонаторов, используемые для формирования полосового фильтра на ОАВ. Основными являются резонатор мембранного типа и резонатор с акустическим отражателем.

Конструкция резонатора мембранного типа проста как для производства, так и для математического моделирования с целью расчета параметров. Именно поэтому фильтры, состоящие из резонаторов на ОАВ мембранного типа, широко применяют при создании средств мобильной связи 4G/LTE. В будущем ввиду относительной дешевизны такие фильтры будут способствовать росту «технологии 5G» из-за высоких характеристик в высокочастотных диапазонах [6].

Основным преимуществом резонаторов на ОАВ с акустическим брэгговским отражателем по сравнению с резонатором на ОАВ мембранного типа является надежность.

В конструкции резонатора на ОАВ с брэгговским акустический отражателем подложка не влияет на нормальную работу пьезоэлектрического преобразователя, так как она акустически изолирована. Благодаря этому повышается надежность резонатора.

Брэгговский акустический отражатель выполнен с использованием четвертьволнового способа в виде системы чередующихся слоев тонких пленок с различными акустическими импедансами.

Количество чередующихся слоев определяется экспериментально и зависит от акустических импедансов материалов пленок. Недостаток конструкции такого резонатора – более сложная технология, так как требуется напыление большого числа слоев с высокой точностью по толщине [7].

В статьях [8; 9] представлены подходы к проектированию, основанные на оптике, для настройки акустического отражателя для эффективного отражения как продольных, так и поперечных волн. Первый использует теорию стоп-зон в оптике, второй – периодическую природу спектров отражения в брэгговском акустическом отражателе. Данные подходы позволяют исключить потери в подложке резонатора.

Чтобы быстро и точно реализовать конструкцию фильтра на ОАВ, обычно применяется модель Баттерворта – Ван Дайка, которая описывает характеристики фильтра с учетом потерь в пьезоэлектрическом слое и в тонкопленочных электродах. В этой модели эквивалентной схемы для описания резонатора на ОАВ используются сосредоточенные элементы, что способствует быстрой оптимизации частотных характеристик фильтра [10].

В настоящее время фильтры на ОАВ и микроэлектронные резонаторы на ОАВ соответствуют всем современным требованиям к микроволновым устройствам: низкая стоимость производства, малые габаритные размеры, широкий диапазон рабочих частот и т. д. Предложенный С. Джозе способ к проектированию акустического отражателя можно эффективно использовать при разработке резонатора на ОАВ.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Bhadauria A. Panchal B., Varghese S. RF Bandpass Filters using FBAR with Fractal Electrodes // CSIR-CEERI, Pilani, Rajasthan, India, 2018.*

[2] *Гуляев Ю.В., Мансфельд Г.Д. Резонаторы и фильтры сверхвысоких частот на объемных акустических волнах: современное состояние и тенденции развития // Радиотехника. 2003.*

[3] *Kim H.-Y. Rf Bulk Acoustic Wave Filters // Artech House Publishers, Norwood, USA, 2009. P. 275.*

[4] *Двоешерстов. М.Ю., Чередник В.И.* Полосовые СВЧ фильтры на основе тонкопленочных акустических резонаторов. Теория и эксперимент // Акустический журнал. 2015. Т. 61, № 6. С. 692–700.

[5] *Voiculescu I., Nordin A.N.* Acoustic Wave Based MEMS Devices, Development and Applications // Microelectromechanical System and Devices, 2012. P. 65–86.

[6] *Bakertain M.* A Review of Radio Frequency Front-end Filters Based on Film Bulk Acoustic Resonators (FBAR) // University of Southern California, South Los Angeles, USA, April 2018. P. 1–10.

[7] *Зима В.Е., Корж И.А.* Пьезоэлектрические тонкопленочные резонаторы СВЧ диапазона // Техника радиосвязи. 2008. Вып. 13. С. 152–160.

[8] *Jose S., Jansman A., Hueting R., Schmitz J.* Optimized Reflector Stacks for Solidly Mounted Bulk Acoustic Wave Resonators // Transactions on ultrasonic, Ferroelectrics, and frequency control. 2010. Vol. 57, no. 12. P. 2753–2763.

[9] *Jose S., Jansman A., Hueting R.* A design procedure for an acoustic mirror providing dual reflection of longitudinal and shear waves in Solidly Mounted BAW Resonators // IEEE Ultrasonics Symposium. 2009. P. 2111–2114.

[10] *Chao M.-C., Huang Z.-N., Pao S.-Y., Wang Z., Lam C.S.* Modified BVD-equivalent circuit of FBAR by taking electrodes into account // Proceedings of 2002 IEEE Ultrasonics Symposium, 2002. P. 948–951.

Дубинин Роман Александрович,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
I курс аспирантуры,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, ramonus_skullus@mail.ru

МИНИАТЮРИЗАЦИЯ ИНТЕГРАЛЬНЫХ LC-ЭЛЕМЕНТОВ СВЧ-ДИАПАЗОНА

Н. В. Жандецкая

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент Т. К. Болецкая

Аннотация. Статья посвящена исследованию частотных характеристик интегральных LC-элементов. Была изготовлена тест-плата с LC-элементами, произведены зондовые измерения их частотных характеристик и сравнение с электромагнитным анализом.

Ключевые слова: МДМ-технология, интегральные LC-элементы, зондовые измерения.

1. Введение

Так как большинство современных высокочастотных радиоустройств – мобильные, у них должны быть минимальные размеры и вес. Одно из направлений миниатюризации радиоустройств – это уменьшение габаритов их пассивной части с помощью технологии МДМ. При использовании МДМ-технологии достигается наибольший выигрыш в габаритах [1].

Целью работы стало исследование индуктивности и емкости интегральных МДМ элементов в СВЧ диапазоне и определение влияния конструкции L- и C-элементов на их частотные характеристики.

2. Методы расчета LC-элементов

Методы расчета индуктивности и емкости различаются в зависимости от выбранного диапазона частот. Для низкочастотного диапазона это формулы с эмпирическими коэффициентами. Индуктивности и емкости на высоких и сверхвысоких частотах рассчитываются с помощью специальных систем автоматизированного проектирования (САПР) с возможностью электромагнитного анализа. Расчет в электромагнитных симуляторах позволяет получить приближенные к реальным значения электромагнитных параметров для конкретной геометрии элемента.

В данной работе используется САПР AWR Design Environment, где применяются 2.5D симулятор AXIEM и 3D

Analyst. Так как результаты сравнения 2,5D и 3D симуляторов [2], показали, что значения, полученные в АХИЕМ и Analyst, отличаются незначительно, то использовался симулятор АХИЕМ из-за его быстрого действия.

3. Моделирование LC-элементов

Было принято решение определить, как будут изменяться электромагнитные параметры устройства (частота резонанса, индуктивность и емкость) при следующих параметрах элементов: катушки с одинаковой шириной витка и шириной зазора от 30 мкм до 60 мкм с шагом в 10 мкм, а также катушки с удвоенным зазором. Конденсаторы с размерами от 600 до 100 мкм с шагом 25 мкм. Ширина подводящей полосковой линии в первой итерации соответствовала ширине витка для катушек и составляла 30 мкм для конденсаторов. Во второй итерации ширина подводящей линии – 100 мкм. Катушки моделировались с 1, 2, 3 и 4 витками.

Было проведено моделирование 98 элементов (катушек и конденсаторов) в среде AWR DE и были выявлены следующие закономерности: при увеличении размеров катушек и конденсаторов, индуктивность и емкость увеличивается, а резонансные частоты уменьшаются; увеличивая размер подводящих полосков, индуктивности и емкости меняются незначительно; при увеличении зазора между витками в два раза индуктивность увеличивается в полтора раза, а частота резонанса уменьшается.

Обратим внимание на пример частного случая, когда у катушки с размерами 40/40 мкм с 3 витками индуктивность составляет 5,62 нГн, а частота резонанса 5,2 ГГц. У катушки же с размерами 60/120 мкм с 2 витками индуктивность почти составляет 5,56 нГн, а частота резонанса равна 4,2 ГГц. Индуктивность у них практически одинаковая, но увеличение зазора и ширины витка отодвинуло резонанс на 1 ГГц.

4. Проверка результатов моделирования

Для проверки результатов электромагнитного расчета было принято решение физически реализовать промоделированные ранее элементы. Для этого была разработана специальная тест-плата. Чтобы оценить технологическую воспроизводимость элементов на плате, каждый элемент был выполнен в пяти экземплярах.

Первым этапом изготовления платы было создание чертежа того, как элементы будут на ней располагаться. Размер платы – 60x48 мм. Всего на чертеже было размещено 577 элементов.

Вторым этапом изготовления платы было изготовление комплекта фотошаблонов. Комплект состоит из шаблонов для первой металлизации, диэлектрика, отверстий для пазов, второй металлизации.

Для изготовления платы применялся маршрут, разработанный в отделе микроэлектроники ЦКБА. Он состоял из операций очистки, фотолитографий, напыления нижней и верхней металлизаций и диэлектрика, операций контроля и лазерной прошивки отверстий и т. д. На рис. 1 показано фото получившейся тест-платы.

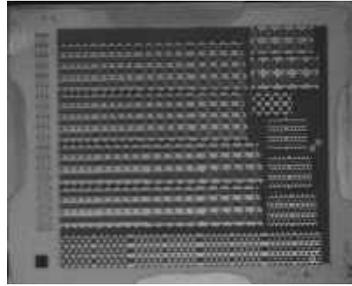


Рис. 1. Фото тест-платы

5. Контроль геометрических параметров

Далее было проведено измерение геометрических размеров элементов на измерительном микроскопе ИМЦ. Из произведенных измерений размеров элементов были выявлены следующие закономерности: средний уход по геометрии для всех элементов составляет 5 мкм, что является вполне приемлемым результатом.

6. Измерение электрофизических параметров

Для измерения номиналов емкостей и индуктивностей обычно используют RLC-метры. Для данной работы RLC-метры не подходят по следующим причинам: они не могут измерить нужные номиналы индуктивности и не могут измерять номиналы во всем диапазоне частот. Поэтому для измерений во всем диапазоне частот использовался векторный анализатор цепей с применением зондовой станции. Результат таких измерений представляется в виде матрицы S-параметров, и S-параметры интерпретируются как индуктивность и емкость с помощью САПР.

На графиках на рис. 2 показаны примеры АЧХ для катушки с размерами 40/40 мкм с 3 витками первой итерации и конденсатора с размерами верхней обкладки 475 x 475 мкм первой итерации.

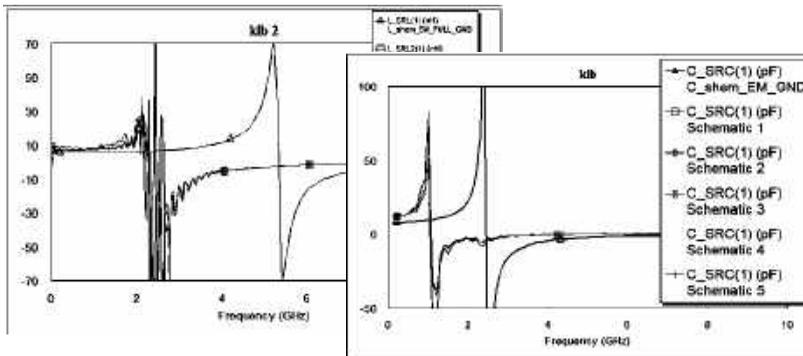


Рис. 2. Амплитудно-частотная характеристика для катушки и конденсатора

7. Результаты и выводы

Был определен набор конструкций LC-элементов в МДМ исполнении (56 вариантов для катушек, 42 вариантов для конденсаторов), созданы 3D модели выбранных конструкций в САПР AWR DE с последующим электромагнитным анализом в модуле Axiem. Для проверки результатов ЭМ моделирования была разработана и изготовлена тест-плата по МДМ технологии, на которой были выполнены зондовые измерения S-параметров 490 МДМ LC-элементов в диапазоне 0...20 ГГц, с предварительным контролем их топологии и номиналов.

В результате измерений было выявлено, что индуктивность у катушек увеличилась на 1–2 нГн по сравнению с электромагнитным моделированием. Емкость конденсаторов изменилась не существенно для конденсаторов с размерами до 300 x 300 мкм, после – видно увеличение в 2 раза по сравнению с моделированием. Для низких номиналов индуктивности и емкости наблюдается наибольшее смещение частоты резонанса. Наиболее вероятная причина – несовершенство измерительной системы и процедуры калибровки в области СВЧ измерений.

Полученные данные позволили выявить некоторые закономерности влияния конструкции на LC-параметры, которые можно использовать для создания практических рекомендаций по проектированию интегральных МДМ LC-элементов.

В дальнейшем планируется скорректировать метод измерения и на основании полученных результатов перейти к моделированию последовательностей LC-элементов, например, LC-фильтрам.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Петренко И.М., Иванов А.А.* Миниатюризация широкополосных трактов промежуточной частоты // Обмен опытом в создании сверхширокополосных радиоэлектронных систем: сборник докладов научно технической конференции. Омск: Изд-во ОмГТУ, 2010.

[2] *Жандецкая Н.В.* Обзор методов расчета интегральных индуктивностей // Современные проблемы радиофизики и радиотехники: сборник докладов Омского научного семинара. Вып. 7. Омск: ОНИИП, 2019.

[3] *Bahl I.* Lumped Elements for RF and Microwave Circuits // ARTECH HOUSE INC, 2003.

[4] *Джозель П.* Дансмор. Измерение параметров СВЧ-устройств с использованием передовых методик векторного анализа цепей. М.: Техносфера, 2018.

Жандецкая Наталья Владимировна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
II курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, zhandetskayanatalia@yandex.ru

МЕТОД КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ ДЛЯ РАСЧЕТА РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО И МАГНИТНОГО ПОЛЕЙ СВЕТОВЫХ ВОЛН В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ВОЛНОВОДАХ

Е. В. Киселева

Научный руководитель: канд. физ.-мат.наук, доцент Т. К. Болецкая

Аннотация. В работе методом конечных разностей рассчитаны распределения напряженностей электрического и магнитного полей в двумерной области в двух случаях: 1) границы области отражающие; 2) границы области поглощающие.

Ключевые слова: метод конечных разностей, оптические волноводы, распределения электрического и магнитного полей.

Оптические волноводы широко распространены и области их применения постоянно расширяются [1; 2]. Характеристики реальных волноводов невозможно вычислить аналитически. Нужно использовать приближенные методы расчета, один из которых – метод конечных разностей [3].

Метод конечных разностей заключается в следующем: пространство и время дискретизируются; в уравнениях Максвелла все производные заменяются конечными разностями. Из полученных разностных уравнений находятся неизвестные будущие поля через известные прошлые поля.

Будем считать, что электромагнитные волны распространяются в плоскости, перпендикулярной оси z , поля в них зависят от координат x и y , но не зависят от координаты z . Будем рассматривать ТЕ-волны, у которых отличны от нуля компонента напряженности электрического поля E_z , и компоненты напряженности магнитного поля H_x и H_y . Уравнение эволюции для E_z имеет вид:

$$E_z^{q+1}[m,n] = E_z^q[m,n] + \left(\frac{\Delta_t}{\varepsilon\varepsilon_0\Delta_y} \left\{ H_y^{q+\frac{1}{2}} \left[m + \frac{1}{2}, n \right] - \right. \right.$$

$$-H_y^{q+\frac{1}{2}}\left[m-\frac{1}{2},n\right]\left\{-\frac{\Delta_t}{\varepsilon\varepsilon_0\Delta_y}\left\{H_x^{q+\frac{1}{2}}\left[m,n+\frac{1}{2}\right]-H_x^{q+\frac{1}{2}}\left[m,n-\frac{1}{2}\right]\right\}\right\}, \quad (1)$$

где $H_x^q[m,n]=H_x(m\Delta_x, n\Delta_y, q\Delta_t)$, $H_y^q[m,n]=H_y(m\Delta_x, n\Delta_y, q\Delta_t)$, $E_z^q[m,n]=E_z(m\Delta_x, n\Delta_y, q\Delta_t)$, m , n и q – целые числа, Δ_x и Δ_y – размеры пространственных шагов в направлениях x и y , Δ_t – временной шаг.

Будем считать, что $\Delta_x = \Delta_y = \delta$, введем $S_c = \frac{c\Delta_t}{\delta} = \frac{\Delta_t}{\delta\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}}$ – число Куранта. Тогда коэффициенты, входя-

щие в (1) выразятся через число Куранта и $\eta_0 = \sqrt{\mu_0/\varepsilon_0}$ – импеданс вакуума. Если среда однородна, то есть ε и μ во всех точках одинаковы, число Куранта принимается равным $S_c = 1/\sqrt{2}$ – оптимальному значению, соответствующему условию устойчивости.

При вычислениях по формуле (1) E_z остаются равными нулю на границе области. Это значит, что область ограничена идеальными электрическими проводниками и электромагнитная волна отражается от ее границ.

Число узлов вдоль осей x и y принималось равным $M = N = 101$. Источник электромагнитного поля находится в центре области и задается вейвлетом Рикеля:

$$E_z^q\left[\frac{M-1}{2},\frac{N-1}{2}\right]=\left(1-2\pi^2\left[\frac{S_c q}{N_p}-1\right]^2\right)\exp\left(-\pi^2\left[\frac{S_c q}{N_p}-1\right]^2\right), \quad (2)$$

$f_p = c/N_p/\delta$ – максимальная частота, присутствующая в спектре функции (2).

На рис. 1а показано распределение E_z в момент времени $110\Delta_t$. К моменту времени $110\Delta_t$ поле достигает всех четырех границ области и отражается от них.

Для того чтобы можно было выполнять расчеты для области с поглощающими границами, нужно модифицировать уравнения эволюции для E_z в узлах, находящихся на границах.

Если E_z удовлетворяет одному из уравнений

$$\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\sqrt{\varepsilon\mu}}{c} \frac{\partial E_z}{\partial t} = 0, \quad (3)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial x} + \frac{\sqrt{\varepsilon\mu}}{c} \frac{\partial E_z}{\partial t} = 0, \quad (4)$$

то E_z является решением волнового уравнения.

Решением уравнения (3) является функция $E_z \left(t + \frac{\sqrt{\varepsilon\mu}}{c} x \right)$, описывающая волну 1, распространяющуюся в отрицательном направлении оси x . Решением уравнения (4) является функция $E_z \left(t - \frac{\sqrt{\varepsilon\mu}}{c} x \right)$, описывающая волну 2, распро-

страняющуюся в направлении оси x . Для того чтобы не было отражения, на левой границе должна существовать только волна 1, а на правой границе – только волна 2.

Поэтому E_z на левой и правой границах должно находиться не из уравнения Максвелла (1), а из уравнений (3) и (4) соответственно. Выполняя конечно-разностные аппроксимации уравнений (3) и (4), получаем:

$$E_z^{q+1}[0] = E_z^q[1] + \frac{S_c / \sqrt{\mu\varepsilon} - 1}{S_c / \sqrt{\mu\varepsilon} + 1} (E_z^{q+1}[1] - E_z^q[0]), \quad (5)$$

$$E_z^{q+1}[M] = E_z^q[M-1] + \frac{S_c / \sqrt{\mu\varepsilon} - 1}{S_c / \sqrt{\mu\varepsilon} + 1} (E_z^{q+1}[M-1] - E_z^q[M]). \quad (6)$$

Уравнения для E_z на нижней и верхней границах подобны уравнениям (5) и (6).

На рис. 16 приведено распределение E_z в момент времени $110\Delta_t$. Отражения волны от границ области не происходит.

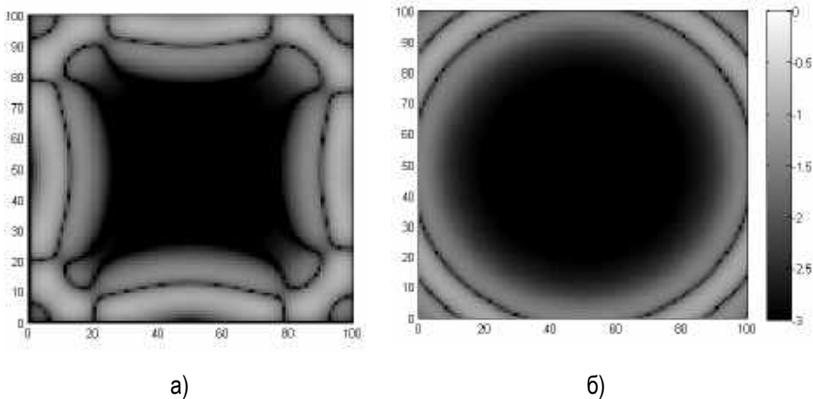


Рис. 1. Распределение E_z

а) границы области отражающие; б) границы области поглощающие.
Используется логарифмический масштаб

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Адамс М.* Введение в теорию оптических волноводов. М., 1984. 512 с.
- [2] *Унгер Х.-Г.* Планарные и волоконные оптические волноводы М., 1984. 656 с.
- [3] *Schneider J.B.* Understanding the Finite-Difference Time-Domain Method, 2014. 403 с.

Киселева Евгения Валерьевна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
I курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, kiselevazh.96@yandex.ru

ФОРМИРОВАНИЕ ПРОЕКТНОЙ КОМПЕТЕНЦИИ У СТУДЕНТОВ СРЕДСТВАМИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ РОБОТОТЕХНИКИ

Я. Р. Кутафина

Научный руководитель: д-р пед. наук, профессор М. П. Ланкина

Аннотация. В настоящий момент наблюдается быстрый рост развития информатизации, который подразумевает внедрение информационных компьютерных технологий в разные сферы человеческой деятельности, особенно активно это происходит в сфере образования.

В качестве средства формирования проектной компетенции студентов была выбрана такая отрасль инновационных технологий, как образовательная робототехника. Она является интегрированной дисциплиной, предполагает формирование умений проектирования, моделирования и конструирования робототехнических устройств, программирования и тестирования, работу с электронными устройствами, а также презентацию полученных результатов. При изучении робототехники формируются как регулятивные универсальные учебные действия, которые направлены на формирование умений планировать, оценивать и корректировать свои действия, так и коммуникативные, проявляющиеся в умении организовывать деловое общение и презентовать результаты своей работы.

Ключевые слова: проект, проектная деятельность, компетенции, образовательная робототехника, Lego Education, Lego Mindstorms.

Одним из приоритетных направлений современного образования является организация проектной деятельности как способ и метод формирования компетенций.

Предъявление результатов проектной деятельности в процессе защиты проектных работ позволяет обучающимся осмыслить приобретенные знания, умения и навыки, интегрировать их в новом виде деятельности [5].

Образовательная робототехника является эффективным материалом и средством для проектной деятельности учащихся, так как каждый робот, создаваемый студентами, является мини-проектом. Проектируя любую модель, учащиеся анализируют техническое задание и подручные средства, создают информационную модель будущего робота, продумывают алгоритм его работы, а потом

формализуют его физически и программно, т. е. занимаются проектной деятельностью. Учащиеся выбирают средства робототехники как материал для своих проектно-исследовательских работ [4].

Основные этапы разработки Лего-проекта практически не отличаются от стандартных этапов учебного проектирования. Учащиеся обозначают тему проекта, его цель и задачи. Затем выдвигают гипотезу и разрабатывают модель на основе конструктора Лего. После составления программы для работы собранной модели или механизма происходит тестирование и устранение дефектов и неисправностей.

Приоритетным направлением образовательной робототехники является серия наборов Лего-конструирования. На сегодняшний день фирма Лего производит 2 типа конструкторов, применяемых в системе образования: Lego Education и Lego Mindstorms [3]. Фундаментальными отличиями данных наборов является то, что Lego Education нацелен на использование их в образовательных дисциплинах, таких как физика, технология, химия и т.д. В отличие от Lego Education набор Mindstorms не нацелен на определенную образовательную дисциплину, обладая способностью мобильности (интеграции в образовательный процесс). Еще одной особенностью набора Mindstorms является наличие программируемого микропроцессора, что позволяет создавать управляемые модели. Исходя из вышеперечисленных особенностей, для нашего исследования наибольший интерес представляет именно этот набор.

Опираясь на публикации отечественных исследователей (А.А. Вербицкий, И.А. Зимняя) [2; 4], в структуре проектной компетенции можно выделить 3 компонента: мотивационный, когнитивный и деятельностный, а также выявляем пять этапов формирования проектной компетенции в процессе изучения курса «Основы образовательной робототехники»:

- 1) на начальном этапе начинает формироваться мотивационный компонент;
- 2) на адаптивном этапе развивается мотивационный компонент проектной компетенции;
- 3) на когнитивном этапе образовательного процесса происходит накопление знаний в области конструирования и програм-

мирования в рамках технологий Лего, то есть формируется когнитивный компонент проектной компетенции;

4) на рефлексивном этапе происходит актуализация потребности самообразовательной рефлексивной деятельности и осуществляется переход на уровень продуктивной рефлексии, продолжается развитие когнитивного компонента проектной профессиональной компетенции;

5) на деятельностном этапе процесса изучения курса «Основы образовательной робототехники» формируется деятельностный компонент проектной компетенции, формируется творческое отношение студентов к процессу конструирования и изучению дисциплин, связанных с прикладным и объектно-ориентированным программированием [4].

Необходимо отметить, что образовательная робототехника на сегодняшний день носит соревновательный характер, т. е. каждый учащийся, занимающийся данными технологиями, вместе со своим руководителем может принять участие в специальных соревнованиях по данным направлениям, которые получили название «World Robot Olympiad» – всемирная олимпиада роботов. Данная олимпиада проходит в двух категориях: основная и творческая.

Идея данной олимпиады заключается в том, что участникам задается тема создания проектов и критерии оценивания. Участие проходит в трех возрастных категориях. В процессе оценивания проектов жюри начисляет баллы. Участники, получившие высшие оценки (баллы) по сумме всех критериев оценки проекта считаются победителями и награждаются дипломами.

Проанализировав литературу и проведя сравнительный анализ деятельности по разработке Лего-проекта и формированию проектной компетенции, можно сделать некоторые предварительные выводы:

1. В педагогической теории проблема использования образовательной робототехники в учебном процессе остается недостаточно изученной.

2. Предполагается, что образовательная робототехника является эффективным средством организации проектной и исследовательской деятельности студентов и школьников.

3. Педагогические и дидактические возможности образовательной робототехники являются многогранными, т.к. спектр применения современных конструкторов Лего весьма широк.

4. Образовательная робототехника обладает возможностью интегрирования в учебный процесс по таким образовательным дисциплинам как информатика, физика, химия и технология.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Александров А.П. Современная робототехника: положение и перспективы // Современные тенденции развития науки и технологий. 2015. № 8. С. 9–12.

[2] *Вербицкий А.А.* Контекстно-компетентностный подход к модернизации образования. Высшее образование в России. 2010. № 5. С. 32–38.

[3] *Ершов М.Г.* Робототехника как объект изучения в курсе физики средней школы. Педагогическое образование в России. 2015. № 3. С. 117–125.

[4] *Зимняя И.А.* Ключевые Компетентности как результативно-целевая основа компетентностного подхода в образовании. М., 2004.

[5] *Новиков А.М.* Методология учебной деятельности. М., 2005.

Кутафина Яна Рубеновна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
I курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, ahyana789@gmail.com

ИНДИВИДУАЛЬНЫЙ ПОДХОД К ДОЗИМЕТРИЧЕСКОМУ ПЛАНИРОВАНИЮ РАДИОЙОДТЕРАПИИ НА ОСНОВЕ ФК МОДЕЛИРОВАНИЯ

Д. С. Лизогуб

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент А. В. Матвеев

Аннотация. Разработана модель кинетики радиофармпрепарата при радиойодтерапии. Приведена методика расчета поглощенных доз на основе данной модели. Результаты моделирования используются для индивидуального дозиметрического планирования радиотерапии щитовидной железы.

Ключевые слова: моделирование, радиойодтерапия, щитовидная железа.

Ядерная медицина – раздел клинической медицины, который занимается диагностикой и лечением с применением радионуклидных фармацевтических препаратов (РФП). В лечении преобладает радиойодтерапия (РЙТ).

Методика индивидуального дозиметрического планирования (ИДП) радионуклидной терапии (РНТ) заключается в следующем:

1. Сначала пациенту вводится диагностическая активность используемого РФП, которая в 100–500 раз ниже терапевтической активности.
2. В течение нескольких дней неоднократно в динамике проводится радиометрия всего тела и (или) отдельных органов.
3. По результатам радиометрии формируются функции удержания РФП в патологических очагах и в других органах-источниках, накапливающих РФП.
4. Пациенту проводят рентгенографию, КТ, УЗИ или какое-либо другое исследование для определения массы органов-мишеней и облучаемых патологических очагов.
5. Рассчитываются значения удельной дозы для органа-мишени (дозы на единицу введенной диагностической активности РФП).

6. По полученному значению удельной дозы и рекомендуемому значению суммарной очаговой дозы рассчитывается величина терапевтической активности РФП, которая должна быть введена пациенту.

7. Анализируется лучевая нагрузка при выбранной величине терапевтической активности РФП на критические по радиочувствительности органы-мишени, не накапливающие или частично накапливающие РФП.

Проблема дозиметрического обеспечения РНТ распадается на две взаимосвязанные задачи – дозиметрическое планирование предполагаемого врачом облучения и контроль очаговых, органных и общих доз, создаваемых в организме человека после введения терапевтической активности.

Тело принимается состоящим из органов-источников, которые активно адсорбируют радиоактивные медицинские препараты, и ряда органов-мишеней, которые облучаются излучением, выходящим из органов-источников. Для самопоглощающей опухоли с однородным распределением радионуклида средняя доза D (Гр) определяется следующим уравнением:

$$D = \frac{\mathcal{A}}{m} \sum_i \Delta_i \varphi_i,$$

где \mathcal{A} – кумулятивная (суммарная или накопленная) активность в опухоли (в МБк·ч); m – масса опухоли (г); Δ_i – константа равновесной мощности дозы для каждого ядерного перехода (Гр/(МБк·ч)); φ_i – доля поглощаемой энергии.

\mathcal{A} – равна площади под кривой зависимости активности от времени для данного органа:

$\mathcal{A} = \int_0^{\infty} A(t) \times dt$, где $A(t)$ – текущее значение активности в органе-источнике в момент времени t .

Для описания кинетики радиойода в организме человека мы используем пятикамерную математическую модель, геометрическая схема которой представлена на рис. 1. Подробнее математические модели кинетики РФП рассматриваются в нашей работе [1].

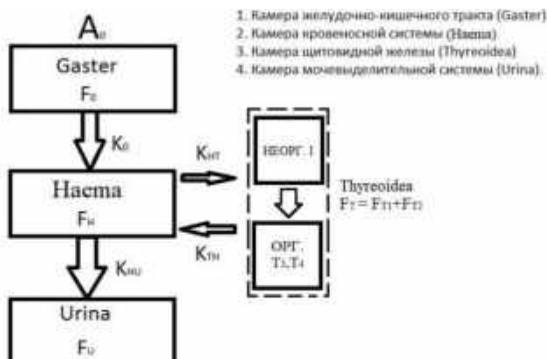


Рис. 1

Система уравнений, описывающая данную модель, имеет вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dF_0(t)}{dt} = -(K_0 + \lambda)F_0(t), \\ \frac{dF_H}{dt} = K_0F_0(t) + K_{TH}F_T(t) - (K_{HT} + K_{HU} + \lambda)F_H(t), \\ \frac{dF_{T_1}}{dt} = K_{HT}F_H(t) - (K_{12} + \lambda)F_{T_1}, \\ \frac{dF_{T_2}}{dt} = K_{12}F_{T_1}(t) - (K_{TH} + \lambda)F_{T_2}, \\ \frac{dF_U(t)}{dt} = K_{HU}F_H(t) - \lambda F_U(t). \end{array} \right. \quad (1)$$

Нами разработана программа для идентификации транспортных констант K_0 , K_{HT} , K_{TH} и K_{HU} с помощью функционала невязки и метода Хука – Дживса. Функционал невязки записывается в виде:

$$F(\vec{K}) = \sum_{i=1}^N \{F_T^{\text{теор}}(t_i) - F_T^{\text{экс}}(t_i)\}^2, \quad (2)$$

где $F_T^{\text{теор}}$ и $F_T^{\text{экс}}$ – теоретические и экспериментальные значения относительной активности РФП в щитовидной железе (ЩЖ).

Решение системы уравнений (1) проводилось численно с помощью метода Розенброка на основе идентифицированных транспортных констант по формуле (2). Нами была написана программа на языке СИ++ с использованием принципов объектно-ориентированного программирования.

На рис. 2, в качестве примера, приведены рассчитанные по формуле (1) кривые «Активность – Время» для одного пациента и экспериментальные значения накопленной активности в ЩЖ.

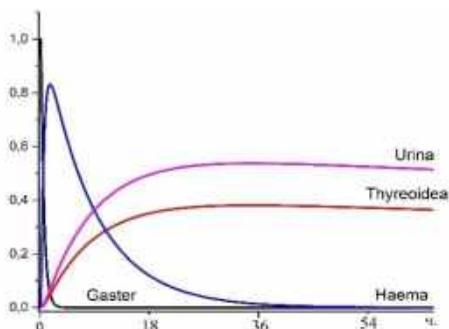


Рис. 2. Кривые «Активность – Время»

В дальнейшем полученные зависимости «Активность – Время» планируется использовать для расчета индивидуальной терапевтической активности РФП, при введении которой в организм в ЩЖ будет реализоваться запланированная врачом поглощенная доза (согласно методике ИДП). Подробнее с методикой ИДП, фармакокинетической модели и формулами для расчета поглощенных доз можно ознакомиться в работе [2].

ЛИТЕРАТУРА

[1] Лизогуб Д.С., Матвеев А.В. Радионуклидные методы исследования в диагностике заболеваний щитовидной железы // Молодежь третьего тысячелетия: сб. науч. статей. Омск, 2017. С. 701–706.

[2] Матвеев А.В., Носковец Д.Ю. Особенности дозиметрического планирования радиойодтерапии на основе фармакокинетического моделирования // Вестник Омского университета. 2016. № 3. С. 74–83.

Лизогуб Денис Сергеевич,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
I курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, dlizogub@gmail.com

ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИЙ ПОДХОД К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧИ ЭМС АНТЕНН В БЛИЖНЕЙ ЗОНЕ

К. А. Майненгер

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент Т. К. Болецкая

Аннотация. В статье рассмотрены вопросы влияния антенно-фидерных устройств КВ диапазона, находящихся по отношению к друг другу в ближней зоне. Приведены результаты электродинамического анализа электромагнитной совместимости антенн и их экспериментальных исследований.

Ключевые слова: электромагнитная совместимость, антенно-фидерные устройства, логопериодическая антенна.

Введение

Как показывает практика при размещении АФУ на площадке ограниченных размеров, число антенн может достигать 10, а размеры площадки таковы, что антенны могут находиться в ближней зоне. Расстояние между антеннами при таком размещении составляет менее одной длины волны, что ведет к сильному взаимному влиянию АФУ друг на друга. [1].

Цель статьи – теоретические и экспериментальные исследования влияния антенно-фидерных устройств, расположенных на площадке ограниченных размеров.

ЭМС антенн на площадке ограниченных размеров

При установке АФУ на ограниченных площадях основным источником взаимных помех являются сигналы [1], поступающие в аппаратуру через антенно-фидерную систему. Взаимное влияние между ними учитывается специальным параметром – коэффициентом развязки. Коэффициент развязки между антеннами характеризуется отношением мощности, подводимой к одной из антенн к мощности, наведенной в нагрузку другой антенны и показывает, во сколько раз ослабляется излучение передатчика при попадании на вход приемника через его антенно-фидерную систему и определяется следующим выражением:

$$K_{\text{разв}} = 10 \cdot \log \frac{P_1}{P_2}, \quad (1)$$

где P_1 – мощность, подведенная к передающей антенне, P_2 – мощность наведенная в приемной антенне, I_1, I_2 – ток в передающей и приемной антенне.

В практике часто бывают случаи, когда необходимо вычислить минимальное значение и характер коэффициента развязки. Зная значения коэффициента развязки, можно провести предварительную оценку расположения состава комплекса связи.

Логопериодические антенны

В качестве дальнейшего исследования и проведения испытаний была выбрана разработанная АО ОНИИП логопериодическая антенна с поворотным устройством антенного полотна. Сложная геометрическая форма излучателей требует долгих и трудоемких расчетов, поэтому наиболее приемлемо использование машинного вычисления.

Модель такой антенны была создана с помощью пакета прикладных программ, реализующих метод конечных элементов (FEM) [2]. Далее был проведен электродинамический анализ построенной модели. Рисунок этой модели изображен на рис. 1.

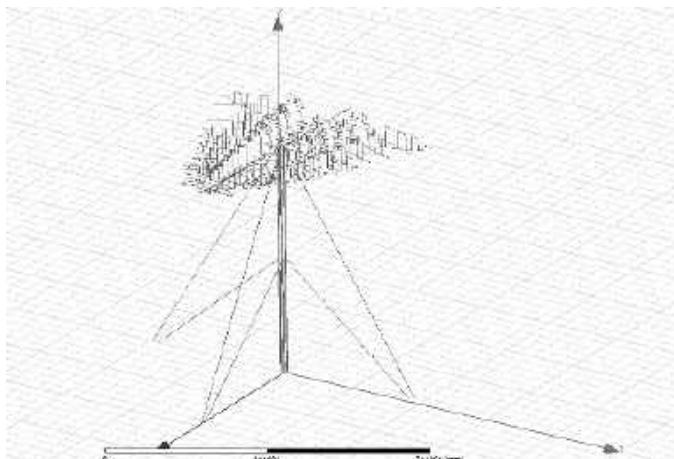


Рис. 1. Модель логопериодической антенны, с излучателями фрактальной формы

Для исследования ЭМС антенн такого типа, была рассмотрена реальная ситуация размещения антенн, на площадке ограниченных размеров. Две логопериодические антенны, размещенные

по отношению к друг другу в ближней зоне, включены на передачу и прием. Для оценки ЭМС этих антенн, при моделировании проводится расчет коэффициента передачи S_{12} , который так же характеризует отношение мощности на выходе системы, к мощности на входе системы, что в свою очередь эквивалентно коэффициенту развязки между антеннами.

Коэффициент передачи рассчитывался, для разных углов поворота антенны как показано на рис. 2.

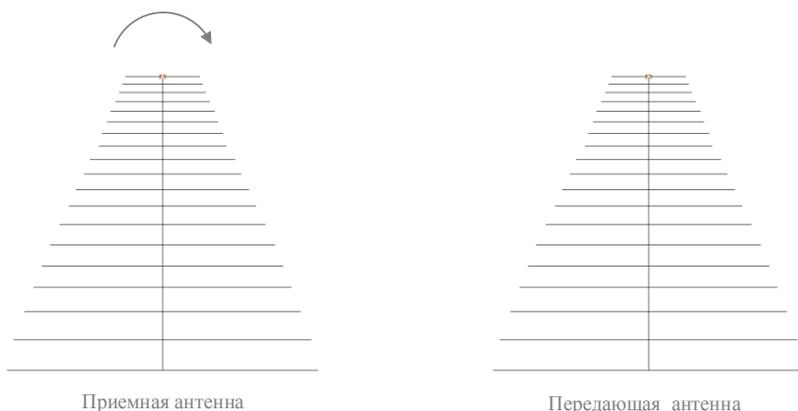


Рис. 2. Схема расположения исследуемых антенн

Результаты расчета коэффициента развязки приведены на рис. 3.

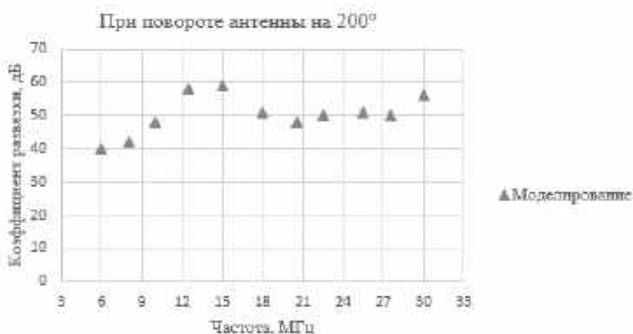


Рис. 3. График зависимости коэффициента передачи от частоты, при заданном положении антенного полотна

Эксперимент

Для подтверждения теоретических результатов проводились испытания при работе на прием и передачу двух логопериодических антенн, находящихся в тех же условиях, что и в модели. На рис. 3 приведены значения коэффициента развязки данных моделирования и данных натурных измерений, проводимых на территории полигона АО ОНИИП.

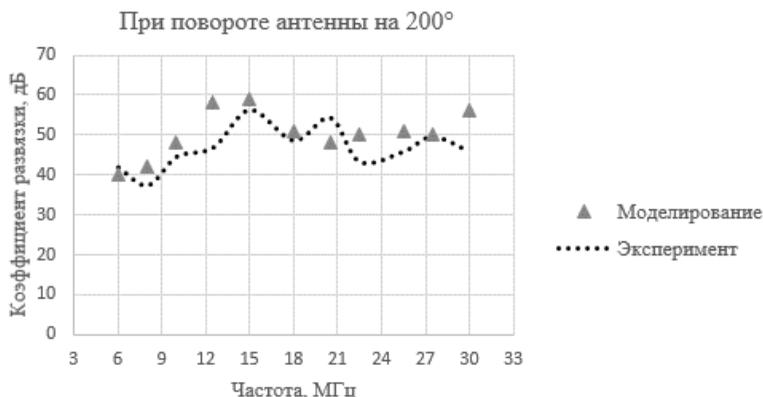


Рис. 3. График зависимости коэффициента передачи и коэффициента развязки от частоты, при заданном положении антенного полотна

Эксперимент подтвердил результаты теоретического исследования, что позволило сделать вывод о возможности использования предложенного метода расчета для других антенн коротковолнового диапазона. Результаты могут быть полезны при проектировании комплексов связи с высокими требованиями к ЭМС.

Заключение

Предложенный метод может положен в основу расчетов ЭМС для комплексов связи декаметрового диапазона радиоволн, размещаемых на площадках небольших размеров. А полученные результаты проведенных численных исследований могут быть использованы, например, для проведения предварительной оценки степени обеспечения ЭМС радиоэлектронных средств на данном локальном объекте.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Севостьянов С.В.* Расчет развязки антенн на основе их электродинамического анализа // Антенны. 2002. № 1. 212 с.

[2] *Банков С.Е., Курушин А.А.* Электродинамика и техника СВЧ для пользователей САПР. М.: Солон-Пресс, 2008. 276 с.

Майненгер Ксения Алексеевна,
Омский государственный университет им Ф. М. Достоевского,
II курс магистратуры,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а

ИЗУЧЕНИЕ ТЕПЛОПЕРЕНОСА РАЗЛИЧНЫМИ ТИПАМИ СОСУДОВ В ОРГАНИЗМЕ ЧЕЛОВЕКА

Н. Д. Малиновская

Научный руководитель: канд. биол. наук, доцент М. Г. Потуданская

Аннотация. Теплоперенос в организме, осуществляемый конвективным и кондуктивным процессами, является малоизученным явлением. Изучение процесса теплопереноса в сосудах различного типа позволяет приблизиться к решению проблемы переноса тепла в организме в целом. Экспериментальные исследования непосредственной теплоотдачи при кровотоке провести сложно, поэтому произведено математическое моделирование теплообмена между тканью и кровью, протекающей в артериальных сосудах.

Ключевые слова: теплоперенос, сосудистое русло, сосуды, теплоотдача, кровь, математические модели.

Существующее распределение температуры обусловлено физиологическими процессами теплопереноса, теплоотдачи и теплопродукции. Улучшение условий поступления артериальной крови вызывает повышение температуры конечности, а значит, эффективность кровоснабжения можно оценивать с помощью методов термометрии и термографии. Своевременная диагностика заболеваний на основе анализа температуры тела является актуальной задачей современной медицины.

Теплоперенос в организме осуществляется током крови и за счет разницы температур в различных точках. Проведем анализ теплообмена между тканью и кровью на математической модели [1]. Будем считать, что на артериальном конце сосудов кровь имеет одну и ту же температуру – 37,5 °С, температуру среды примем равной характерной температуре кожи человека – 34 °С. По закону сохранения энергии, изменение количества теплоты крови эквивалентно количеству теплоты, уходящей через боковую поверхность рассматриваемого элемента сосуда:

$$-c \times m \times (T_{i+1} - T_i) = \alpha_{эф} \times S \times (T_i - T_{cp}) \times \Delta t, \quad (1)$$

где c – удельная теплоемкость крови; m – масса крови в единичном объеме; $\alpha_{эф}$ – эффективный коэффициент теплообмена крови, те-

кущей по сосуду; S – площадь боковой поверхности выделенного элемента сосуда; T_{cp} – температура ткани, окружающей сосуд; T_i и T_{i+1} – температура крови в выделенном элементе сосуда во время t_i и t_{i+1} , соответственно.

В соответствии с существующими данными [2]:

$$\alpha_{эф} = \frac{1}{\frac{1}{\alpha_{внут}} + \frac{1}{\alpha_{внеш}}},$$

где $\alpha_{внут}$ – коэффициент теплоотдачи, связанный с конвекцией крови по сосуду; $\alpha_{внеш}$ – коэффициент теплоотдачи, связанный с теплоотдачей от сосуда в окружающую ткань.

Коэффициент теплоотдачи от движущейся крови к стенке сосуда постоянен и равен:

$$\alpha_{внут} = 3,66 * \frac{\lambda_{кр}}{d},$$

где $\lambda_{кр}$ – коэффициент теплопроводности крови; d – диаметр сосуда.

Коэффициент теплоотдачи от сосуда в окружающую ткань:

$$\alpha_{внеш} = 0,5 * \frac{\lambda_{ТК}}{d},$$

где $\lambda_{ТК}$ – коэффициент теплопроводности в ткани.

Таким образом, коэффициент $\alpha_{эф}$ так же будет постоянной величиной.

Дифференциальная форма уравнения (1) примет вид:

$$c \times m \times dT = -\alpha_{эф} \times S \times (T - T_{cp}) \times dt. \quad (2)$$

Интегральное решение этого уравнения в соответствии с данными авторов принимает следующий вид: [3]:

$$T = (T_0 - T_{cp}) * \exp\left(\frac{-2 * \alpha_{эф} * t}{c * \rho * R}\right) + T_{cp}, \quad (3)$$

где T_0 – температура крови на входе в сосуд; T – температура крови на выходе из сосуда. Время t , движения крови по сосуду, определяется из соотношения $t = L / V$, где L – длина сосуда, а V – скорость движения крови по сосуду.

Процесс отдачи тепла из крови, движущейся в различных сосудах, в ткани можно представить в виде следующего выражения:

$$q = q_{\text{вх}} - q_{\text{вых}} = c \times W \times (T_{\text{вх}} - T_{\text{вых}}) = c \times W \times \Delta T, \quad (4)$$

где $q_{\text{вх}}$ и $q_{\text{вых}}$ – количество тепла в крови, входящей и выходящей из сосуда в единицу времени, соответственно; c – удельная теплоемкость крови; W – количество крови, входящее в сосуд в единицу времени, которое для каждого сосуда составляет величину $\rho \times \pi \times R^2 \times V$, где R – радиус сосуда, V – скорость движения крови в сосуде, ρ — плотность крови.

Представленная в таблице величина тепла крови q , вычисленная с использованием приведенных исходных данных по уравнению (4) характеризует состояние организма. Путем анализа локализации аномального тепловыделения можно судить о состоянии внутренних органов и всего организма в целом. Такого рода анализ удобно проводить методами термометрии и термографии, так как они являются экспрессными, неинвазивными и инструментальными, что обеспечивает их объективность, фиксацию, хранение и обработку результатов анализа. Тем самым раскрывается важность рассмотренных в настоящей работе математических моделей для теоретического обоснования современных методов диагностики различных заболеваний.

Характеристики артериальных сосудов

Радиус сосуда	Длина сосуда	Линейная скорость кровотока	Время нахождения единицы объема крови в сосуде	Объемная скорость кровотока	Температура крови на выходе из сосуда	Тепло крови
R, м	L, м	V, м/с	t, с	W, м ³ /с	T, °C	q, Дж
$0,5 \cdot 10^{-4}$	$0,45 \cdot 10^{-2}$	$1,5 \cdot 10^{-2}$	0,3	$0,118 \cdot 10^{-3}$	34,1	1,6
$1 \cdot 10^{-4}$	$0,6 \cdot 10^{-2}$	$3 \cdot 10^{-2}$	0,2	$0,942 \cdot 10^{-3}$	35,3	8,08
$2 \cdot 10^{-4}$	$0,85 \cdot 10^{-2}$	$4,8 \cdot 10^{-2}$	0,177	$6,032 \cdot 10^{-3}$	36,87	14,8
$3 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-2}$	$6 \cdot 10^{-2}$	0,166	$16,954 \cdot 10^{-3}$	37,045	19,8

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Лучаков Ю.И., Камышев Н.Г., Шабанов П.Д.* Перенос тепла кровью: сопоставление расчетных и экспериментальных данных // *Обзоры по клинической фармакологии и лекарственной терапии.* 2009. Т. 7. С. 3–20.
- [2] *Исаченко В.П., Осипова В.А., Сукомел А.С.* Теплопередача. М., 1981. 417 с.
- [3] *Амелькин В.В.* Дифференциальные уравнения в приложениях. М., 1987. 158 с.

Малиновская Ника Дмитриевна,
Омский государственный университет им Ф. М. Достоевского,
I курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а

ФАРМАКОКИНЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИ РАДИОНУКЛИДНОМ ИССЛЕДОВАНИИ ПОЧЕК

С. П. Михайлов

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент А. В. Матвеев

Аннотация. Представлена математическая модель кинетики нефротропного радиофармпрепарата в организме человека при радионуклидном исследовании почек. Проведены расчеты индивидуальных фармакокинетических характеристик и построены кривые «Активность – Время» для 39 пациентов на основе клинических данных динамической нефросцинтиграфии.

Ключевые слова: динамическая нефросцинтиграфия, фармакокинетическое моделирование.

Динамическая нефросцинтиграфия – это радиологическое исследование почек путем фиксации прохождения через почки нефротропных радиофармпрепаратов. В результате в различные моменты времени формируются изображения накопления препарата в почечной ткани, прохождение его в чашечно-лоханочный аппарат и далее в мочеточники. Изображения дополняются компьютерным расчетом определенных показателей и построением графиков. Полученная информация позволяет судить о функциональном состоянии отдельных участков почечной паренхимы и верхних мочевыводящих путей.

Для интерпретации количественных результатов такого исследования и для его научного обоснования прибегают к параллельному моделированию кинетики введенного в организм пациента радиофармпрепарата (РФП). Такие математические модели называют фармакокинетическими или камерными [1].

Анализ результатов динамической сцинтиграфии производят в два этапа: 1) визуальным способом; 2) с помощью количественной оценки полученных кривых «активность-время». Визуальный анализ реносцинтиграмм позволяет оценить топографию, размеры, форму почек, наличие задержки индикатора в чашечно-лоханочной системе и мочеточниках, составить предварительное заключение о поглотительной и выделительной функциях каждой

почки. Кривые «активность–время» с области почек имеют характерный вид ренограмм с сосудистым, функциональным (либо фильтрационным, либо секреторным) и экскреторным сегментами.

Для описания кинетики нами использовалась камерная модель, учитывающая переход РФП из плазмы крови в почки за счет его фильтрации почками и выход препарата с мочой в мочевой пузырь.



Рис. 1. Схема модели кинетики Тс-99м-пентатеха при динамической сцинтиграфии почек

Математические уравнения в рамках данной модели имеют вид:

$$\frac{df_H(t)}{dt} = -(k_{H1} + k_{H2} + \lambda)f_H(t) ,$$

$$\frac{df_{R1}(t)}{dt} = k_{H1}f_H - (k_{1U} + \lambda)f_{R1}(t) ,$$

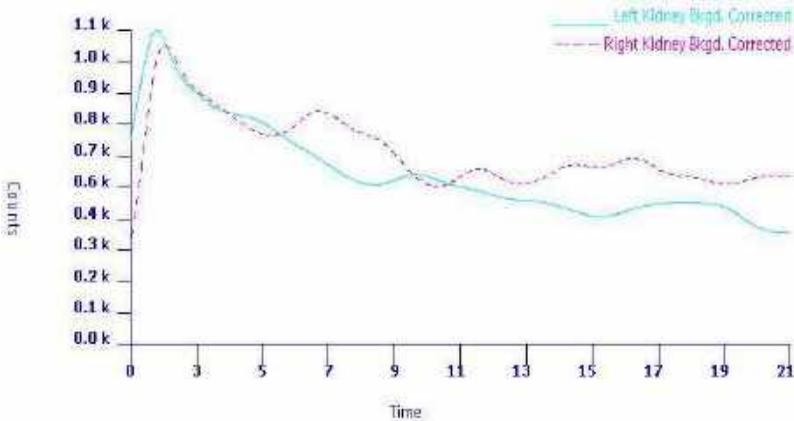
$$\frac{df_{R2}(t)}{dt} = k_{H2}f_H - (k_{2U} + \lambda)f_{R2}(t) ,$$

$$\frac{df_U(t)}{dt} = k_{1U}f_{R1} + k_{2U}f_{R2} - \lambda f_U(t) .$$

С учетом того, что РФП вводится внутривенно, начальные условия для функций относительной активности запишутся в виде: $f_H(0) = 1$; $f_R(0) = 0$; $f_{R2}(0) = 0$; $f_U(0) = 0$.

Данный подход к моделированию кинетики РФП при исследовании функции почек позволяет оценить фильтрационно-экскреторную функцию каждой почки. Транспортные константы k связаны с основными количественными показателями динамической нефросцинтиграфии и наряду с ними могут быть использо-

ваны при функциональной оценке мочевыделительной системы. Нами была разработана методика идентификации транспортных констант модели на основе количественных данных динамической нефросцинтиграфии.



Для реализации выше изложенной фармакокинетической модели были получены клинические данные динамической нефросцинтиграфии на базе радиологического отделения БУЗОО «Областная клиническая больница» для 39 пациентов, которые проходили диагностику в 2015–2016 гг. Все пациенты были нами расклассифицированы на три группы:

- 1) нормальный тип ренограммы для обеих почек (Н-тип ренограммы),
- 2) афункциональный тип ренограммы хотя бы для одной почки (А-тип),
- 3) обструктивный тип ренограммы хотя бы для одной почки (О-тип).

Были изучены и проанализированы количественные показатели радионуклидной диагностики почек и установлена их связь с транспортными константами модели. Создан простейший вариант расчетной программы на языке СИ++. С ее помощью проведены расчеты транспортных констант и построены кривые «Активность – время» для 39 пациентов. В качестве примера на рис. 2 приведены клинические ренограммы и рассчитанные в рамках че-

тырехкамерной модели кривые «Активность – время» для одного пациента с Н-типом ренограмм.

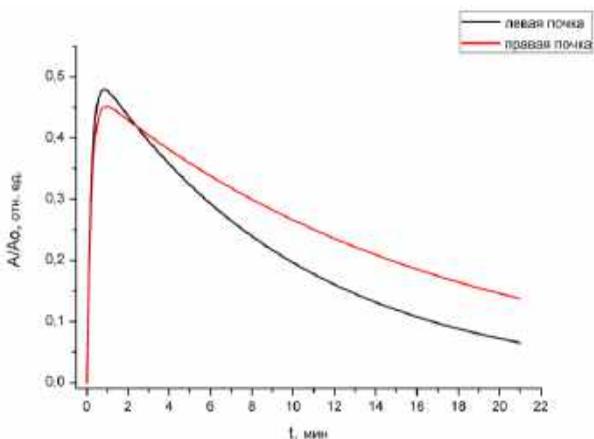


Рис. 2. Клинические ренограммы для обеих почек (сверху) и соответствующие модельные кривые «Активность – время» (снизу) для одного пациента

При обработке результатов динамической нефросцинтиграфии 39 пациентов установлено, что у 6 из них имеет место афункциональный тип ренограммы, у 13 – обструктивный и у 22 наблюдаются нормальные либо близкие к ним ренограммы. Причем у одного пациента ренограммы обеих почек имеют О-тип, у двух пациентов ренограммы одной почки имеют А-тип, другой – О-тип.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Матвеев А.В.* Ядерная медицина: радиоизотопы и фарм-препараты: учебное пособие. Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та, 2016. С. 28–56.

Михайлов Станислав Павлович,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
I курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, cnfc55@mail.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ КОРРЕЛЯЦИИ ПРОИЗВОДНЫХ ГЕМОГЛОБИНА И СОДЕРЖАНИЯ ГЛЮКОЗЫ В КРОВИ МЕТОДОМ СПЕКТРОФОТОМЕТРИИ

В. И. Постовая

Научный руководитель: канд. биол. наук, доцент М. Г. Потуданская

Аннотация. В статье описана методика определения содержания общего гемоглобина в крови человека методом спектрофотометрии. Получены спектры поглощения Hb при разном уровне глюкозы на спектрофотометре СФ-56, и рассчитана концентрация дериватов гемоглобина. На основе полученной информации сделаны выводы о влиянии концентрации глюкозы в крови на содержание производных гемоглобина.

Ключевые слова: общий гемоглобин, спектрофотометрия, анализ на уровень глюкозы, производные гемоглобина.

Кровь является многокомпонентной биологической системой; биомолекулы форменных элементов крови и плазмы поглощают фотоны с различными длинами волн, поэтому спектр поглощения крови достаточно широк. Мишенями для оптического излучения являются аминокислоты, белки, липиды, полисахариды клеточных мембран и цитоплазмы, гемоглобин.

Главным объектом воздействия УФ-света являются эритроциты, которые содержат дыхательный пигмент – гемоглобин, обеспечивающий ткани кислородом [1]. В крови гемоглобин существует, по крайней мере, в четырех формах: редуцированный гемоглобин (дезоксигемоглобин) и оксигемоглобин, обеспечивающие нормальную транспортно-дыхательную функцию организма, карбогемоглобин и метгемоглобин.

Существуют также и другие формы гемоглобина: солянокислый гематин, карбоксигемоглобин (HbCO), циангемоглобин (CNHb), азидметгемоглобин (NaN₃MetHb), сульфгемоглобин (SHb) и др., образующиеся *in vivo* или *in vitro* в результате взаимодействия гемоглобина с различными веществами [2]. В данной работе исследуются окси-, дезокси-, карбокси- и метгемоглобин. В зависимости от колебаний уровня глюкозы в крови, отслежива-

лось изменение спектра поглощения и изменение концентрации производных гемоглобина.

Методика измерения глюкозы

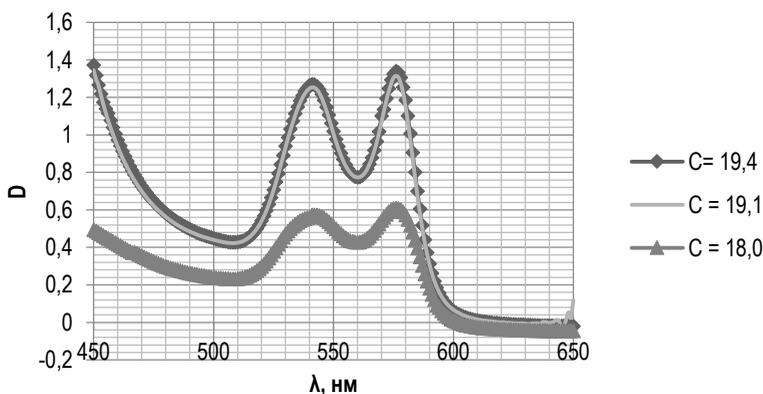
Для исследования крови на содержание глюкозы использовалась капиллярная кровь больного сахарным диабетом I типа. Забор крови и определение концентрации глюкозы осуществляется с помощью портативного анализатора Акку-чек Актив. В ходе эксперимента было последовательно осуществлено несколько заборов крови натощак в разные дни. Для каждой пробы готовился образец из цельной крови.

Методика измерения общего гемоглобина

Для получения полного спектра гемоглобина используется цельная капиллярная кровь. Кровь гемолизируется перемораживанием при температуре -18°C в течение 1 часа. Разборная кювета с длиной оптического пути 0,1 мм наполняется кровью, кювета сравнения остается пустой. Кювета с образцом крови облучается ртутной лампой ДРГС-30 с использованием светофильтра УФС-1. Оптическая плотность крови измеряется при помощи спектрофотометра СФ-56. По спектрам поглощения с помощью программы "НемоSpectr" рассчитывается содержание оксигемоглобина, дезоксигемоглобина, карбоксигемоглобина и метгемоглобина.

Результаты измерений

Для исследуемых проб получены спектры поглощения растворов цельной крови. Они представлены на рисунке.



Спектры поглощения для образцов с разным уровнем глюкозы

Соотношение уровня глюкозы и дериватов гемоглобина

<i>Номер образца</i>	<i>Концентрация глюкозы, ммоль/л</i>	<i>Дериваты Hb</i>	<i>Концентрация дериватов, %</i>
1	19,4	HbO ₂	95,9
		HbCO	2,2
		MetHb	1,9
		HНb	0,0
2	19,1	HbO ₂	91,0
		HbCO	1,9
		MetHb	1,4
		HНb	5,7
3	18,0	HbO ₂	72,0
		HbCO	2,0
		MetHb	1,5
		HНb	24,5

Из рисунка видно, что при большей концентрации глюкозы в крови оптическая плотность дериватов гемоглобина выше. На рисунке ярко выражен спектр поглощения оксигемоглобина, который имеет пики при длинах волн 541 нм и 576 нм. Было установлено, что в спектре с более высоким содержанием глюкозы более высокое содержание оксигемоглобина. Это ни в коем случае не связано с лучшим связыванием кислорода с дезоксигемоглобином. Кислородное насыщение крови вне зависимости от уровня глюкозы в артериальной крови лежит в пределах 98–99 %. Более высокое содержание оксигемоглобина в капиллярной крови свидетельствует о нарушении газообменной функции. Так как вязкость крови с более высоким содержанием глюкозы выше, то капиллярный кровоток замедлен и не во все капилляры поступает достаточное количество крови, что уменьшает площадь контакта эритроцитов со стенками обменных сосудов и препятствует передаче кислорода гемоглобином. Анализ таблицы показывает, что концентрации карбокси- и метгемоглобина в течение всех экспериментов были достаточно стабильны, и уровень глюкозы в крови на них не влияет.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Бескровная Е.В., Мосур Е.Ю.* Количественный спектрофотометрический анализ: лабораторный практикум для студентов IV курса физического факультета. Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та, 2010. 48 с.

[2] *Кривенцев Ю.А., Бисалиева Р.А. Носков А.И.* Гемоглобины человека // Вестник АГТУ. 2007. № 6(41). С. 34–41.

Постовая Виктория Игоревна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
II курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, Мира, 55а, lifeiscolour@mail.ru

АДГЕЗИЯ ТОНКИХ ПЛЕНОК НИТРИДА АЛЮМИНИЯ К КРЕМНИЮ

Н. Р. Тачитдинова

Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, профессор В. И. Струнин

Аннотация. Представлены результаты атомно-силовой микроскопии тонких пленок AlN, полученных при разных режимах напыления. Проведен анализ результатов исследования адгезии AlN с целью правильности выбора технологических параметров процесса нанесения покрытий.

Ключевые слова: адгезия, адгезионная прочность, тонкие пленки, нитрид алюминия.

Предмет измерения тонкопленочной адгезии представлял большой интерес с момента разработки микроэлектронных устройств. Надежность этих устройств зависит, прежде всего, от того, насколько хорошо тонкие пленки «прилипают» друг к другу и подложкам. Адгезионные силы являются определяющими при работе устройств микросистемной техники, определяют прочность композиционных материалов [1].

Существует ряд методов определения адгезии. Наиболее распространенными методами количественного определения величины адгезии являются методы вдавливания различными инденторами, прямого отрыва пленки от подложки, а также метод скрайбирования (царапанья) [2].

Методом, позволяющим оценивать силовое воздействие в диапазоне от пико- до микро- ньютонов при размере пятна контакта от десятков до сотен нанометров, соизмеримом с деталями сопряжений микроэлектромеханических систем, является атомно-силовая микроскопия (АСМ). Значения адгезии определяются в режиме силовой спектроскопии методом прямых измерений величины отклонения консоли при нарушении адгезионного контакта. В этом случае одним из двух контактирующих тел является острый зонд АСМ [3].

Для измерений были выбраны образцы, полученные методом магнетронного распыления при разных температурах. Измерения проводились на приборе Bruker Multimode 8, использовались острые зонды на гибкой балке ScanAsyst-Air.

Результаты сканирования для разных образцов представлены на рис. 1а, б. Данные изображения отражают рельеф поверхности на площади 5×5 мкм. Это так называемое 2D – представление данных сканирования, при котором высоты, соответствующие отдельным точкам сканирования, отображаются с помощью цветовой палитры таким образом, что впадинам соответствуют более темные тона, а по мере увеличения высоты рельефа цвет становится светлее. Цветовая шкала высот приведена справа от скана.

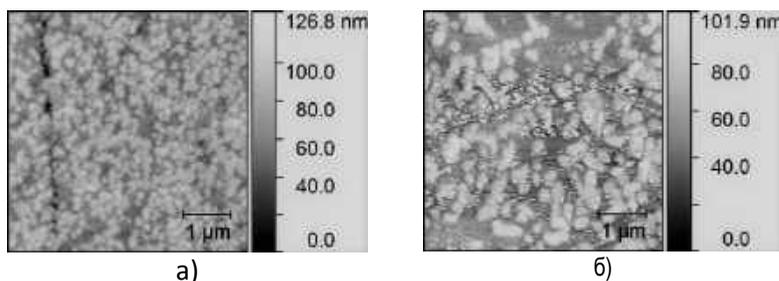


Рис. 1. АСМ изображения поверхности образцов 5×5 мкм, полученных при температуре: а) 300°C ; б) 360°C

Канал адгезии отражает нечто похожее на зерна (рис. 2). По границам зерен светлые пиксели, на самих зернах пиксели картинки темнее. Это связано с клейкостью зонд-образец, когда зонд попадает в низинку, то есть рядом с атомами зонда становится много атомов поверхности (во время простукивания), к которым он временно пристает силами Ван-дер-Ваальса. Можно оценить размеры зерен, их равномерность распределения по поверхности, равномерность их формы и размеров.

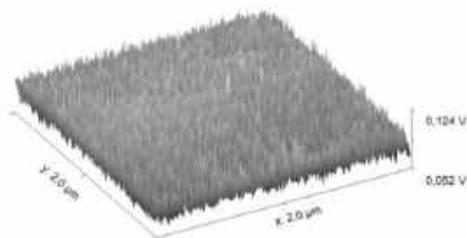


Рис. 2. 3D-изображение поверхности образца 2×2 мкм, полученного при температуре 400°C

АСМ измеряет отклонение зонда как функцию сближения с исследуемой поверхностью. На начальной стадии расстояние между иглой и поверхностью большое и между ними нет взаимодействия. Когда игла приближается к поверхности, силы Ван-дер-Ваальса начинают изгибать кантилевер. В определенной точке, когда силы притяжения будут достаточно большими, игла делает скачок к поверхности. Дальнейшее движение поверхности в контакте с иглой вызывает прогиб консоли в противоположном направлении. Когда движение идет в обратную сторону, благодаря силам адгезии игла прилипает к поверхности и после точки нулевого изгиба. В конце концов упругая консоль отскочит от поверхности и потеряет с ней контакт. Сила, требуемая чтобы оторвать иглу от поверхности, соответствует силе адгезии.

Соответствующая отводу зонда часть силовой кривой зачастую соответствует кривой подвода, однако чаще наблюдается гистерезис. Наиболее часто тип гистерезиса соответствует определенному виду адгезии, которая проявляется в силовой кривой как изгиб вниз от исходного равновесного состояния. На рис. 3 представлен вид кривой подвода-отвода зонда к поверхности образца.

Из графика видно, что для данного образца сила адгезии (F_a) равна 35 нН. Адгезию можно вычислить по формуле $\sigma = F_a/s$, где s – площадь контакта зонда с образцом. Адгезия для данного образца равна 445МПа. Аналогично проводим расчет для образцов, полученных при температуре 300 °С и 400 °С, адгезия для них равна 382МПа и 500МПа соответственно.

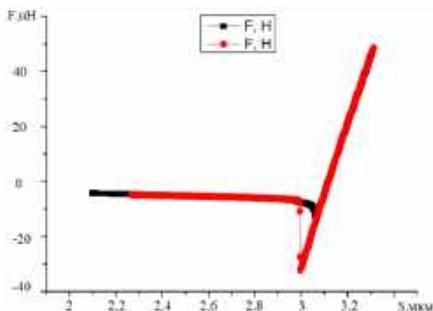


Рис. 3. Кривая подвода – отвода зонда для образца, полученного при температуре 360 °С

В данной работе проведено исследование адгезии тонких пленок нитрида алюминия, полученных с использованием магнетронного реактивного распыления при разных температурах. В результате измерений получена зависимость адгезии от температуры. Показано, что при увеличении температуры – адгезия повышается. С помощью этих данных можно судить о параметрах технологического процесса, а также использовать их для получения пленок с лучшей адгезией.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Зимон А.Д.* Адгезия пленок и покрытий. М.: Химия, 1977. 351 с.
- [2] *Углов А.А., Анищенко Л.Н., Кузнецов С.Е.* Адгезионная способность пленок. М.: Радио и связь, 1987. 104 с.
- [3] *Быков В.А., Лазарев М.И., Саунин С.А.* Сканирующая зондовая микроскопия для науки и промышленности // *Электроника: наука, технология, бизнес.* 1997. № 5. С. 7–14.

Тачитдинова Наталья Рамильевна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
II курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, Nataliya_tachitdinova@mail.ru

ОКИСЛЕНИЕ МЕДИ И БРОНЗЫ ПОСЛЕ ОБЛУЧЕНИЯ МОЩНЫМ ИОННЫМ ПУЧКОМ

А. А. Шмидт

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент Т. В. Панова

Аннотация. Исследовано влияние облучения мощным ионным пучком (МИП) наносекундной длительности на окисление меди и бронзы БрАЖ9–4. Установлено, что облучение МИП и последующее окисление на воздухе приводят к закономерному образованию оксидов меди на модифицированной поверхности чистой меди, тогда как на поверхности бронзы БрАЖ9–4 происходит формирование окисной пленки сложного состава.

Ключевые слова: окисление, мощный ионный пучок, бронза, медь.

Взаимодействие мощного ионного пучка (МИП) с металлами сопровождается процессами нагрева, плавления и испарения поверхности материала, перемешиванием компонент, протеканием химических реакций, возбуждением волн сжатия в мишени. В зависимости от плотности мощности пучка преобладают те или иные процессы. Облучение МИП приводит к модификации поверхностного слоя, улучшению эксплуатационных характеристик ряда материалов: электроэрозионной стойкости, уменьшению коэффициента трения, износостойкости и коррозионной стойкости [1]. Такое воздействие не должно сказаться и на окислительных свойствах металлов.

Окисление металлов – реакция соединения металла с кислородом, сопровождающаяся образованием окислов (оксидов). Направление процессов окисления металлов определяется как термодинамическим фактором – изменением свободной энергии при реакции, так и кинетическим – скоростью ее протекания, которая в значительной степени зависит от природы продуктов окисления и характера их взаимодействия с металлом [2]. Проще всего исследовать влияние облучения МИП на окислительные свойства металлов при их последующей термической обработке на воздухе в муфельной печи. Отжиг состоит из нагрева до заданной температуры, выдержки при ней и последующего охлаждения с необходи-

мой скоростью. Известно, что медь, взаимодействуя с кислородом печной атмосферы, окисляется, образуя в зависимости от температуры два окисла: окись CuO и закись Cu_2O [3]. При низких температурах (-100°C) на поверхности меди образуется пленка окиси меди черного цвета. При высоких температурах (выше 600°C) скорость окисления сильно возрастает, причем при этих температурах образуется плотная пленка закиси меди красного цвета. Целью настоящей работы являлось исследование влияния облучения МИП на окисление меди и бронзы.

В качестве объектов исследования были выбраны образцы чистой меди, сплав на основе меди – алюминиевая бронза БрАЖ9–4 (8–10 % Al, 2–4 % Fe, примесей не более 1,7 %). Образцы подвергались механическому шлифованию, полированию и облучению МИП. Обработку МИП проводили на ускорителе «ТЕМП» ионным пучком со следующими параметрами пучка: состав пучка $-\text{H}^+(30\%)$, $\text{C}^{n+}(70\%)$; энергия частиц 200 кэВ; плотность ионного тока на мишени $150 \text{ A}/\text{cm}^2$; длительность импульса 60 нс.

Кинетику процесса изучали методом окисления на воздухе в муфельной печи в течение 1,4 и 9 часов при температуре 400°C . Фазовый состав исследовали на дифрактометре ДРОН–3М.

На рис. 1 представлены дифрактограммы чистой меди и бронзы БрАЖ9–4 до и после облучения МИП с последующим отжигом при температуре 400°C в течение 1,4 и 9 часов. На дифрактограмме исходного образца обнаружены фазы меди с ГЦК решеткой и небольшое количество оксидов CuO , Cu_2O (рис. 1а). После облучения МИП и отжига процентное содержание оксидов закономерно возрастает. Бронза БрАЖ9–4 после облучения МИП фазовый состав не изменяет, в то время как после облучения МИП и отжига в печи при температуре 400°C возникает оксид меди (CuO) и оксид железа (Fe_2O_3) (рис. 1б).

На рис. 2 приведены гистограммы изменения интенсивности фаз в образцах меди (а) и бронзы БрАЖ9–4 (б) до и после облучения МИП с последующим отжигом в муфельной печи с различной продолжительностью выдержки. Из гистограммы (рис. 2а) видно, что после облучения МИП и отжига в течение 4 часов содержание фаз CuO и Cu_2O заметно сокращается. Это можно объяснить тем, что термообработка облученной меди приводит к образованию

слоя хрупкого оксида, толщина которого увеличивается с возрастанием времени отжига, что приводит к его частичному отделению от поверхности меди.

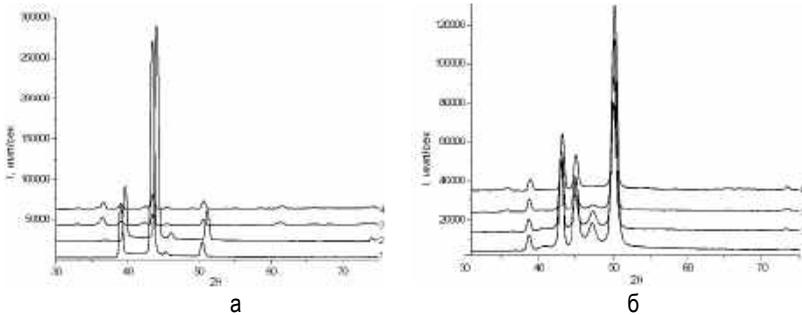


Рис. 1. Дифрактограмма меди (а) и бронзы БрАЖ9-4 (б) после облучения МИП с плотностью тока 150 А/см² и отжига:
1 – исходный; 2, 3 и 4 – отжиг 1, 4 и 9 часов соответственно

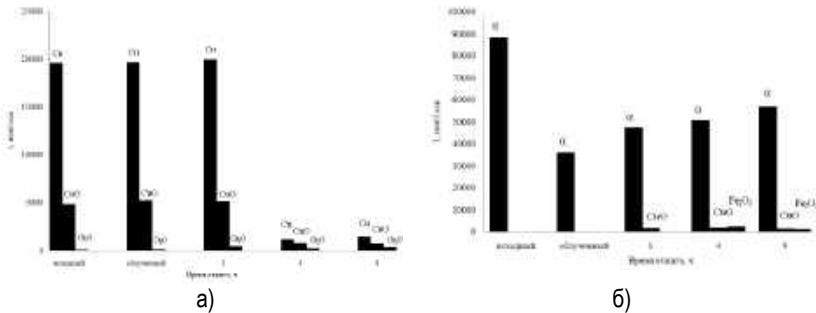


Рис. 2. Гистограммы изменения интенсивности фаз в образцах меди (а) и бронзы БрАЖ9-4 (б) после облучения МИП с плотностью тока 150 А/см² и отжига муфельной печи при температуре 400 °С в течение 1,4 и 9 часов

Из гистограммы (рис. 2б) видно, что после облучения МИП отжига бронзы БрАЖ9-4 в течение 1 часа на поверхности обнаруживается оксид меди CuO, а после отжига в течение 4 часов оксид железа Fe₂O₃. Известно, что образующаяся на поверхности бронзы оксидная пленка позволяет ей противостоять коррозии в активных влажных или газовых средах. А легирующие добавки железа оказывают положительное влияние на структуру бронзового сплава,

повышают его износостойкость, прочность и устойчивость к истиранию.

Таким, образом, установлено, что отжиг облученной МИП меди не изменяет состава продуктов окисления, а соотношение фаз определяется продолжительностью отжига. Облучение МИП бронзы БрАЖ9–4 приводит к формированию окисной пленки сложного состава, включающего помимо окисла меди окисел железа.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Ремнев Г.Е.* Модификация материалов с использованием мощных ионных пучков // Известия ТПУ. 2000. С. 59–69.

[2] *Панова Т.В., Ковивчак В.С., Блинов В.И., Стукова К.М.* Влияние обработки мощным ионным пучком на окислительные свойства металла и сплавов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2009. № 4. С. 12–16.

[3] *Натапов Б.С.* Термическая обработка металлов: учеб. пособие для вузов. Киев: Вища школа Головное изд-во, 1980. 288 с.

Шмидт Анна Андреевна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
II курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, annitashmidt@mail.ru

Секция

ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО ПРОДУКТА ДЛЯ ПИНЧ-АНАЛИЗА ХТС

М. И. Бабидорич

*Научный руководитель: ст. преподаватель кафедры ПХТС
на базе ПАО «ОНХП» О. А. Реутова*

Аннотация. В работе описаны результаты создания компьютерной программы для выполнения пинч-анализа, освещены ее возможности, достоинства и ограничения.

Ключевые слова: пинч-анализ, ресурсосбережение, теплообменные системы.

Большой объем и сложность практических задач интеграции процессов требует использования специфического программного обеспечения. Реальные проектные задачи могут содержать большое число технологических потоков, и поэтому проектировщику практически невозможно проанализировать все альтернативные проекты в деталях [1].

Существует ряд программных продуктов, позволяющих выполнить пинч-анализ объектов НПЗ. Одной из самых популярных программ является Aspen Energy Analyzer, входящая в пакет программ AspenONE. Существуют и другие аналоги, например, SuperTarget, «Ахиллес-НПЗ», SPRINT, PinCH, HeatIT. Эти программные продукты отличаются некоторыми недостатками: закрытость или дороговизна лицензий, английский язык интерфейса, неудобство использования, ограниченные возможности платформы.

Для создания собственной программы с пользовательским интерфейсом, наполненным графическими элементами, с возможностью проведения математических вычислений использовался язык программирования C# и технология Windows Presentation Foundation (WPF). WPF является частью экосистемы платформы .NET и представляет собой подсистему для построения графических интерфейсов.

Основная задача программы – создание компьютерной модели системы рекуперативного теплообмена в ХТС и визуализация полученной модели. Возможности программы на сегодняшний день следующие:

- формирование таблицы потоков с расчетом недостающих значений;
- построение составных кривых технологических потоков;
- построение температурного каскада теплообменной системы;
- определение точки пинча и минимально возможного энергопотребления;
- построение сеточной диаграммы по технологическим потокам.

Преимущества и требования разработанной программы

<i>Преимущества</i>	<i>Требования и ограничения</i>
Простой интерфейс	Требуется ОС Windows 8 и выше
Русский язык	Ограниченные возможности тестовой версии программы
Малый объем занимаемой памяти (как постоянной, так и оперативной)	
Открытая обратная связь с разработчиком	Минимальные знания пинч-анализа
Возможность адаптации продукта для планшетов, под управлением ОС Windows	

ЛИТЕРАТУРА

[1] Основы интеграции тепловых процессов / Смит Р., Клемеш Й., Товажнянский Л.Л., Капустенко. П.А., Ульев Л.М. Харьков: НТУ «ХПИ», 2000. 458 с.

Бабидорич Максим Иванович,
Омский государственный технический университет,
II курс магистратуры, ФЭОиМ,
644050, г. Омск, пр. Мира, 11, babidoritch2011@yandex.ru

3D-ПЕЧАТЬ МОДЕЛЕЙ АППАРАТОВ НЕФТЕПЕРЕРАБАТЫВАЮЩЕЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

М. И. Бабидорич, Б. В. Павлюченко

*Научный руководитель: ст. преподаватель кафедры ПХТС
на базе ПАО «ОНХП» О. А. Реутова*

Аннотация. В работе показана роль 3D-печати в обучении, описан процесс создания модели технологического аппарата от стадии компьютерного моделирования до 3D-печати на примере кожухотрубного теплообменника.

Ключевые слова: 3D-моделирование, 3D-печать, кожухотрубный теплообменник.

Трехмерное моделирование – это новый способ предоставления информации, который позволяет заменить 2D-изображения более наглядным образом, оптимизировать различные технологические процессы, заменяя натуральное макетирование.

Обучение студентов специальности «Химическая технология» подразумевает изучение внутреннего устройства аппаратов нефтеперерабатывающей промышленности. Основным источником информации – это устаревшие учебные пособия с упрощенным изображением разрезов аппаратов (рис. 1а).

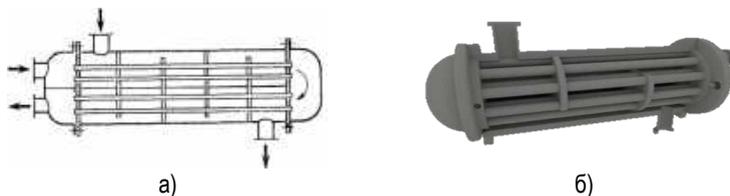


Рис. 1. Классическое изображение теплообменника (а) и 3D-модель (б)

Повысить качество усваиваемого материала студентами позволит демонстрация наглядных разборных трехмерных моделей (рис. 1б). Для их создания потребуется соответствующее программное обеспечение с возможностью экспортирования файла в формат .stl. Существует достаточно большое количество про-

грамм, имеющих такую возможность. Например, AutoCAD, Blender3D, SolidWorks, 3DS Max, Fusion 360 и другие. Модель теплообменного аппарата на рис. 1б выполнена в AutoCAD и Blender3D.

Для преобразования модели из формата .stl в код, читаемый принтером, используют программу-слайсер Cura. Помимо «нарезки» трехмерной модели на множество двумерных слоев, из которых 3D-принтер будет составлять физический объект, слайсер также управляет настройками параметров печати: температурой экструзии, скоростью печати, высотой слоя, плотностью заполнения детали.

Один из самых доступных методов 3D-печати – технология FDM. Создание модели происходит путем последовательного наплавления слоев материала, повторяющих контур печати. В качестве материала используют термопластичные полимеры, например пластик PLA (полиэфир молочной кислоты). PLA обладает рядом преимуществ: дешевизна, прочность готовых изделий, отсутствие ядовитых испарений при плавлении пластика в экструдере принтера. Низкая усадка пластика при охлаждении позволяют максимально точно повторить разработанную модель.

Разработанная модель теплообменного аппарата состоит из набора деталей, собирающихся в единое целое, как конструктор (рис. 2).

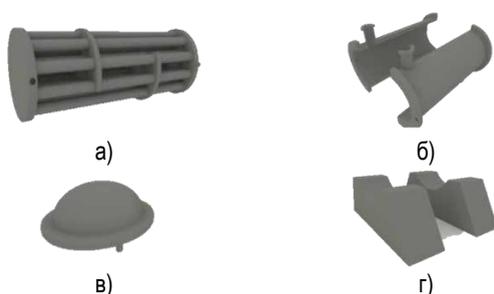


Рис. 2. Комплектация кожухотрубного теплообменника: трубный пучок (а), две зеркальные половины кожуха (б), два сферических днища (в), две опоры (г)

Полученная 3D-модель может использоваться в обучении студентов специальности «Химическая технология» для более полного представления об устройстве и принципах работы теплообменного аппарата [1], а сформированные при 3D-моделировании навыки позволят активно применять новые методы в проектировании химико-технологических систем.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Бощенко Т.В., Чепур П.В.* Опыт внедрения технологий прототипирования изделий на основе 3D печати в образовательный процесс высшего учебного заведения // Современные проблемы науки и образования. 2015. № 5. С. 546.

Бабидорич Максим Иванович,
Омский государственный технический университет,
II курс магистратуры, ФЭОиМ,
644050, г. Омск, пр. Мира, 11, babidoritch2011@yandex.ru

Павлюченко Богдан Вячеславович,
специалист компании «Ростелеком»

СОВРЕМЕННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ОЧИСТКИ СТОЧНЫХ ВОД НПЗ

Ю. С. Гноевых

*Научные руководители: ст. преподаватель кафедры ПХТС
на базе ПАО «ОНХП» О. А. Реутова;
канд. хим. наук, доцент П. Е. Нор*

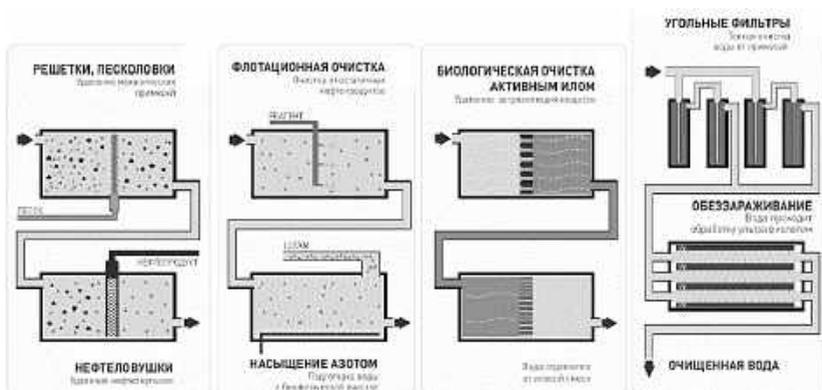
Аннотация. В работе представлена сравнительная характеристика открытой и закрытой технологической схемы водоочистки. С вводом современных технологических установок, совершенствованием технологических процессов, применением современных технологий очистки газовых выбросов и промышленных стоков предприятия стараются снизить нагрузку на окружающую среду. По результатам проведенных расчетов было выявлено, что наибольший вклад загрязнений приходится на механический блок. В ходе сравнительного анализа наблюдаем уменьшение валовых выбросы для сероводорода в 1,6 раз, гексана в 255 раз, бензола в 2,5 раза, ксилола в 4,7 раза, толуола в 5 раз, фенола в 37 раз.

Ключевые слова: технология, очистка стоков, НПЗ, механический блок.

На сегодняшний день нефтеперерабатывающие заводы (НПЗ) являются одними из водоемких предприятий [3]. Важным этапом любого технологического цикла является высококачественная очистка сточных вод. Применение воды на предприятии идет для охлаждения нефтепродуктов и оборудования, для обессоливания нефти, для промывки топлива после зашлакачивания, для приготовления щелочных растворов и для других технологических процессов [4]. Промышленные стоки нефтеперерабатывающего завода (НПЗ) представляют собой смесь воды, нефтепродуктов, сульфидов, аммонийного азота, фенолов, нитритов и других взвешенных веществ. Предприятия стремятся увеличить степень очистки применяемой в производстве воды и максимально сократить объем выбросов загрязняющих веществ в окружающую среду, тем самым уменьшить воздействие на здоровье человека. Основная цель очистки сточных вод – удаление взвешенных и растворимых органических и неорганических соединений до концен-

траций, которые не превышают заранее регламентированные предельно допустимые концентрации (ПДК) [1]. Очистные сооружения, выполненные в открытом исполнении, являются источниками загрязнения не только сточных вод, но и атмосферного воздуха, поскольку в процессе очистки загрязняющие вещества испаряются и поступают в воздух.

Комплекс очистки нефтесодержащих водных стоков состоит из нескольких стадий, в которых применяются улавливание нефти, аэрация, биологическая обработка активным илом, обеззараживание ультрафиолетовым облучением и адсорбция/фильтрация на угле (рис. 1). Сооружения очистки промышленных водосточков выполнены в закрытом варианте и находятся под азотной «подушкой», что позволяет снизить валовый выброс загрязняющих веществ в атмосферу [2].



На примере рассмотрения блока механической очистки открытого и закрытого типа, было выявлено, что на долю загрязняющих веществ наибольший вклад в суммарный выброс от всех очистных сооружений вносят вещества, относящиеся ко 2, 3, 4 классу опасности. 73 % приходится на долю фенола – 2 класс опасности, 43 % на долю гексана – 4 класс опасности и 31 % на долю толуола – 3 класс опасности.

На долю загрязняющих веществ наибольший вклад в суммарный выброс от всех очистных сооружений закрытого типа вносят вещества, относящиеся ко 2 и 3 классу опасности. 85 % выбросов приходится на долю бензола и 67 % на долю сероводорода – 2 класс опасности, 83 % выбросов – на долю толуола, относящегося к 3 классу опасности.

Расчет объемов валовых выбросов загрязняющих веществ в блоке механической очистки при переходе с открытого типа на закрытый показал уменьшение для сероводорода 1,6 в раз, гексана в 255 раз, бензола в 2,5 раза, ксилола в 4,7 раза, толуола в 5 раз, фенола в 37 раз.

Таким образом, с внедрением современных технологий на очистных сооружениях нефтеперерабатывающего завода повышается степень очистки воды, что, как следствие, препятствует попаданию химических веществ в окружающую среду и позволяет повторно использовать очищенные воды в производстве.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Вильде Т.* Экологическая программа нефтеперерабатывающих заводов «Газпром Нефти» // Сибирская нефть. 2017. №4/141. С. 38–41.

[2] *Гноевых Ю.С., Реутова О.А.* Снижение выбросов загрязняющих веществ от очистных сооружений НПЗ при переходе на закрытую систему // Материалы XXIII Междунар. экол. студенческой конф., 2018. С. 110.

[3] ИТС 8-2015 Очистка сточных вод при производстве продукции (товаров), выполнении работ и оказании услуг на крупных предприятиях. С. 15.

[4] Очистка сточных вод нефтеперерабатывающих заводов / Я.А. Карелин и [др.]. М.: Стройиздат, 1982. 182 с.

Гноевых Юлия Сергеевна,
Омский государственный технический университет,
I курс магистратуры, ФЭОиМ,
644050, г. Омск, пр. Мира, 11, juuliya_21@mail.ru

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЛИПИДОВ И ПРОДУКТОВ ИХ ОКИСЛЕНИЯ В РАЗНЫХ УСЛОВИЯХ

Е. П. Гро

Научный руководитель: д-р хим. наук, профессор И. В. Власова

Аннотация. Изучен процесс окисления липидов (на примере льняного масла) в разных растворителях – воде и смеси гексан : изопропанол. Вычислены коэффициенты поглощения масла и его окисленных структур в УФ-области. Показано, что с использованием УФ-спектров поглощения в широком интервале длин волн методом множественной линейной регрессии удастся правильно определить содержание масла и продуктов его окисления в каждом растворителе.

Ключевые слова: окисление липидов пероксидом, спектрофотометрия, метод множественной линейной регрессии.

Липиды играют большую роль в жизни человека. Естественным является и процесс их окисления, нарушение его может указывать на проблемы со здоровьем [1]. Для оценки содержания окисленных липидов в организме их извлекают в органические растворители. Часто с этой целью используют смесь гексана и изопропанола [1]. Авторы утверждают, что в растворитель извлекаются только продукты окисления жиров. Но доказательств селективности процесса не приводят, а без этого сложно судить, насколько точно определяются в органической фазе окисленные продукты. Целью настоящей работы являлось: на примере растительного масла оценить возможность спектрофотометрического определения липидов и продуктов их окисления в разных растворителях, используя УФ-поглощение в широком диапазоне длин волн и метод множественной линейной регрессии (МЛР). В качестве объекта анализа было выбрано аптечное льняное масло, в состав которого входит триглицерид линолевой кислоты (более 90 %) и свободная α -линолевая кислота (менее 10 %). Для приготовления водных растворов вначале по точной навеске готовили исходный раствор масла в изопропанол, затем небольшие аликвоты раствора переносили в мерные колбы на 25 мл и доводили

водой до метки. Рабочие растворы масла в смеси гексан : изопропанол (4 : 1) готовили путем разбавления аликвот исходного раствора, приготовленного по точной навеске масла в том же растворителе. Окисление проводили раствором пероксида водорода.

Были сняты спектры водных и гексан-изопропанольных растворов с разной концентрацией льняного масла в интервале длин волн 200–300 нм, вычислены удельные коэффициенты (рис. 1а). Установлено, что УФ-спектры имеют максимум поглощения при $\lambda = 205\text{--}208$ нм, но в воде коэффициенты масла примерно в три раза больше, чем в смеси гексан : изопропанол.

Для вычисления коэффициентов поглощения продуктов окисления масла были приготовлены растворы с постоянной, избыточной концентрацией пероксида водорода и разной концентрацией масла. Снимали спектры полученных растворов через каждые 20 минут в течение 2 часов. Оказалось, что в водных растворах через 20–40 мин, а в органических – через 60 мин, вид спектра перестает меняться, что может указывать на установление равновесия. Вычисленные по полученным спектрам коэффициенты были условно названы коэффициенты поглощения окисленного масла.

Как видно (рис 1б), процесс окисления в разных растворителях приводит к разным продуктам. Можно предположить, что в органическом растворителе процесс окисления идет медленнее, и за период наблюдения образуются только диеновые конъюгаты [2]. В воде пероксид успевает более глубоко окислить масло, конъюгаты разрушаются с образованием низкомолекулярных продуктов (рис 1б). В обоих растворителях спектры поглощения масла и продуктов его окисления перекрываются, а значит, поглощение не является селективным. В этом случае судить о содержании окисленных структур только по поглощению при единственной длине волны [3], некорректно. Необходимо переходить к многоволновой спектрометрии, а для расчета содержаний масла и продуктов его окисления использовать метод множественной линейной регрессии (МЛР).

Нами были приготовлены растворы масла в обоих растворителях, в которые был добавлен пероксид водорода. Спектры растворов регистрировали через определенные промежутки времени и с помощью программы Optic-MLR находили концентрацию

окисленного (C_{Ox}) и не окисленного масла ($C_{\text{масла}}$). Затем вычисляли $C_{\text{общ}}$, сравнивали полученную концентрацию с исходной концентрацией масла, $C_{\text{исх}}$, и вычисляли относительную погрешность. В качестве примера в таблице представлены результаты, полученные для некоторых растворов через 5 и 60 минут.

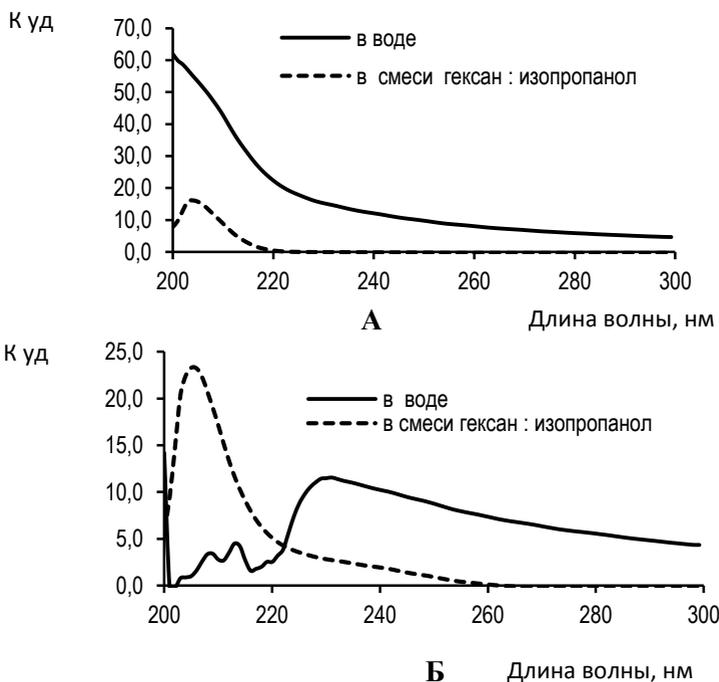


Рис. 1. Удельные коэффициенты поглощения льняного масла (А) и продуктов его окисления (Б) в разных растворителях

Таким образом, предложенный нами алгоритм нахождения концентраций разных форм масла может быть использован для изучения влияния разных факторов на процесс окисления масла в разных средах.

Определения масла и продуктов его окисления методом МЛР

Время, мин	Растворитель	С (H ₂ O ₂), мг/мл	Введено С _{исх} , мг/мл	Найдено, мг/мл			Погр-сть, %	
				С _{масла}	С _{окисл}	С _{общ}		
5	Гексан: изопро- панол	1,2	0,02	0,023	-0,003	0,020	1,6	
60				0,001	0,022	0,023	11	
5				0,10	0,092	0,009	0,102	1,6
60					0,095	0,016	0,111	11
5	Вода	0,48	0,03	0,025	0,006	0,304	1,2	
60				0,023	0,008	0,303	1,0	
5		1,2	0,03	0,008	0,024	0,032	3,0	
60				0,00	0,031	0,031	0,1	

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Карпов Ю.А.* Омега-3 – полиненасыщенные жирные кислоты: применение сегодня и перспективы использования в клинической практике // *Атмосфера. Новости кардиологии.* 2014. № 2. С. 43–51.

[2] *Узбеков М.Г.* Перекисное окисление липидов и антиоксидантные системы при психических заболеваниях. Сообщение I // *Социальная и клиническая психиатрия.* 2014. Т. 24, № 4. С. 97–103.

[3] *Рыбакова О.В., Сафонова Е.Ф., Сливкин А.И.* Определение спектральных характеристик спиртовых растворов растительных масел и масляных экстрактов методом УФ спектрофотометрии // *Вестник ВГУ.* 2007. № 2. С. 171–173.

Гро Екатерина Петровна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
II курс магистратуры, химический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, gro.e.p@yandex.ru

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ АЛЬДЕГИДОВ И КЕТОНОВ В ВОДНЫХ СРЕДАХ

М. А. Криванкова

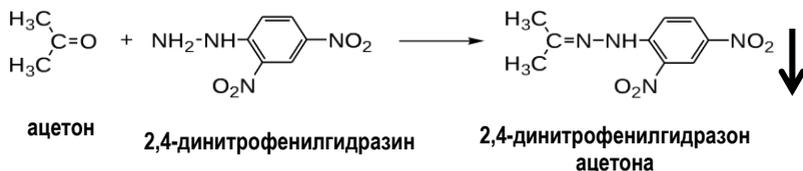
Научный руководитель: канд. хим. наук, доцент Т. В. Антонова

Аннотация. Показана возможность определения суммарного содержания альдегидов и кетонов в водных растворах спектрофотометрическим методом по реакции с 2,4-динитрофенилгидразином. Погрешность анализа снижается до 20 % отн. при переходе от измерений сигнала на фиксированной длине волны к многоволновым измерениям.

Ключевые слова: количественное определение альдегидов и кетонов, окислительный стресс, спектрофотометрия, суммарное содержание, многоволновая спектрофотометрия, 2,4-динитрофенилгидразин.

Задача определения содержания альдегидов и кетонов актуальна в анализе разнообразных объектов, таких как воздух рабочей зоны, косметическая продукция, органические растворители, а также биологические жидкости.

Спектрофотометрическое определение альдегидов и кетонов проводят по реакции с 2,4-динитрофенилгидразином (далее – ДНФГ). При этом данная группа веществ превращаются в окрашенные динитрофенилгидразоны (далее ДНФГ-оны).



Существует целый ряд методик определения индивидуальных альдегидов и кетонов, однако известна лишь одна методика определения их суммарного содержания.

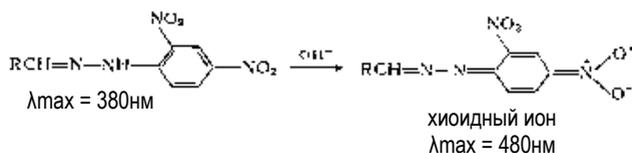
Цель данной работы – разработка методики определения суммарного содержания альдегидов и кетонов в водных средах спектрофотометрическим методом по реакции с ДНФГ.

Объектами исследования были водные растворы формальдегида, ацетона, метилэтилкетона, ацетофенона и бензальдегида, а также их смеси, приготовленные из реактивов квалификации «ч.д.а». Спектры поглощения растворов снимали на спектрофотометре СФ-2000 при толщине слоя раствора 1,0 см. Результаты обрабатывали с использованием программ Static и Excel.

Суммарное содержание карбонильных соединений в биологических жидкостях определяют по методике Дубининой [2]. Образующиеся малорастворимые ДНФГ-оны растворяют, измеряют оптическую плотность раствора при 380 нм и находят содержание карбонильных соединений с использованием единого пересчетного коэффициента.

Экспериментальная проверка показала, что в случае ацетона, ацетальдегида, формальдегида осаждение ДНФГ-онов происходит лишь при концентрациях порядка 1 г/л. При меньших концентрациях определению мешает неудаляемый избыток реагента. Данная методика не позволяет определять низкомолекулярные альдегиды и кетоны в концентрациях, меньших 1 г/л.

Мешающее влияние избытка реагента устраняется в методике Лаппина и Кларка, в которой при добавлении гидроксида натрия к спиртовому раствору ДНФГ-она появляется интенсивное винно-красное окрашивание вследствие образования хиноидного иона. При этом максимум полосы поглощения ДНФГ-она смещается с 340 нм на 480 нм [3].



Важным преимуществом этой методики является ее универсальность: в предлагаемых условиях возможно определение более 11 индивидуальных альдегидов и кетонов. Основной недостаток – использование токсичного растворителя метанола.

В методике Фролова и Волкова метанол заменен этанолом, однако она пригодна лишь для определения фурфурола, формаль-

дегида, бензальдегида и ацетальдегида. Фотометрическая реакция в этом случае проводится без нагревания, окраска раствора не стабильна [1].

В качестве прототипа выбрана более универсальная методика Лаппина и Кларка [3] с заменой токсичного метанола на этанол, подобраны условия получения окрашенных растворов. К 1 мл исследуемого раствора добавляют 1 мл насыщенного раствора ДНФГ в этаноле и 1 каплю концентрированной HCl, нагревают на водяной бане в течение 15 минут. После его остывания до комнатной температуры добавляют 5 мл 2М спиртового раствора NaOH. Через 10 минут измеряют аналитический сигнал против холостого раствора.

При длине волны 600 нм зависимости оптической плотности от концентрации для всех изученных аналитов линейны в интервале 3–100 мг/л и могут служить в качестве градуировочных графиков при их определении. Погрешность определения индивидуальных альдегидов и кетонов по этим графикам не превышает 10%отн., $Sr < 0,08$. Пределы обнаружения составляют 0,6–8 мг/л.

Проверку возможности определения суммарного содержания альдегидов и кетонов проводили на смесях различного качественного и количественного состава с суммарной концентрацией КС 25-100 мг/л. Смеси альдегидов и кетонов аддитивны (3S-критерий).

Погрешность оценки суммарного содержания альдегидов и кетонов по величине оптической плотности при 600 нм (одноволновая спектрофотометрия) в пересчете на стандартное вещество, входящее в состав смеси, составляет 2 – 30 % отн., что объясняется высокой внутригрупповой селективностью сигналов.

Для повышения точности определения применяли метод многоволновой спектрофотометрии. Расчеты проводили в программе МЛР, используя коэффициенты поглощения всех аналитов и спектры поглощения их 2- и 3-компонентных смесей в диапазоне длин волн 450–700 нм с шагом 1 нм.

Переход от одноволновых измерений к многоволновым, в узком диапазоне длин волн не приводит к снижению погрешности. Расчет результата по всему спектру поглощения позволил снизить погрешность до 20 % отн.

Выводы:

1. Предложена методика спектрофотометрического определения альдегидов и кетонов по реакции с ДНФГ без использования токсичных растворителей. Относительная погрешность определения ацетона, МЭК, формальдегида, бензальдегида и ацетофенона не превышает 10 %, $S_r \leq 0,08$.

2. Показана возможность определения суммарного содержания альдегидов и кетонов в смесях методом одноволновой спектрофотометрии. Погрешности определения суммарного содержания альдегидов и кетонов в 2- и 3-компонентных смесях в пересчете на стандартное вещество, входящее в состав смеси, не превышает 30 %.

3. Метод многоволновой спектрофотометрии с использованием спектра поглощения в диапазоне 450–700 нм позволяет снизить погрешность определения суммарного содержания альдегидов и кетонов до 20 % отн.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Волкова Н.В., Вернигора Н.А., Фролов А.В. Спектрофотометрическое определение 2-фурвльдегида с использованием 2,4-динитрофенилгидразина // Журн. Естественные науки. Химия. 2017. № 4(20). С.105–115.

[2] Дубинина Е.Е., Бурмистров С. О., Ходов Д.А., Порохов И.Г. Окислительная модификация белков сыворотки крови человека, метод ее определения // Вопросы медицинской химии. 1995. № 1. С. 24–26.

[3] Сиггиа С., Ханна Дж.С. Количественный органический анализ по функциональным группам: пер. с англ. М.: Химия, 1983. 336 с.

Криванкова Марина Алексеевна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
II курс магистратуры, химический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, cool.mk2012199@yandex.ru

МОДЕЛИРОВАНИЕ УСТАНОВКИ ПРОИЗВОДСТВА ВОДОРОДА

Я. С. Петров

*Научный руководитель: ст. преподаватель кафедры ПХТС
на базе ПАО «ОНХП» О. А. Реутова*

Аннотация. Проведен анализ процесса получения водорода высокой степени чистоты методом паровой конверсии метана. Построена компьютерная модель процесса в прикладной программе Aspen HYSYS V9 CP1 (35.0.1.271) в составе ПО aspenONE®forUniversities. Полученная модель подходит для подбора оптимального технологического режима работы установки производства водорода требуемой чистоты.

Ключевые слова: водород, паровая каталитическая конверсия метана, моделирование в AspenHYSYS.

Водород различной степени чистоты (содержание водорода в ВСГ варьируется от 60 % до 90 % и выше) широко используется в различных технологических процессах химической и нефтехимической промышленности (синтез аммиака и метанола, гидроочистка, гидрокрекинг и т. д.), и потребность в нем неуклонно растет, что вызвано утяжелением нефти и спросом на более чистые и легкие нефтяные топлива. Это приводит к необходимости использования более современных катализаторов и ужесточению требований к чистоте используемого водорода: чем выше концентрация водорода в ВСГ, тем ниже может быть кратность циркуляции, которая влияет на время контакта сырья с катализатором и на скорость дезактивации катализатора (рис. 1) [1; 2].

Одним из источников водорода являются различные водородсодержащие газовые смеси (конвертированный газ), получаемые различными способами, но наиболее используемый вариант – переработка дешевого углеводородного сырья: природных и попутных газов, газов нефтепереработки и нефтяных остатков методом паровой конверсии (паровой риформинг).

Основными блоками современных установок получения водорода являются очистка природного газа от соединений серы, предрифформинг, паровой риформинг метана, паровая каталитиче-

ская конверсия монооксида углерода и выделение водорода требуемой концентрации из полученного конвертированного газа с помощью КЦА [3; 4].



Рис. 1. Влияние концентрации водорода на степень обессеривания прямогонного дистиллята ($T = 350\text{ }^{\circ}\text{C}$, объемная скорость подачи сырья $4,0\text{ час}^{-1}$, парциальное давление водорода около 10 ат.)

Целью работы было построение компьютерной модели типовой установки производства водорода методом паровой каталитической конверсии метана. В качестве среды для моделирования была выбрана программа AspenHYSYS [4; 5].

Основная сложность работы заключалась в моделировании равновесных реакторов, так как необходимо учесть все протекающие реакции и задать константы равновесий реакции в зависимости от температуры (таблица) [4; 6].

Расчет проводился с использованием термодинамического пакета Peng-Robinson. Полученная модель (рис. 2) дает принципиальную возможность путем варьирования технологических параметров получать целевую функцию – поток водорода заданной чистоты в зависимости от производственной программы предприятия, то есть с учетом планирования производства, что связано с графиком работы и планом на товарную продукцию других установок (КПА, КТ-1/1 (секция 100), ГО БКК, Л-24/6,7,9 и др.).

Основные реакции и их константы равновесия в зависимости от температуры

<i>Реакция</i>	<i>Уравнение $\ln K_p = f(T)$</i>
$\text{CH}_3\text{SH} + \text{H}_2 = \text{CH}_4 + \text{H}_2\text{S}$	$\ln K_p = -\Delta G^\circ(\text{реакции})/RT$
$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{H}_2 = 2\text{CH}_4$	$\ln K_p = -0,030 \cdot 10^5/T^2 + 7553,9/T + 5,917 - 0,528 \ln T - 1,747 \cdot 10^{-3} \cdot T + 4,6 \cdot 10^{-7} \cdot T^2$
$\text{C}_3\text{H}_8 + 2\text{H}_2 = 3\text{CH}_4$	$\ln K_p = -0,060 \cdot 10^5/T^2 + 13841/T + 15,675 - 1,602 \ln T - 3,205 \cdot 10^{-3} \cdot T + 0,8 \cdot 10^{-7} \cdot T^2$
$\text{n-C}_4\text{H}_{10} + 3\text{H}_2 = 4\text{CH}_4$	$\ln K_p = -0,091 \cdot 10^5/T^2 + 19311/T + 39,952 - 5,147 \ln T - 0,884 \cdot 10^{-3} \cdot T + 4,6 \cdot 10^{-7} \cdot T^2$
$\text{i-C}_4\text{H}_{10} + 3\text{H}_2 = 4\text{CH}_4$	$\ln K_p = -0,091 \cdot 10^5/T^2 + 18432/T + 36,156 - 4,110 \ln T - 3,364 \cdot 10^{-3} \cdot T + 1,2 \cdot 10^{-6} \cdot T^2$
$\text{n-C}_5\text{H}_{12} + 4\text{H}_2 = 5\text{CH}_4$	$\ln K_p = -0,121 \cdot 10^5/T^2 + 25610/T + 44,846 - 5,343 \ln T - 3,949 \cdot 10^{-3} \cdot T + 1,3 \cdot 10^{-6} \cdot T^2$
$\text{i-C}_5\text{H}_{12} + 4\text{H}_2 = 5\text{CH}_4$	$\ln K_p = -0,121 \cdot 10^5/T^2 + 24753/T + 42,032 - 4,759 \ln T - 4,755 \cdot 10^{-3} \cdot T + 1,5 \cdot 10^{-6} \cdot T^2$
$\text{C}_6\text{H}_{14} + 5\text{H}_2 = 6\text{CH}_4$	$\ln K_p = -\Delta G^\circ(\text{реакции})/RT$
$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} = 3\text{H}_2 + \text{CO}$	$\ln K_p = 0,043 \cdot 10^5/T^2 - 22829/T - 24,811 + 7,930 \ln T - 4,299 \cdot 10^{-3} \cdot T + 3,5 \cdot 10^{-7} \cdot T^2$
$\text{C}_2\text{H}_6 + 2\text{H}_2\text{O} = 5\text{H}_2 + 2\text{CO}$	$\ln K_p = 0,056 \cdot 10^5/T^2 - 38105/T - 43,706 + 15,332 \ln T - 10,346 \cdot 10^{-3} \cdot T + 1,2 \cdot 10^{-6} \cdot T^2$
$\text{C}_3\text{H}_8 + 3\text{H}_2\text{O} = 7\text{H}_2 + 3\text{CO}$	$\ln K_p = 0,069 \cdot 10^5/T^2 - 54647/T - 58,760 + 22,188 \ln T - 16,103 \cdot 10^{-3} \cdot T + 1,9 \cdot 10^{-6} \cdot T^2$
$\text{n-C}_4\text{H}_{10} + 4\text{H}_2\text{O} = 9\text{H}_2 + 4\text{CO}$	$\ln K_p = 0,082 \cdot 10^5/T^2 - 72006/T - 59,295 + 26,573 \ln T - 18,082 \cdot 10^{-3} \cdot T + 1,9 \cdot 10^{-6} \cdot T^2$
$\text{i-C}_4\text{H}_{10} + 4\text{H}_2\text{O} = 9\text{H}_2 + 4\text{CO}$	$\ln K_p = 0,082 \cdot 10^5/T^2 - 72886/T - 63,090 + 27,610 \ln T - 20,561 \cdot 10^{-3} \cdot T + 2,6 \cdot 10^{-6} \cdot T^2$
$\text{n-C}_5\text{H}_{12} + 5\text{H}_2\text{O} = 11\text{H}_2 + 5\text{CO}$	$\ln K_p = 0,095 \cdot 10^5/T^2 - 88537/T - 79,213 + 34,307 \ln T - 25,446 \cdot 10^{-3} \cdot T + 3,1 \cdot 10^{-6} \cdot T^2$
$\text{n-C}_5\text{H}_{12} + 5\text{H}_2\text{O} = 11\text{H}_2 + 5\text{CO}$	$\ln K_p = 0,095 \cdot 10^5/T^2 - 89394/T - 82,027 + 34,891 \ln T - 26,252 \cdot 10^{-3} \cdot T + 3,2 \cdot 10^{-6} \cdot T^2$
$\text{C}_6\text{H}_{14} + 6\text{H}_2\text{O} = 13\text{H}_2 + 6\text{CO}$	$\ln K_p = -\Delta G^\circ(\text{реакции})/RT$
$\text{CH}_4 + 2\text{H}_2\text{O} = \text{CO}_2 + 4\text{H}_2$	
$\text{C}_2\text{H}_6 + 4\text{H}_2\text{O} = 2\text{CO}_2 + 7\text{H}_2$	
$\text{C}_3\text{H}_8 + 6\text{H}_2\text{O} = 3\text{CO}_2 + 10\text{H}_2$	
$\text{n-C}_4\text{H}_{10} + 8\text{H}_2\text{O} = 4\text{CO}_2 + 13\text{H}_2$	

Окончание табл.

<i>Реакция</i>	<i>Уравнение $\ln K_p = f(T)$</i>
i-C ₄ H ₁₀ + 8H ₂ O = 4CO ₂ + 13H ₂	$\ln K_p = -\Delta G^\circ(\text{реакции})/RT$
n-C ₅ H ₁₂ + 10H ₂ O = 5CO ₂ + 16H ₂	
n-C ₅ H ₁₂ + 10H ₂ O = 5CO ₂ + 16H ₂	
C ₆ H ₁₄ + 12H ₂ O = 6CO ₂ + 19H ₂	
4C ₂ H ₆ + 2H ₂ O = 7CH ₄ + CO ₂	
4C ₃ H ₈ + 4H ₂ O = 10CH ₄ + 2CO ₂	
4 n-C ₄ H ₁₀ + 6H ₂ O = 13CH ₄ + 3CO ₂	$\ln K_p = -\Delta G^\circ(\text{реакции})/RT$
4i-C ₄ H ₁₀ + 6H ₂ O = 13CH ₄ + 3CO ₂	
4 n-C ₅ H ₁₂ + 8H ₂ O = 16CH ₄ + 4CO ₂	
4i-C ₅ H ₁₂ + 8H ₂ O = 16CH ₄ + 4CO ₂	
4C ₆ H ₁₄ + 10H ₂ O = 19CH ₄ + 5CO ₂	
CO + H ₂ O = CO ₂ + H ₂	$\ln K_p = -0,47 \cdot 10^5/T^2 + 5723/T - 15,966 + 1,565 \ln T - 0,151 \cdot 10^{-3} \cdot T$

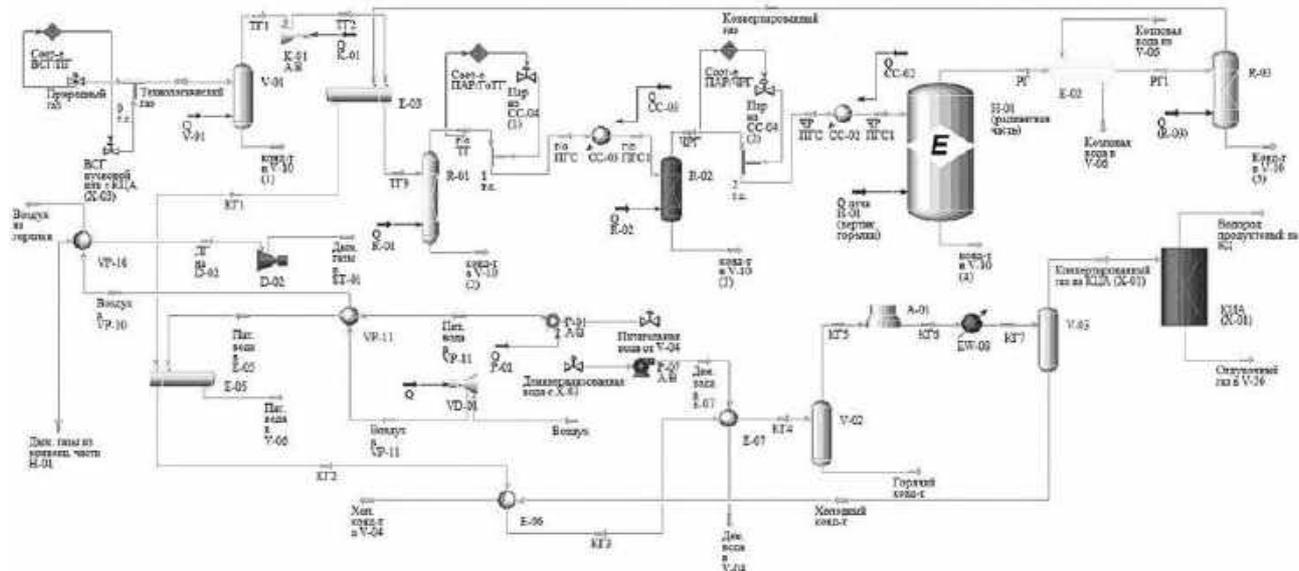


Рис. 2. Компьютерная модель установки производства водорода

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Мейерс Р.А.* Основные процессы нефтехимии: справочник / Роберт А. Мейерс (ред.); пер. с англ. под. ред. И. А. Голубевой. СПб.: Профессия, 2015. 747 с.
- [2] *Герасименко Н.М., Жадановский Н.Б., Финелонов В.П.* Гидроочистка нефтепродуктов. М.: Гостоптехиздат, 1962. 133 с.
- [3] *Штинель Е., Мадсен С.В.* Технологии и катализаторы Топсе для производства водорода. М.: Газохимия, ЗАО «редакция газеты «Кворум». 2010. № 11. С. 56–59.
- [4] *Jakobsen D., Åtland V.* Concepts for Large Scale Hydrogen Production.: Master thesis. NTNU, 2016. 121 P.
- [5] *Кузнецов О.А.* Начало работы в AspenHysysV8: учебное пособие. М.; Берлин: Директ-Медиа, 2015. 68 с.
- [6] *Равдель А.А., Пономарева А.М.* Краткий справочник физико-химических величин / Н. М. Барон и др. 10-е изд., испр. и доп. СПб.: Иван Федоров, 2003. 240 с.

Петров Ян Сергеевич,
Омский государственный технический университет,
II курс магистратуры, ФЭОиМ,
644050, г. Омск, пр. Мира, 30а, j.s.petrov@chemomsu.ru

СИНТЕЗ КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ СМЕСИ ФОСФАТОВ КАЛЬЦИЯ И ХИТОЗАНА

А. А. Цыганова, А. Н. Еловский

*Научный руководитель: д-р геол.-минерал. наук,
профессор О. А. Голованова*

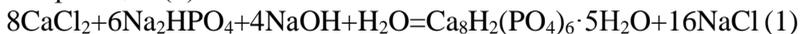
Аннотация. В работе получен композиционный материал на основе смеси фосфатов кальция и хитозана, изучен состав, морфология полученных образцов и динамическое растворение.

Ключевые слова: композиционный материал, смесь фосфатов кальция, хитозан, динамическое растворение.

В настоящее время актуальным является сравнительно новый подход создания композиционных материалов на основе фосфатов кальция (ФК) и биополимеров [1]. В частности, материалов на основе хитозана – полисахарида, который является биосовместимым, нетоксичным, обладает антимикробным и противогрибковым действием, а также может выполнять функцию эластичного каркаса [2].

Целью данной работы является получения композиционного материала на основе хитозана и смеси ортофосфатов кальция.

На основе литературных данных [3; 4] был выбран способ синтеза смеси ортофосфатов кальция, путем осаждения из водного раствора. Осаждение проводилось при температуре 40 °С, рН = 6.5, τ = 48 ч и введении добавки ионов магния в концентрации 12.5 ммоль/л. В основе данного способа лежит следующая химическая реакция (1):



Методами РФА и ИК-Фурье-спектроскопии установлено, что полученный порошковый материал представлен фазами ОКФ, брушита и ГА (рис. 1, 2), основным интенсивным линиям которых соответствуют углы 2Θ: ОКФ – 4.8; 11.4, 22.8; ГА – 25.9, 29.6, 31.8; брушита – 20.4, 47.3, 35.2. С размерами кристаллитов ОКФ – 2.96 нм, брушита – 2.45 нм, ГА – 2.15 нм.

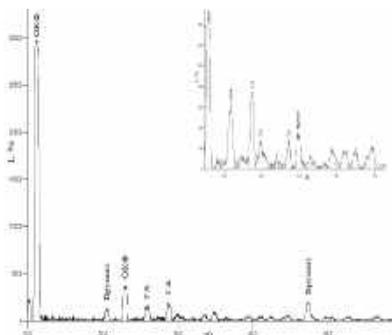


Рис. 1. Дифрактограмма смеси ортофосфатов кальция

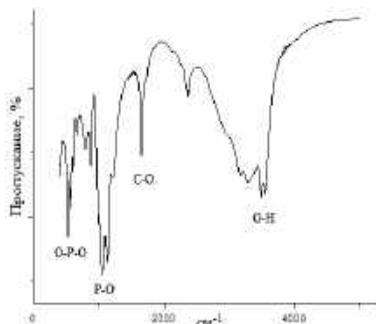


Рис. 2. ИК-спектр смеси ортофосфатов кальция

На следующем этапе был получен композиционный материал на основе смеси ФК и хитозана. Для этого готовили 2 % суспензию биополимера в уксусной кислоте. В суспензию вводили порошок материала в количестве 10, 30, 50 масс.% и подвергали интенсивному перемешиванию. Пену помещали в тигель и высушивали при температуре 25 °С и 200 °С.

Поверхность полученных композитов выглядит как пористый матрикс, в котором равномерно распределена твердая фаза (рис. 3).

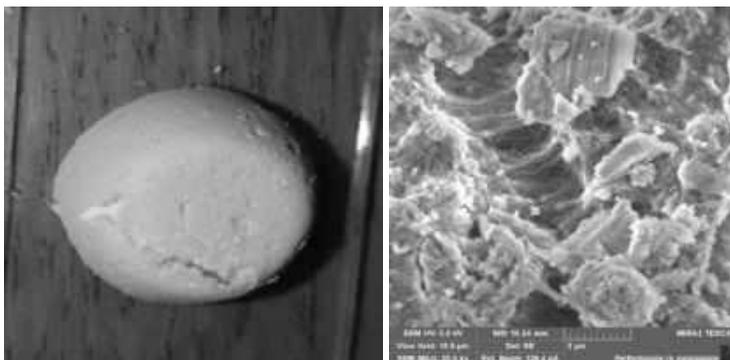


Рис. 3. Фотографии композиционного материала на основе хитозана с содержанием наполнителя 30 %

Методом ИК-Фурье-спектроскопии было установлено, что образцы композита содержат весь набор полос, характерных для

фосфатов кальция, а также полосы хитозана (рис. 4). На спектре присутствуют валентные колебания связи $>C=O$ при 1240 см^{-1} , а также максимумы при $1350, 1620\text{ см}^{-1}$, относящиеся к симметричным и плоским деформационным колебаниям групп NH_2 и NH_3^+ соответственно. Что не противоречит литературным данным [5] о том, что наиболее вероятным процессом взаимодействия является фосфорилирование хитозана фосфат-ионами.

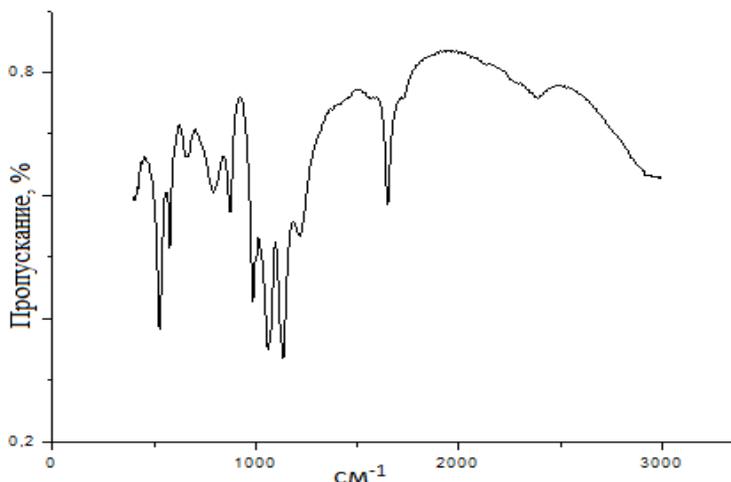


Рис. 4. ИК-спектр композиционного материала на основе хитозана и смеси ортофосфатов кальция с содержанием наполнителя 30 масс.%

Для изучения биорезорбируемости образцов было проведено их растворение в 0.1 М растворе HCl, ацетатном буферном растворе и 0,9 % растворе NaCl. Из полученных данных (табл.) следует, что резорбируемость полученных композитов снижается при увеличении температуры сушки композита и возрастает при увеличении соотношения наполнитель/матрица, но для соляной кислоты наблюдаются обратные зависимости.

Таким образом, в работе предложен способ получения композиционных материалов, свойства которых возможно корректировать за счет варьирования соотношения наполнитель/матрица и температуры сушки.

Среда	Соотношение наполнитель/матрица в композите	Начальная скорость, моль/л*мин	
		$T_{\text{сушки}} = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$	$T_{\text{сушки}} = 200\text{ }^{\circ}\text{C}$
0,1 М раствор HCl	10/90	21,2	21,1
	30/70	23,0	37,0
	50/50	11,3	23,7
Ацетатный буферный раствор	10/90	23,6	10,2
	30/70	33,1	23,3
	50/50	33,2	28,6
0,9 % раствор NaCl	10/90	32,4	21,3
	30/70	43,6	35,5
	50/50	68,1	42,7

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Гурин А.Н., Комлев В.С., Федотов А.Ю., Берковский А.А., Мамонов В.Е., Ериеорьян А.С.* Сравнительная характеристика материалов на основе хитозана, альгината и фибрина в комплексе с р-трикальцийфосфатом для остеопластики (экспериментально-морфологическое исследование) // *Стоматология*. Т. 93. 2014. С. 4–10.

[2] *Скрябина К.Г., Вихоревой Г.А., Варламова В.П.* Хитин и хитозан: Получение, свойства и применение. М.: Наука, 2002. 368 с.

[3] *Tung M.S., Tomazic B., Brown W.E.* The effects of magnesium and fluoride on the hydrolysis of octacalcium phosphate // *Arch. Oral Biol*. 1992. P. 585–591.

[4] *Dorozhkin S.V.* Bioceramics of calcium orthophosphates// *Biomaterials*. 2010. Vol. 31. P. 1465–1485.

[5] *Фадеева И.В.* О взаимодействии фосфатов кальция с хитозаном // *Доклады акад. наук*. 2011. Т. 441, № 5. С. 639–642.

Цыганова Анна Анатольевна,

Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
II курс аспирантуры, химический факультет
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, a.a.tsyganova1993@yandex.ru

Еловский Александр Николаевич,

Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
IV курс бакалавриата, химический факультет
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, elovskiy97@mail.ru

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СУММАРНОГО СОДЕРЖАНИЯ ФЕНОЛЬНЫХ АНТИОКСИДАНТОВ С ПОМОЩЬЮ СИЛЬНЫХ ОКИСЛИТЕЛЕЙ

А. С. Чикунова, Е. В. Белова

Научный руководитель: д-р хим. наук, профессор В. И. Вершинин

Аннотация. Сопоставлены методы определения фенольных антиоксидантов (ФА) с помощью сильных и слабых окислителей. В ходе анализа одно- и многокомпонентных растворов ФА выявлены недостатки стандартных методик, применяемых для контроля качества пищевых продуктов. Перманганатометрия по Левенталю дает плохо воспроизводимые результаты, что связано с глубокой деструкцией молекул ФА. Спектрофотометрическое определение суммарного содержания ФА по Фолину – Чокальтеу дает большие систематические погрешности из-за неаддитивности и внутригрупповой селективности сигналов. Удовлетворительную точность дает лишь применение слабых одноэлектронных окислителей (метод FRAP) ввиду стабильной стехиометрии редокс-процессов и отсутствия побочных реакций.

Ключевые слова: фенольные антиоксиданты, групповой анализ, метод Левенталья, метод Фолина – Чокальтеу, метод FRAP.

Контроль качества пищевых продуктов (вина, чай, фрукты) требует оценки суммарного содержания водорастворимых фенольных соединений, являющихся антиоксидантами ЕТ-типа, т. е. активными восстановителями. Природные смеси фенольных антиоксидантов (ФА) включают полифенолы (кверцетин, катехин и др.), их производные (галлаты, танины) и некоторые аналоги (аскорбиновая кислота, тиолы) [3]. Для количественного определения суммарного содержания ФА (c_{Σ}) обычно используют методы, основанные на одновременном окислении всех ФА (спектрофотометрия, титриметрия, электрохимические методы). В качестве групповых реагентов часто применяют слабые окислители типа Fe(III) или Cu(II), вводя их в избытке. Результат анализа (c^* , мкМ) находят в пересчете на стандартное вещество ($X_{\text{ст}}$). В испытательных лабораториях предприятий пищевой промышленности применяют более сильные окислители: гетерополикомплексы молибдена и вольфрама (метод Фолина – Чокальтеу) и перманганат калия (метод Левенталья). Однако эти методики неспецифичны для

ФА и недостаточно исследованы. Нет данных по стехиометрии и кинетике соответствующих реакций, не изучена внутригрупповая селективность сигналов. Анализ одних и тех же проб с помощью слабых и сильных окислителей дает закоррелированные, но достоверно различающиеся результаты [5]; причины различий пока не установлены.

Цель данного исследования – проверка стандартных методик Фолина – Чокальтеу (ФЧ) и Левенталья в ходе анализа одно- и многокомпонентных модельных смесей ФА (водных растворов). Следовало сопоставить возможности этих методик в сравнении с методом FRAP, основанным на применении слабого окислителя - ионов Fe^{3+} [4].

В качестве модельных соединений использовали галловую кислоту (ГК), аскорбиновую кислоту (АК), кверцетин (КВ), рутин, резорцин и пирокатехин. Смеси этих веществ (водные растворы, c_2 порядка 100 мкМ) готовили по точным навескам. Перманганатометрическое определение индивидуальных ФА по Левенталю вели по методике [1] с индикатором индигокармином. Спектрофотометрическое определение ФА с реактивом ФЧ вели по методике [2], измеряя оптическую плотность продуктов реакции на приборе КФК-3-01 при 765 нм. Статистическую обработку данных проводили по Стьюденту ($n = 3$, $P = 0,95$). Аддитивность светопоглощения проверяли с помощью 3s-критерия.

По нашим данным, перманганатометрическое титрование ГК и АК в их однокомпонентных растворах возможно на уровне 10^{-3} – 10^{-4} моль/л. Результаты плохо воспроизводимы из-за растянутого цветового перехода индикатора; коэффициент вариации (W) нередко превышал 10 %. Зная молярную концентрацию титруемого раствора и определив его нормальную концентрацию по объему затраченного титранта, мы рассчитали число электронов, отдаваемых молекулой ФА. Оказалось, что число электронов превышает число ОН-групп в молекуле ФА. Следовательно, окисление ФА перманганатом сопровождается их глубокой деструкцией (дециклизацией). Так, молекула ГК отдает примерно 5 электронов, тогда как при взаимодействии со слабыми одноэлектронными окислителями она теряет 3 электрона, превращаясь в трихинон. Непредсказуемая и плохо воспроизводимая глубина окисления индивидуальных ФА не

позволяет использовать методику [1] для точного определения молярных или массовых концентраций ФА, а тем более для определения суммарного содержания ФА. Некоторые ФА оттитровать перманганатом вообще не удастся (кверцетин).

Проверка методики [2] показала, что в однокомпонентных растворах с концентрацией $10^{-6} - 10^{-4}$ моль/л все модельные соединения определялись правильно, погрешности не превышали 5 %. Результаты имели хорошую сходимость, коэффициенты вариации (W) не превышали 1,5 %. Рассчитанные по Кайзеру пределы обнаружения (C_{\min}) индивидуальных ФА находились в интервале от 0,1 до 1 мкМ. Таким образом, метод ФЧ вполне пригоден для определения индивидуальных ФА в однокомпонентных растворах. Однако при определении суммарного содержания нескольких ФА метод ФЧ дает весьма неточные результаты (табл.).

Результаты и погрешности анализа некоторых смесей фенольных антиоксидантов с применением разных $X_{ст}$

№ смеси	c_{Σ} , мкМ	c^* в пересчете на разные $X_{ст}$, мкМ			Погрешность, δc , %		
		КВ	ГК	АК	КВ	ГК	АК
1	93	76	140	250	-18	+51	+169
2	91	72	132	239	-21	+45	+162
3	77	48	85	155	-35	+13	+106

Видно, что применение АК в качестве $X_{ст}$ приводит к сильно завышенным, а применение КВ – к заниженным результатам. Более точные результаты были получены в пересчете на ГК, но и они содержат значимые систематические погрешности (до 50 % по модулю). По-видимому, основной причиной появления погрешностей является внутригрупповая селективность сигналов. Дополнительным источником погрешности были статистически значимые отклонения от аддитивности светопоглощения. Для большинства смесей оптическая плотность продуктов восстановления реактива ФЧ была примерно на 20 % ниже, чем сумма оптических плотностей, создаваемых компонентами порознь.

Поскольку определение суммарного содержания ФА по методу Левенталя оказалось невозможным, а метод ФЧ дает значи-

мые систематические погрешности, использовать сильные окислители для определения суммарного содержания ФА в пищевых продуктах не следует. При использовании слабых окислителей отклонения от аддитивности светопоглощения незначимы, а внутригрупповая селективность выражена в меньшей степени. Погрешности анализа смесей по методу FRAP обычно не превышают 20 % отн. [4]. Таким образом, в аналитическом контроле пищевых продуктов целесообразна замена метода ФЧ более точным, чувствительным и специфичным методом FRAP.

ЛИТЕРАТУРА

[1] ГОСТ 19885-74: Чай. Методы определения содержания танина и кофеина. М.: Стандартиформ, 1974. 5 с.

[2] ГОСТ Р. ИСО 14502-1-2010 Чай. Метод определения общего содержания полифенолов. М.: Стандартиформ, 2012. 16 с.

[3] Зиятдинова Г.К., Будников Г.К. Природные фенольные антиоксиданты в биоаналитической химии: состояние, проблемы и перспективы развития // Успехи химии. 2015. Т.84(2). С. 194-224.

[4] Определение суммарного содержания антиоксидантов методом FRAP / Т.Г. Цюпко [и др.] // Аналитика и контроль. 2011. Т. 15. № 3. С. 287-298.

[5] *Цюпко Т.Г., Бриленок Н.С., Гуцаева К.С., Вершинин В.И.* Определение суммарного содержания фенольных антиоксидантов в чае с применением разных вариантов метода FRAP. Аналитика и контроль. 2019. Т. 19, № 1. С. 143–151.

Чикунцова Анастасия Сергеевна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
I курс магистратуры, химический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, nastyachikunova438@gmail.com

Белова Екатерина Валерьевна
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
IV курс бакалавриата, химический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а

ПОЛУЧЕНИЕ УГЛЕРОД-УГЛЕРОДНЫХ НАНОКОМПЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИВИНИЛХЛОРИДА И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ ТЕКСТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК

А. В. Шибитова

*Научные руководители: канд. хим. наук, доцент Т. А. Калинина;
д-р. хим. наук, профессор Ю. Г. Кряжев*

Аннотация. Осуществлен синтез пористых углерод-углеродных нанокмпозитов (УУНК), содержащих графеноподобные частицы на основе оксида графита и восстановленного оксида графита, а также наночастицы глобулярного углерода. Прекурсором пористого углерода являлся реакционно-способный полимер с системой сопряжения – поливинилен, образующийся путем щелочного дегидрохлорирования поливинилхлорида. В результате углекислотной активации УУНК при 900 °С получены пористые нанокмпозиционные материалы, обладающие высокими значениями удельной поверхности (до 1115 м²/г) и развитыми объемами микро- и мезопор, что подтверждено методом низкотемпературной адсорбции азота.

Ключевые слова: поливинилхлорид, поливинилены, дегидрохлорирование, пористые углеродные материалы.

В ранее проведенных исследованиях описывается подход к синтезу углеродных материалов (УМ), основанный на формировании углеродных структур при температурах до 400 °С за счет межцепной конденсации реакционноспособных полимеров с системой сопряжения – поливиниленов, образующихся при дегидрохлорировании карбоцепных хлорполимеров [3]. Проведение щелочного дегидрохлорирования в растворах хлорполимеров позволило в мягких условиях вводить модифицирующие добавки в прекурсор углерода на стадии синтеза поливиниленов [1].

В настоящей работе такой подход используется для получения углерод-углеродных нанокмпозитов (УУНК). Для этого в качестве модифицирующих добавок, вводимых в реакционную среду на стадии дегидрохлорирования, использовали наноразмерные углеродные компоненты двух типов: углеродные наноглобулы – электропроводящий технический углерод (ТУ) марки П

267-Э и графеноподобные частицы на основе оксида графита (ОГ) и восстановленного оксида графита (ВОГ).

В качестве исходного полимера использовали наиболее доступный и сравнительно недорогой полимер – поливинилхлорид.

На начальном этапе синтеза при постоянном перемешивании вводили углеродные наночастицы (ОГ, ВОГ, ТУ) или смесь наночастиц (ОГ+ТУ) в 1 % масс. растворы ПВХ в диметилсульфоксиде. Образования стабильных дисперсий добивались путем ультразвуковой обработки в течение 60 мин с помощью ультразвукового диспергатора (44 кГц, 100 Вт). Устойчивость получаемых дисперсий контролировали методом оптической микроскопии. Было показано, что равномерное распределение частиц и устойчивость полученных дисперсий сохраняются в течение 24 ч.

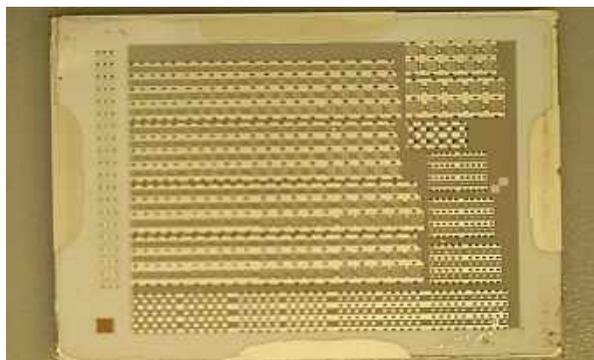
Дегидрохлорирование осуществляли в присутствии КОН при 20 °С в течение 6 ч при постоянном перемешивании. Продукт дегидрохлорирования осаждали в воду, отфильтровывали, промывали (промывные воды проверяли на отсутствие ионов Cl⁻) и сушили при 80 °С.

Проводили ступенчатую карбонизацию (200 °С – 1 ч, 400 °С – 1 ч) полученных поливиниленов в трубчатой печи в токе CO₂.

Образование поливиниленов на стадии дегидрохлорирования ПВХ и формирование sp²-структур в результате карбонизации подтверждается методом спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) (рис.).

В результате дегидрохлорирования регистрируются интенсивные полосы рассеяния, характерные для поливиниленовых цепей (1124 и 1503 см⁻¹), что указывает на протекание реакции дегидрохлорирования ПВХ. После карбонизации регистрируются другие полосы рассеяния (1141 и 1525 см⁻¹, 1356 и 1589 см⁻¹), типичные для углеродных материалов.

Методом просвечивающей электронной микроскопии было показано, что полученные УМ представляют собой аморфную углеродную матрицу, в которой распределены конгломераты либо наноглобулярного углерода (в случае добавки ТУ), либо характерные для ОГ и ВОГ структуры типа «смятые листы бумаги», аналогичные структуре, описанной ранее [2].



Результаты спектроскопии КРС:

- (1) – поливинилен, полученный дегидрохлорированием ПВХ,
 (2) – после термообработки при 200 °С (1 ч.) и (3) – при 400 °С (1 ч.)

Для развития пористой структуры применяли активацию в среде CO_2 при 900 °С (2 ч). Определение сорбционной емкости активированных образцов по парам бензола ($a_{\text{бенз}}$) показало, что в выбранных условиях активации достигаются значения $a_{\text{бенз}}$ в диапазоне 267–610 мг/г, что характерно для известных марок активных углей (табл.).

Параметры пористой структуры углеродных материалов, полученных на основе ПВХ в среде ДМСО

Добавка	Параметры микропор		Параметры мезопор		$a_{\text{бенз}}$, мг/г	$S_{\text{БЭТ}}$, м ² /г
	$V_{\text{микро}}$, см ³ /г	$D_{\text{микро}}$, Å	$V_{\text{мезо}}$, см ³ /г	$D_{\text{мезо}}$, Å		
–	0,39	15	0,07	31	267	1102
ОГ	0,38	16	0,32	89	610	1115
ВОГ	0,35	16	0,20	98	301	979
ОГ + ТУ	0,30	16	0,03	29	268	810

Исследовали текстурные характеристики УУНК методом низкотемпературной адсорбции азота. Из приведенных в таблице данных видно, что при активации УМ с добавками графеноподобных частиц резко повышается объем мезопор ($V_{\text{мезо}}$) и образуются микро- ($V_{\text{микро}}$), мезопористые материалы: в случае добавки частиц

ОГ повышается удельная поверхность ($S_{БЭТ}$) и объем мезопор, для частиц ВОГ удельная поверхность несколько снижается и наблюдается преобладание микропор, но доля мезопор весьма существенна.

Для нанокompозитов, содержащих смесь ОГ+ТУ, отмечается некоторое снижение значения удельной поверхности и объема микро- и мезопор. По-видимому, присутствие технического углерода подавляет образование мезопор в УМ. Аналогичный эффект был отмечен и ранее [1] на примере композита, содержащего глобулярный дисперсный углерод.

Полученные материалы, обладающие развитыми объемами микро- и мезопор, а также высокими значениями удельной поверхности, могут найти применение в качестве адсорбентов, носителей катализаторов, электродов суперконденсаторов [2].

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Аникеева И.В., Кряжев Ю.Г., Солодовниченко В.С., Дроздов В.А.* Получение композитов с наночастицами глобулярного углерода, распределенными в аморфной углеродной матрице // Химия твердого топлива. 2012. № 4. С. 69–72.

[2] *Кряжев Ю.Г., Вольфович Ю.М., Мельников В.П., Рычагов А.Ю. и др.* Синтез и исследование электрохимических свойств нанокompозита с графеноподобными частицами, встроенными в высокопористую углеродную матрицу // Физикохимия поверхности и защита материалов. 2017. Т. 53, № 3. С. 266–269.

[3] *Кряжев Ю.Г., Солодовниченко В.С., Мартыненко Е.С., Арбузов А.Б. и др.* Синтез полихлорвиниленов – реакционноспособных полимеров с системой сопряжения – и их использование для низкотемпературного формирования углеродных структур // Известия Академии наук. Серия химическая, 2015. № 12. С. 2919.

Шибитова Алена Вячеславовна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
I курс магистратуры, химический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, shibitova_alyona@mail.ru

СИНТЕЗ ПОРИСТЫХ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИВИНИЛХЛОРИДА С РАЗЛИЧНЫМИ ТЕКСТУРНЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ

У. К. Штеблау

*Научные руководители: д-р хим. наук, профессор Ю. Г. Кряжев;
канд. хим. наук, доцент Т. А. Калинина*

Аннотация. Получены пористые углеродные материалы путем дегидрохлорирования в растворе ПВХ под действием КОН, а также путем совместной механообработки ПВХ и различных оснований. Активацию материалов проводили под действием различных активирующих агентов (CO₂, H₂, КОН).

Ключевые слова: поливинилхлорид, поливинилен, пористые углеродные материалы, активация, механоактивация

В настоящее время пористые углеродные материалы (ПУМ) представляют собой важнейший класс адсорбентов, катализаторов и носителей катализаторов, благодаря ряду ценных свойств. Перспективными видами органического сырья, используемого для получения УМ, выступают производимые в промышленном масштабе карбоцепные полимеры, получаемые полимеризацией виниловых мономеров – продуктов органического синтеза с использованием нефтяного и газового сырья. Одним из наиболее доступных и дешевых из карбоцепных полимеров является поливинилхлорид (ПВХ). Материалы на основе ПВХ широко применимы в промышленности и в быту, поэтому большую актуальность приобретает проблема утилизации отходов ПВХ, поскольку традиционные методы (мусоросжигание) для него не применимы в связи с образованием высокотоксичных диоксиновых соединений.

В предшествующих исследованиях [1–3] была показана возможность получения ПУМ из ПВХ в три стадии: щелочное дегидрохлорирование ПВХ, термообработка полученных поливиниленов, обогащенных углеродом, с целью формирования углеродных структур (карбонизация) до 400 °С и активация (до 900 °С) в присутствии паров активирующего агента (H₂O, CO₂).

Настоящая работа посвящена активации УМ на основе ПВХ-различными активирующими агентами (CO_2 , H_2 , КОН).

Дегидрохлорирование ПВХ осуществляли двумя методами:

- в 1%-ом растворе ПВХ в диметилсульфоксиде в присутствии гидроксида калия (1:2 масс.) при комнатной температуре в течение 6 ч;

- при механообработке ПВХ в присутствии LiОни КОН в высокоэнергетической центробежно-планетарной мельнице АГО-2 (навеска 5 г., ускорение шаров 60 g, мощность вводимая шарами 100 Вт/г) в течение 10 мин.

Карбонизацию полученных поливиниленов проводили в трубчатой печи в инертной атмосфере в две стадии: 200 °С (2 ч) и 400 °С (2 ч).

Для развития пористой структуры в УМ, полученных в результате карбонизации поливиниленов, были использованы различные подходы: с использованием газообразных активирующих агентов как окислительного (CO_2), так и восстановительного (H_2) типа при 900 °С, а также так называемой «щелочной» активации – термообработкой при 800 °С углеродно-щелочного аддукта, полученного при совместной механообработке ПВХ и гидроксида калия.

Характеристики удельной поверхности и пористой структуры исследуемых образцов были получены из анализа изотерм адсорбции-десорбции N_2 при $-195,97$ °С (77,4 К), измеренных на объемной вакуумной статической установке ASAP-2020M “Micromeritics”.

Данные, полученные при определении характеристик пористой структуры, приведены в таблице.

Существенное развитие пористой структуры наблюдается для образца, полученного путем дегидрохлорирования в растворе и активации в углекислом газе. Данный образец характеризуется микро-мезопористой структурой с преобладанием микропор, тогда как восстановительная активирующая среда (H_2) способствует преобладанию мезопор в конечном материале.

В результате механохимической активации был получен материал с преобладанием мезопор, а «щелочная» активация приводит к обратному результату – преимущественно микропористому материалу.

**Результаты активации углеродных материалов
при использовании различных активирующих агентов**

<i>Условия дегидрохлорирования</i>	<i>Условия активации</i>	<i>S_{БЭТ}, м²/г</i>	<i>V_{микро}, см³/г</i>	<i>V_{мезо}, см³/г</i>
Дегидрохлорирование в растворе	CO ₂ (900 °С)	1436	0,50	0,36
	H ₂ (900 °С)	356	0,12	0,22
Механоактивация в при- сутствии КОН	^a CO ₂ (850 °С)	470	0,12	0,33
	^b КОН (800 °С)	605	0,21	0,09
Механоактивация в при- сутствии LiOH	CO ₂ (850 °С)	460	0,09	0,6

^a – УМ, полученный при карбонизации (400 °С) очищали от гидроксида калия экстракцией водой в аппарате Сокслета и активировали в токе CO₂

^b – продукт механообработки ПВХ в присутствии КОН подвергали карбонизации и последующей активации при 800 °С с последующей активированного УМ экстракцией водой в аппарате Сокслета.

Полученные результаты свидетельствуют о возможности регулирования текстурных характеристик пористых УМ, получаемых согласно предложенным вариантам их синтеза, основанном на щелочном дегидрохлорировании ПВХ.

Результаты данной работы могут быть использованы при разработке бездиоксиновых технологий переработки ПВХ и его отходов с получением пористых углеродных материалов востребованных в различных областях промышленности и медицины.

Автор выражает благодарность младшему научному сотруднику Центра новых химических технологий ИК СО РАН Аникеевой Ирине Валерьяновне за помощь при проведении экспериментов и получении экспериментальных данных.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Синтез полихлорвиниленов – реакционноспособных полимеров с системой сопряжения – и их использование для низкотемпературного формирования углеродных структур / Ю.Г. Кря-

жев и [др.] // Известия Академии наук. Серия химическая. 2015. № 12. С. 1–3.

[2] *Кряжев Ю.Г., Дроздов В.А., Сенкевич С.И. и др.* // Материалы IX Всероссийского симпозиума с участием иностранных ученых «Современные проблемы организации пористых структур и адсорбционного разделения веществ». 19–23 апреля 2004 г. (Москва – Клязьма). М., 2004. С. 49.

[3] *Аникеева И.В., Кряжев Ю.Г., Арбузов А.Б. и др.* Синтез углеродных материалов с использованием механоактивированного дегидрохлорирования поливинилхлорида // Журнал прикладной химии. 2018. Т. 91. Вып. 11. С. 1620–1625.

Штеблау Ульяна Константиновна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
II курс магистратуры, химический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а, shteb lau_ulyana@mail.ru