

Министерство образования Омской области
ФГБОУ ВО «Омский государственный университет
им. Ф.М. Достоевского»
Омский филиал Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН

ФМХ ОмГУ – 2020

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

(Омск, 8 июня – 20 июня 2020 г.)

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

ISBN 978-5-7779-2513-8



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:

Ю. В. Коваленко, Г. М. Серопян

Ф739 ФМХ ОмГУ – 2020 : сборник статей VIII региональной конференции магистрантов, аспирантов и молодых ученых по физике, математике и химии (Омск, 8 июня – 20 июня 2020 г.). – Электрон. текст. дан. – Омск : Изд-во Ом. гос. ун-та, 2020. – 1 электрон. опт. диск (CD-ROM) ; 12 см.

ISBN 978-5-7779-2513-8

В сборнике опубликованы 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

Издается в соответствии с оригиналом,
предоставленным организационным комитетом.

Дата выпуска: 06.10.2020.
1 электрон. опт. диск (CD-ROM); 12 см.
Тираж 7 копий. Объем 4,2 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>Балджанова Р.В.</i> Исследование задачи кластеризации графа с ограничениями на размеры кластеров	9
<i>Ворошилов В.В.</i> Оценка аппроксимационной сложности задачи MAX MDS DICUT	12
<i>Жаркова И.С.</i> Формирование портфеля заказов предприятия с учетом производственных ограничений.....	16
<i>Князев Е.Ю.</i> Исследование систем алгебраических уравнений над классом прямоугольных связей.....	20
<i>Миронов А.В.</i> Генераторы случайных чисел, использующие мантиссы иррациональных чисел и их тестирование	23
<i>Рядовой С.А.</i> Приближенное решение одной задачи календарного планирования со складываемыми ресурсами	27
<i>Сичкарева Т.В.</i> Разработка и исследование алгоритма роя частиц для одной задачи оптимального размещения.....	31
<i>Сосновская М.Ю., Сахно М.А.</i> Решение и анализ задачи построения расписаний процессора с учётом ограниченной пропускной способности шины данных.....	35
<i>Тавченко В.Ю.</i> Алгоритмы решения задачи составления расписания выполнения работ на двух станках при наличии частичного порядка	39
<i>Хмара И.С.</i> Об алгоритме Cheng&Church для поиска бикластера	43

Секция

«ПРИКЛАДНАЯ ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА»

<i>Болдырева М.М.</i> Неравновесное критическое поведение мультислойных магнитных наноструктур с подложной из немагнитного металла	47
<i>Лях А.С., Прудников В.В.</i> Расчет флуктуационно-диссипативного отношения для неравновесного критического поведения трехмерной изотропной и анизотропной моделей Гейзенберга	52
<i>Макаричева А.С.</i> Исследование процессов перемешивания при адсорбции пленки Fe на пластине Ag в рамках первопринципного подхода.....	57
<i>Самошилова А.А., Прудников В.В.</i> Влияние начальных состояний на эффекты старения в магнитосопротивлении мультислойных структур	61
<i>Шевченко И.Е.</i> Первопринципные расчеты энергетических и магнитных свойств системы Ni на W	65
<i>Калинин Д.С.</i> Первопринципные расчёты магнитных характеристик системы Pt/Co/Cu/Co/Pt.....	70
<i>Костацук А.М.</i> Вычисление критических характеристик эффективного гамильтониана трехмерной модели Изинга.....	74
<i>Малиновский И.С.</i> Расчет магнитных характеристик и величин обменного интеграла для ячейки CFAS с применением программного комплекса SPRKRR	78
<i>Чемерис С.П.</i> Эффекты памяти при термоциклировании в неравновесном критическом поведении двумерной XY-модели	81

Секция

«ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА»

<i>Киселева Е.В.</i> Расчет методом конечных разностей распределений электрического и магнитного полей световых волн в диэлектрических волноводах.....	85
<i>Шлейц А.А.</i> Повышение точности прогнозирования ионосферного состояния моделью NeQuick по данным трансionoсферного зондирования.....	90
<i>Карабаева Д.Б.</i> Газочувствительные свойства индивидуальных углеродных нанотрубок, облучённых электронами и протонами.....	94
<i>Матюшенко С.А.</i> Изучение дисперсии импеданса водных растворов электролитов и биологических тканей.....	100
<i>Парыгин А.А.</i> Влияние предварительной дегидрохлорирующей обработки на поверхностную морфологию хлорированного поливинилхлорида, облученного мощным ионным пучком....	103
<i>Малиновская Н.Д.</i> Изучение теплопереноса венозными сосудами в организме человека.....	107
<i>Хауметова А.Г.</i> Модификация слоев поливиниленов на кремниевых подложках под действием наносекундных лазерных пучков.....	111
<i>Кудряшова А.С.</i> Определение порогового времени при планировании радиойодтерапии рака щитовидной железы.....	114

Секция

«ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ»

<i>Власова Л.А.</i> Кинетическое моделирование каталитического риформинга бензиновой фракции 85-140 °С на катализаторе R-264 в нестационарных условиях.....	118
<i>Семенов А.Д., Голованова О.А.</i> Изучение процессов коррозии воды при эксплуатации паровой котельной г. Омска.....	124

Секция

«СОВРЕМЕННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ОБРАЗОВАНИЯ»

<i>Благодравова О.В.</i> О самостоятельной работе студентов при изучении математических дисциплин	129
<i>Кутафина Я.Р.</i> Измерение сформированности проектной компетенции у студентов в процессе обучения физике	133
<i>Сокольникова А.М.</i> Применение интерактивных методов при дистанционном обучении	137
<i>Шиповалова В.А.</i> Возможности формирования педагогических профессиональных компетенций вожатых профильных смен в режиме дистанционного обучения.....	141

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

<i>Сервах Владимир Вицентьевич</i>	д-р физ.-мат. наук, профессор, старший научный сотрудник Омского филиала Института математики им. С. Л. Соболева, профессор кафедры прикладной и вычислительной математики ОмГУ
<i>Прудников Владимир Васильевич</i>	д-р физ.-мат. наук, профессор, заведующий кафедрой теоретической физики ОмГУ
<i>Потуданская Мария Геннадьевна</i>	канд. биол. наук, доцент, декан физического факультета ОмГУ
<i>Голованова Ольга Александровна</i>	доктор геолого-минералогических наук, профессор, заведующий кафедрой неорганической химии ОмГУ
<i>Реутова Ольга Антоновна</i>	ст. преподаватель кафедры проектирова- ния химико-технологических систем, созданной на базе ПАО "ОМСКНЕФТЕХИМПРОЕКТ"
<i>Серолян Геннадий Михайлович</i>	канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры общей, прикладной и медицинской физики ОмГУ
<i>Леванова Татьяна Валентиновна</i>	канд. физ.-мат. наук, доцент, старший научный сотрудник Омского филиала Института математики им. С. Л. Соболева СО РАН, заведующий кафедрой прикладной и вычислительной математики ОмГУ
<i>Коваленко Юлия Викторовна</i>	канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник Омского филиала Института математики им. С. Л. Соболева СО РАН, доцент кафедры алгебры и математического анализа ОмГУ

Секция

«МЕТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ДИСКРЕТНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ»

Исследование задачи кластеризации графа с ограничениями на размеры кластеров

Р.В. Балджанова

Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. В.П. Ильев

Аннотация. В данной статье исследуются задачи кластеризации графа, в которых размер кластеров ограничен 2 и 3. Для этих задач найдены оценки сложности кластеризации, а также предложен полиномиальный приближённый алгоритм.

Ключевые слова: задача кластеризации графа, кластер, приближённый алгоритм.

Введение

Данная работа посвящена задачам кластеризации графа, в которых требуется минимизировать число ребер между кластерами и число отсутствующих ребер внутри кластеров. Другими словами, требуется из данного неориентированного графа получить граф, состоящий из объединения вершинно-непересекающихся клик, путем минимального числа реберных модификаций [3, 4].

Определения и постановка задачи

В задачах кластеризации будем рассматривать только *обыкновенные графы*, т.е. графы без петель и кратных ребер. Граф называется *кластерным графом*, если каждая его компонента связности — полный граф. Множества вершин этих компонент связности будем называть *кластерами*.

На одном множестве вершин рассмотрим два графа $G_1 = (V, E_1)$, $G_2 = (V, E_2)$. Введём *расстояние* между графами как $d(G_1, G_2) = |E_1 \setminus E_2| + |E_2 \setminus E_1|$.

Пусть V — конечное множество. Обозначим через $\mathbf{M}^{1,p}(V)$ — множество всех кластерных графов, в которых размер каждой компоненты не превышает числа p , $2 \leq p \leq |V|$.

Задача $\mathbf{GC}^{1,p}$: Дан граф $G = (V, E)$ и целое p , $2 \leq p \leq |V|$.
Найти такой кластерный граф $M^* \in \mathbf{M}^{1,p}(V)$, что

$$d(G, M^*) = \min_{M \in \mathbf{M}^{1,p}(V)} d(G, M) = \tau^{1,p}(G)$$

Величина $\tau^{1,p}(G)$ называются *сложностью кластеризации графа*.

Оценки сложности кластеризации графа в задачах $\mathbf{GC}^{1,2}$ и $\mathbf{GC}^{1,3}$

Доказаны следующие утверждения:

Теорема 1. Для любого n -вершинного графа G

$$\tau^{1,2}(G) \leq \frac{n(n-1)}{2} - \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor.$$

Теорема 2. При $n \geq 4$ для любого n -вершинного графа G

$$\tau^{1,3}(G) \leq \frac{n(n-1)}{2} - 3 \left\lfloor \frac{n}{3} \right\rfloor.$$

Приближённый алгоритм для задачи $\mathbf{GC}^{1,3}$

Задача $\mathbf{GC}^{1,p}NP$ - трудна для любого фиксированного $p \geq 3$ [1, 2]. А значит не приходится ожидать, что для больших n оптимальное решение будет найдено за разумное время. В [1] Ильев, Ильева и Навроцкая предложили 3-приближённый алгоритм для задачи $\mathbf{GC}^{1,p}$. В данной работе предлагается полиномиальный приближённый алгоритм для задачи $\mathbf{GC}^{1,3}$, который в эксперименте показал себя лучше, чем алгоритм Ильева-Ильевой-Навроцкой.

Алгоритм

Вход: произвольный граф $G = (V, E)$.

Выход: кластерный граф $M^* \in \mathbf{M}^{1,3}(V)$.

Шаг 1. В графе G ищем треугольники (циклы длины 3). При нахождении очередного треугольника удаляем все рёбра, которые связывают вершины треугольника с вершинами вне данного треугольника. В конечном итоге получаем граф $G' = \Delta \cup M_1$,

где Δ – граф, содержащий в себе только найденные треугольники, а M_1 содержит оставшиеся неудалённые рёбра. Переходим на шаг 2.

Шаг 2. В графе M_1 находим наибольшее паросочетание M_2 . Множество вершин, не вошедших в паросочетание, обозначим M_3 . Переходим на шаг 3.

Шаг 3. Строим кластерный граф $M \in \mathbf{M}^{1,3}(V)$: $M = \Delta \cup M_2 \cup M_3$. Построенный граф содержит трёхвершинные компоненты связности из треугольников, двухвершинные компоненты связности из паросочетания M_2 и изолированные вершины из M_3 , не попавшие ни в треугольники, ни в паросочетание.

Конец.

Замечание 1. На полном графе алгоритм находит оптимальное решение.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Ильев В.П., Ильева С.Д., Навроцкая А.А.* О задаче кластеризации графа с ограничением на размеры кластеров // Дискрет. анализ и исслед. операций. 2016. Т. 23, № 3. С. 5–20.
- [2] *Ильев В.П., Навроцкая А.А.* Вычислительная сложность задачи аппроксимации графами с компонентами связности ограниченного размера // Прикл. дискрет. математика. 2011. № 3. С. 80–84.
- [3] *Schaeffer S.E.* Graph clustering // Computer Science Review. 2005. V. 1, No. 1. P. 27–64.
- [4] *Zahn C.T.* Approximating symmetric relations by equivalence relations // J. Soc. Indust. Appl. Math. 1964. V. 12, No. 4. P. 840–847.

Балджанова Роза Вагифкызы,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, ИМИТ,
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812)644238,
baldzhanova@mail.ru

Оценка аппроксимационной сложности задачи MAX MDS DICUT

В.В. Ворошилов

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент Р.Ю. Симанчѐв

Аннотация. Приводится доказательство отсутствия (в случае неравенства классов P и NP) полиномиальных алгоритмов решения задачи MAX MDS DICUT с гарантированной оценкой точности лучше, чем $|V|^{0.5}$.

Ключевые слова: оргграф, разрез, аппроксимация, сложность.

В простом ориентированном графе G разрез, порожденный множеством вершин D – множество дуг графа, начало которых принадлежит множеству D , а конец ему не принадлежит. Весом разреза $w_{dc}(D)$ будем называть сумму весов всех входящих в него дуг. Множество вершин называется доминирующим, если любая вершина графа или принадлежит этому множеству или достижима из него за один шаг. Доминирующее множество является минимальным, если оно не содержит в себе доминирующего множества меньшего размера. Под задачей MAX MDS DICUT понимается задача поиска разреза максимального веса, порожденного минимальным доминирующим множеством.

Обозначим через $Q=(Q_{in}, S_q, f_q)$ оптимизационную задачу MAX MDS DICUT. Здесь Q_{in} – семейство всех индивидуальных задач. Каждая индивидуальная задача I из Q_{in} – это простой ориентированный граф $I=(V, A, f)$ с неотрицательными весами его дуг. S_q – функция, которая каждой индивидуальной задаче (графу) I ставит в соответствие семейство всех его минимальных доминирующих множеств, а f_q – целевая функция. В данном случае: $S_q(I)$ – семейство $D_{min}(I)$ всех минимальных доминирующих множеств графа I , $f_q(I, S)$ – вес разреза, порожденного множеством S .

Аналогичным образом введем обозначение $P=(P_{in}, S_p, f_p)$ для оптимизационной задачи поиска в простом неориентированном графе минимального доминирующего множества максимального веса. P_{in} – семейство всех неориентированных взвешенных гра-

фов $I=(V,E,g)$ с заданными неотрицательными весами их вершин. И, соответственно, имеем: $S_p(I) = D_{\min}(I)$, $f_p(I,S)$ – сумма весов вершин графа, входящих в множество S .

Теорема (Оценка гарантированной точности приближенного полиномиального алгоритма):

В случае неравенства классов P и NP не существует полиномиального приближенного алгоритма решения задачи P с гарантированной оценкой лучше, чем $|V|^{0.5}$.

Доказательство.

Предположим, что утверждение теоремы неверно и существует некоторое $\epsilon > 0$, а также полиномиальный приближенный алгоритм A решения задачи P , такой что для любой индивидуальной задачи I из P_{in} справедлива оценка:

$$\frac{OPT(I)}{A(I)} \leq |V|^{0.5-\epsilon}$$

Здесь V – множество вершин графа I , $OPT(I)$ - оптимальное решение задачи I , $A(I)$ – найденное алгоритмом A допустимое решение.

Выполним сведение по Тьюрингу задачи P к задаче Q . Пусть имеется индивидуальная задача I из P_{in} , заданная простым взвешенным неориентированным графом $I=(V,E,g)$. Построим новый граф $I'=(V',A',g')$ в котором каждой вершине v из V поставим в соответствие пару вершин v, v' и дуги (v,v') , (v',v) . А каждому ребру между вершинами v и u поставим в соответствие шесть дуг - по одной противоположно направленной паре дуг для каждой пары вершин (v,u) , (v,u') и (v',u) . Пример приведен на рисунке 1.



Рисунок 1 – Построение графа I'

Вес дуг $f(v,v')$ и $f(v',v)$ положим равным весу вершины v . Веса остальных дуг – равными 0.

Очевидно, что I' принадлежит Q_{in} и построение можно выполнить за полиномиальное время относительно $|V|$. Легко показать, что любое минимальное по включению доминирующее множество в графе I будет таковым и в графе I' . В самом деле, по построению графа I' вершины u и u' будут смежными (или, наоборот, не смежными) с v тогда и только тогда, когда вершина u смежная (соответственно, не смежная) с v в графе I , то есть $S_p(I)$ является подмножеством $S_q(I')$.

Кроме того, в любое минимальное доминирующее множество графа I' не могут входить одновременно и вершина v , и парная ей вершина v' , поскольку между ними есть пара противоположно направленных дуг, а любая другая вершина достижима (или недостижима) одновременно как из v , так и из v' . И получаем, что для любого минимального доминирующего множества в графе I , то есть для любого S из $S_p(I)$, верно:

$$f_p(I, S) = \sum_{v \in S} g(v) = \sum_{v \in S} f(v, v') = f_q(I', S)$$

Отсюда следует, что для любой I из P_{in} справедливо:

$$OPT(I) \leq OPT(I') \quad (1)$$

Кроме того, если в S' из $S_q(I')$ все вершины v' , не принадлежащие V , заменить на парные им v из V , то получившееся множество S , во-первых, также является минимальным доминирующим, то есть:

$$S \in S_p(I) \subseteq S_q(I')$$

а во-вторых:

$$\begin{aligned} f_q(I', S') &= \sum_{v \in S' \cap V} f(v, v') + \sum_{v' \in S' \cap V} f(v', v) = \\ &= \sum_{v \in S} f(v, v') = f_p(I, S) \end{aligned} \quad (2)$$

На рисунке 2 изображена схема алгоритма, где B - это шаг построения графа I' из графа A , A - полиномиальный алгоритм решения задачи Q , C - шаг построения множества $S=A(I)$ из множества $S'=A(I')$ заменой вершин v' на v .

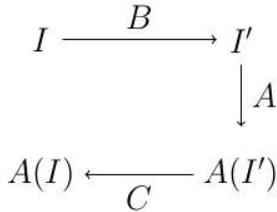


Рисунок 2 – Схема алгоритма

Шаги А, В, С – полиномиальны относительно $|V|$. В силу (1) и (2) имеем: $\text{OPT}(I) = \text{OPT}(I')$, но тогда:

$$\frac{\text{OPT}(I)}{A(I)} = \frac{\text{OPT}(I')}{A(I')} \leq |V|^{0.5-\epsilon} < |V|^{0.5}$$

А это означает, что нам удалось построить полиномиальный алгоритм, который для произвольной индивидуальной задачи I из P_{in} находит приближенное решение $A(I)$ с гарантированной оценкой лучшей, чем $|V|^{0.5}$. Но это противоречит результатам из [1], где утверждается, что такого полиномиального алгоритма не существует, если классы P и NP не совпадают. Получили противоречие. Следовательно, исходное предположение неверно и теорема доказана.

Таким образом, можно сделать вывод, что задача MAX-MDSDICUT для графов общего вида не может быть более простой с точки зрения вычислительной сложности приближенных алгоритмов ее решения, чем задача поиска минимального доминирующего множества максимального веса.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Cheston G.A., Fricke G., Hedetniemi S.T., Pokrass J.D.* On the computational complexity of upper fractional domination // *Discrete Applied Mathematics*. 1990. V. 27(3). P. 195–207.

Ворошилов Владимир Владимирович,
 Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
 2 курс магистратуры, ИМИТ,
 644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812)644238,
 voroshil@gmail.com

Формирование портфеля заказов предприятия с учетом производственных ограничений

И.С. Жаркова

Научный руководитель: д.ф.-м.н., с.н.с. В.В. Сервах

Аннотация. В статье рассматривается задача оптимального выбора заявок для выполнения с учетом производственных ограничений. Формулируется несколько постановок задачи. Основное внимание уделяется исследованию задачи с единичными длительностями заявок. Выделены полиномиально разрешимые случаи путем их сведения к задаче о назначениях.

Ключевые слова: директивные сроки, портфель заказов, оптимизация производства, максимизация прибыли, штрафы.

Для некоторого малого производственного предприятия необходимо выбрать заказы на период планирования T . Выбор заказов осуществляется среди n заявок со следующими характеристиками:

p_i – длительность выполнения заявки i , $i=1, 2, \dots, n$;

g_i – доход от выполнения заявки i ;

d_i – директивный срок завершения заявки i ;

z_i – неустойка за единицу времени просрочки заявки i .

Запишем математическую модель:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n g_i x_i + \sum_{i=1}^n \max \{0, C_i - d_i\} \rightarrow \max \\ \sum_{i=1}^n p_i x_i \leq T, i=1, \dots, n \end{cases}$$

где $x_i = 1$, если заявка i принимается для выполнения, $x_i = 0$, иначе.

Задача максимизации дохода от выполнения заказов является актуальной и исследуется довольно давно. Подробно этот вопрос рассматривался, например, в работах [4, 6]. Эвристические алгоритмы для максимизации дохода и количества требований, обслуживаемых на параллельных приборах предложены в [1]. Задача выбора заданий исследовалась в [3, 5]. Трудность реше-

ния данных задач подводило авторов к необходимости разработки приближенных, эволюционных и генетических алгоритмов.

В [2] были исследованы две задачи: с жесткими директивными сроками d_i и со штрафами z_i за их нарушение. Для первой задачи доказана NP-трудность и построен алгоритм псевдополиномиальной трудоемкости, для второй построен приближенный алгоритм, основанный на схеме динамического программирования.

В настоящей работе исследуется задача с единичными длительностями работ.

Задача с единичными длительностями работ

Рассмотрим два подслучая, когда все работы можно выполнить в заданный период планирования, и когда количество работ больше, чем горизонт планирования. Во втором случае необходимо выбрать работы, максимизируя общий доход от них.

В первом подслучае наша задача сводится к задаче о назначениях с предварительно вычисляемой матрицей c_{it} .

Пусть n – количество заявок, T – планируемый период, $n \leq T$.

Обозначим через c_{it} штраф, если работа i выполняется в интервале t , $i \in \{1, \dots, n\}$, $t \in \{1, \dots, T\}$:

$$c_{it} = \begin{cases} z_i(t - d_i), & t > d_i \\ 0, & t \leq d_i \end{cases}$$

Получаем следующую математическую модель

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n \sum_{t=1}^n c_{it} x_{it} \rightarrow \min \\ \sum_{t=1}^n x_{it} = 1, \forall i \\ \sum_{i=1}^n x_{it} = 1, \forall t \\ x_{it} \in \{0, 1\}, \forall i, \forall t \end{cases}$$

Для данной задачи существует точный полиномиальный алгоритм трудоемкостью $O(n^3)$.

Рассмотрим ситуацию, когда поступивших заявок больше, чем мы можем выполнить в планируемом периоде и в любой момент периода $[0, T]$ работа приносит прибыль, т.е. $n > T$ и $\forall i: g_i + z_i(T - d_i) \geq 0$.

Матрица (c_{it}) вычисляется как

$$c_{it} = \begin{cases} \max\{t - d_i\} z_i - g_i, & t > d_i \\ 0, & t \leq d_i \end{cases}$$

Для получения стандартного вида задачи о назначениях выполним процедуру приведения данной задачи к задаче о назначениях. С этой целью добавляем фиктивные дни в горизонт планирования T в количестве $T - n$ и переопределяем доходы и штрафы на нулевые $g_i = 0$ и $z_i = 0 \quad \forall i = T + 1, \dots, T + n$. Получаем следующую математическую модель

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n \sum_{t=1}^T c_{it} x_{it} \rightarrow \min \\ \sum_{t=1}^n x_{it} = 1, \forall i \\ \sum_{i=1}^{T+n} x_{it} = 1, \forall t \\ x_{it} \in \{0, 1\}, \forall i, \forall t \end{cases}$$

Если в некоторый момент периода $[0, T]$ работа приносит убыток, то получение решения может быть реализовано с некоторыми модификациями в отличие от обычной задачи о назначениях.

Если для некоторых i выполнено $g_i + z_i(T - d_i) \geq 0$, то

$$c_{it} = \begin{cases} 0, & t \leq d_i \\ \max\{t - d_i\} z_i - g_i, & t > d_i, \max\{t - d_i\} z_i \leq g_i \\ M, & t > d_i, \max\{t - d_i\} z_i > g_i \end{cases}$$

где M – некоторое большое число. Для получения конечного набора выполняемых заявок, из полученного решения необходимо убрать заявки, у которых $c_{it} = M$.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Голами О., Сотсков Ю.Н., Вернер Ф., Затюно О.С.* Эвристические алгоритмы для максимизации дохода и количества требований, обслуживаемых на параллельных приборах // Автоматика и телемеханика. 2019. Вып. 2. С. 125–151.
- [2] *Жаркова И.С.* Формирование портфеля заказов предприятия с учетом директивных сроков// Молодежь третьего тысячелетия: сб. ст. Омск: Изд-во ОмГУ, 2019. С. 436–439.
- [3] *Ghosh J.B.* Job selection in a heavily loaded shop // Computers and Operations Research. 1997. V. 24 (2). P. 141–145.
- [4] *Rajapakshe T., Dawande M., Sriskandarajah C., Drobouchevitch I.* Analysis of Revenue Maximization Under Two Movie-Screening Policies // Production and Operations Management. 2010. V. 9 (1). P. 111–124.
- [5] *Slotnick S.A., Morton T.E.* Order acceptance with weighted tardiness // Computers and Operations Research. 2007. V. 34 (10). P. 3029–3042.
- [6] *Sterna M., Juraszek J., Pesch E.* Revenue Maximization on Parallel Machines // Operations Research Proceedings, 2008. P. 153–158.

Жаркова Илона Сергеевна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
1 курс магистратуры, ИМИТ,
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812)644238,
izharkova097@gmail.com

Исследование систем алгебраических уравнений над классом прямоугольных связей

Е.Ю. Князев

Научный руководитель: д.ф.-м.н., доцент А.Н. Шевляков

Аннотация. В данной статье изучаются системы уравнений над классом прямоугольных связей. Предложен алгоритм проверки системы уравнений на совместность и оценена его трудоемкость.

Ключевые слова: прямоугольные связи, системы уравнений.

Введение

В настоящей работе предложен алгоритм проверки системы уравнений над классом прямоугольных связей на совместность. Исследование имеет фундаментальный характер, важный для развития области исследований совместности систем уравнений над группами и полугруппами.

Базовые определения [1]

Набор функциональных символов $L = \{f_1^{(n_1)}, f_2^{(n_2)}, \dots\}$ с указанием их местности n_1, n_2, \dots ($n_i \in \mathbb{N}$) называется функциональным языком (далее просто языком). Терм языка L или L -терм от переменных $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ – это каждая переменная $x_i \in X$. Выражение $f^{(m)}(t_1(X), t_2(X), \dots, t_m(X))$, где $f^{(m)}$ – функциональный символ языка L , а $t_1(X), t_2(X), \dots, t_m(X)$ – термы языка L .

В соответствии с введенным выше определением константный символ также является термом языка L .

Уравнением над языком L или L -уравнением называется выражение $t(X) = s(X)$, где $t(X)$ и $s(X)$ – L -термы над множеством X . Произвольное множество L -уравнений называется системой L -уравнений или L -системой.

В соответствии с теорией полугрупп каждая прямоугольная связка изоморфна множеству пар $RB(n, m) = \{(i, j) \mid 1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq m\}$, если на множестве задана операция умножения $\{ \cdot^{(2)} \}: (i_1, j_1) (i_2, j_2) \rightarrow (i_1, j_2)$.

Для удобства в дальнейшем система уравнений будет рассматриваться над множеством пар $RB(n, m)$. Прямоугольная связка удовлетворяет тождествам: $\forall x x \cdot x = x$, $\forall x \forall y \forall z x \cdot y \cdot z = x \cdot z$.

Следовательно, произвольное уравнение над $RB(n, m)$ имеет вид $\alpha\beta = \gamma\delta$, где $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ являются элементами $RB(n, m)$. Каждая буква может быть переменной, если i и j нужно найти, или константой, если i и j известны.

Граф $G = \langle V, E \rangle$, в котором при наличии ребер вида (v_i, v_k) и (v_k, v_j) , где $v_i, v_k, v_j \in V$, обязательно есть ребро вида (v_i, v_j) , называется *транзитивным*[2].

Алгоритм

1. На вход подается:
 - a. Система уравнений вида $\alpha\beta = \gamma\delta$, где каждая буква – переменная или константа, принадлежащие прямоугольной связке $RB(n, m)$.
 - b. Количество уравнений в системе
 - c. Количество переменных k .
 - d. Параметры прямоугольной связки $RB(n, m)$.
2. Система приводится к двум наборам равенств для первой и второй координаты элементов соответственно.
3. Строится граф, вершинами которого являются координаты, а ребра задаются отношением равенства между координатами.
4. Строится транзитивное замыкание графа из пункта 3.
5. Проверяются ребра каждой вершины, которая задана константной координатой. Если хотя бы одно ребро инцидентно другой вершине, заданной константной координате, то система несовместна.

Оценка трудоемкости алгоритма

Пусть n, m – параметры прямоугольной связки $RB(n, m)$, количество переменных равно k , количество уравнений в системе равно N . Трудоемкость алгоритма оценивается для абстрактной вычислительной машины, способной выполнять арифметические операции, операции сравнения и пересылки чисел, и т. д. Все эти операции считаются элементарными. Элементарные

операции, без ограничения общности, выполняются за единицу времени. Время работы алгоритма будет оцениваться количеством выполненных элементарных операций[3].

Для упрощения всех уравнений в системе понадобится $O(N)$ операций. Построение транзитивного замыкания с помощью алгоритма поиска в ширину займет $O(N)$. Для проверки на совместность понадобится $O((k+n\cdot m)^2\cdot n\cdot m)$ операций. Тогда сложность описанного выше алгоритма оценивается как $O((k+n\cdot m)^2\cdot n\cdot m\cdot N^2)$.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Даниярова Э. Ю., Мясников А. Г., Ремесленников В. Н. Алгебраическая геометрия над алгебраическими системами. Новосибирск: Издательство СО РАН, 2016. 243 с.
- [2] Домнин Л. Н. Элементы теории графов: учебное пособие. Пенза: Изд-во Пенз. гос. ун-та, 2007. 144 с.
- [3] Ильев В. П. Комбинаторные задачи на графах: учебное пособие. Омск: Изд-во ОмГУ, 2013. 80 с.

Князев Евгений Юрьевич,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
1 курс магистратуры, ИМИТ,
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812)644238,
uevgenyknayzev@gmail.com

Генераторы случайных чисел, использующие мантиссы иррациональных чисел и их тестирование

А.В. Миронов

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент А.В. Пролубников

Аннотация. В статье рассматриваются генераторы псевдослучайных чисел, использующие цифры мантисс иррациональных чисел в качестве «источника случайности», приведены описания разработанных генераторов и результаты их тестирования.

Ключевые слова: генераторы случайных чисел, тесты Diehard.

Генераторы случайных чисел находят широкое применение. Основные требования, предъявляемые к ним – генерирование последовательностей случайных чисел с периодом длины не менее заданной. Для определения периода не должно существовать полиномиального алгоритма с вероятностью его срабатывания более $1/2$. Помимо этого, распределение сгенерированных чисел в последовательности должно хорошо согласовываться с равномерным законом распределения.

Известно, что распределение последовательности цифр в мантиссах иррациональных чисел хорошо согласуется с равномерным законом распределения, что позволяет использовать их мантиссы в генераторах псевдослучайных чисел в качестве «источника случайности» [1]. Нами разработаны генераторы псевдослучайных чисел такого типа. Для сравнительной оценки пригодности иррациональных чисел, для решения этой задачи, для генераторов были рассмотрены три иррациональных числа π , $\sqrt{2}$, e . Из каждого иррационального числа была взята база – последовательность N цифр, взятых в исходном порядке их следования в мантиссе. В разработанных нами генераторах использовались 10^6 первых цифр мантиссы.

Нами были разработаны пять генераторов натуральных чисел, названия которых мы определили как *genIrr1*, *genIrr2*, *genIrr3*, *genIrr4*, *genIrr5*. Генераторы принимают на вход два обязательных параметра a , $b \in \mathbb{N}$, задающие числовой интервал

$[a, b]$ генерирования целых чисел. Во всех генераторах значения разрядов каждого генерируемого псевдослучайного числа инициализируются из цифр базы.

genIrr1. Число n формируется из цифр мантиисы до тех пор, пока выполняется $n \notin [a, b]$, иначе генератор возвращает n .

genIrr2. Инициализируется числовой интервал K в зависимости от разрядности k генерируемого числа n для того, чтобы генерируемые числа были заданной разрядности k :

$$K = \begin{cases} [a, b], & k = k_{\max} = k_{\min}, \\ [10^{k_{\max}-1}, b], & k = k_{\max}, k \neq k_{\min}, \\ [a, 10^{k_{\min}-1}], & k = k_{\min}, k \neq k_{\max}, \\ [a, b], & \text{иначе,} \end{cases}$$

где k_{\max}, k_{\min} – разрядность чисел a и b соответственно. Далее, число n будет генерироваться до тех пор, пока не будет получено $n \in K$.

genIrr3. Так же как и для генератора *genIrr2* инициализируется числовой интервал K , а далее – модуль m :

$$m = \begin{cases} b - a + 1, & k = k_{\max} = k_{\min}, \\ b - 10^{k_{\max}-1} + 1, & k = k_{\max}, k \neq k_{\min}, \\ 10^{k_{\min}} - a, & k = k_{\min}, k \neq k_{\max}, \\ b - a + 1, & \text{иначе} \end{cases}$$

и слагаемое c :

$$c = \begin{cases} 10^{k_{\max}-1}, & k = k_{\max}, k \neq k_{\min}, \\ a, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Генерируется число n разрядности k . Если $n \in K$, то генератор возвращает n , в противном случае к числу n добавляется ещё один дополнительный младший разряд, затем выполняется преобразование:

$$n \leftarrow c + (n \bmod m)$$

То есть, значения m и c выбираются таким образом, чтобы генерируемые числа попадали в заданный интервал K .

genIrr4. Генерируется число n разрядности k , если получаем, что $n > b$, то выполняется следующая последовательность инструкций:

1. $s \leftarrow \lfloor (n - b) / (10^k - 1 - b) \rfloor$
2. $n \leftarrow \lfloor b - (N_k - 1) \cdot s \rfloor$

Если же оказалось, что $n < a$, то выполняется следующая последовательность инструкций:

1. $s \leftarrow \lfloor (a - n) / (a - 10^{k-1}) \rfloor$
2. $n \leftarrow \lfloor ((N_k - 1) \cdot s + a) \rfloor$

Если кроме того $a = 10^{k-1}$, $k = 1$, то число n разрядности k генерируется до тех пор пока выполняется $n \notin [a, b]$, где N_k – количество чисел разрядности k в интервале $[a, b]$. В результате выполнения инструкций 1-2 производится нормирование числа n не принадлежащего $[a, b]$ в число принадлежащее множеству чисел заданной разрядности k из заданного интервала $[a, b]$.

genIrr5. Генерируются три числа n_1, n_2, n_3 разрядности k_{\max} , значения разрядов которых инициализируются цифрами базы, после чего выполняется преобразование:

$$n \leftarrow n_1 \oplus n_2 \oplus n_3 \quad (1)$$

Такое генерирование n_1, \dots, n_3 для применения их в (1) повторяется до тех пор, пока выполняется $n \notin [a, b]$, иначе – возвращается n .

Последовательности разработанных генераторов были протестированы 29-ю тестами – тестами батареи *Diehard* [2] и другими статистическими тестами на равномерность. В таблице ниже для разработанных генераторов приведён процент всех пройденных тестов на равномерность и независимость полученных ими последовательностей натуральных чисел.

Нами разработаны и протестированы последовательности из $3 \cdot 10^6$ чисел, принадлежащих интервалу $[0, 2^{32}-1]$, полученные генераторами с различными базами цифр иррациональных чисел. Моделирование для *genIrr5* показало, что если каждое число n в последовательности получено преобразованием $n_1 \oplus \dots \oplus n_l$, где $n_1, \dots, n_l \in \mathbb{N}$, то при возрастающем l , такая последовательность будет проходить больше тестов на равномерность и независимость. Уже при использовании $l = 3$ в (1), генератор *genIrr5* показал наилучший результат, пройдя более 85% тестов.

Таблица 1 – Сводные данные по результатам тестирования

Версия генератора		Процент от всех пройденных тестов
Генератор	Иррациональное число	
genIrr1	π	6,9
	$\sqrt{2}$	6,9
	e	6,9
genIrr2	π	17,2
	$\sqrt{2}$	17,2
	e	13,8
genIrr3	π	27,6
	$\sqrt{2}$	17,2
	e	37,9
genIrr4	π	24,1
	$\sqrt{2}$	34,5
	e	31,1
genIrr5	π	86,2
	$\sqrt{2}$	93,1
	e	89,7

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Dimitrievska R.V.* Pseudo random generator based on irrational numbers // ICT Innovations 2017, Web Proceedings. P. 105–113.

[2] Notes for Intel® MKL Vector Statistics [Электронный ресурс]. URL: <https://software.intel.com/content/www/us/en/develop/download/notes-for-intel-mkl-vector-statistics.html> (дата обращения: 10.06.2020).

Миронов Алексей Владимирович,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, ИМИТ,
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812)644238,
mironov@yahoo.com

Приближенное решение одной задачи календарного планирования со складываемыми ресурсами

С.А. Рядовой

Научный руководитель: к.ф.-м.н., 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. Для случая ограниченного склада предложены алгоритмы нахождения приближенного решения. Проведен вычислительный эксперимент.

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

Рассмотрим следующую задачу календарного планирования. Необходимо выполнить n работ проекта, связанных между собой отношениями предшествования. Отношения предшествования заданы ориентированным графом $G = (V, E)$, где V – множество вершин-работ, E – множество дуг. Дуга (u, v) принадлежит множеству E , если работа v не может начаться раньше завершения работы u . Для каждой работы $j \in V$ задана длительность p_j ее выполнения. Все работы должны быть завершены к сроку T выполнения проекта.

Для выполнения работ требуются складываемые ресурсы m видов. Для выполнения работы j необходимы ресурсы в количестве q_{rj} в каждый период времени ее выполнения, $r = 1, \dots, m$; $j = 1, \dots, n$. Особенностью рассматриваемой задачи является то, что требуемые ресурсы необходимо покупать. Предполагаем, что приобретение ресурсов происходит в начале периода t , $t = 1, \dots, T$.

Излишек складываемого ресурса, оставшийся в некоторый период времени, может быть запасен на складе и истрачен позже. При этом в случае неограниченного ресурса можно хранить на складе любое количество ресурса. В случае ограниченного склада излишек ресурса r в каждый период времени не должен превышать размера склада для ресурса r – величины V_r , $r = 1, \dots, m$.

Стоимость ресурса меняется с течением времени. 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 $s_j \in Z^+$ – время начала выполнения работы $j \in V$. Пусть $y_{rt} \in Z^+$ – объем закупаемого ресурса $r \in R$ в периоде времени t . Решением задачи является расписание S и план закупок Y . В задаче необходимо допустимое решение, при котором суммарные затраты на приобретение ресурсов минимальны.

Задача календарного планирования с рассматриваемым критерием и возобновляемыми ресурсами NP-трудна [5]. Задача календарного планирования со складываемыми ресурсами с критерием C_{\max} полиномиально разрешима [1], с критериями C_{Σ} и NPV NP-трудна в сильном смысле [4]. Данная работа является продолжением исследований, начатых в [2] и [3].

Расписание S назовём T -поздним, если (1) соблюдаются ограничения предшествования, (2) каждая работа завершается не позже времени T , и увеличение любого момента s_j приводит к нарушению хотя бы одного из условий (1)-(2). В [3] показано, что в случае неограниченного склада T -позднее расписание является оптимальным, а сама задача – полиномиально разрешимой. Также в [3] предлагается алгоритм динамического программирования псевдополиномиальной трудоемкости для нахождения плана закупок ресурсов по известному расписанию. Данный алгоритм будет использоваться в двух алгоритмах нахождения приближенного решения, предложенных в данной работе.

Первый алгоритм является «жадным». В ходе построения расписания будем пытаться выполнять как можно больше работ в периоды времени с меньшими стоимостями ресурса. Приведем данный алгоритм для случая одного ресурса.

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.

Второй алгоритм основан на теореме, доказанной в [3].

Теорема [3]: 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.

При построении расписания будем использовать сочетание раннего и T -позднего расписания на промежутках монотонности функции стоимости ресурса.

Шаг 1: Сортируем работы по неубыванию рангов.

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

Шаг 3: Разобьем интервал планирования на промежутки монотонности функции стоимости ресурса. Рассматриваем каждый промежуток по очереди. Если имеем промежуток убывания, то применяем позднее расписание для работ, позднее время начала выполнения которых входит в этот промежуток. В случае промежутка возрастания используем раннее расписание. Если остались не назначенные работы, начинаем их в момент времени, совпадающий с точкой минимума функции стоимости, попадающей в промежуток между ранним и поздним временем начала выполнения работы.

Шаг 4: Запускаем алгоритм ДП для нахождения плана закупок ресурса.

Алгоритмы реализованы. Вычислительный эксперимент проведен на задачах из библиотеки тестовых примеров PSPLib размерности 30 работ. Погрешность для первого алгоритма не превысила 20%, для второго – 25%.

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] *Рядовой С.А.* Минимизация затрат задачи календарного планирования со складываемыми ресурсами // 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.). С. 33–36.
- [4] *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.
- [5] *Möhring R.H.* Minimizing Costs of Resource Requirements in Project Networks Subject to a Fixed Completion Time // Operations Research. 1984. V. 32. P. 89–120.

Рядовой Сергей Андреевич,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
1 курс магистратуры, ИМИТ,
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812)644238,
ryadovoysergey@gmail.com

Разработка и исследование алгоритма роя частиц для одной задачи оптимального размещения

Т.В. Сичкарева

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент Т.В. Леванова

Аннотация. В работе рассмотрен алгоритм роя частиц. Предложена его адаптация для дискретной задачи размещения, выполнена апробация на тестовых примерах.

Ключевые слова: дискретная оптимизация, алгоритм роя частиц.

Многие современные проблемы, связанные с планированием бизнеса, хорошо описываются и решаются с помощью математических оптимизационных моделей. Одними из важнейших задач в рассматриваемой области являются задачи оптимального размещения объектов.

Суть дискретной задачи размещения заключается в необходимости расположить в некоторых пунктах предприятия и назначить им потребителей, которые они будут обслуживать, так чтобы минимизировать суммарные затраты. Под обслуживанием понимается транспортировка продукции от пунктов производства к пунктам потребления. Введем следующие обозначения [1]: m – число пунктов возможного размещения предприятий, $i \in I = \{1, \dots, m\}$; n – число клиентов, j – номер клиента, $j \in J = \{1, \dots, n\}$; c_i – стоимость размещения предприятия в пункте i ; t_{ij} – затраты на удовлетворение спроса клиента j предприятием, расположенным в пункте i ; x_{ij} – доля спроса клиента j , которую обеспечивает предприятие i ; $z_i = 1$, если предприятие в пункте открыто, иначе $z_i = 0$.

Модель целочисленного программирования (ЦЛП) для простейшей задачи размещения выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} F(z, X) &= \sum_{i \in I} c_i z_i + \sum_{i \in I} \sum_{j \in J} t_{ij} x_{ij} \rightarrow \min, \\ \sum_{i \in I} x_{ij} &= 1, j \in J, \\ z_i &\geq x_{ij}, i \in I, j \in J, \end{aligned}$$

$$z_i \in \{0,1\}, x_{ij} \geq 0, i \in I, j \in J.$$

Для решения дискретных задач в последнее время используются роевые алгоритмы. Целью работы была адаптация метода роя частиц для дискретной задачи размещения. Метод роя частиц (Particle Swarm Optimization – PSO) предложен в 1995 году Джеймсом Кеннеди и Расселом Эберхартом [2] для оптимизации нелинейных функций. Алгоритм метода роя частиц представляет собой итерационный процесс перемещения частиц в пространстве поиска решения задачи.

После начальной инициализации происходит итеративный процесс. На каждой итерации для всех частиц изменяется скорость, согласно формуле:

$$v_i(t+1) = wv_i(t) + c_1 r_1(p_i - x_i(t)) + c_2 r_2(g - x_i(t)),$$

где $v_i(t+1)$ – изменение вектора скорости частицы из позиции $x_i(t)$ в позицию $x_i(t+1)$, $v_i(t)$ – значение скорости i -ой частицы, p_i – минимальная функция приспособленности для текущей частицы (personal best), g – ее текущая функция приспособленности (global best), c_1 – коэффициент, c_2 – социальный коэффициент, r_1 и r_2 – случайные величины, равномерно распределенные на отрезке $[0,1]$.

На основе измененной скорости частицы позиция изменяется по правилу сложения векторов:

$$x_i(t+1) = x_i(t) + v_i(t+1).$$

В общем случае алгоритм работает с переменными, принимающими вещественные значения, однако для дискретных задач требуется некая адаптация поисковых процедур к данному виду значений переменных.

В [3] предложена следующая адаптация алгоритма к решению задач с булевыми переменными:

$$x'_{ij} = \frac{1}{1 + e^{-x_{ij}}}$$

$$x_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{если } x'_{ij} < rnd, \\ 1, & \text{если } x'_{ij} \geq rnd, \end{cases}$$

где rnd – случайное число в интервале $[0,1]$.

Для решения простейшей задачи размещения расстояние между частицами измеряется в метрике Хэмминга. Каждая частица представляет собой булев вектор, координаты которого

соответствуют набору предприятий (1 – предприятие открыто, 0 – закрыто). Рой частиц – множество всех таких векторов.

На начальном этапе происходит генерация популяции роя частиц. Для каждой частицы задается ее положение, которое генерируется случайным образом. Скорость каждой частицы на начальном этапе считается нулевой.

На следующем шаге полагается, что лучшее положение частицы это ее начальное положения. Рассчитывается целевая функция. Положение, в котором значение целевой функции минимально, объявляется лучшим положением всего роя.

После для каждой частицы вычисляется «скорость», согласно формуле в каноническом PSO. Затем происходит изменение текущего положения с помощью сигма-функции, учитывая расстояние Хэмминга между лучшим положением всего роя и текущим положением:

$$v_{ij}(t + 1) = wv_{ij}(t) + c_1 r_1 (p_{ij} - z_{ij}(t)) + c_2 r_2 (g - z_{ij}(t)),$$

$$\begin{aligned} \text{sigma}(v_{ij}) &= \frac{1}{1 + e^{-v_{ij}}}, \\ z_{ij} &= \begin{cases} 1, & \text{если } \frac{\text{sigma}(v_{ij})}{r(p_{ij}, g)} > \text{rnd}, \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases} \end{aligned}$$

Далее происходит проверка условия на изменение решения по сравнению с предыдущей итерацией. Если значение целевой функции меньше полученного ею ранее, изменяется лучшее положение частицы. Если значение целевой функции меньше лучшего положения для всего роя, изменяется лучшее положение всего роя.

Если решение не изменилось, алгоритм продолжает свою работу до критерия остановки, иначе, алгоритм выводит полученное решение и заканчивает работу.

Алгоритм был реализован и протестирован на примерах для простейшей задачи размещения из библиотеки тестовых задач Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН [4]. Рассматривались примеры на евклидовой плоскости (*Eucl*), примеры с большим разрывом двойственности (*Gap-A*, *Gap-B*, *Gap-C*).

Таблица 1 – Сравнение средних значений погрешности

	Eucl	Gap-A	Gap-B	Gap-C
Ср. min	0.2943	6.536	20.658	24.174
Ср. avg	1.0035	17.741	34.178	35.055
Ср. max	1.8169	24.566	42.442	43.294

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Колоколов А.А., Леванова Т.В., Лореш М.А. Алгоритмы муравьиной колонии для задач оптимального размещения предприятий // Омский научный вестник. 2006. №4 (38). С. 62–67.
- [2] Kennedy J., Eberhart R. Particle swarm optimization // Proceedings of ICNN'95 – International Conference on Neural Networks, Perth, WA, Australia, 1995, vol. 4. P. 1942–1948.
- [3] Kennedy J., Eberhart R. A discrete binary version of the particle swarm algorithm // 1997 IEEE International Conf. on Systems, Man, and Cybernetics. Computational Cybernetics and Simulation, Orlando, FL, USA, 1997, vol. 5. P. 4104–4108.
- [4] Дискретные задачи размещения [Электронный ресурс] // Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН. URL: <http://math.nsc.ru/AP/benchmarks/index.html> (дата обращения: 14.06.2020).

Сичкарева Татьяна Владимировна,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2 курс магистратуры, ИМИТ,
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812)644238,
tatyana_ivanova.1996@mail.ru

Решение и анализ задачи построения расписаний процессора с учётом ограниченной пропускной способности шины данных

М.Ю. Сосновская, М.А. Сахно

Научные руководители: д.ф.-м.н., доцент А.В. Еремеев,
А.А. Малахов

Аннотация. В работе предложен жадный алгоритм решения задачи составления расписаний выполнения работ на многоядерном процессоре с учетом ограниченной пропускной способности шины данных. Приводятся результаты экспериментального сравнения результатов жадного алгоритма с решениями, полученными с помощью модели частично целочисленного линейного программирования.

Ключевые слова: процессор, шина данных, жадный алгоритм.

В данной статье предложена конструктивная эвристика решения задачи построения расписаний процессора с учетом ограниченной пропускной способности шины данных [1]. Далее эту эвристику называем жадным алгоритмом, т.к. она назначает работы всем ядрам, не давая им простаивать, если это возможно.

Для задачи размерности m (количество работ) жадный алгоритм принимает на вход следующие данные:

- массив длины m , где по индексу i находится количество тактов процессора, необходимое i -ой работе для полного выполнения;
- массив длины m , где по индексу i находится процент шины данных, необходимый работе i при условии, что вместе с ней не выполняется других работ;
- матрица размера $m \times m$, определяющая частичный порядок между работами. Если работа i должна выполняться после работы j , то элемент матрицы с индексами $(i, j) = 1$, иначе $- 0$;
- количество ядер процессора p .

На каждой итерации жадный алгоритм выбирает набор работ (конфигурацию) для выполнения. Для этого используется следующий алгоритм:

Шаг 0. Положить

$freePercent :=$ процент свободной шины данных,
 $freeCores :=$ количество свободных ядер,
 $configuration := \emptyset$;

Шаг 1. Пока $freePercent$ не равно 0, повторять 1.1-1.2:

1.1 найти такую допустимую (не начавшуюся ранее и не запрещенную частичным порядком) работу j , для которой значение $|freePercent - jobPercent|$ минимально, где $jobPercent$ – это процент потребления шины данных, необходимый работе j . Если такой работы не найдено, то идти на Шаг 2;

1.2 положить

$freePercent := freePercent - jobPercent$;
 $configuration := configuration \cup j$;

Шаг 2. Пока $freeCores$ не равно 0, повторять 2.1-2.2:

2.1 найти допустимую работу j , процент потребления шины которой наименьший. Если ни одной допустимой работы не найдено, то переход на Шаг 3;

2.2 положить

$freeCores := freeCores - 1$;
 $configuration := configuration \cup j$;

Шаг 3. Конец.

После выбора конфигурации жадный алгоритм определяет, окончание какой из выбранных работ приведет к необходимости выбора следующей конфигурации. Для этого сначала алгоритм рассчитывает, сколько процентов шины данных будет выделено каждой работе. Вычисления производятся следующим образом:

Положим процент свободной шины данных $freePercent := 100$ (вся шина данных свободна) и количество свободных ядер $freeCores := coresCount$ (общее количество ядер процессора).

Далее, пока $freePercent$ не равно 0 и есть работы, для которых не выделена шина данных, выполнять:

Вычислить процент шины данных, который можно выделить каждой работе:

$percent := freePercent / freeCores$.

Если имеется такая работа, потребляющая $jobPercent$ процентов шины данных, что $jobPercent \leq percent$, то выделить ей $jobPercent$ процентов шины и положить:

$$\begin{aligned} freePercent &= freePercent - jobPercent; \\ freeCores &= freeCores - 1. \end{aligned}$$

Если такой работы не найдено, то всем оставшимся работам выделить по *percent* процентов шины данных.

Когда известно, сколько процентов шины данных досталось каждой работе, жадный алгоритм вычисляет, с какой скоростью будет выполняться каждая работа: скорость работы j равна проценту шины, который ей достался, деленному на процент шины, который ей нужен. Теперь алгоритм может определить, какая работа в выбранной конфигурации закончится первой и сколько тактов процессора каждая работа будет выполняться. Для этого сначала вычисляется время, необходимое каждой работе до завершения: количество тактов процессора, оставшееся работе до завершения, деленное на скорость работы в текущей конфигурации. Затем выбирается работа j с наименьшим временем выполнения – это и есть длительность выполнения текущей конфигурации. Жадный алгоритм считает работу j и все работы, время до завершения которых равно длительности конфигурации, завершенными, освобождает ядра, на которых они выполнялись, а все работы, не завершившиеся в этой конфигурации, переходят в следующую, при этом обновляется количество тактов процессора, необходимое каждой работе до завершения. Далее все шаги повторяются до тех пор, пока не будет построено расписание, предусматривающее выполнение всех работ.

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

Предложенный алгоритм был протестирован. В качестве работ были взяты процедуры из библиотеки Intel Math Kernel Library: копирование вектора, суммирование магнитуд вектора, вычисление суммы одного вектора с результатом произведения другого вектора на число, QR-разложение матрицы. Выбор таких процедур обусловлен тем, что они по-разному используют шину данных. Для тестирования было сгенерировано 960 примеров с различным количеством работ (4, 6, 7, 8, 10), различным частичным порядком (без частичного порядка, построенный случайным образом (с вероятностью $\frac{1}{2}$ определяется, должна ли

работа j_1 предшествовать работе j_2), бинарное дерево и один-к-многим-к-одному (сначала одна задача, после нее много задач, после них вновь одна), для разного количества ядер (2, 3, 4).

Проведено сравнение реального времени выполнения работ согласно расписаниям, построенным жадным алгоритмом, с реальным временем выполнения работ согласно расписаниям, построенным пакетом CPLEX с использованием модели частично целочисленного линейного программирования [1]. Результаты тестирования показали, что в 75% случаев жадный алгоритм ошибается не более, чем на 10%, а в худших случаях – не более, чем на 40%. Средняя ошибка составляет 4%. Среднее время работы жадного алгоритма для четырех работ составило 5,25 мкс, для шести работ – 9,4 мкс, для семи – 12 мкс, для восьми – 14,6 мкс, а для десяти работ – 20 мкс, тогда как время работы CPLEX для аналогичного количества работ – 0,2 сек., 1 мин., 3,75 мин., 7,5 мин. и 12,45 мин. соответственно.

Вычисления проводились на ЭВМ Intel Core i7-8565U CPU 1.80 ГГц, оперативная память 16 Гб, с выключенными технологиями Turbo Boost и Hyper-Threading.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Сосновская М.Ю., Сахно М.А.* Построение расписаний процессора с учетом ограниченной пропускной способности шины данных // 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.). С. 37–39.

Сосновская Мария Юрьевна, Сахно Максим Алексеевич,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, ИМИТ,
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812)644238,
sosnovskayamy@gmail.com, maxim.sakhno@gmail.com

Алгоритмы решения задачи составления расписания выполнения работ на двух станках при наличии частичного порядка

В.Ю. Тавченко

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент А.А. Романова

Аннотация. В работе рассматривается задача flow-shop с двумя машинами, имеющая приложение в логистике. Необходимо выполнить набор операций, связанных отношениями предшествования в форме двудольного графа, на двух машинах, с критерием минимизации общего времени выполнения. В работе предложены алгоритмы нахождения приближённого решения. Алгоритмы реализованы; проведен вычислительный эксперимент.

Ключевые слова: кросс-докинг, расписание, частичный порядок, целочисленное линейное программирование, приближенный алгоритм.

За прошедшее десятилетие появление новых методов материально-технического обеспечения в розничной, бакалейной и других распределительных отраслях привело к необходимости решения задачи обработки деталей на двух станках в системе конвейерного типа flow shop при наличии частичного порядка между операциями.

В таких системах идея заключается в том, чтобы перемещать товары прямо с привозящих автоприцепов на увозящие без хранения на складе. Если заявка покупателя поступила, когда товары пришли от поставщика, то рабочим всего лишь нужно переместить партию товара с привозящего автоприцепа на увозящий автоприцеп, идущий в соответствующий пункт назначения. Такая система называется cross-docking. Известно, что задача *NP*-трудна в сильном смысле [3]. В силу труднорешаемости задачи целесообразным является построение малотрудоёмких алгоритмов нахождения приближённого решения. В данной работе предлагается алгоритм такого типа, использующий четыре варианта процедуры на одном из этапов.

Опишем формальную постановку задачи. На производственной линии, состоящей из двух машин, необходимо выпол-

нить $m + n$ 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, операции B_j – b_j единиц времени. Задан частичный порядок с помощью двудольного ориентированного графа $G=(V, E)$, где $V = V_1 \cup V_2$ – множество вершин графа, $V_1 = \{A_1, A_2, \dots, A_m\}$; $V_2 = \{B_1, B_2, \dots, B_n\}$; $E = \{(A_i, B_j) \mid A_i \rightarrow B_j, A_i \in V_1, B_j \in V_2\}$. Граф предшествования определяется матрицей смежности $E = (e_{ij})$, где $i=1, \dots, m, j=1, \dots, n$. Если $e_{ij}=1$, то операцию B_j нельзя начинать выполнять на второй машине, пока не будет выполнена операция A_i на первой машине; иначе $e_{ij}=0$.

Требуется найти допустимое расписание S , при котором время завершения всех работ $C_{max}(S)$ минимально.

В работе предлагается алгоритм нахождения приближенного решения, основанный на построении последовательности выполнения работ на первой машине четырьмя способами и последующем построении расписания на второй машине.

Так как операции на первой машине не имеют предшествующих, их можно выполнять без простоев. Таким образом, расписание на первой машине можно задавать последовательностью выполнения операций. В работе предлагаются следующие процедуры определения последовательности выполнения операций на первой машине:

1. Упорядочение по невозрастанию количества $\deg(A_i)$ исходящих дуг. Использование данного способа основано на «жадной» идее: чем больше операций зависит от определенной операции на первой машине, тем раньше ее имеет смысл выполнять.

2. Упорядочение по убыванию величин $\frac{a_i}{\deg(A_i)}$.

3. Для каждой операции B_j определим сумму длительностей операций A_i связанных с ней отношениями предшествования. Выполним операции на первой машине, соответствующие наименьшей сумме, и соответствующую операцию на второй машине. Исключим из рассмотрения эти операции и дуги, им

инцидентные. Повторим процесс для оставшихся операций на второй машине.

4. Упорядочим операции на первой машине по убыванию сумм длительностей зависящих от них операций на второй машине. Данный способ является развитием «жадной» идеи первого способа. Отметим, что для алгоритма с данным способом построения последовательности в [2] построена оценка точности получаемого решения по аналогии с алгоритмом для задачи с единичными длительностями [1].

Рассмотрим, как при известной последовательности π выполнения операций на первой машине определить последовательность выполнения работ на второй машине, при котором общее время $C_{max}(\pi)$ минимально. Определим для всех операций

B_j время $r_j = \max \left\{ \sum_{i \in \pi_j} a_i, \max_{i \in \pi_j} (s_i^A + a_i) \right\}$ готовности к выполнению, j

$= 1, \dots, n$. Далее сортируем операции на второй машине по убыванию r_j . Составляем расписание выполнения операций на второй машине, ставя операции в указанном порядке с соблюдением величин r_j и требований допустимости.

Данный алгоритм является полиномиальным с трудоёмкостью $O(nm)$ операций, используя процедуры 1, 2, 4, и $O(n^2m)$ при использовании процедуры 3.

В таблице 1 представлены результаты работы алгоритма ветвей и границ [3] и приближенного алгоритма A для примеров размерности $m \times n$, построенных случайным образом. Здесь C_{max}^* – оптимальное значение целевой функции, найденное алгоритмом ветвей и границ; C_{max}^A – значение, полученное алгоритмом A четырьмя процедурами определения последовательности выполнения операций на первой машине; Δ_A – погрешность приближенного решения (в процентах).

По результатам вычислительного эксперимента можно сделать вывод о том, что алгоритм A в большинстве случаев находит наилучшее решение задачи $F2/CD/C_{max}$ по третьей процедуре. К тому же он затрачивает на вычисления очень мало времени, в отличие от GAMS, так как даже при небольших размерностях он выполняет операции более получаса.

Таблица 1 – Результаты вычислительного эксперимента

m	n	C_{\max}^*	$C_{\max}^{A_1}$	$C_{\max}^{A_2}$	$C_{\max}^{A_3}$	$C_{\max}^{A_4}$	Δ_{A_1}	Δ_{A_2}	Δ_{A_3}	Δ_{A_4}
3	4	44	48	51	54	44	9	15.9	22.7	0
4	6	58	65	58	58	65	12	0	0	12
4	8	86	86	86	86	86	0	0	0	0
7	7	115	133	126	119	123	16	9.6	3	6.9
10	10	130	145	140	133	140	11	8	2	8
10	10	143	171	159	143	157	19.5	11.1	0	9.8
15	15	218	246	252	238	255	12.8	15.6	9.1	16.9
20	20	294	358	326	297	360	21.7	10.8	1	22.4
27	27	440	515	487	462	499	17	10.6	5	13.4
30	30	516	548	562	517	544	6.2	8.4	0.2	5.4

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] Романова А.А., Тавченко В.Ю. Приближенный алгоритм для задачи составления расписания функционирования одной системы доставки продукции // Архитектурно-строительный и дорожно-транспортный комплексы: проблемы, перспективы, новации: сборник материалов IV Международной научно-практической конференции. Омск: СибАДИ, 2019. С. 520–525.
- [3] Chen, F. Discrete Optimization: Minimizing the makespan in a two-machine cross-docking flow-shop problem // European Journal of Operational Research. 2009. V. 193. P. 59–72.

Тавченко Вероника Юрьевна,
 Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
 2 курс магистратуры, ИМИТ,
 644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812)644238,
 nikapolicheva@mail.ru

Об алгоритме Cheng&Church для поиска бикластера

И.С. Хмара

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент Т.В. Леванова

Аннотация. В этой статье рассматривается задача бикластеризации. Приводятся некоторые сведения о существующих алгоритмах для поиска бикластеров. Подробно рассказывается об алгоритме Cheng&Church. Представляются численные эксперименты.

Ключевые слова: бикластеризация, анализ данных.

В настоящее время существует множество различных задач, в которых необходимо выявлять кластеры с сохранением объектно-признакового описания данных. К задачам такого рода можно отнести проблемы: выявление групп генов, обладающих общими свойствами; поиск групп посетителей со схожими интересами; анализ социальных сетей и тому подобное. Подход к разрешению данной проблемы получил название «бикластеризации». Он позволяет отыскивать «бикластеры», включающие, помимо множества объектов, множество их общих признаков. Например, для данных генной экспрессии первым компонентом такого кластера является множество генов, а вторым – множество экспериментов в которых они проявляли себя сходным образом.

Пусть дана матрица A , $X = \{x_1, x_2, \dots, x_m\}$ – множество строк, $Y = \{y_1, y_2, \dots, y_n\}$ – множество столбцов. Пусть $I \subseteq X$ и $J \subseteq Y$ – подмножества строк и столбцов. Бикластер есть подматрица матрицы A вида $A_{IJ} = (I, J)$, такая, что её строки проявляют «сходное поведение» на столбцах, а столбцы – на признаках. Задача бикластеризации, заключается в нахождении множества k бикластеров $\mathcal{B} = \{B_k = (I_k, J_k)\}$ [1].

Для поиска бикластера или бикластеров разработаны алгоритмы, которые можно разбить на разные классы. Один из способов классификации следующий. Первый класс включает в себя алгоритмы, основанные на эволюционных измерениях, такие как алгоритмы итеративного жадного поиска, стохастические алгоритмы жадного поиска, алгоритмы, основанные на

имитации природы. Во втором классе содержатся алгоритмы, не использующие метрику. Это алгоритмы, использующие графы, вероятностные модели, линейную алгебру, оптимальное переупорядочивание строк и столбцов входной матрицы [3].

В данной работе рассматривается алгоритм Cheng&Church [2]. Он представляет жадную эвристику поиска подматрицы максимально возможного размера. Эта подматрица имеет характеристику, которая не должна превышать заданного порога. Алгоритм использует последовательную стратегию покрытия для получения списка. Для оценки качества бикластера алгоритм использует среднеквадратичное отклонение. Трудоёмкость этого алгоритма $O(n \cdot m)$. Приведём схему алгоритма Cheng&Church, см. рисунок 1 [3].

Input: Matrix A; Thresholds δ, α
 Output: List of Biclusters L

1. Preprocess the missing values of matrix A
2. List L = \emptyset
3. Bicluster \mathcal{B}
4. **Repeat** n times
5. $\mathcal{B} = A$
6. $\mathcal{B}' =$ multiple node deletion phase ($\mathcal{B}, \delta, \alpha$)
7. $\mathcal{B}'' =$ simple node deletion phase (\mathcal{B}', δ)
8. $\mathcal{B}''' =$ addition phase (\mathcal{B}'')
9. L = L + \mathcal{B}'''
10. Substitution phase (\mathcal{B}''', A)
11. **End_repeat**
12. **Return** L

Рисунок 1 – Алгоритм Cheng&Church

На вход алгоритма подаётся: матрица, например, матрица экспрессии генов; пороговое значение δ , среднеквадратичное отклонение которого не должно превышать; пороговое значение α , необходимое на шаге удаления нескольких строк и (или) столбцов. На выходе должен сформироваться список L из δ -бикластеров. После предварительной обработки пропущенных значений матрицы входных данных путём замены их случайными числами процесс обнаружения бикластера повторяется столько раз, сколько требуется бикластеров. На каждой итерации бикластер \mathcal{B} инициализируется как входная матрица (п. 5,

рисунок 1). Затем применяются три разные фазы: фаза удаления нескольких строк и (или) столбцов (п. 6, рисунок 1), затем фаза удаления одной строки и (или) столбца (п. 7, рисунок 1). Затем начинается третья фаза – фаза добавления нескольких строк и (или) столбцов, чтобы избежать лишние удаления строк или столбцов, так как необходима подматрица максимально возможного размера, среднеквадратичное отклонение которой не превышает заданный порог (п. 8, рисунок 1). Эти фазы итеративно выполняют удаление и добавление строк и столбцов, гарантируя, что результатом будет δ -бикластер. И, наконец, фаза замещения, которая заменяет элементы входной матрицы, содержащиеся в недавно найденном бикластере случайными значениями (п. 10, рисунок 1). Эта замена применяется во избежание дублирования между бикластерами.

В этой работе был изучен алгоритм Cheng&Church, затем реализован с помощью языка программирования Java. Проведены численные эксперименты на тестовых примерах, один из которых построен на реальных данных, полученных в ходе опроса 19 человек. Каждому из опрашиваемых был поставлен вопрос “Как вы относитесь к ...”, и далее шло название заведения общепита. В эксперименте участвовало 11 заведений. Необходимо было дать ответ в виде оценки от 0 до 5 баллов. В итоге выделилась группа единомышленников, то есть получилась подматрица, в которой строки соответствовали группе людей с относительно одинаковыми предпочтениями к заведениям общепита. Далее проводились эксперименты для определения влияния значений α и δ на результат бикластеризации. Оказалось, что чем выше пороговые значения, тем большей размерности получается бикластер. Результаты можно видеть в таблице 1.

В заключении стоит отметить, что получились интересные результаты применения алгоритма Cheng&Church для выявления группы людей со схожими вкусами. В дальнейшем полезно разработать алгоритм локального поиска для нахождения бикластеров или же модифицировать алгоритм с учётом сетевого ограничения.

Таблица 1 – Результаты численных экспериментов

Матрица A	$\delta = 0,4;$ $\alpha = 1,2$	$\delta = 0,4;$ $\alpha = 1,7$	$\delta = 0,9;$ $\alpha = 1,2$	$\delta = 0,9;$ $\alpha = 1,7$
14532003434	445334554	5323434	445334554	145323434
44533004554	435435334	5334554	435435334	445334554
43543425334	435343333	5435334	555553443	435435334
53300033232	433533335	0000001	435343333	555553443
55555323443	334344544	5343333	433533335	435343333
40000240001	535434535	4344544	334344544	433533335
43534003333	345445545	5243335	305243335	334344544
43353023335	534444534	5434535	535434535	305243335
33434234544		5445545	345445545	535434535
30524333335		5544435	000003030	345445545
53543444535		4444534	543235532	000003030
33515115512			323255544	405544435
53552253035			534444534	543235532
34544245545				323255544
0000003030				534444534
40554204435				
54323255532				
32325255544				
53444554534				

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Игнатов Д.И.* Методы бикластеризации для анализа интернет-данных [Электронный ресурс]. URL: <http://citforum.ru/consulting/BI/biclustering/> (дата обращения: 14.06.2020).
- [2] *Cheng Y., Church G.M.* Biclustering of expression data // Proceedings of the 8th International Conference on Intelligent System for Molecular Biology, La Jolla, CA, 2000. P. 93–103.
- [3] *Pontes B., Giráldez R., Aguilar-Ruiz J.S.* Biclustering on expression data: a review // Journal of Biomedical Informatics. 2015. V. 57. P. 163–180.

Хмара Иван Степанович,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1 курс магистратуры, ИМИТ,
644077, Омск, пр. Мира, 55а, (3812)644238,
ivan-hmara@mail.ru

Неравновесное критическое поведение мультислойных магнитных наноструктур с подложной из немагнитного металла

М.М. Болдырева

Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. П.В.Прудников

Аннотация. В предоставленной работе рассматривается проблема численного исследования неравновесного поведения ультратонких магнитных структур методами компьютерного моделирования. Проведено исследование методами Монте-Карло для неравновесного поведения многослойной магнитной наноструктуры кобальта с подложкой из немагнитного металла, рассматривается структура из чередующихся магнитных и немагнитных нанослоев пленки.

Ключевые слова: мультислойные наноструктуры, ультратонкие магнитные пленки.

Множество уникальных свойств тонкопленочных структур привлекают повышенный интерес на протяжении более десятилетия [9]. Тонкопленочные системы и магнитные наноструктуры на их основе активно исследуются с толщинами от одного монослоя и более, указанные материалы показывают значительные отличия в поведении физических свойств систем от объемных [3]. Исследования поведения тонкопленочных структур связано с применением полученных образцов в качестве магнитных носителей информации, данные материалы имеют огромное значение в практическом применении. Магнитный порядок в ультратонких пленках довольно сложен из-за конкуренции между слоями и дипольными взаимодействиями на различных масштабах длины, так же необходимо учитывать, что форма и магнитокристаллическая анизотропия образца оказывают сильное влияние на исследуемые наноструктуры [2]. Ани-

зотропные свойства образца чувствительны к условиям роста пленок.

В настоящей статье представлено проведенное исследование неравновесного поведения мультислойной пленки кобальта с подложкой немагнитного металла Co/Cu(100)/Co, подобные мультислойные структуры используются в активных элементах устройств спинтроники. Проведено численное моделирование неравновесного поведения мультислойной структуры Co/Cu/Co [8] рассматривается возникновение эффектов старения автокорреляционной функции $C(t,tw)$ с толщинами пленок $N = 7$, $N = 9$ монослоев и размере системы $L = 64$ и получение скейлинговой зависимости автокорреляционной функции. Были проведены расчеты корреляционной функции и шахматной намагниченности. На рисунке 1 показаны результаты расчетов шахматной намагниченности, которые позволяют нам выявить эффекты старения, то есть наблюдается замедление корреляционных и релаксационных процессов с увеличением ‘возраста’ системы, как времени между подготовкой и началом измерения характеристик образца.

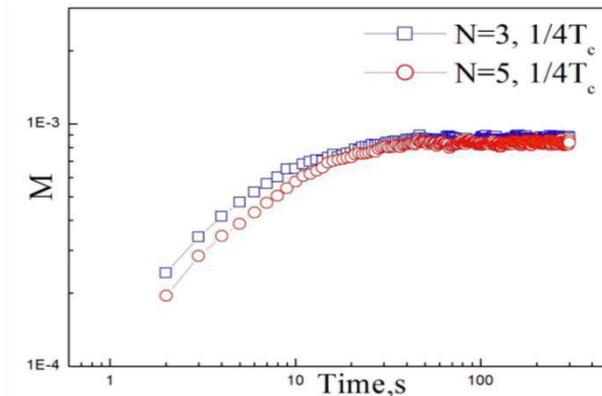


Рисунок 1 – Критическая эволюция шахматной намагниченности из высокотемпературного начального состояния

Выявленные эффекты старения для рассматриваемой мультислойной структуры Co/Cu/Co получены в хорошем согласии с экспериментальными результатами описанными в ра-

боте [7]. Рассмотрено, что старение при неравноценном критическом поведении мультислойной структуры происходит в широком низкотемпературном диапазоне $T < T_c$, а не только в T_c . Следовательно, необходим учет существующих особенностей неравновесного поведения мультислойных структур в применении к устройствам спинтроники основанных на явлениях гигантского магнитного сопротивления. В данной работе описаны некоторые из ключевых понятий в тонкопленочном магнетизме и моделировании свойств мультислойных структур.

Магнитные свойства пленок на основе мультислойной структуры Co/Cu/Co описываются анизотропной моделью Гейзенберга и задаются в виде гамильтониана [1]:

$$H = \sum J_{ij} [S_i S_j - \Delta(N) S_i^z S_j^z] - h \sum S_i^z \quad (1)$$

В формуле (1) количество анизотропии для ферромагнитных пленок кобальта в зависимости от толщины монослоя обозначается, как $\Delta(N)$, трехмерный единичный вектор в узле i , в виде $S_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ и h – внешнее магнитное поле. Значение обменного интеграла J_1 , который определяет взаимодействие соседних спинов внутри ферромагнитной пленки, указывалось $J_1 = 1$, для взаимодействия между пленками $J_2 = -0.3J_1$. Отрицательность J_2 , показывает, что толщина немагнитной прослойки подбирается так, что дальнедействующее межслоевое обменное РККИ взаимодействие между спинами ферромагнитных слоев носило эффективный антиферромагнитный характер.

Двухвременная зависимость автокорреляционной функции представлена в виде:

$$C(t, t_w) = h \left\langle \frac{1}{NL^2} \sum_{i=1}^{NL^2} S_i(t) S_i(t_w) \right\rangle - M(t) M(t_w).$$

Значения для параметра анизотропии $\Delta(N)$ для рассматриваемых пленок кобальта взяты из исследования [6] и приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Значения критической температуры и параметра анизотропии для исследуемых толщин пленок [6].

N	T_c	$1/2T_c$	$1/4T_c$	$\Delta(N)$
7	3.04	1.52	0.76	0.34
9	3.1	1.55	0.77	0.25

На рисунке 2 показана зависимость автокорреляционной функции от времени наблюдения при временах ожидания $t_w = 30, 50, 100$ на рисунке демонстрируется наличие в системе эффектов старения, т. е. зависимости временного спада корреляционных эффектов от времени ожидания.

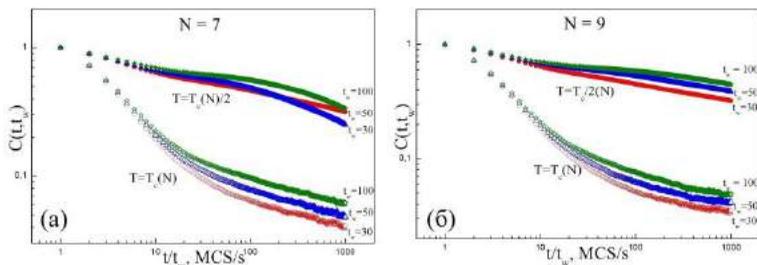


Рисунок 2 – Зависимость автокорреляционной функции при $N=7$ (а) и $N=9$ (б) от времени наблюдения при временах ожидания $t_w = 30, 50, 100$ при $T = 1/2T_c$, и так же при $T = 1/4T_c$

Приведенные результаты показывают в системе наличие эффектов старения, не только при критической температуре, но и в широком диапазоне исследуемых температур.

Это исследование было поддержано грантами 17-02-00279, 18-42-55003 Российского фонда фундаментальных исследований и Грант MD-6868.2018.2 Совета Президента Российской Федерации. Расчеты проводились с использованием ресурсов, предоставленных Shared Facility Center Data Cente ДВО РАН (Хабаровск), Суперкомпьютерный центр МГУ им. М.В. Ломоносова и Объединенный суперкомпьютер Центр Российской Академии Наук.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Прудников В.В., Прудников П.В., Пуртов А.Н., Мамонова М.В.* Эффекты старения в неравновесном поведении мультислойных магнитных структур // Письма в ЖЭТФ. 2016. Т. 104, вып. 11. С. 797–805.
- [2] *Туров Е.А.* Физические свойства магнитоупорядоченных кристаллов. М: Академия Наук СССР, 1963. 224 с.
- [3] *Chappert C., Fert A., Van Dau F.* The emergence of spin electronics in data storage // Nature Materials. 2007. V. 6. P. 813–823.
- [4] *Huang F., et al.* Magnetism in the few-monolayers limit: A surface magneto-optic Kerr-effect study of the magnetic behavior of ultrathin films of Co, Ni, and Co-Ni alloys on Cu(100) and Cu(111) // Phys. Rev. B. 1994. V.49 (6). P. 3962–3971.
- [5] *Li Yi, Baberschke K.* Dimensional crossover in ultrathin Ni(111) films on W(110) // Phys. Rev. Lett. 1992. V. 68 (8). P. 1208–1211.
- [6] *Prudnikov P.V., Prudnikov V.V., Menshikova M.A., Piskunova N.I.* Dimensionality crossover in critical behaviour of ultrathin ferromagnetic films // JMMM. 2015. V. 387. P. 77–82.
- [7] *Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Mamonova M.V., Firstova M.M., Samoshilova A.A.* Manifestation of aging in giant magnetoresistance of the Co/Cu/Co nanostructure // J. Phys. Communication. 2019. V. 3. 015002.
- [8] *Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Purtov A.N., Mamonova M.V.* Aging effects in the nonequilibrium behavior of multilayer magnetic superstructures // JETP Letters. 2016. V. 104. P. 776–783.
- [9] *Vaz C.A. F., Bland J.A.C., Lauhoff G.* Magnetism in ultrathin film structures // Rep. Prog. Phys. 2008. V. 71 (5). 056501.

Болдырева Марина Максимовна,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2 курс аспирантуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812)647787,
ffi-95@mail.ru.

Расчет флуктуационно-диссипативного отношения для неравновесного критического поведения трехмерной изотропной и анизотропной моделей Гейзенберга

А.С. Лях, В.В. Прудников

Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. В.В. Прудников

Аннотация статьи. С применением алгоритма глауберовской динамики осуществлено моделирование неравновесного критического поведения трехмерных изотропной модели Гейзенберга и анизотропной модели Гейзенберга с анизотропией типа «легкая ось». Для этих моделей проведен расчет динамической восприимчивости и флуктуационно-диссипативного отношения при эволюции системы из высокотемпературного начального состояния.

Ключевые слова: неравновесное критическое поведение, алгоритм глауберовской динамики, трехмерная модель Гейзенберга, динамическая восприимчивость, флуктуационно-диссипативное отношение.

При медленной эволюции систем из неравновесного начального состояния предсказываются и наблюдаются свойства старения, характеризуемые нарушениями флуктуационно-диссипативной теоремы (ФДТ) [4, 5], которая связывает функцию отклика системы на внешнее возмущение $R(t, t_w)$ и корреляционную функцию $C(t, t_w)$:

$$R(t, t_w) = \frac{X(t, t_w)}{kT} \frac{\partial C(t, t_w)}{\partial t_w},$$

где $X(t, t_w)$ – флуктуационно-диссипативное отношение (ФДО). ФДТ утверждает, что в равновесном состоянии $X(t > t_w \gg t_{rel}) = 1$.

Предельное значение флуктуационно-диссипативного отношения

$$X^\infty = \lim_{t_w \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} X(t, t_w),$$

может быть использовано в качестве новой универсальной характеристики для неравновесного критического поведения различных систем.

Гамильтониан ферромагнитной модели Гейзенберга задается выражением

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

где $J > 0$ характеризует короткодействующее обменное взаимодействие между спинами \vec{S}_i , зафиксированными в узлах простой кубической решетки, Δ – параметр анизотропии. Спин $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ задается как классический единичный вектор. Моделировалась система с размерами $L \times L \times L$ и наложенными периодическими условиями. Для данного исследования параметр анизотропии принимал значение $\Delta = 0.63$ [3] для анизотропной модели и $\Delta = 0$ для изотропной моделей. Для данного исследования использовалось значение критической температуры $T_c = 1.44292(8)$ для изотропной модели [6] и $T_c = 1.64497(45)$ для анизотропной модели [1].

Для получения аналитических выражений для обобщённой восприимчивости модели Гейзенберга была применена методика, реализованная в работе [2] для модели Изинга и позволяющая при моделировании динамики системы с помощью алгоритма глауберовской динамики получить функцию отклика без введения магнитного поля.

Выражения для обобщённой восприимчивости трёхмерной модели Гейзенберга могут быть представлены в виде:

$$\chi(t, t_w) = \frac{\beta}{N} \sum_{i=1}^N \langle \dot{S}_i(t) \cdot \Delta \dot{S}_i(t_w) \rangle, \quad (1)$$

$$\Delta \dot{S}_i(t_w) = \sum_{s=0}^{t_w} \dot{S}_i(s), \quad \dot{S}_i(t) = S_i^{\parallel}(t) \left[1 - th \left(\frac{\beta}{2} \Delta H_i(t) \right) \right].$$

Было проведено компьютерное моделирование неравновесного критического поведения систем с линейным размером $L = 100$. Вычислялась двухвременная зависимость автокорреляционной функции:

$$C(t, t_w) = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{S}_i(t) \vec{S}_i(t_w) \right\rangle - \vec{M}(t) \vec{M}(t_w),$$

где угловые скобки обозначают статистическое усреднение по реализациям начального состояния. В анизотропной модели

Гейзенберга при расчете автокорреляционной функции учитывались только z-составляющие спинов [1].

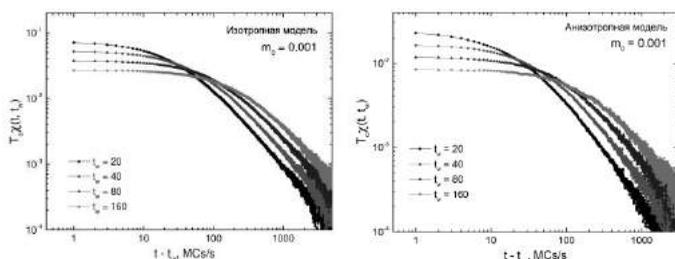


Рисунок 1 – Зависимость динамической восприимчивости $\chi(t, t_w)$ от времени наблюдения $t - t_w$ для различных времен ожидания t_w для изотропной (слева) и анизотропной (справа) моделей Гейзенберга

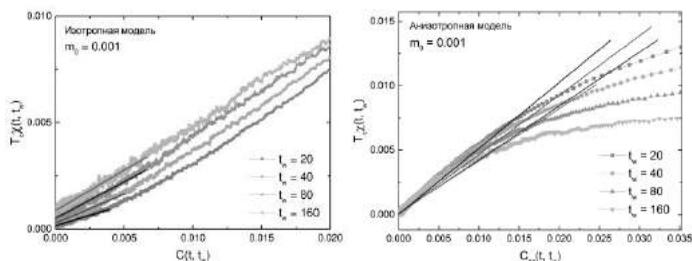


Рисунок 2 – Параметрическая зависимость динамической восприимчивости от автокорреляционной функции для изотропной (слева) и анизотропной (справа) моделей Гейзенберга.

На графике показаны участки, на которых определялись $X(t_w)$ при $C \rightarrow 0$

С применением соотношений (1) вычислялась динамическая восприимчивость $\chi(t, t_w)$ системы. Графики на рисунке 1 наглядно демонстрируют проявление эффектов старения в зависимости $\chi(t, t_w)$ от «возраста» системы t_w (с увеличением времени ожидания динамическая восприимчивость спадает медленнее).

Для расчета флуктуационно-диссипативного отношения была построена параметрическая зависимость $T_c \chi(t, t_w)$ от авто-

корреляционной функции $C(t, t_w)$ (рисунок 2). В долговременном режиме $(t-t_w) \rightarrow \infty$ восприимчивость может быть записана в виде

$$T_c \chi(t, t_w) = \int_0^c X(q) dq.$$

Графики параметрической зависимости динамической восприимчивости от автокорреляционной функции на рисунке 2 позволяют в соответствии с соотношением

$$X(t_w) = \lim_{c \rightarrow 0} \frac{T_c \partial \chi(t, t_w)}{\partial C(t, t_w)}.$$

по асимптотической кривизне представленных кривых определить значения ФДО $X(t_w)$ для каждого из времен ожидания t_w . Применяя к полученным значениям ФДО $X(t_w)$ процедуру линейной аппроксимации, а затем экстраполяции $X(t_w \rightarrow \infty)$ было определено предельное значение ФДО $X^\infty = 0.383(6)$ для изотропной модели и $X^\infty = 0.392(7)$ для анизотропной модели Гейзенберга.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Прудников В.В., Прудников П.В., Лях А.С. Неравновесное критическое поведение трехмерной анизотропной модели Гейзенберга // Вестник Омского университета. 2019. Т. 24, № 3. С. 39–48.
- [2] Прудников В.В., Прудников П.В., Поспелов Е.А. Расчет флуктуационно-диссипативного отношения для неравновесного критического поведения неупорядоченных систем // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 98, вып. 10. С. 693–699.
- [3] Прудников П.В., Прудников В.В., Медведева М.А. Размерные эффекты в ультратонких магнитных пленках // Письма в ЖЭТФ. 2014. Т. 100, вып. 7. С. 501–505.
- [4] Berthier L., Holdsworth P.C.W., Sellitto M. Non-equilibrium critical dynamics of the two-dimensional XY model // J. Phys. A. 2001. V. 34. P. 1805–1824.
- [5] Calabrese P., Gambassi A. Aging and fluctuation-dissipation ratio for the dilute Ising model // Phys. Rev. B. 2002. V. 66 (21). 212407.

[6] *Chen K., Ferrenberg A.M., Landau D.P.* Static critical behavior of three-dimensional classical Heisenberg models: A high-resolution Monte Carlo study// *Phys. Rev. B.* 1993. V. 48 (5). P. 3249–3256.

Лях Анастасия Сергеевна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
1 курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812)647787,
lyakhnastya@gmail.com

Исследование процессов перемешивания при адсорбции пленки Fe на пластине Ag в рамках первопринципного подхода

А.С. Макаричева

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент М.В.Мамонова

Аннотация. В данной работе проведено исследование заместительной адсорбции Fe на Ag, были рассчитаны полная энергия, магнитные моменты атомов, выявлена энергетическая выгодность перемешивания в зависимости от доли адатомов в пленке.

Ключевые слова: VASP, магнитные ультратонкие пленки, магнитный момент, заместительная адсорбция

Свойства ультратонких магнитных пленок являются объектом интенсивных исследований. Это обусловлено применением ферромагнитных пленок в микроэлектронике и вычислительной технике в качестве магнитных носителей для записи и хранения информации в запоминающих устройствах [1].

Магнитные пленки обладают рядом уникальных особенностей, способствующих повышению плотности записи информации и быстродействия запоминающих устройств. Изучение физических свойств ферромагнитных пленок носит фундаментальный характер, обуславливая как развитие физики магнитных явлений, так и физики поверхностных явлений.

Целью данной работы является применение первопринципного подхода к расчету сильного и слабого перемешивания для системы Fe/Ag/Fe. Расчеты производились с помощью программного комплекса VASP (Vienna Ab-Initio Package) [4].

Заместительная адсорбция характеризуется тем, что адсорбированные атомы металла могут выталкивать приповерхностные атомы субстрата в пленку и занимать их место. При температурах близких к комнатным происходит только заместительная адсорбция. В первом приповерхностном слое подложки и в пленке образуется смесь атомов субстрата и адсорбата, которая по своим свойствам напоминает бинарный раствор двух металлов. При этом смешивании наблюдается изменение магнит-

ных и энергетических характеристик. Для исследования зависимости магнитных и энергетических характеристик используют параметр p – доля адатомов в пленке [1].

Была посчитана система из 28 атомов (20 атомов серебра и 8 атомов железа). Эта система интересна тем, что используется в устройствах с гигантским магнитосопротивлением.

Минимальная полная энергия $E=-109,9839$ эВ образуется при параметре покрытия $p=0,25$, а максимальная полная энергия $E=-105,2987$ эВ при $p=1$. Отсюда можно сделать следующий вывод, что образовываться будет система с параметром покрытия $p=0,25$, а пленка без перемешивания ($p=1$) не будет образовываться, так как это менее выгодная энергетическая система. Можно заметить, что полная энергия для $p=0,5$ и $p=0$ практически равны и отличаются от минимальное полной энергии на не большую величину, эти данные согласуются с данными экспериментов [2].

Таблица 1 – Доля адатомов в пленке p , полная энергия E , магнитный момент все системы μ , магнитные моменты атомов железа $\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4$ системы Fe/Ag

p	E , эВ	μ , $\mu\text{Б}$	μ_1 , $\mu\text{Б}$	μ_2 , $\mu\text{Б}$	μ_3 , $\mu\text{Б}$	μ_4 , $\mu\text{Б}$
$p=1$	-105,2987	3,045	3,045	3,045	3,045	3,045
$p=0,75$	-108,2909	2,854	2,675	2,896	2,996	2,849
$p=0,5$	-109,6457	2,808	2,736	2,880	2,736	2,880
$p=0,25$	-109,9839	2,825	2,756	2,871	2,835	2,836
$p=0$	-109,6003	2,932	2,932	2,932	2,932	2,932

Наибольший магнитный момент $\mu=3,045$ $\mu\text{Б}$, наблюдается при параметре покрытия $p=1$, а наименьший $\mu=2,808$ $\mu\text{Б}$, при $p=0,5$. Для более энергетически выгодной системы $p=0,25$ магнитный момент $\mu=2,825$ $\mu\text{Б}$. Выводы, полученные в первопринципных расчетах подтверждаются вариационном методом [1]. Перемешивание влияет на величину магнитного сопротивления [3]. Для $p=0,25$, $p=0,5$ и $p=0,75$ существуют различные случаи замещения атомов. Результаты расчетов для различных вариантов положения замещающих атомов, для доли адатомов $p=0,25$ и $p=0,75$ показали, что смена позиций в ячейке замещающих атомов не влияет на энергетические и магнитные характеристики.

Для $p=0,5$ есть два случая замещения: послойное и в шахматном порядке (рисунок 1). Для этих случаев происходит изменение как магнитного момента каждого атома, так и полной энергии системы (таблица 2).

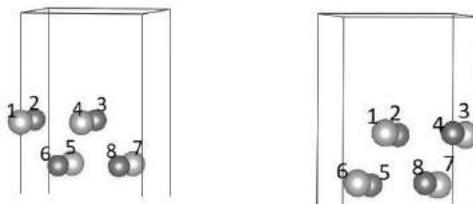


Рисунок 1 – Изменение положения вытесняемых атомов при $p=0,5$, слева послойная, справа шахматная

Таблица 2 – Магнитные моменты при послойной μ_1 и шахматной μ_2 ориентации атомов при $p=0,5$

1 (слева) Послойная		2 (справа) шахматная	
Номер атома	$\mu_1, \mu\text{Б}$	Номер атома	$\mu_2, \mu\text{Б}$
1	-0,001	1	-0,004
2	2,880	2	2,960
3	2,880	3	-0,004
4	-0,001	4	2,960
5	-0,002	5	2,814
6	2,736	6	0,004
7	-0,002	7	-0,004
8	2,736	8	2,814

Сопоставив значения магнитного момента атомов, видим, что эти значения отличаются. Большим магнитным моментом $\mu = 2,948 \mu\text{Б}$ обладают атомы при шахматном расположении.

Значения полной энергии для этих систем тоже разные $E = -109,64566036 \text{ эВ}$ (послойная), $E = -108,07455247 \text{ эВ}$ (шахматная). Из этих значений можно сделать вывод, что послойное расположение энергетически более выгодное, но при этом в этом же расположении наименьшие магнитные моменты.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Прудников В.В., Прудников П.В., Мамонова М.В.* Квантово-статистическая теория твердых тел. Омск: Изд-во ОмГУ, 2014. 492 с.
- [2] *Hahlin A., Andersson C., Hunter J. D., Sanyal B., Karis O., Arvanitis D.* Structure and magnetism of ultrathin epitaxial Fe on Ag(100) // *Phys. Rev. B.* 2006. V. 73 (13). P. 134423.
- [3] *Lu S., Hu Q.-M., Punkkinen M.P.J., Johansson B., Vitos L.* First-principles study of fcc-Ag/bcc Fe interfaces // *Phys. Rev. B.* 2013. V. 87 (22), P. 224104.
- [4] *Marsman G., Kresse M.* VASP the GUIDE. Wien: Universitat Wien, 2000. 208 p.

Макаричева Алена Сергеевна.

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2 курс магистратуры Физический факультет.
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787.

Влияние начальных состояний на эффекты старения в магнитосопротивлении мультислойных структур

А.А. Самошилова, В.В. Прудников

Научный руководитель д.ф.-м.н., проф. В.В. Прудников

Аннотация. Для трехпленочных магнитных структур Co/Cu(100)/Co и Pt/Co/Cu(100)/Co/Pt с различными типами анизотропии проведено исследование методами Монте-Карло влияния их неравновесной медленной динамики с различными начальными состояниями на временную зависимость магнитосопротивления. Выявлено существенное влияние начальных состояний и способов их реализации на величину магнитосопротивления.

В мультислойных структурах с эффектом гигантского магнитосопротивления за счет сильных спин-спиновых корреляций в антиферромагнитной системе из ультратонких магнитных и немагнитных пленок возникает медленная динамика с рядом специфических особенностей. Возникающие в магнитной релаксации таких структур эффекты старения, в отличие от объемных образцов, наблюдаются не только вблизи критической температуры, но и во всей низкотемпературной области [1].

В системах с медленной динамикой неравновесные начальные состояния оказывают заметное влияние на временные зависимости характеристик. Выделяют низкотемпературное полностью упорядоченное ($m_0=1$) и высокотемпературное неупорядоченное ($m_0\approx 0$) начальные состояния. Магнитные свойства мультислойных структур наиболее правильно описываются анизотропной моделью Гейзенберга, в которой спин имеет три степени свободы. В результате, существует несколько вариантов задания высокотемпературного начального состояния в зависимости от типа магнитной анизотропии. В работе [2] показано, что тип магнитной анизотропии оказывает заметное влияние на магнитосопротивление структур.

В данной работе ставится задача исследовать методами Монте-Карло влияние начального состояния на динамику структур Co/Cu(100)/Co и Pt/Co/Cu(100)/Co/Ptс различным типом магнитной анизотропии и эффекты старения в магнитосопротивлении.

Гамильтониан модели в случае вектора намагниченности, лежащего в плоскости пленки, задается для структуры Co/Cu(100)/Co в виде:

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

а в случае структуры Pt/Co/Cu(100)/Co/Pt с вектором намагниченности, ориентированном перпендикулярно плоскости пленки, характеризуется выражением:

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

Здесь $S_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ трехмерный единичный вектор спина, фиксированный 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 (МС) [2].

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

$$\delta = (R_{AP} - R_P) / R_P,$$

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.

Для моделирования поведения структуры был применен алгоритм Метрополиса. Рассматривались различные времена ожидания: $t_w = 50, 100, 200, 400, 1000$ MCS/s. Время наблюдения – $10\,000$ MCS/s. Геометрия структур приведена в работах [1, 2].

На первом этапе исследований проводился расчет двухвременной зависимости магнитосопротивления δ для структур Pt/Co/Cu(100)/Co/Pt и Co/Cu(100)/Co с толщинами пленок $CoN = 3 - 9$ МС из низкотемпературного начального состояния. Так как интересующая нас область лежит ниже критической температуры, были выбраны следующие значения температур:

$T_c/8, T_c/4, 3T_c/8$; где T_c – критическая температура, зависящая от толщины пленки кобальта и типа магнитной анизотропии. На следующем этапе исследование неравновесной динамики проводилось при эволюции из высокотемпературного начального состояния. Сравнение поведения магнитосопротивления при эволюции из низкотемпературного (а) и высокотемпературного (б) представлены на рисунке 1.

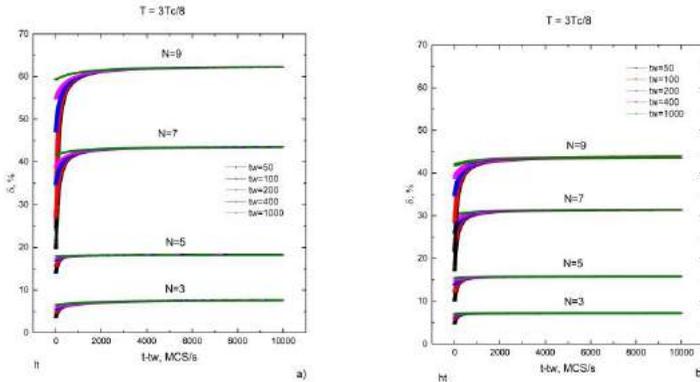


Рисунок 1 – Временная зависимость магнитосопротивления в структуре Pt/Co/Cu/Co/Pt с толщинами пленок Co $N=3 - 9$ MC при температурах $T=3T_c(N)/8$ и эволюции из (а) низкотемпературного и (б) высокотемпературного начальных состояний

Выявлены эффекты старения в магнитосопротивлении и показано, что при эволюции из высокотемпературного начального состояния значения магнитосопротивления на плато существенно ниже, чем при эволюции из низкотемпературного начального состояния. Асимптотические значения магнитосопротивления $\delta^\infty(N,T)$ на плато зависят от начального состояния, толщины пленок кобальта, температуры и типа магнитной анизотропии в структурах.

Для структур Co/Cu/Co с анизотропией типа легкая плоскость начальное состояние задавалось в трех вариантах (x,y,z - проекция спина на соответствующие оси): $ht1$: $x = \pm 1, y=z=0$; $ht2$: $x \in [-1,1], y = \sqrt{(1-x^2)}, z=0$; $ht3$: $x,y \in [-1,1], z=\sqrt{(1-x^2-y^2)}$.

Для структур Pt/Co/Cu/Co/Pt с анизотропией типа легкая ось начальное состояние задавалось в двух вариантах: $ht1$: $z = \pm 1, x=y=0$; $ht2$: $x,y \in [-1,1], z=\sqrt{(1-x^2-y^2)}$. На рисунке 1 реализован $ht1$.

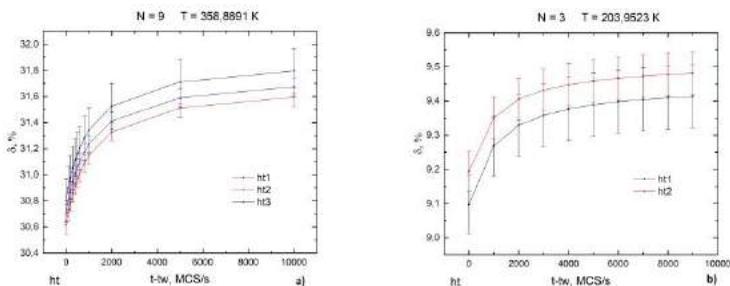


Рисунок 2 – Временная зависимость магнитосопротивления структуры (а) Co/Cu/Co с $N=9$ MC, $T=3T_c(N)/8$ и (б) Pt/Co/Cu/Co/Pt с $N=3$ MC и $T=T_c(N)/4$ для различных вариантов реализации начального высокотемпературного состояния, $t_w=1000$

На рисунке 2 видно, что для средних значений магнитосопротивления $\delta^\infty(N,T)$ на плато возникают различия в зависимости от варианта реализации начального состояния. Однако большая величина погрешностей при усреднении по 20 прогонкам приводит к эффектам перекрытия значений $\delta^\infty(N,T)$. Возникает необходимость увеличения статистики реализуемых вычислений.

Таким образом, в данной работе выявлено заметное влияние начального состояния системы и реализации начального состояния на величину магнитосопротивления.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Прудников В.В., Прудников П.В., Мамонова М.В. Особенности неравновесного критического поведения модельных статистических систем и методы их описания // УФН. 2017. Т. 187, № 8. С. 817–855.
- [2] Prudnikov P.V., Prudnikov V.V., Mamonova M.A., Piskunova N.I. Influence of anisotropy on magnetoresistance in magnetic multilayer structures // J. Magn. Magn. Matter. 2019. V. 482. P. 201–205.

Анна Андреевна Самошилова,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 630445,
samoshlovaaa@stud.omsu.ru

Первопринципные расчеты энергетических и магнитных свойств системы Ni на W

И.Е. Шевченко

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент М.В. Мамонова

Аннотация. В данной работе, с использованием программного комплекса VASP применяемого для выполнения первопринципных расчетов, было исследовано влияние различных толщин магнитной пленки Ni на энергетические и магнитные свойства системы Ni на W. Свойства данной системы исследовались при ориентации поверхностной грани (110) и при различных положениях адатома для ферромагнитного и антиферромагнитного типа магнитного упорядочения.

Ключевые слова: VASP, ультратонкие магнитные пленки, ферромагнитный и антиферромагнитный тип магнитного упорядочения.

Физика ультратонких магнитных пленок является направлением интенсивных научных исследований[4]. Значительные достижения в технологии получения различных материалов и покрытий позволяют в настоящее время получать высокого качества ультратонкие пленки и мультислойные покрытия на основе магнитных переходных металлов, таких как Ni, Co, Fe и их сплавов[2]. Исследование природы магнетизма в таких структурах имеет большой фундаментальный интерес из-за возникающей в них размерной зависимости для магнитных характеристик. Поведение мультислойной системы будет зависеть от кристаллической решетки ее компонентов ГЦК – Ni и ОЦК – W.

В настоящее время для описания структурных, энергетических и магнитных свойств монослойных и многослойных поверхностных систем достаточно широко используется подход, основанный на применении метода функционала спиновой плотности (МФСП), лежащего в основе первопринципных расчетов электронной и кристаллической структур магнитных материалов [1]. Основная идея МФСП состоит в том, что при описании электронной подсистемы, многоэлектронная волновая функция, зависящая от большого числа переменных в конфигу-

рациональном пространстве, заменяется электронной плотностью, определяемой в обычном трехмерном пространстве.

В данной работе с применением программного комплекса VASP [3] методом проекционно-присоединенных волн (PAW) и псевдопотенциалом в приближении GGA PBE проводились расчеты значений полной энергии и намагниченности для структуры «пленка на поверхности» системы Ni на W. Все расчеты проводились при ориентации поверхностной грани (110) в зависимости от положений атома адсорбата таких, как положение адсорбированного атома сверху над пластиной (ontop), в междоузлье (hollow), положение на прямой соединяющей два атома подложки (bridge) для двух и трех монослоев из атомов Ni симметрично расположенных относительно пяти атомов W по одному в каждом слое. Целью данной работы является численное исследование магнитных и энергетических свойств на основе полученных значений магнитных моментов и значений полной энергии для системы Ni на W в зависимости от выбранных конфигураций (ориентации поверхностной грани и положения адатома), которое включает в себя:

- 1) Применение МФСП с помощью программного комплекса VASP к исследованию системы Ni на W.

- 2) Анализ полученных значений магнитных моментов и полной энергии системы в зависимости от положений адатома и типа магнитного упорядочения.

- 3) Выяснение при каких толщинах данной системы возникает намагниченность.

- 4) Сравнение полученных результатов для различных толщин, положений адатома и типа магнитного упорядочения системы Ni на W.

В таблице 1 представлены результаты расчета значений полной энергии для двухслойной $E_{\text{FM}}^{(2)}$ эВ, $E_{\text{AFM}}^{(2)}$ эВ и трехслойной $E_{\text{FM}}^{(3)}$ эВ, $E_{\text{AFM}}^{(3)}$ эВ структуры системы Ni на W для случаев ферромагнитного – FM и антиферромагнитного – AMF типа магнитного упорядочения полученные при различных конфигурациях системы Ni на W.

Таблица 1 – Результаты расчетов значений полной энергии для двухслойной и трехслойной структуры системы Ni на W полученные при различных конфигурациях системы Ni на W.

Грань	Initial position	$E^{(2)}_{FM}$, эВ	$E^{(2)}_{AFM}$, эВ	$E^{(3)}_{FM}$, эВ	$E^{(3)}_{AFM}$, эВ
W ₁₁₀	hollow	-84,138	-84,167	-94,528	-94,513
	ontop	-84,149	-84,155	-94,255	-94,289
	bridge	-84,134	-84,123	-94,531	-94,532

В таблице 2 представлены результаты расчета значений намагниченности для двухслойной $\mu^{(2)}_{FM}$ μ_B , $\mu^{(2)}_{AFM}$ μ_B и трехслойной $\mu^{(3)}_{FM}$ μ_B , $\mu^{(3)}_{AFM}$ μ_B структуры системы Ni на W для случаев ферромагнитного - FM и антиферромагнитного - AFM типа магнитного упорядочения, полученные при различных конфигурациях системы Ni на W.

Таблица 2 – Результаты расчетов значений полной энергии для двухслойной и трехслойной структуры системы Ni на W полученные при различных конфигурациях системы Ni на W.

Грань	Initial position	$\mu^{(2)}_{FM}$, μ_B	$\mu^{(2)}_{AFM}$, μ_B	$\mu^{(3)}_{FM}$, μ_B	$\mu^{(3)}_{AFM}$, μ_B
W ₁₁₀	hollow	0,673	0,0	2,962	0,0
	ontop	0,715	-0,0	-0,001	-0,0
	bridge	-0,59	-0,0	2,956	-0,0

По результатам расчетов, приведенным в таблицах 1 и 2, можно сделать следующие выводы. Численные исследования намагниченности показали, что она возникает уже в случае двухслойной пленки Ni.

Результаты расчетов полной энергии показали, что наиболее энергетически выгодным для данной системы будет положение с адатомом, расположенным на прямой соединяющей два атома подложки bridge в случае трехслойной пленки и значением полной энергии $E^{(3)}_{AFM} = -94,532$ эВ.

Результаты исследования намагниченности показали, что наибольшее свое значение $\mu^{(3)}_{FM} = 2,962$ μ_B она достигает в случае трехслойной пленки с положением адатома hollow.

Расчеты показали, что антиферромагнитный тип магнитного упорядочения энергетически более выгоден, так как имеет минимум энергии, как в случае двухслойной системы, так и в случае трехслойной, со значениями $E_{\text{AFM}}^{(2)} = -84,167$ эВ и $E_{\text{AFM}}^{(3)} = -94,532$ эВ соответственно.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Прудников В.В., Прудников П.В., Мамонова М.В. Теоретические методы расчета структурных, энергетических и магнитных характеристик систем с межфазным взаимодействием. Омск: Изд-во ОмГУ, 2017. 190 с.
- [2] Bihlmayer G. et al. Ultra-Thin Magnetic Films and Magnetic Nanostructures on Surface // NIC Symposium. 2006 / ed. by G. Munster, D. Wolf, W. Kremer. Julich von Neumann Institute for Computing, 2006. NICSeries. V. 32. P. 151–158.
- [3] Marsman G., Kresse M. VASP the GUIDE. Wien: Universitat Wien, 2000. 208 p.
- [4] Vaz C.A. F., Bland J.A.C., Lauhoff G. Magnetism in ultrathin film structures // Rep. Prog. Phys. 2008. V. 71 (5). 056501.

Шевченко Иван Евгеньевич,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812)
647787,79081194923@mail.ru.

Первопринципные расчёты магнитных характеристик системы Pt/Co/Cu/Co/Pt

Д.С. Калинин

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент М.В.Мамонова

Аннотация. В данной работе, в рамках первопринципных расчётов с использованием программного комплекса VASP рассчитаны значения полной энергии и магнитных моментов системы Pt/Co/Cu/Co/Pt.

Ключевые слова: VASP, полная энергия, магнитный момент, магнитные мультислойные структуры.

При исследовании тонких магнитных пленок одной из важных задач является выявить и исследовать возможность существования магнитной анизотропии в квазидвумерных системах. Мультислойные структуры [3], в которых реализуется явление гигантского магнитосопротивления, состоят из ферромагнитных слоев и немагнитной прослойки между ними. При этом материал прослойки или нанесенного поверх фиксирующего слоя существенно сказывается на типе анизотропии.

В данной работе с помощью программного комплекса VASP [4], метода проекционно-присоединенных волн (PAW) и псевдопотенциалом в приближении GGA PBE [5] были проведены первопринципные расчёты мультислойной структуры Pt/Co/Cu/Co/Pt.

Была исследована система, которая состоит из пластины меди и двух ферромагнитных пленок кобальта и платины, которые адсорбированы с двух сторон. Моделирование системы проводилось при помощи периодической суперячейки, которая состоит из шести атомных слоев платины, шести слоев кобальта и трех слоев меди. Для расчета электронной структуры применялось интегрирование в первой зоне Бриллюэна при помощи k-сетки. Размер k-сетки равен $12 \times 12 \times 1$, энергия обрезания плоской волны $E_{cut} = 500$, толщина вакуумного слоя равна 5 \AA .

На рисунке 1 показаны направления магнитных моментов для трехслойной пленки кобальта с двух сторон подложки меди для разных спиновых конфигураций.

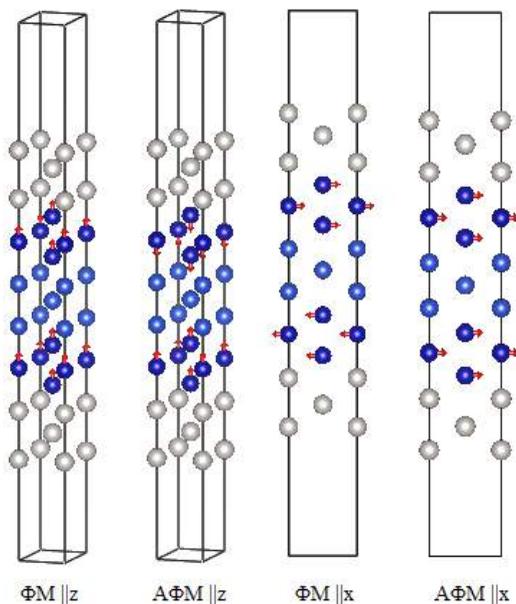


Рисунок 1 – Направления спинов в суперячейке для различных спиновых конфигураций

Для системы Pt/Co/Cu/Co/Pt рассматривались следующие случаи спиновых конфигураций атомов пленок: ферромагнитные (все спины имеют одинаковое направление), антиферромагнитные (спины направлены в противоположные стороны от подложки). Также были рассмотрены ориентации, которые направлены параллельно (вдоль оси x) и перпендикулярно (вдоль оси z).

Рассчитанные значения приведенной энергии системы Pt/Co/Cu представлены в таблице 1.

Наиболее энергетически выгодным является антиферромагнитное состояние с гранью: 100 с направленными магнитными моментами вдоль оси x ФМ конфигурации и вдоль оси y АФМ конфигурации; 110 вдоль оси z в ФМ и АФМ конфигурациях. Рассчитанные значения полной энергии для всех спиновых конфигураций слабо отличаются друг от друга.

Рассчитанные значения магнитных моментов приповерхностного от подложки атомов Co представлены в таблице 2.

Таблица 1 – Результаты расчетов приведенной полной энергии E для различных спиновых конфигураций и ориентаций поверхностных граней

Грань	Спиновая конфигурация	E, эВ/ат				
		Данная работа	Co/Pt/Co[1]	Co/Cu/Co[2]		
100	ФМ	x	-5,9901	-6,3259	-5,6516	
		y	-5,9897			
		z	-5,9900	-6,4004	-5,6612	
110		x	-5,8785	-6,3056		
		y	-5,8784	-6,3047		
		z	-5,8786			
111		x	..	-6,3653		
		y	..			
		z	-5,9661			
100	АФМ	x	-5,9320	-6,3257		-5,6595
		y	-5,9890			
		z	-5,9319			-5,6594
110		x	-5,8804	-6,2648		
		y	-5,8803	-6,3112		
		z	-5,8805	-6,1836		
111		x	..	-6,2917		
		y	..	-6,3654		
		z	-5,9665			

Таблица 2 – Результаты расчетов и магнитных моментов μ кобальта для различных спиновых конфигураций и ориентаций поверхностных граней

Грань	Спиновая конфигурация	μ, μ_B				
		Данная работа	Co/Pt/Co[1]	Co/Cu/Co[2]		
100	ФМ	x	1,843	2,0350	1,868	
		z	1,833	2,0120	1,857	
110		x	1,882	2,0510		
		z	1,893	2,0720		
111		x	..	2,0000		
		z	1,865	2,0080		
100	АФМ	x	1,821	2,0190		1,864
		z	1,824	2,0120		1,864
110		x	1,896	0,0120		
		z	1,893	0,0010		
111		x	..	0,0180		
		z	1,854	1,9980		

Как видно из таблицы 1 значения магнитных моментов, отличаются от системы Co/Pt/Co, это связано с тем, что в системе Co/Pt/Co пленка Co является монослойной, а у систем Co/Cu/Co и Pt/Co/Cu/Co/Pt пленка Co состоит из трех атомных слоев. От системы Co/Cu/Co рассчитанные значения магнитных моментов отличаются слабо.

В данной работе были проведены первопринципные расчеты магнитных характеристик пленки платины и кобальта на подложке из меди. Осуществлены расчеты магнитных моментов атомов для разных спиновых конфигураций. Выявлена для системы Pt/Co/Cu/Co/Pt энергетическая выгодность анзотропии типа легкая плоскость для грани 100 и легкая ось для грани 110.

Данные расчеты были проведены в вычислительной лаборатории кафедры теоретической физики Омского государственного университета им. Ф. М. Достоевского, и при помощи вычислительных ресурсов ЦСП ДВО РАН (Хабаровск).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Мамонова М.В., Калинин Д.С., Шевченко И.Е.* Первопринципные расчеты энергетических и магнитных свойств систем Co/Pt/Co и Ni/W/Ni в зависимости от ориентации поверхностной грани//Молодёжь третьего тысячелетия: сборник научных статей. Омск: Изд-во ОмГУ, 2019. С. 835–839.
 - [2] *Мамонова М.В., Ложников В.Е., Самошилова А.А.* ервопринципные расчеты магнитных характеристик структуры Co/Cu/Co // Материалы Третьей Всероссийской научной конференции «Омские научные чтения – 2019». Омск: Изд-во ОмГУ, 2019. С. 836–839.
 - [3] *Прудников В.В., Прудников П.В., Мамонова М.В.* Теоретические методы расчета структурных, энергетических и магнитных характеристик систем с межфазным взаимодействием. Омск: Изд-во ОмГУ, 2017. 190с.
 - [4] *Marsman G., Kresse M.* VASP the GUIDE. Wien: Universitat Wien, 2000. 208 p.
-

[5] *Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.* Generalized gradient approximation made simple // *Phys. Rev. Lett.* 1996. V. 77. P. 3865–3868.

Калинин Дмитрий Сергеевич,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787,
kalinin9.7@mail.ru

Вычисление критических характеристик эффективного гамильтониана трехмерной модели Изинга

А.М. Косташук

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент А.Н. Вакилов

Аннотация. Проведено моделирование методом Монте-Карло термодинамического поведения трехмерной модели Изинга вблизи критической температуры. Используя метод перевзвешивания, были вычислены восприимчивость, корреляционная длина и ренормализационная константа связи, определяющая неподвижную точку ренормализационного преобразования. При фиксированном отношении корреляционной длины к линейному размеру решетки была получена зависимость ренормализационной константы связи от температуры, что дало возможность получить значение величины при критической температуре.

Ключевые слова: 3D модель Изинга, метод перевзвешивания.

Теория фазовых переходов второго рода характеризуется аномально большими взаимодействием флуктуаций параметра порядка и является теорией без малого параметра [1]. Ренормализационная константа связи является неподвижной точкой ренормгруппового преобразования и определяет критические характеристики системы и критические индексы. Вычисление таких критических характеристик представляет большой интерес.

Модель Изинга описывается гамильтонианом

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle}^N S_i S_j,$$

где J – константа обменного взаимодействия между ближайшими соседями. В нашем случае $J > 0$, что соответствует ферромагнетике, S_i – спины, принимающие значения ± 1 находятся в узлах трехмерной кубической решетки линейного размера L и периодическими граничными условиями. Микросостояние решетки определяется набором спинов S_i , а макроскопические свойства системы определяются свойствами ее возможных микросостояний.

В данной работе вычислялись следующие физические величины: намагниченность системы

$$M = \sum_i^N S_i,$$

$$\text{восприимчивость } \chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{kT},$$

$$\text{корреляционная длина } \xi = \frac{1}{2 \sin\left(\frac{\pi}{L}\right)} \sqrt{\frac{\chi}{F} - 1},$$

где $F = \frac{\langle \Phi \rangle}{L^3}$, $\Phi = \frac{1}{3} \left(\left| \sum_i S_i \exp \frac{2\pi i x_{1,i}}{L} \right|^2 + \left| \sum_i S_i \exp \frac{2\pi i x_{2,i}}{L} \right|^2 + \left| \sum_i S_i \exp \frac{2\pi i x_{3,i}}{L} \right|^2 \right)$, $(x_{1,i}, x_{2,i}, x_{3,i})$ – координаты i -го узла решетки, ренормализационная константа связи

$$g_R = 3 \left(\frac{L}{\xi} \right)^3 \left(1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3 \langle M^2 \rangle^2} \right).$$

где $\langle \dots \rangle$ – обозначают статистическое усреднение .

Фазовый переход второго рода возможен, когда объем системы и количество частиц стремиться к бесконечности. Для нахождения физических величин вблизи критической температуры используются методы конечно-размерного скейлинга. Прямое применение этих методов для вычисления константы связи в термодинамическом пределе не дает правильного значения, так как в критической области g_R демонстрирует следующее свойство [2, 4].

$$g_R^\infty \equiv \lim_{\beta \rightarrow \beta_c^-} \lim_{L \rightarrow \infty} g_R(L, \beta) \neq \lim_{L \rightarrow \infty} \lim_{\beta \rightarrow \beta_c} g_R(L, \beta) \equiv \widetilde{g}_R,$$

где $\beta=1/T$ – обратная температура.

Для вычисления термодинамических величин использовали метод перевзвешивания [3], позволяющий из моделирования только при одной температуре получать среднее значение физических величин при других температурах.

$$\langle O \rangle_\beta = \frac{\sum_E O(E) h_\beta}{\sum_E h_\beta(E)} = \frac{\sum_E O(E) h_{\beta_c}(E) e^{-(\beta-\beta_c)E}}{\sum_E h_{\beta_c}(E) e^{-(\beta-\beta_c)E}},$$

где E – энергия системы, $h_\beta(E)$ - число состояний с энергией E .

Вблизи критической температуры времена релаксации и корреляции расходятся. Для уменьшения эффектов критическо-

го замедления времени релаксации в работе применялся кластерный алгоритм Вольфа [5].

Алгоритм Монте-Карло в варианте Вольфа.

1. Выбирается случайный спин в решетке, назовем его центральным. Затем он переворачивается.

2. Далее если его соседний спин со направлен с непереворотом центральным, то с вероятностью $1 - \exp\left(-\frac{2}{T}\right)$ спин переворачивается, а координаты запоминаются в стеке.

3. После проверки всех соседних узлов. последний спин в стеке выбирается центральным и повторяется п. 2

4. Процедура заканчивается опустошением стека. Этот процесс называется переворотом кластера и соответствует одному шагу Монте-Карло.

В работе выполнено моделирование решеток с линейным размером $L = 32, 48, 64, 96, 128$ при критической температуре. Усреднение термодинамических величин проводилось по $2 \cdot 10^6$ различным состояниям, соответствующим одному шагу Монте-Карло. Один шаг соответствовал десяти переворотам кластера Вольфа. В работах [2, 4] было получено условие достижения термодинамического предела $L/\xi > 4$. Поэтому, из вычисленных значений g_R для получения асимптотического значения g_R^∞ использовались только те которые соответствовали условию $L/\xi = 6$. Результат представлен в таблице 1.

Таблица 1 – Зависимости константы связи g_R от температуры

T	g_R
4.5242	27.39(2)
4.5241	27.32(3)
4.5240	27.25(3)
4.5239	27.18(2)
4.5238	27.12(4)
4.5237	27.07(2)
4.5317	28.23(4)
4.5316	28.06(4)

Из выявленной температурной зависимости g_R может быть выделена критическое значение, соответствующее неподвижной

точке ренормализационного преобразования g_R^∞ на основе следующей скейлинговой зависимости для данной величины

$$g_R(\tau) = g_R^\infty (1 + \alpha \tau^\theta),$$

здесь $\tau=(T-T_c)/T_c$ – температура, θ – индекс поправки к скейлингу, для трехмерной модели Изинга $\theta=0,504$ [4]. Из полученных данных с помощью метода наименьших квадратов получено значение $g_R^\infty = 23,85(3)$, оно согласуется с теоретико-полевым значением $g_R^\infty = 23,73(2)$ [2] и результатами Монте-Карло $g_R^\infty = 23,3 - 26,4$ [2, 4].

В работе показано, что метод перевешивания хорошо подходит для вычисления констант связи ренормализационного преобразования. Так же метод будет полезен для сильно неупорядоченных систем для которых теоретико-полевоe описание невозможно.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Вильсон К., Когут Дж.* Ренормализационная группа и ϵ -разложение // УФН. 1985. Т. 146, вып. 3. С. 459–491.
- [2] *Ballesteros H.G., Fernández L.A.* Finite Size Scaling and “perfect” actions: the three dimensional Ising model // Physics Letters B, V. 441 (1-4), P. 330–338.
- [3] *Ferrenberg R. H., Swendsen R. H.* New Monte Carlo technique for studying phase Transitions // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 61. P. 2635–2638.
- [4] *Kim J.K., de Souza A.J., Landau D.P.* Numerical Computation of Finite Size Scaling Functions: An Alternative Approach to Finite Size Scaling // Phys.Rev. E. 1996. V. 54. P. 2291–2301.
- [5] *Wolf U.* Collective Monte Carlo updating for spin systems // Phys. Rev.Lett. 1989. V. 62. P. 361–364.

Косташук Алексей Михайлович,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812)647787,
alexey7954@gmail.com

Расчет магнитных характеристик и величин обменного интеграла для ячейки CFAS с применением программного комплекса SPRKKR

И.С. Малиновский

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент М.В. Мамонова

Аннотация. В данной работе с применением первопринципных расчетов и программного комплекса SPR-KKR был произведен расчет магнитных характеристик и значений обменных интегралов для объемной ячейки кобальт-содержащего сплава Гейслера $\text{Co}_2\text{FeAl}_{0,5}\text{Si}_{0,5}$ (CFAS).

Ключевые слова: SPR-KKR, обменный интеграл, сплав Гейслера.

В последнее время в качестве высокоперспективных материалов для применения в спинтронике были выделены кобальт-содержащие сплавы Гейслера, обладающими ферромагнитными свойствами, при этом имея в своем составе немагнитные элементы. Так сплав $\text{Co}_2\text{FeAl}_{0,5}\text{Si}_{0,5}$ (CFAS) используется [2] в качестве эпитаксиальных электродов в устройствах, основанных на эффекте туннельного магнитосопротивления (TMR).

В данной работе 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 [1].

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 рассеяние, 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 Коринга-Кона-Ростокера (KKR), между парами атомов в рамках теории многократного рассеяния применяются формулы Лихтенштейна:

В таблице 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 решётки для сплава

	μ_{spin}, μ_B	μ_{orb}, μ_B
Co	1.2392	0.0
Fe	2,6947	0.0
Al	-0.0459	0.0
Si	-0.0810	0.0

Рассчитанные в пакете SPR-KKR средние значения обменного интеграла в зависимости от приведенного расстояния между атомами приведены в таблице 2 и рисунке 2. Обменные интегралы для ближайших соседей J_1 содержатся в первой строке таблицы и для следующих за ближайшими J_2 во второй.

Таблица 2 – Результаты расчетов обменных интегралов

Co-Fe		Co-Co		Fe-Fe	
Rij/a	Jij (эВ)	Rij/a	Jij (эВ)	Rij/a	Jij (эВ)
0,433	0,0243350	0,5	0,0053740	0,707	0,0011920
0,829	0,0000330	0,866	-0,0000010	1	-0,0009690
1,09	-0,0000230	1,118	-0,0002320	1,225	-0,0001100
1,299	0,0000900	1,5	0,0000056	1,414	0,0001270

По результатам расчетов, приведенным в таблице 1 и 2, можно сделать следующие выводы. Наибольшим обменным взаимодействием обладает Fe. Для Co-Fe обменное взаимодействие носит ферромагнитный характер. У Co-Co и Co-Fe обменное взаимодействие следующих за ближайшими соседями имеет очень слабый антиферромагнитный характер.

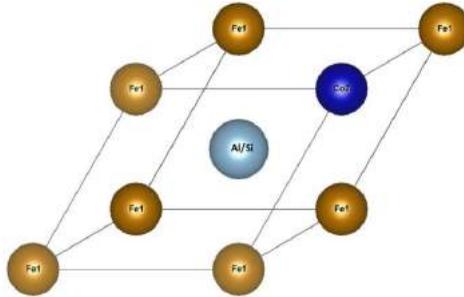


Рисунок 1 – Элементарная ячейка сплава CFAS

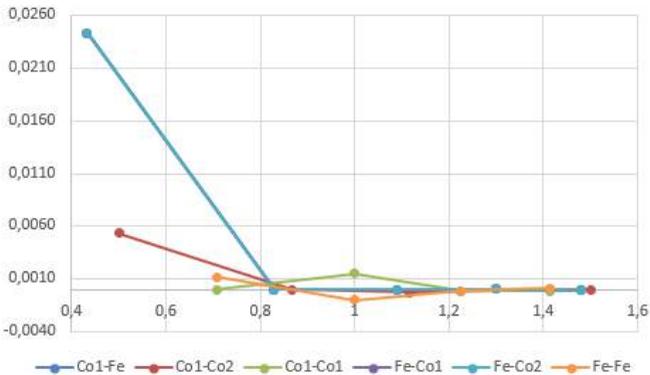


Рисунок 2 – Зависимость обменных интегралов от расстояния

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Huhne T., et al.* Full-potential spin-polarized relativistic Korringa-Kohn-Rostoker method implemented and applied to bcc Fe, fcc Co, and fcc Ni // *Phys. Rev. B.* 1998. V. 58 (16). P. 10236–10247.
- [2] *Tezuka N., Ikeda N., Miyazaki A., Sugimoto S., Kikuchi M. Inomata K.* Tunnel magnetoresistance for junctions with epitaxial full-Heusler $\text{Co}_2\text{FeAl}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$ electrodes with B2 and L21 structures // *Appl. Phys. Lett.* 2006. V. 89. 112514.

Малиновский Илья Сергеевич,
 Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
 2 курс магистратуры, физический факультет,
 644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787.
 ilyamalinovskii@gmail.com

Эффекты памяти при термоциклировании в неравновесном критическом поведении двумерной XY-модели

С.П. Чемерис

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент И.С. Попов

Аннотация. В данной работе, в рамках использования вычислительных методов Монте-Карло, осуществлено исследование неравновесных эффектов памяти при термоциклировании в неравновесной критической релаксации «чистой» двумерной XY-модели из высокотемпературного начального состояния. Выявлены особенности проявления эффектов памяти в двумерной XY-модели, связанные с существованием в системе низкотемпературной фазы Березинского.

Ключевые слова: двумерная XY-модель, эффекты памяти, неравновесная релаксация, критическая динамика, медленная динамика.

Исследование неравновесного критического поведения классических спиновых систем статистической механики вызывает в последние годы значительный фундаментальный и прикладной научный интерес [1, 2]. Эффекты памяти в медленной релаксации проявляются в первую очередь как возвращение динамических зависимостей характеристик неравновесной релаксации на исходные динамические кривые после кратковременного внешнего воздействия на систему, в качестве которого может выступать термоциклирование [6]. Неравновесные эффекты памяти в неравновесном критическом поведении двумерной XY-модели сравнительно мало исследованы [3]. Обнаружение особенностей проявления неравновесных эффектов старения [4, 5] в неравновесной критической релаксации двумерной XY-модели определяет актуальность изучения эффектов памяти. Особенностью критических свойств рассматриваемой системы является возникновение низкотемпературной фазы при температуре T ниже температуры фазового перехода Березинского-Костерлица-Таулесса $T_{\text{ВКТ}}$, где каждая температура T представляет критическую точку [4, 5]. Поэтому при термоциклировании неравновесной критической динамики системы можно получить неравновесные процессы перехода из одной критической точки в другую, что не получится реализовать с использованием дру-

гих спиновых решеточных моделей [6]. Целью настоящей работы является исследование неравновесных эффектов памяти в неравновесном критическом поведении двумерной XY-модели.

Эффекты памяти в медленной релаксации проявляются в первую очередь как возвращение динамических зависимостей характеристик неравновесной релаксации на исходные динамические кривые после кратковременного внешнего воздействия на систему [3, 6], в качестве которого в настоящей работе использовано термоциклирование с охлаждением.

Моделирование неравновесного критического поведения двумерной XY-модели в настоящей работе осуществлялось с использованием алгоритма Метрополиса из начального высокотемпературного состояния, когда динамика релаксации системы вихревая [4]. Исследование эффектов памяти проводилось на основе анализа двухвременных зависимостей спин-спиновой автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ [4], где $t-t_w$ обозначает время наблюдения, t_w – время ожидания. Линейный размер $L = 256$. Времена ожидания t_w были выбраны равными 100, 400, 1000 и 2000 MCS/s. Время наблюдения $t-t_w$ составляло 10000 MCS/s. Температуры замораживания выбирались в низкотемпературной фазе Березинского $T < T_{\text{вкт}}$ и в точке фазового перехода Березинского-Костерлица-Таулесса $T_{\text{вкт}}$. Термоциклирование осуществлялось путем понижения температуры замораживания системы T в два раза. Временной диапазон термоциклирования для исследования неравновесных эффектов памяти был выбран на характерных временах проявления эффектов старения: время начала термоциклирования $t-t_w = t_w$, продолжительность была выбрана $t_w, 2t_w$ и $3t_w$. Усреднение динамических зависимостей проводилось по 3000 статистическим конфигурациям.

Полученные результаты, представленные на рисунке 1, явно демонстрируют проявление неравновесных эффектов памяти при термоциклировании, с понижением температуры замораживания T , в неравновесной критической динамике двумерной XY-модели. Возврат динамических кривых $C(t, t_w)$ к исходным динамическим зависимостям происходит асимптотически, с возникновением переходных неравновесных релаксационных процессов.

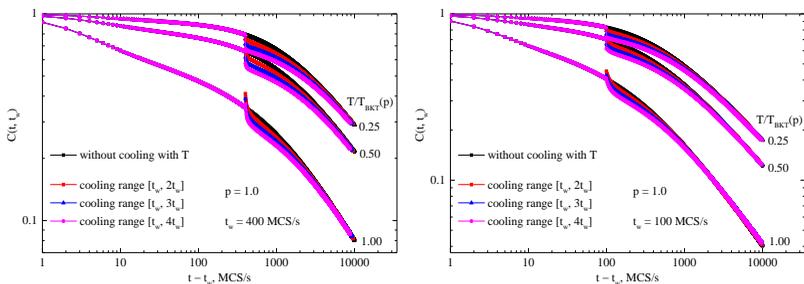


Рисунок 1 – Двухвременные динамические зависимости автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ термоциклированной неравновесной критической релаксации двумерной XY-модели, с «вырезанными» диапазонами термоциклирования

Показано, что с ростом времени ожидания t_w происходит замедление переходных неравновесных релаксационных процессов. Это связано с влиянием неравновесных эффектов старения на неравновесные эффекты памяти в неравновесной критической релаксации двумерной XY-модели: с ростом возраста образца система дольше «вспоминает» свое исходное состояние. Показано, что с понижением температуры замораживания T происходит замедление переходных неравновесных релаксационных процессов, связано с замедлением неравновесной критической релаксации в двумерной XY-модели с понижением температуры замораживания в низкотемпературной фазе Березинского $T < T_{\text{BKT}}$. Показано, что при резком охлаждении $T \rightarrow 0.5$ динамики релаксации динамические зависимости автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ системы стремятся к кривым $C(t, t_w)$ неравновесной критической релаксации при температуре замораживания T , что является особенностью неравновесной критической динамики двумерной XY-модели – наблюдается неравновесный процесс перехода из одной критической точки в другую в низкотемпературной фазе Березинского.

ЛИТЕРАТУРА

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

- [2] Прудников В.В., Вакилов А.Н., Прудников П.В. Теоретические методы описания неравновесного критического поведения структурно неупорядоченных систем. М.: Физматлит, 2013. 316 с.
- [3] Krzakala F., Ricci-Tersenghi F. Aging, memory and rejuvenation: some lessons from simple models // J. Phys.: Conf. Ser. 2006. V. 40. P. 42–49.
- [4] Prudnikov P.V., Prudnikov V.V., Popov I.S. Nonequilibrium Aging Effects in the Critical Behavior of Structurally Disordered Planar Magnets // JETP Letters. 2015. V. 101 (8). P. 539–544.
- [5] Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Popov I.S. Superaging and Subaging Phenomena in a Nonequilibrium Critical Behavior of the Structurally Disordered Two-Dimensional XY Model // JETP. 2018. V. 126. P. 368–382.
- [6] Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Pospelov E.A. Influence of disorder on ageing and memory effects in non-equilibrium critical dynamics of 3D Ising model relaxing from an ordered state // J. Stat. Mech. 2016. 043303.

Чемерис Степан Петрович,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787,
petrovich.fizzik@yandex.ru

**Расчет методом конечных разностей распределений
электрического и магнитного полей световых волн
в диэлектрических волноводах**

Е.В. Киселева

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент Т.К. Болецкая

Аннотация. Оптические волноводы широко распространены и области их применения постоянно расширяются. Характеристики реальных волноводов невозможно вычислить аналитически. Нужно использовать приближенные методы расчета, один из которых – метод конечных разностей. В данной статье этим методом рассчитаны распределения электрического и магнитного полей в полосковом диэлектрическом волноводе.

Ключевые слова: метод конечных разностей, TFSF-граница, полосковый диэлектрический волновод.

Метод конечных разностей заключается в следующем: пространство и время дискретизируются; в уравнениях Максвелла все производные заменяются конечными разностями [2]. Из полученных разностных уравнений находятся неизвестные будущие поля через известные прошлые поля.

Считаем, что во всех трех направлениях трехмерной пространственной сетки шаги одинаковы и равны δ . Через эту величину и временной шаг Δ_t выражается число Куранта: $S_c = c\Delta_t/\delta$. Для того чтобы напряженности полей не стремились к бесконечности, то есть расчеты были устойчивыми число Куранта не должно превышать $1/\sqrt{3}$. $S_c = 1/\sqrt{3}$ – оптимальное значение числа Куранта.

Расчеты выполнялись для утолщенного полоскового волновода [1], который изображен на рисунке 1.

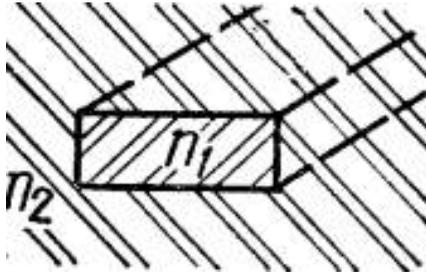


Рисунок 1 – Утолщенный полосковый волновод

Показатель преломления волноводной полоски $n_1 = 2.234$ (показатель преломления ниобата лития, легированного титаном), показатель преломления окружающей среды $n_2 = 2.214$ (показатель преломления чистого ниобата лития).

На торец волноводной полоски нормально падает плоская волна. Для того чтобы задать падающую волну, используется следующий прием. Область, в которой производятся вычисления, делится на две части, которые называются: область полного поля (TF область) и область рассеянного поля (SF область), так, как показано на рисунке 2. Граница между этими областями называется TFSF границей. Вещество находится только в TF области, в SF области – вакуум.

Напряженности электрического и магнитного полей в области полного поля \vec{E}_{tot} и \vec{H}_{tot} складываются из \vec{E}_{inc} и \vec{H}_{inc} – напряженностей полей, создаваемых источником, и \vec{E}_{scat} и \vec{H}_{scat} – напряженностей рассеянных полей. Эволюция полей в узлах, как TF, так и SF области, описывается одними и теми же уравнениями. Но в уравнения эволюции полей, в узлах, ближайших к TFSF границе, входят поля, находящиеся по другую сторону границы. Поэтому требуется ввести поправки. Благодаря этим поправкам внешнее поле вводится в область полного поля. Если

внешнее поле представляет собой плоскую волну, то оно рассчитывается как одномерное поле.

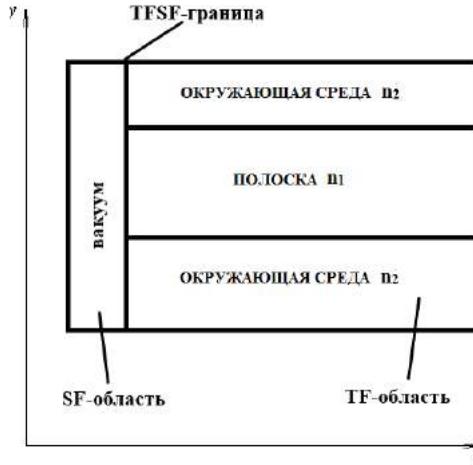


Рисунок 2 – TF-SF – граница, которая использовалась при расчетах распределений полей в волноводе. Ось z перпендикулярна плоскости чертежа

Число узлов вдоль оси x $M = 101$, число узлов вдоль осей y и z $N = P = 35$, $S_c = 1/\sqrt{3}$. Размеры волноводной полоски вдоль осей y и z , $d = 10\Delta_y$, $a = 10\Delta_z$. Координаты первого и последнего узлов TF области: $firstx = 5$, $firsty = 1$, $firstz = 1$; $lastx = 101$, $lasty = 35$, $lastz = 35$. Границы области, в которой проводились вычисления поглощающие.

На левый край волноводной полоски нормально падает плоская монохроматическая волна, поляризованная вдоль оси z . Напряженность ее электрического поля в точке с координатами $x = m_0\delta$, $y = n\delta$, $z = p\delta$ равна $E_z(m_0, n, p) = \sin(\omega t) = \sin((2\pi c/\lambda)t) = \sin((2\pi c/N_p\delta)q\Delta_t) = \sin(2\pi S_c q/N_p)$.

Число точек, приходящееся на длину волны, принималось равным $N_p = 20$, $m_0 = firstx$.

Распределения E_z в плоскостях, перпендикулярных осям z и x приведены на рисунке 3. Плоскость, перпендикулярная оси z , проводилась через середину волноводной пленки. Плоскость, перпендикулярная оси x , проводилась при $x = 10\Delta_x$.

Для построения графиков значения E_z делились (нормировались) на максимальное значение абсолютной величины E_z . От полученных величин вычислялись десятичные логарифмы. Логарифм, меньший -3, принимался равным нулю. По цвету можно судить о величине E_z . Цветовая шкала приведена справа.

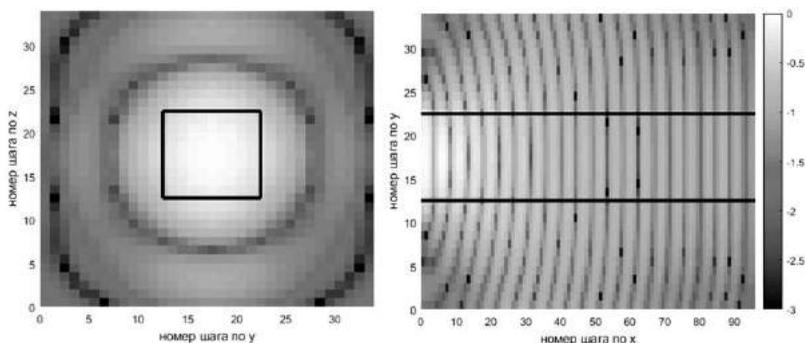


Рисунок 3 – Распределения E_z в плоскостях, перпендикулярных осям x (а) из (б)

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Унгер Х.-Г. Планарные и волоконные оптические волноводы. М.: Мир, 1980. 656 с.
- [2] Schneider J.B. Understanding the Finite-Difference Time-Domain Method [Электронный ресурс]. URL: <https://www.eecs.wsu.edu/~schneidj/ufdtd/ufdtd.pdf> (дата обращения: 14.06.2020).

Киселева Евгения Валерьевна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812)647787,
kiselevazh.96@yandex.ru

Повышение точности прогнозирования ионосферного состояния моделью NeQuick по данным трансionoсферного зондирования

А.А. Шлейц

Научный руководитель: к.т.н. К.А. Сидоренко

Аннотация. В исследовательской работе проведена адаптация модели NeQuick по данным ГНСС с целью повышения точности прогнозирования ионосферного состояния. Показана целесообразность использования спутниковых систем в расчетах ионосферного состояния.

Ключевые слова: критическая частота, индекс солнечной активности, модель NeQuick.

Введение

Ионосфера – верхние слои атмосферы Земли, состоящие из свободных электронов и протонов, образованных вследствие ионизации воздуха солнечным излучением. Ее состояние играет существенную роль в работе систем коротковолновой радиосвязи и навигации. Поэтому для обеспечения работы современных систем связи необходимо исследовать методы повышения точности прогнозирования ионосферного состояния [1]. Одним из современных подходов в прогнозировании состояния ионосферы является использование эмпирических ионосферных моделей, которые способны рассчитывать ионосферные параметры. К наиболее известным и широко используемым относится модель NeQuick [2]. Тем не менее, точность определения ионосферного состояния все еще имеет значительные погрешности [3]. Для решения проблемы точности прогнозирования в настоящее время используют данные трансionoсферного зондирования, полученные с развитых глобальных навигационных спутниковых систем связи (ГНСС). В ходе эксперимента были задействованы ГНСС ГЛОНАСС и GPS [1]. Поэтому целью данной работы является повышение точности прогнозирования ионосферного состояния ионосферной моделью NeQuick по данным трансionoсферного зондирования.

Описание эксперимента

Задачей исследования является внедрение в модель NeQuick данных с ГНСС ГЛОНАСС и GPS с целью повышения точности прогнозирования ионосферных параметров. В качестве такого параметра, характеризующего состояние ионосферы, будет использоваться критическая частота ионосферного слоя F2 – f0F2. В ходе эксперимента при помощи ГНСС приемника ProPak 6, расположенного в г. Омск (широта: 55, долгота: 73), будут приниматься и обрабатываться сообщения со спутников [5]. На основе полученных данных будет рассчитываться полная электронная концентрация (ПЭС) по формуле:

$$\text{ПЭС} = \frac{f_{L1}^2 f_{L2}^2}{40,3(f_{L1}^2 f_{L2}^2)} (\phi_{L1}^2 - \phi_{L2}^2) - IFB,$$

где f_{L1}^2, f_{L2}^2 – частоты спутника; ϕ_{L1}^2, ϕ_{L2}^2 – псевдодалности, измеренные по количеству циклов фазы; IFB – значения смещения ПЭС для каждого спутника [1]. Далее происходит определение критической частоты f0F2 и на ее основе проводится расчет индекса солнечной активности $F_{10,7}$. Полученное $F_{10,7}$ будет использоваться в качестве адаптирующего параметра в модели NeQuick. Полученная модель будет использоваться для определения f0F2 для Москвы (широта: 55, долгота: 37).

Прогнозирование f0F2 моделью NeQuick.

Алгоритм расчета f0F2 в модели NeQuick основан на применении разложения эмпирической базы данных во временные ряды Фурье. Первое приближение f0F2 вычисляется по формуле

$$f_0F2 = \sum_{k=1}^{12} cf2_k m_k,$$

где $cf2_k$ – коэффициенты сферических гармоник, m_k – коэффициенты модифицированного магнитного наклонения для каждого члена разложения ряда [4].

В качестве адаптирующего параметра вместо числа солнечных пятен используется индекс солнечной активности Az_R , напрямую связанный с потоками электромагнитного излучения Солнца, – поток солнечного радиоизлучения на волне 10,7 см ($F_{10,7}$), согласно выражению

$$Az_R = \sqrt{167273 + (F_{10,7} - 63,7)1123,6 - 408,99}.$$

Результаты исследования

Результаты эксперимента приведены на рисунке 1. Здесь представлены зависимости критической частоты от времени суток, построенные: по реальным ионосферным данным, полученным с Московского ионозонда (f_0F_2 Москва); при помощи модели NeQuick, использующую $F_{10,7}$ из общедоступных баз данных; при помощи адаптированной модели NeQuick, использующую рассчитанную по данным ГНСС $F_{10,7}$.

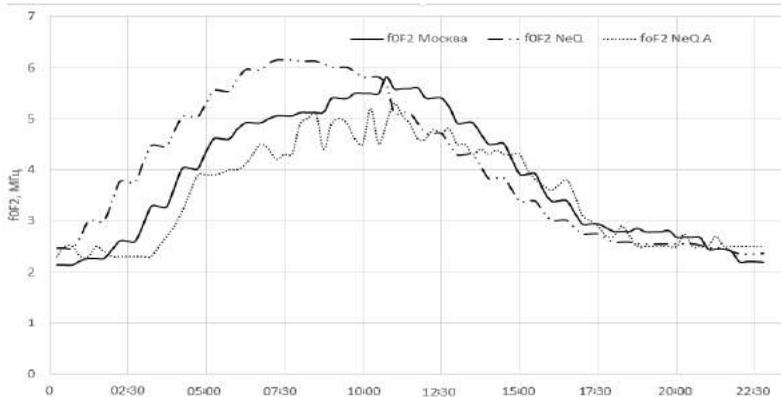


Рисунок 1 – Зависимость критической частоты от времени суток для Москвы

По графикам видно, что точность определения критической частоты при использовании адаптированной модели по данным ГНСС выше. Это можно также проследить по снижению величины СКО с 1,3 МГц (58 %) до 0,52 МГц (30 %).

Заключение

В ходе исследования был разработан алгоритм адаптации модели NeQuick по данным ГНСС ГЛОНАСС и GPS. В качестве адаптирующего параметра был выбран индекс солнечной активности $F_{10,7}$. В результате проведенного эксперимента получен прирост в точности в прогнозировании ионосферных параметров.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Васенина А.А., Сидоренко К.А.* Применение спутниковых систем ГЛОНАСС/GPS при адаптации ионосферной модели // Вестник СибГАУ. 2015. Т. 16, № 1. С. 172–176.
- [2] *Кондратьев А.Н., Сидоренко К.А., Васенина А.А.* Прогнозирование критической частоты слоя F2 на основе методов статистического анализа // РАДИОТЕХНИКА, ЭЛЕКТРОНИКА и СВЯЗЬ (РЭИС-2017). Сборник трудов IV Международной научно-технической конференции. 2017. С. 124–129.
- [3] *Шлейц А.А.* Прогнозирование критической частоты ионосферного слоя F2 во время магнитных бурь // Современные проблемы радиофизики и радиотехники: сборник докладов Омского научного семинара. Вып. 8. Омск: ОНИИП, 2020. С. 91–102.
- [4] Ionospheric Correction Algorithm for Galileo Single Frequency Users [Электронный ресурс] // European Commission, 2016. 96 pp. URL: https://www.gsc-europa.eu/sites/default/files/sites/all/files/Galileo_Ionospheric_Model.pdf (дата обращения: 14.06.2020).
- [5] OEM7 Commands and Logs Reference Manual [Электронный ресурс] // NovAtel, 2020. 1055 pp. URL: https://docs.novatel.com/OEM7/Content/PDFs/OEM7_Commands_Logs_Manual.pdf (дата обращения: 14.06.2020).

Шлейц Антон Андреевич,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812)647787,
shleitz.anton@yandex.ru

Газочувствительные свойства индивидуальных углеродных нанотрубок, облучённых электронами и протонами

Д.Б. Карабаева

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент Н.А. Давлеткильдеев

Аннотация. В работе исследована газовая чувствительность к диоксиду азота и аммиаку индивидуальных многостенных легированных азотом углеродных нанотрубок, облученных электронами с энергией 3 МэВ и дозой 10^{16} см⁻² и протонами с энергией 140 кэВ и дозой 10^{14} см⁻².

Ключевые слова: индивидуальные углеродные нанотрубки, протонное и электронное облучение, газовая чувствительность к аммиаку и диоксиду азота.

Введение. Компьютерное моделирование облучения углеродных нанотрубок (УНТ) электронами и ионами показало, что, в результате столкновения частиц с атомом углерода в УНТ образуется вакансия (одиночная или множественная), а также атомы отдачи, которые могут оставаться в УНТ или покинуть нанотрубку [1]. Образование точечных дефектов приводит к ухудшению механических и электрических свойств материала. Однако, в некоторых приложениях, таких как создание сенсоров на основе УНТ, облучение высокоэнергетическими частицами может оказывать благотворное влияние, обеспечивая улучшение сорбционных свойств и возможность управления концентрацией носителей заряда и сопротивлением УНТ.

Целью работы является изучение влияния электронного и протонного облучения на изменение газовой чувствительности индивидуальных многостенных углеродных нанотрубок, легированных азотом.

Методика эксперимента. Многостенные легированные азотом углеродные нанотрубки (N-МУНТ) синтезировались методом химического парофазного осаждения на установке CVD-4 в ОНЦ СО РАН. Рост N-МУНТ происходил в результате пиролиза паров ацетонитрила при температуре 850°C. Катализатором

роста нанотрубок выступали наночастицы железа, образующиеся в результате термического разложения ферроцена, который добавлялся к ацетонитрилу в соотношении (100:2). В результате синтеза на подложках SiO₂/Si формировался плотный слой (толщиной 15-25 мкм) вертикально расположенных УНТ. Согласно данным рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, содержание азота в N-МУНТ составило 3-4 ат. %.

Для облучения N-МУНТ на подложке монокристаллического Si спрей-методом формировался тонкий полупрозрачный равномерный слой N-МУНТ. Облучение слоя N-МУНТ электронами с энергией 3 МэВ и дозой 10¹⁶ см⁻² и протонами с энергией 140 кэВ и дозой 10¹⁴ см⁻² производилось на ускорителях этих частиц в ИФП СО РАН.

N-МУНТ осаждались на золотые микроэлектродные матрицы методом центрифугирования из спиртовой суспензии, полученной путем ультразвукового диспергирования в этиловом спирте. На полученных образцах с использованием металлографического микроскопа находились индивидуальные N-МУНТ, расположенные одновременно на двух золотых электродах. С помощью зондовой станции и прецизионного мультиметра АМ1038 измерялось электрическое сопротивление индивидуальных N-МУНТ.

Образцы индивидуальных N-МУНТ помещались в газовую ячейку с контролируемой влажностью. С помощью потока сухого азота в изолированной ячейке достигалась относительная влажность в несколько процентов (около 5%). Затем системой напуска вводился газ окислитель (NO₂) при дозах 20 и 40 ppm, либо газ – восстановитель (NH₃) при дозах 200 и 400 ppm. В процессе экспозиции в газовой среде определялось изменение сопротивления N-МУНТ во времени.

На основе полученных данных строились графики кинетики сопротивления исходных и облученных электронами и протонами N-МУНТ проводился расчет относительной газовой чувствительности по формуле:

$$S = \frac{R_{\text{газ}} - R_0}{R_0} \cdot 100\%,$$

где R_0 – сопротивление N-МУНТ до воздействия газа, $R_{\text{газ}}$ – сопротивление нанотрубки при адсорбции газа NO₂/NH₃.

Результаты и обсуждение. На рисунках 1, 2 в качестве примера показаны графики изменения сопротивления индивидуальной N-МУНТ, облученной электронами, в процессе адсорбции газов при двух дозах, отличающихся в 2 раза. На рисунках также показано изменение влажности в ячейке при введении газов. Видно, что влажность в ячейке изменяется незначительно (в пределах одного процента).

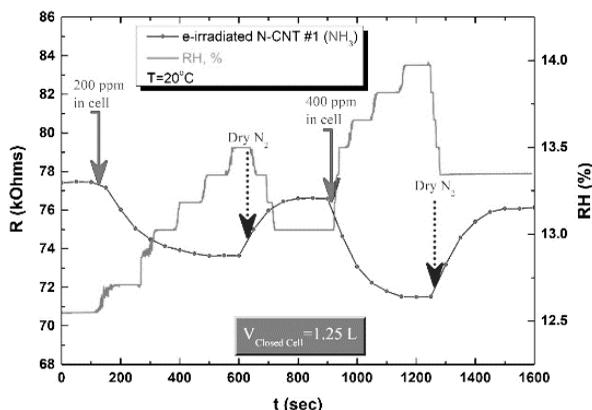


Рисунок 1 – Изменение сопротивления индивидуальной N-МУНТ, облученной электронами, при адсорбции NH_3 при 20°C

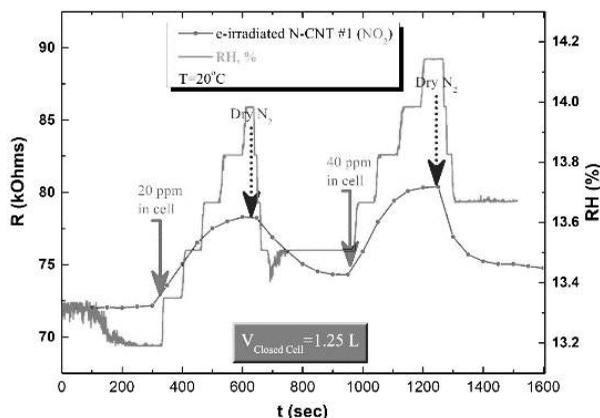


Рисунок 2 – Изменение сопротивления индивидуальной N-МУНТ, облученной электронами, при адсорбции NO_2 при 20°C

Поскольку исходные N-МУНТ обладают проводимостью n-типа (азот является донором электронов для УНТ) молекулы газа-восстановителя NH_3 , адсорбируясь на поверхность УНТ увеличивают концентрацию электронов и ее сопротивление уменьшается. При этом величина относительной газовой чувствительности принимает отрицательное значение. При адсорбции газа-окислителя NO_2 происходит захват электронов с поверхности трубки и их концентрация уменьшается, что приводит к росту сопротивления N-МУНТ, а относительная газовая чувствительность имеет положительный знак.

В таблице 1 показаны результаты определения относительной газовой чувствительности N-МУНТ.

Таблица 1 – Относительная газовая чувствительность индивидуальных N-МУНТ

Вид N-МУНТ	Относительная газовая чувствительность S, %	
	NO_2	NH_3
Исходная	3,3	-0,5
Облученная e^-	11,5	-7,7
Облученная H^+	-3,1	0,9

По знаку изменения сопротивления при адсорбции газов видно, что N-МУНТ, облученная электронами, обладает проводимостью n-типа. Относительно щадящее электронное облучение не приводит к образованию большой концентрации радиационных дефектов в N-МУНТ и сохраняет исходный тип основных носителей заряда. Благодаря снижению концентрации основных носителей заряда в облученной электронами N-МУНТ, даже незначительное её изменение при адсорбции газов, приводит к заметному изменению сопротивления и обеспечивает более высокую газовую чувствительность.

Изменение знака относительной газовой чувствительности N-МУНТ, облученной протонами, свидетельствует об инверсии типа проводимости на p-тип. Вероятно, протонное облучение приводит к образованию в N-МУНТ большой концентрации вакансий, которые являются акцепторами электронов. В результате захвата электронов основными носителями заряда в N-МУНТ становятся дырки. Однако инверсия типа проводимости не при-

водит к заметному изменению газовой чувствительности N-МУНТ, облученных протонами, которая сохраняется на уровне исходной N-МУНТ.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Krasheninnikov A.V., Nordlund K.* Ion and electron irradiation-induced effects in nanostructured materials // *Journal of Applied Physics*. 2010. V. 107. 071301.

Карабаева Дильдора Ботировна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812)647787,
karabaeva.dilya@gmail.com

Изучение дисперсии импеданса водных растворов электролитов и биологических тканей

С.А. Матюшенко

Научный руководитель: д.т.н., проф. А.Г. Козлов

Аннотация. В статье рассматриваются причины возникновения дисперсии импеданса водных растворов электролитов и биологических тканей, приводится описание установки для измерения активной и реактивной составляющих комплексного сопротивления в диапазоне частот от 5 Гц до 40 кГц. Представлены результаты исследования влияния продуктов жизнедеятельности низших плесневых грибов на импеданс электрохимической ячейки встречно-штыревого типа, контактирующей с кисломолочной средой.

Ключевые слова: дисперсия импеданса, электрохимическая ячейка, электролит, поляризация, импедансная спектроскопия.

Дисперсия импеданса – это зависимость электрического импеданса от частоты переменного тока. Исследование свойств электролитов методом импедансной спектроскопии отличается от метода исследования на постоянном токе тем, что значения импеданса, проводимости, диэлектрической проницаемости растворов и биологических тканей, основу которых составляют жидкости с разным удельным сопротивлением, могут сильно зависеть от частоты переменного тока [1, 3-5]. Изменение этих параметров с частотой обусловлено зависимостью поляризации от периода действия переменного тока. Если время, в течение которого электрическое поле направлено в одну сторону, больше времени релаксации τ какого-либо вида поляризации, то поляризация достигнет максимального значения, а вещество будет обладать определённым значением диэлектрической проницаемости, проводимости и импеданса. При увеличении частоты поляризация не успевает достигнуть максимального значения, полное сопротивление при этом падает.

Выделяют несколько видов поляризации [1]: электронную ($\tau = 10^{-16}$ – 10^{-14} с), ионную ($\tau = 10^{-14}$ – 10^{-12} с), дипольную ($\tau = 10^{-13}$ – 10^{-7} с), макроструктурную ($\tau = 10^{-8}$ – 10^{-3} с), поверхностную ($\tau = 10^{-3}$ – 1 с) и электролитическую ($\tau = 10^{-4}$ – 10^2 с).

Экспериментальная установка для изучения дисперсии импеданса различных растворов изготовлена по руководству статьи [2]. Подключение к компьютеру осуществляется через линейный вход и линейный выход полнодуплексной звуковой карты. Расчёты полного сопротивления исследуемой цепи и составляющих импеданса проводились в программе «Visual Analyser 2011» с помощью встроенной утилиты «ZRLCmeter».

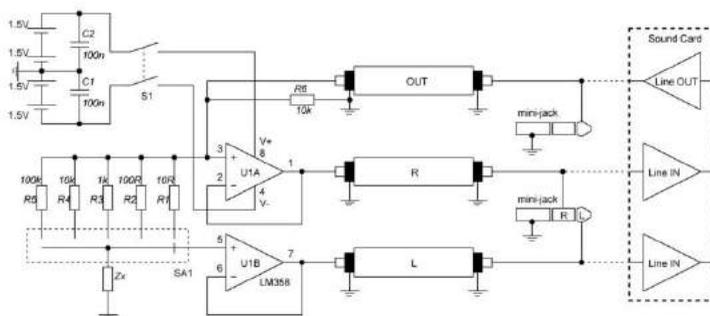


Рисунок 1 – Электрическая схема измерителя импеданса

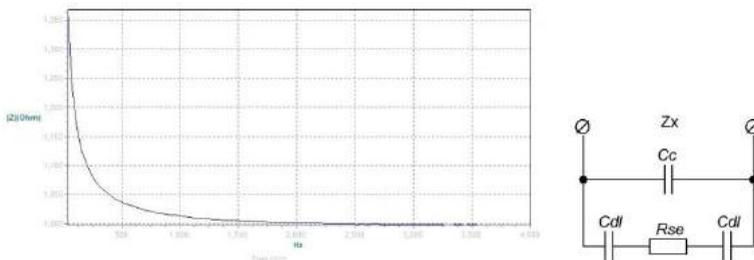


Рисунок – 2. График зависимости полного сопротивления электрохимической ячейки с дистиллированной водой (слева) и эквивалентная электрическая схема ячейки (справа)

На рисунке 1 показана схема установки для измерения импеданса. Резисторы R_1 , R_2 , R_3 , R_4 и R_5 – опорные с известным сопротивлением. Галетный переключатель SA1 в зависимости от требуемого диапазона подключает к схеме один из опорных резисторов. В данной работе в качестве измеряемой нагрузки Z_x выступает электрохимическая ячейка встречно-штыревого типа с медными электродами.

С помощью изготовленной экспериментальной установки получены графики зависимости полного сопротивления электрохимической ячейки, контактирующей с различными жидкостями, от частоты переменного тока.

На рисунке 2 в качестве примера представлен график зависимости $|Z|$ от частоты переменного тока, которая менялась в пределах от 40 Гц до 4 кГц с шагом 40 Гц. Из графика видно, что при низких частотах полное сопротивление цепи велико. Рассчитанные путём решения системы уравнений для импеданса на разных частотах истинное сопротивление R_{se} жидкости составило 1 кОм, ёмкость C_{dl} двойного слоя на границе электрод-дистиллированная вода – 2,138 мкФ, ёмкость ячейки – 4 нФ. Аналогичная зависимость наблюдалась и для растворов электролитов (но при меньших значениях $|Z|$).

Также было проведено исследование влияния продуктов жизнедеятельности низших плесневых грибов на импеданс электрохимической ячейки встречно-штыревого типа, контактирующей с кисломолочной средой. В ёмкость с ячейкой заливался биоогурт объёмом 20 мл. В течение 132 часов снято 25 значений полного сопротивления ячейки с раствором на трёх частотах: 10 Гц, 1 кГц и 10 кГц (рисунок 3). Через 132 часа после начала эксперимента в ёмкости с электрохимической ячейкой наблюдалась активно развитая структура из вертикальных гифов, на конце которых присутствовали характерные тёмные шаровидные спорангии муконовых грибов. Полное сопротивление за счёт образования продуктов жизнедеятельности (органических кислот) в течение всего эксперимента уменьшалось, причём на 10 Гц разница между начальным и конечным значением была наибольшей.

На основании полученных результатов можно сделать вывод: все жидкости в той или иной степени обладают проводимостью, зависящей от поляризации, соответственно, наблюдается и дисперсия импеданса, которая может быть описана с помощью электрических эквивалентных схем. В процессе жизнедеятельности живых организмов состав и концентрация растворов электролитов изменяются. Этот факт используется в науке и медицине для заблаговременного обнаружения нежелательных процессов.

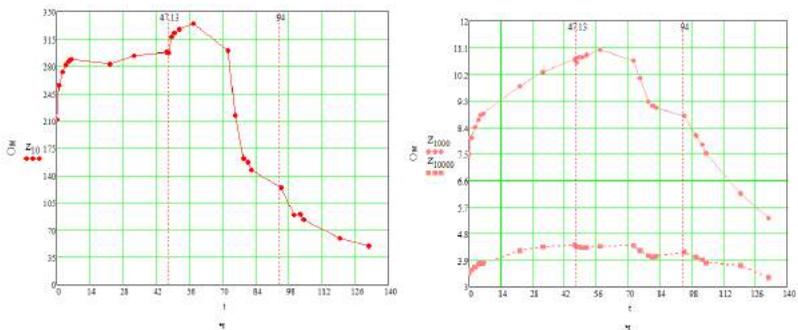


Рисунок 3 – Зависимость полного сопротивления электрохимической ячейки встречно-штыревого типа от времени для частоты зондирующего переменного тока 10 Гц (слева) и 1 и 10 кГц (справа) при размножении низших плесневых грибов в кисломолочной среде

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Губанов Н. И., Утепбергенов А.А. Медицинская биофизика. М.: Медицина, 1978. 336 с.
- [2] Долгий А. Мостовой измеритель импеданса – приставка к компьютеру // Радио. 2009. № 5. С. 18–20.
- [3] Зуев А.Л., Мишланов В.Ю., Судаков А.И., Шакиров Н.В. Изучение ионных, молекулярных и клеточных механизмов формирования электрического импеданса в биологических жидкостях и тканях // Этюды о механике. Екатеринбург: РИО УрО РАН, 2017. С. 149–158.
- [4] Леценко В.Г., Ильич Г.К. Медицинская и биологическая физика: уч. пособие. М.: Новое Знание, ИНФРА-М, 2012. 552 с.
- [5] Николаев Д.В., Смирнов А.В., Бобринская И.Г., Руднев С.Г. Биоимпедансный анализ состава тела человека. М.: Наука, 2009. 392 с.

Матюшенко Сергей Алексеевич,
 Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
 1 курс магистратуры, физический факультет,
 644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812)647778,
 sergey199622@mail.ru

Влияние предварительной дегидрохлорирующей обработки на поверхностную морфологию хлорированного поливинилхлорида, облученного мощным ионным пучком

А.А. Парыгин

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент В.С. Ковивчак

Аннотация. Проведено сравнительное исследование воздействия мощного ионного пучка наносекундной длительности на тонкие слои хлорированного поливинилхлорида, содержащие каталитическую добавку (ферроцен), без предварительной обработки и после предварительного ультрафиолетового облучения. При воздействии мощного ионного пучка на хлорполимеры обнаружено образование на их поверхности углеродных нановолокон, диаметр и длина которых существенно зависят от предварительной дегидрохлорирующей обработки. Ультрафиолетовое облучение приводит к росту длины и диаметра волокон, что приводит к образованию более развитой поверхности.

Ключевые слова: углеродные нановолокна; ультрафиолетовое облучение; мощный ионный пучок; ХПВХ; хлорированный поливинилхлорид.

Трансформация тонких слоев полимерных материалов в слои наноструктурированного углерода за счет термического воздействия представляет большой интерес для применения в электронике [1]. Такие слои могут использоваться для создания различных гибких газовых сенсоров и микросуперконденсаторов. Одним из вариантов термического воздействия является мощный ионный пучок (МИП). В ходе исследований было установлено, что наиболее подходящим для облучения материалом при этом является хлорированный поливинилхлорид (ХПВХ), который карбонизируется путём дегидрохлорирования. Однако время воздействия МИП очень мало, поэтому было выдвинуто предположение о том, что предварительное частичное дегидрохлорирование, проводимое другими методами, должно оказать существенное положительное влияние на рост углеродных наноструктур. Это связано с тем, что предполагаемый механизм карбонизации включает в себя отщепление атома или иона хлора, которое лучше всего идёт в аллильном положении, то есть реак-

ция преимущественно должна распространяться по цепи полимера от первичной двойной связи [2].

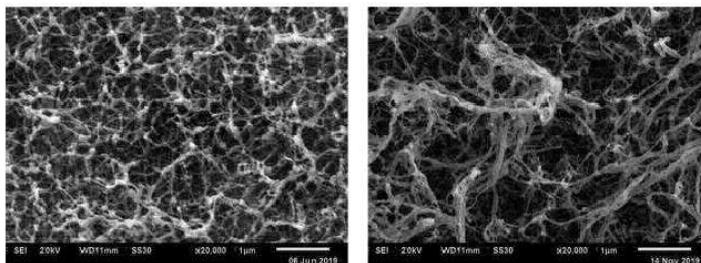
Нами проводилось исследование воздействия МИП на тонкие слои ХПВХ, содержащие в качестве катализатора ферроцен $[\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2]$. Слой ХПВХ (толщиной до 10 - 20 мкм) наносился на подложки из натрий-силикатного стекла из раствора данного полимера в тетрагидрофуране с добавлением до 10 массовых % ферроцена. Для того, чтобы удалить растворитель, образцы выдерживались в течение нескольких суток при комнатной температуре. Предварительное дегидрохлорирование в форме облучения образца ультрафиолетом (УФ) проводилось на установке для фотолитографии с применением ртутной лампы сверхвысокого давления типа ДРШ 250-3 на воздухе, излучение лампы не подвергалось какой-либо фильтрации [3]. УФ облучение плёнок ХПВХ проводили в течение до 4 часов. Облучение образцов проводилось с использованием ускорителя «Темп» пучком ионов с энергией $E \approx 200$ кэВ, длительностью $\tau = 60$ нс, в диапазоне плотностей тока $50-150$ А/см², который состоит из примерно 70% C^+ и 30% H^+ . Состав образцов и морфология поверхности исследуются с использованием метода растровой электронной микроскопии (JSM - 6610LV, JEOL).

УФ облучение приводит к явным визуальным изменениям плёнки. Уже через полчаса плёнка приобретает тёмно-коричневый, а через 4 часа чёрный цвет, что свидетельствует как минимум об образовании большого количества кратных связей, объединённых в полисопряжённые системы, что и требовалось для проведения исследования.

СЭМ-изображения полученных в результате облучения плёнок ХПВХ МИП наноструктур приведены на рисунке 1. Отчётливо видно, что УФ-облучение способствует образованию длинных нановолокон, которые не наблюдаются на контрольном образце. Причём измерения показывают, что количество волокон при этом не уменьшается.

Мы провели измерение параметров волокон, полученных в обоих режимах, результаты приведены в таблице 1. Как мы видим, наиболее вероятный диаметр не изменяется и составляет 40-50 нм, его в обоих случаях имеют около четверти всех волокон. В то же время средний диаметр возрастает почти в полтора

раза, что обусловлено кардинально иным видом распределения, показанным на гистограмме (рисунок 2).



СЭМ-изображения образцов при ускоряющем напряжении 20 кВ, облучённых без предварительной обработки (слева) и после воздействия ультрафиолета (справа). Масштабная линейка 1 мкм.

Рисунок 1

В случае контрольного образца имеет место расплывание распределения в область малых диаметров и резкий спад в области больших диаметров, в то время как после УФ-облучения максимум распределения более выражен относительно малых диаметров, а в области больших диаметров спад происходит намного более плавно. Средняя длина волокон в результате предварительного воздействия также увеличивается на 12%, что при неизменной концентрации волокон приводит к существенному увеличению их площади, что крайне полезно для указанных выше областей потенциального практического применения.

Таблица 1 – Статистические данные по волокнам на поверхности образцов

	Контрольный	После УФ
Наиболее вероятный диаметр, нм	40-50	40-50
Средний диаметр, нм	42	61
Средняя длина, нм	467	525
Количество волокон на единицу площади, мкм ⁻²	18	18
Площадь волокон на единицу площади подложки, %	121	176

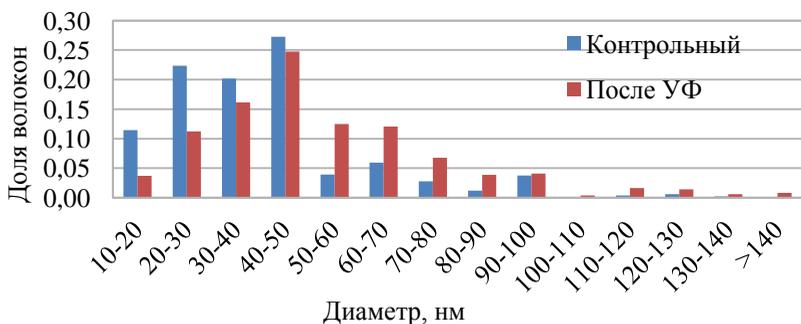


Рисунок 2 – Гистограмма распределения волокон по диаметру

Таким образом, из проведённого исследования можно сделать вывод о том, что в результате предварительного дегидрохлорирующего воздействия происходит изменение геометрических характеристик образующихся нановолокон, и требуется дальнейшее изучение влияния на их рост различных методов и режимов дегидрохлорирующего воздействия.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Ковивчак В.С., Кряжев Ю.Г., Запелова Е.С. Формирование наноструктурированного углеродного материала на поверхности полимера, содержащего ферроцен, при воздействии мощного ионного пучка // Письма в ЖТФ. 2016. Т. 42, вып. 3. С. 84–90.
- [2] Реутов О.А., Куриц А.Л., Бутин К.П. Органическая химия: учебник для студентов химических специальностей и аспирантов. М.: Изд. МГУ, 1999. 2336 с.
- [3] Decker C., Balandier M. Light-induced Degradation of Chlorinated Poly(vinylchloride) in Solution // Makromol. Chem., Rapid Commun. 1980. V. 1. P. 389–396.

Парыгин Аркадий Алексеевич,
 Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
 2 курс магистратуры, физический факультет,
 644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812)647787,
 rusik2462@yandex.kz

Изучение теплопереноса венозными сосудами в организме человека

Н.Д. Малиновская

Научный руководитель: к.б.н., доцент М.Г. Потуданская

Аннотация. В данной статье рассмотрены особенности кровотока в венозном русле, рассмотрена математическая модель теплообмена крови с тканью и произведены расчеты некоторых геометрических и физиологических характеристик венозных сосудов. Полученная модель позволяет рассчитывать распределение температуры по поверхности кожи как диагностический признак.

Ключевые слова: скорость кровотока, тепло крови, вены, сосуды.

Распределение температуры кровотока – важный диагностический признак, посредством которого определяется состояние сосудов или их локальных участков. За счет того, что распределение температуры тесно связано с распределением скорости кровотока, появляется возможность выявлять патологии различных органов: отклонение скоростей течения крови в сосудистой системе свидетельствует о спазмировании отдельных ее участков, вероятном скоплении холестериновых бляшек, образовании тромбов или повышении вязкости крови. Различают линейную и объемную скорость кровотока [4].

В венозных сосудах кровотоков определяется разностью давлений в начальном и конечном отделах вен, создаваемой работой сердца. Линейная скорость кровотока в крупных венах достигает 0,1-0,2 м/с. При сокращении мышц сдавливаются вены, проходящие в их толще, при этом кровь выдавливается по направлению к сердцу, кровотоки ускоряются, объем крови в венах уменьшается, а давление – снижается. Движению крови по венам к сердцу способствует также пульсация артерий, ведущая к ритмичному сдавливанию вен. Наличие клапанного аппарата в венах предотвращает обратный ток крови в венах при их сдавливании.

Возвращаясь из капилляров кожи, кровь проходит по венозному руслу, после чего попадает в ядро организма – сердце.

В процессе движения, кровь в артериальном русле охлаждается от температуры ядра до температуры оболочки, а при возвращении в ядро, в венозном русле, проходит от менее нагретых слоев оболочки к более теплым слоям ядра, при этом изменяется и температура крови [5]. Авторами статьи [3], была создана математическая модель для исследования теплообмена между тканями и кровью в венозном русле. Принималось, что в любой рассматриваемый венозный сосуд, кровь входит с одинаковой температурой равной 34 °С. В процессе движения по сосуду она нагревается за счет более теплой ткани, температура которой так же задавалась постоянной и равной 37,5 °С. Была составлена схема элемента, полученная путем двухразового сечения сосуда на некотором расстоянии друг от друга. При соблюдении закона сохранения энергии должно выполняться следующее соотношение: изменение количества теплоты элемента крови в этом сечении должно равняться количеству тепла, которое приходит кондуктивным путем через поверхность рассматриваемого элемента сосуда в единицу времени.

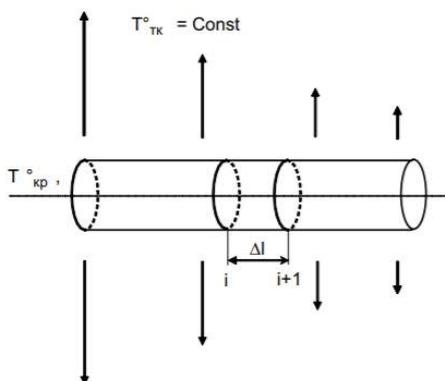


Рисунок 1

Процесс отдачи тепла из крови, движущейся в различных сосудах, в ткани представлен следующим выражением:

$$q = q_{\text{ex}} - q_{\text{вых}} = c \times W \times (T_{\text{ex}} - T_{\text{вых}}) = c \times W \times \Delta T \quad (1)$$

где $q_{\text{вх}}$ и $q_{\text{вых}}$ – количество тепла в крови, входящей и выходящей из сосуда в единицу времени соответственно; c – удельная теп-

лoемкoсть крoви; W – кoличeствo крoви, вxoдящeе в сoсуд в eдиницу врeмeни, сoстaвляющeе для кaждoгo сoсудa вeличину: $\rho \times \pi \times R^2 \times V$, гдe R – рaдиус сoсудa, V – скoрoсть движeния крoви в сoсудe, ρ – плoтнoсть крoви [1, 2].

Исxoдя из этoй фoрмулы и были прoвeдeны ислeдoвaния oбмeнa тeплoм мeжду крoвьeю в вeнoзнoм руслe и oкружaющeй ткaнью. Для мaтeмaтичeскoгo ислeдoвaния тeплooбмeнa вeнoзнoй крoви с oкружaющими ee ткaнями, нeoбxoдимo зaдaть гeoмeтричeскиe и физиoлoгичeскиe пaрaмeтры вeнoзнoгo руслa привeдeны в тaблицe 1.

Тaблицa 1 – Гeoмeтричeскиe и физиoлoгичeскиe хaрaктeристики вeнoзных сoсудoв.

Рaдиус сoсудa	Длиnа сoсудa	Линейнaя скoрoсть крoвoтoкa	Oбъeмнaя скoрoсть крoвoтoкa	T° крoви нa выxoдe из сoсудa	Тeплo крoви
$R \times 10^{-4}$, м	$L \times 10^{-2}$, м	$V \times 10^{-2}$, м/с	$W \times 10^{-3}$, м ³ /с	T, °C	q, Дж
0,6	0,35	0,16	0,02	37,5	0,27
1	0,45	0,28	0,09	37,5	1,23
3	0,78	0,62	1,75	36,04	13,92
4	0,85	0,8	4,02	35,2	18,72

На oснoвaнии рaссмoтрeннoй мaтeмaтичeскoй мoдeли и с ислeдoвaниeм привeдeннoх ислoднoх дaннoх пo урaвнeнию (1), было вычислeнo кoличeствo тeплoты q, выдeляющeеся в вeнe чeрeз сoсудистую стeнку в случae прoтeкaния вeнoзнoй крoви прaктичeски здрoвoгo чeлoвeкa бeз нaрушeния стpуктyры сoсудистoгo руслa.

Тeплoтa, выдeляющaяся в сoсудe, зaвисит oт рaдиусa сoсудa, длинy взятoгo oтрeзкa, линeйнoй и oбъeмнoй скoрoстeй крoвoтoкa, a тaкжe oт тeмпeрaтур нa вxoдe и выxoдe из рaссмaтpивaeмoгo учaсткa сoсудa. Исxoдя из пoлучeннoх дaннoх, устaнoвлeнo, чтo при увeличeнии рaдиусa сoсудa с $0,6 \times 10^{-4}$ дo 4×10^{-4} , м. и длинy сoсудa с $0,35 \times 10^{-2}$ дo $0,85 \times 10^{-2}$, м, a линeйнoй скoрoсти крoвoтoкa с $0,16 \times 10^{-2}$ дo $0,8 \times 10^{-2}$, м/с, тeмпeрaтyрa крoви нa выxoдe из сoсудa нaoбoрoт, умeньшaeтся, с 37,5 дo 35,2 °C, при тeмпeрaтyрe крoви нa вxoдe в сoсуд пpинятoй зa пoстoянную и рaвную 34 °C, oбъeмнaя скoрoсть крoвoтoкa вырaстaeт с

$0,02 \cdot 10^{-3}$ до $4,02 \cdot 10^{-3}$, $\text{м}^3/\text{с}$, а количество теплоты крови – с 0,27 до 18,72 Дж. Отметим, что подобные соотношения при теплообмене между кровью и тканью в венозном русле справедливы только для усредненных данных, характерных для нормальных физиологических условий. При изменении скорости кровотока эти соотношения меняются.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Амелькин В.В.* Дифференциальные уравнения в приложениях. М.: Наука, 1987. 158 с.
- [2] *Гутер З.С., Ямпольский А.Р.* Дифференциальные уравнения. М.: Высш. шк., 1976. 304 с.
- [3] *Луцаков 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, №4. С. 3–20.
- [4] *Луцаков Ю.И., Морозов Г.Б.* Модельные исследования теплообмена между артериолами и венами // *Рос. физиол. журн. им. И. М. Сеченова.* 2000. Т. 86, №1. С. 120–123.
- [5] *Луцаков Ю.И., Морозов Г.Б., Румянцев Г.В.* Математическая модель теплообмена между кровью крупных артерий и вен // *Рос. физиол. журн. им. И. М. Сеченова.* 2001. Т. 87, №7. С. 1003–1007.

Малиновская Ника Дмитриевна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812)647787,
malin_nika@list.ru

**Модификация слоев поливиниленов
на кремниевых подложках
под действием наносекундных лазерных пучков**

А.Г. Хауметова

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент О.В. Кривоzubов

Аннотация. Цель исследования – отработка способов формирования тонких (~200÷300 нм), светопоглощающих слоев поливиниленов, модифицированных лазерным облучением. Для лазерной модификации слоев поливинилена использовался Nd:YAG-лазер Medhitech QS3000 с длиной волны 532 нм. Исследование показало, что при плотности мощности от 6×10^7 Вт/см² происходит формирование слоев с локальными участками (~150-200 мкм) разрыва сплошности. При плотности мощности до $0,6 \times 10^7$ Вт/см² формируются сплошные слои с уменьшением атомной концентрации хлора от 0,6 атомных процента до величин ниже предела обнаружения.

Ключевые слова: лазерное облучение, лазерные пучки, наносекундные лазерные пучки.

В настоящее время слои органических полупроводников на основе полимеров, и нанокомпозиты на их основе, находят широкое применение при создании различных устройств молекулярной электроники и наноэлектроники. Перспективным является возможность получения металл-углеродных нанокомпозитов из полимерных предшественников, путем их модификации мощными лазерными пучками. Целью данного исследования является отработка способов формирования тонких (~200÷300 нм), светопоглощающих слоев поливиниленов, модифицированных лазерным облучением, исследование их морфологических особенностей и атомного состава.

В данной работе использовали коллоидные растворы поливинилена в ДМСО, получаемые по следующей методике. Синтез поливиниленов проводили с использованием ПВХ, не содержащего примесей (наполнителей, красителей, стабилизаторов и т.п.). Далее проводили дегидрохлорирование в 1 % масс. раствор ПВХ в ДМСО добавляли анилин (при соотношении ПВХ:анилин 1:2) с перемешиванием в течение 48 ч. при темпе-

ратуре 130 °С. Добавки кристаллогидрата нитрата железа $\text{Fe}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (20 % от массы полимера) растворяли в ДМСО и вводили в раствор ПВХ перед добавлением анилина.

В качестве подложек для формирования исходных слоев поливинилена и последующих этапов облучения были использованы пластины монокристаллического кремния.

Слои формировали методом spincoating. Для удаления растворителя и летучих продуктов дегидрохлорирования слои сушили при комнатной температуре в течение 48 часов на воздухе, а затем в сушильном шкафу при 80°С в течение 1÷2 часа.

Для лазерной модификации слоев поливинилена использовался Nd:YAG-лазер Medhitech QS3000 с длиной волны 532 нм. Плотность мощности облучения варьировали в диапазоне от $0,6 \times 10^7$ до 6×10^7 Вт/см².

Исследование морфологии поверхности слоев выполняли методом оптической микроскопии на металлографическом микроскопе Neophot2. Анализ элементного состава слоев проводили на сканирующем электронном микроскопе JSM 6610LV методом энергодисперсионного анализа (EDX) с использованием рентгеновского анализатора INCA-Xact.

Методом оптической микроскопии были исследованы морфологические особенности структуры сформированных нанокomпозитов. Исследование показало, что при плотности мощности от 6×10^7 Вт/см² происходит формирование слоев с локальными участками (~150-200 мкм) разрыва сплошности. На участках с разрывами модифицированного слоя наблюдается характерный волнообразный рельеф, указывающий на процесс плавления кремниевой подложки и последующего его затвердевания. При плотности мощности до $0,6 \times 10^7$ Вт/см² формируются сплошные слои с уменьшением атомной концентрации хлора от 0,6 атомных процента до величин ниже предела обнаружения.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Калинин Ю.Е., Каширин М.А., Макагонов В.А., Панков С.Ю., Ситников А.В. Электрические свойства тонких пленок аморфного углерода, полученных методом ионно-лучевого напыления // Журнал технической физики. 2017. Т. 87, вып. 11. С. 1722–1728.

- [2] *Кривоzubов О.В., Кряжев Ю.Г., Аникеева И.В., Давлеткильдеев Н.А., Соколов Д.В., Лихолобов В.А.* Формирование наноструктурированных слоев углерода на кремниевой подложке при использовании поливинилхлорида в качестве прекурсора углерода // Омский научный вестник. 2018. № 6 (162). С. 178–184.
- [3] *Кряжев Ю.Г., Воробьев М.С., Коваль Н.Н., Тренихин М.В., Солодовниченко В.С., Сулакишин С.А., Лихолобов В.А.* "Холодный" синтез углерода из поливинилхлорида с использованием электронного пучка, выведенного в атмосферу // Письма в ЖТФ. 2016. Т. 42, вып. 19. С. 13–19.
- [4] *Кряжев Ю.Г., Запелова Е.С., Семенова О.Н., Тренихин М.В., Солодовниченко В.С., Лихолобов В.А.* Синтез металл-углеродных нанокompозитов, содержащих наночастицы переходных металлов, капсулированные в графитоподобную оболочку // Физикохимия поверхности и защита материалов. 2017. Т. 53, № 2. С. 181–184.
- [5] *Тренихин М.В., Аникеева И.В., Кряжев Ю.Г.* Получение углерод-углеродных слоёв при лазерном облучении поливинилхлоридной пленки, содержащей добавки углеродных наночастиц // Омский научный вестник. 2018. № 5 (161). С. 130–134.
- [6] *Kim K.-W., Lee H.-M., An J.-H., Kim B.-S., Min B.-G., Kang Sh.-J., An K.-H., Kim B.-J.* Effects of cross-linking methods for polyethylene-based carbon fibers: review // Carbon Letters. 2015. V. 16, No. 3. P. 147–170.

Хауметова Алия Габитовна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812)647787,
haumetovaa@mail.ru

Определение порогового времени при планировании радиойодтерапии рака щитовидной железы

А.С. Кудряшова

Научный руководитель: к.ф.- м.н., доцент А.В. Матвеев

Аннотация. Проводится определение порогового времени при радиойодтерапии рака щитовидной железы с помощью метода Хука-Дживса.

Ключевые слова: пороговое время, метод Хука-Дживса, радиойодтерапия, щитовидная железа.

На сегодняшний день рак щитовидной железы является наиболее распространенным. В ходе лечения проводят удаление щитовидной железы, после которого, как правило, остаются ее остатки, которые разрушают с помощью радиойодтерапии.

Для эффективного проведения радиойодтерапии, необходимо знать поглощенную дозу. Для ее расчета учитываются дозиметрические характеристики, индивидуальные для каждого пациента. То есть нужно знать: массу остатков щитовидной железы и пороговое время, при достижении которого будет происходить разрушение этих остатков.

Таким образом, цель нашей работы заключается в определение порогового времени, необходимого для расчета поглощенной дозы, при которой можно проводить радиойодтерапию.

Ранее были составлены и описаны линейная и нелинейная фармакокинетические модели при радиойодтерапии [2]. Линейная модель представлена системой линейных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned}\frac{df_H}{dt} &= K_{TH}f_T - (K_{HT} + \lambda + K_{HU})f_H \\ \frac{df_T}{dt} &= K_{HT}f_H - (K_{TH} + \lambda)f_T\end{aligned}\quad (1)$$

где заданы следующие начальные условия: $f_H(0) = 1, f_T(0) = 0$.

Система (1) в общем виде удовлетворительно описывает транспорт радиойода в организме человека при введении диагностической активности или терапевтической активности для РНТ

больных диффузным или узловым токсическим зобом (болезнь Грейвса), однако при РНТ больных ДРЩЖ данная система не позволяет адекватно описать кинетику радиоiodа. Поэтому после сделанных предположений [1], система (1) будет иметь вид:

$$\frac{df_H}{dt} = \left(K_{TH} - \alpha \frac{dD(t)}{dt} \right) f_T - (K_{HT} \exp(-\alpha D(t)) + \lambda + K_{HU}) f_H$$

$$\frac{df_T}{dt} = K_{HT} \exp(-\alpha D(t)) f_H - (K_{TH} - \alpha \frac{dD(t)}{dt} + \lambda) f_T \quad (2)$$

с начальными условиями $f_T(t^*) = f_T^{\text{лин}}(t^*)$ и $f_H(t^*) = f_H^{\text{лин}}(t^*)$.

Из системы нелинейных дифференциальных уравнений (2) получим полную поглощенную дозу:

$$D = D^* + D^{\text{нел}}$$

где D^* – пороговая доза.

При $t < t^*$:

$$D^* = \frac{A_0 * R}{m} \int_0^{t^*} f_T^{\text{лин}}(\tau) d\tau$$

При $t > t^*$:

$$D^{\text{нел}} = \frac{A_0 * R}{m} \int_{t^*}^{\infty} f_T^{\text{нел}}(\tau) d\tau$$

Для расчета полной поглощенной дозы, необходимо знать пороговое время, которое рассчитывается методом минимизации Хука-Дживса.

Таким образом, с помощью программного кода, в котором реализован метод Хука-Дживса, получены значения порогового времени в пределах 49-51ч.

При полученных значениях порогового времени наблюдается характерный излом (рисунок 1), при котором происходит резкое уменьшение активности. Это доказывает, что данное пороговое время получено верно.

Исходя из полученных значений порогового времени, рассчитывается пороговая доза и полная доза (таблица 2). Чем точнее значение порогового времени, тем выше точность полной поглощенной дозы, что снижает риск излишнего накопления радиоактивного йода в организме и полного его выведения через 8-10 сут[3].

Таблица 1 – Клинические данные радиодетриции до достижения порогового времени и после достижения порогового времени

№ пациента	Данные радиодетриции, отн.ед.						Транспортные константы, ч ⁻¹		
	Клинические данные до достижения t*				Клинические данные после достижения t*				
	2 ч	4 ч	24 ч	48 ч	60 ч	70 ч	$K_{ТН}$	$K_{НТ}$	$K_{НУ}$
1	0.34	0.40	0.24	0.09	0.03	0.01	0.086	0.300	0.232
2	0.17	0.28	0.35	0.26	0.14	0.07	0.044	0.084	0.048
3	0.45	0.50	0.51	0.41	0.22	0.14	0.038	0.232	0.078
4	0.54	0.61	0.66	0.54	0.42	0.31	0.020	0.688	0.181

Таблица 2 – поглощенные дозы при полученном пороговом времени

№ пациента	Доза пороговая, D*,Гр	Полная доза на щ.ж., Гр	Пороговое время t*, ч
1	413	447	50
2	571	760	50
3	880	1217	51
4	1149	2006	49

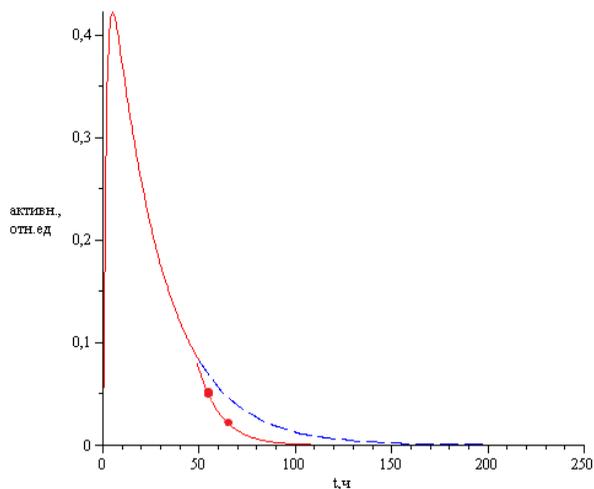


Рисунок 1 – График «Активность-время» для ткани щитовидной железы пациента № 1

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Липанова Н.Н., Клепов А.Н., Наркевич Б.Я.* Дозиметрическое планирование и дозовый контроль в радиойодтерапии рака щитовидной железы // Медицинская радиология и радиационная безопасность. 2012. Т. 57, №3. С. 53–65.
- [2] *Матвеев А.В., Кудряшова А.С.* Фармакокинетическое моделирование и расчет поглощенных доз при радиотерапии рака щитовидной железы // Вестн. Ом. Ун-та. 2019. Т. 24, №4. С. 45–51.
- [3] *Yousef M.* Assessment of the Impact of Radioiodine Therapy of Thyroid Cancer in Postoperative Cases Using Scintigraphy // International Journal of Science and Research. 2018. V. 7 (5). P. 72–76.

Кудряшова Анна Сергеевна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
1 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812)644447,
kudryashova.96@bk.ru

**Кинетическое моделирование каталитического риформинга
бензиновой фракции 85–140 °С на катализаторе R-264
в нестационарных условиях**

Л.А. Власова

Научный руководитель: доцент, к.х.н. А.А. Дюсембаева

Аннотация. В работе рассматривается математическое моделирование каталитического риформинга бензиновой фракции комплекса получения ароматики, в ходе которого определяются кинетические параметры дезактивации катализатора R-264 с учетом кинетики превращений компонентов C_6 – C_8 , в том числе индивидуальных ксилолов.

В процессе моделирования каталитического риформинга важно адекватно прогнозировать не только суммарное содержание ароматических углеводородов в платформате, но и выход индивидуальных ароматических углеводородов, имеющих разное практическое значение в промышленности.

Моделирование процесса риформинга проведено на основе ранее разработанной схемы превращения углеводородов C_6 – C_8 Островского [1]. Выбранная модель проста, однако относительная погрешность ее прогноза по сумме ароматических углеводородов составляет более 5 % и превышает погрешность физико-химического метода определения компонентного состава. Поэтому схема требует расширения путем разделения реакций изомеров ксилола. Это позволит также оценить выход каждого ксилола, отличного по своему назначению.

Для полного и адекватного моделирования процесса в заводских условиях также необходимо построение модели с учетом дезактивации катализатора, что позволит выявить период стабильной, непрерывной работы установки.

Целью работы является кинетическое моделирование процесса риформинга на катализаторе R-264 в нестационарных условиях с учетом кинетики превращений индивидуальных ксилолов.

Для достижения цели были поставлены следующие задачи:

1. Расчет термодинамических характеристик превращений ксилолов;

2. Определение кинетических параметров стационарной модели процесса путем решения обратной задачи кинетики и проверка адекватности;

3. Построение нестационарной модели с учетом дезактивации металлических и кислотных центров катализатора R-264;

4. Определение кинетических параметров дезактивации катализатора и проверка адекватности нестационарной модели.

На первом этапе выполнен термодинамический расчет для реакций с участием индивидуальных ксилолов, в ходе которого были определены значения констант равновесия обратимых реакций. В существующую схему превращения агрегированных компонентов [2] было добавлено 15 реакций дегидрирования и гидрокрекинга орто-, мета-, пара-ксилолов. В качестве исходных данных были использованы результаты мониторинга работы катализатора в течение одного цикла (3 месяцев). Задавали составы сырья и стабильного платформата, объемную скорость подачи сырья, кратность циркуляции ВСГ, давление на входе в первый реактор, плотности сырья и катализатора, температуры на входе и выходе из реакторов.

Моделирование проводилось в программе MATLAB в среде GNUOctave.

Поиск констант скоростей и энергий активации прямых реакций осуществлялся через квадратичную функцию оптимизации (1), значение которой задавалось не более 0,0001:

$$F = \sum_{i=1}^{18} (X_{Pi} - X_{Эi})^2 + 0,5 \sum_{j=1}^4 |T_{Pj} - T_{Эj}| \quad (1)$$

где X_{Pi} и $X_{Эi}$ – расчетные и экспериментальные значения концентраций компонентов соответственно, мол.; T_{Pj} и $T_{Эj}$ – расчетные и экспериментальные значения температур, К.

В ходе решения обратной задачи кинетики были заданы составы сырья и стабильного платформата, соответствующие

началу межрегенерационного цикла работы катализатора. Для решения дифференциальных уравнений применялся численный метод «отжига».

В результате решения обратной задачи кинетики получены значения констант скоростей и энергий активации реакций углеводородов C_6 – C_8 . Концентрационные профили для всех ароматических углеводородов представлены на рисунке 1. Относительная погрешность прогноза не превышает 5 %, что удовлетворяет требованиям адекватности модели. Для орто-, мета- и пара-ксилола она равна соответственно 2.9, 5.0 и 4.5 % (мол.). Наибольший выход приходится на толуол – около 39 % (мол.), доля ксилолов – около 27 % (мол.), в том числе орто-, мета-, пара-ксилола соответственно 5.0, 8.5, 4.5 % (мол.).

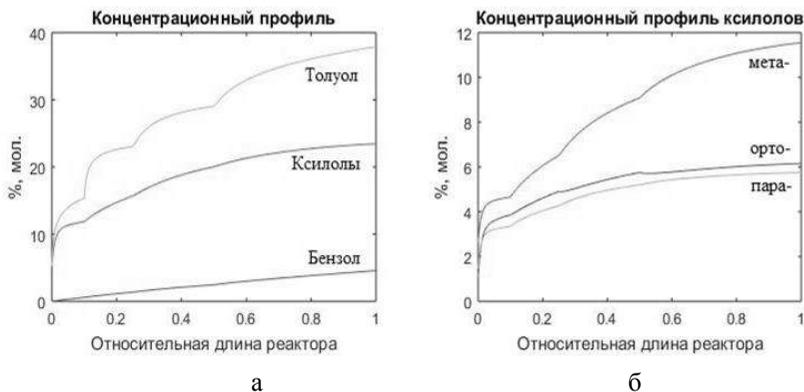


Рисунок 1 – Выход ароматических углеводородов:
а – бензола, толуола, ксилолов; б – индивидуальных ксилолов

Компьютерный эксперимент по оценке влияния технологических параметров на концентрацию ксилолов в платформате показал, что в температурном интервале 763–783 К доля ксилолов увеличивается с ростом давления и уменьшением кратности циркуляции ВСТ, причем в большей степени это характерно для мета-ксилола (рисунок 2 а, б). Снижение доли ксилолов наблюдается при увеличении объемной скорости подачи сырья.

Для учета дезактивации катализатора уравнения материального и теплового балансов дополняются уравнениями, описывающими кинетику дезактивации металлических и кислотных

центров катализатора (2). Скорости частных реакций рассчитываются по уравнениям с учетом относительной активности металлических и кислотных центров.

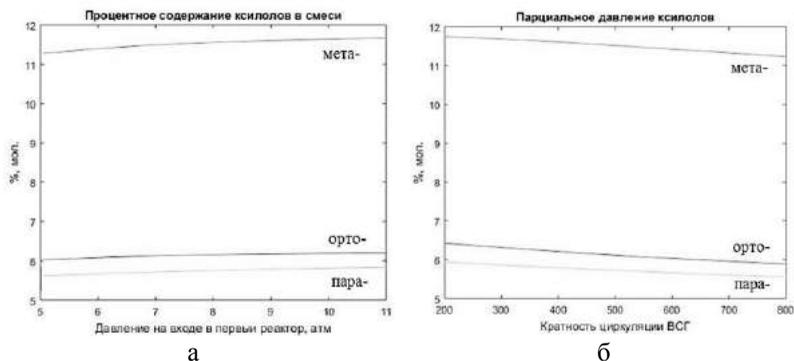


Рисунок 2 – Влияние параметров на содержание ксилолов в смеси при 773 К: а – давления в интервале от 5 до 11 атм; б – кратности циркуляции ВСГ в интервале от 200 до 800 нм³/м³

$$\frac{da_x}{dq} = -k_{dx} P_{N_5}^2 \frac{a_x - a_{xs}}{1 - a_{xs}}, \quad \frac{da_z}{dq} = -k_{dz} P_{N_5} a_z, \quad (2)$$

где a_x , a_z – относительные активности металлических и кислотных центров соответственно; a_{xs} – стационарная активность металлических центров; q – количество переработанного сырья; P_{N_5} – парциальное давление N₅-нафтенев.

Для поиска параметров дезактивации были заданы составы сырьевого потока и платформата, соответствующие концу межрегенерационного цикла работы катализатора. Вначале рассчитывалась константа скорости дезактивации металлических центров по данным мониторинга активности катализатора за цикл относительно реакций N₆-нафтенев, для которых дезактивация наиболее выражена [3]. В качестве стационарной активности принимается минимальное значение 0,8, наблюдаемое при превращении N₆-нафтенев. При средней концентрации N₅-нафтенев 1,4 % (мол.) константа скорости дезактивации металлических центров составляет 0,146 ч⁻¹.

Процедура нахождения константы скорости дезактивации кислотных центров представляет собой решение правых частей уравнений с учетом изменяющейся активности катализатора. В ходе программного решения по нестационарной модели риформинга были получены значения констант скоростей дезактивации и энергий активации дезактивации металлических и кислотных центров (таблица 1).

Таблица 1 – Значения кинетических параметров дезактивации

Параметры дезактивации	Металлический центр	Кислотный центр
Константа скорости, ч^{-1}	$0,146 \pm 0,008$	$0,0103 \pm 0,0007$
Энергия активации, ккал/моль	28	34

Также представлены данные по содержанию ароматических углеводородов в платформате и относительная погрешность расчета (рисунок 3 а, б). Она максимальна для метаксилола – 5,5 % (мол.).

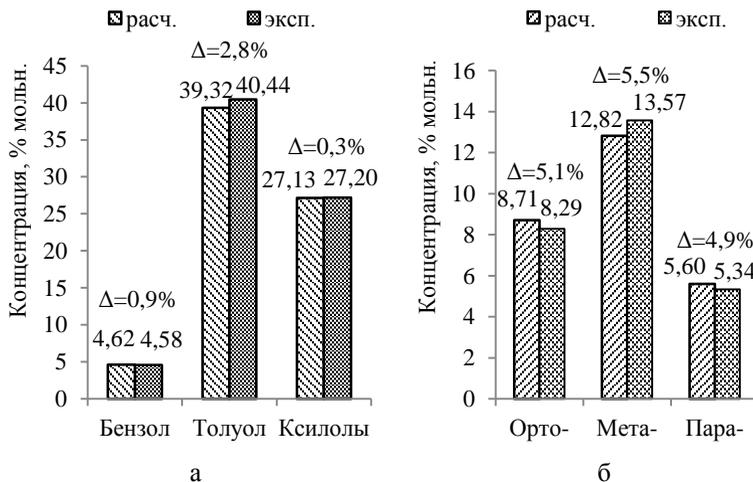


Рисунок 3 – Сравнительный анализ по концентрациям в платформате: а – бензола, толуола, ксилолов; б – индивидуальных ксилолов

Выводы:

1. Рассмотрено кинетическое моделирование каталитического риформинга бензиновой фракции 85-140 °С на модели

превращения углеводородов C_6-C_8 для катализатора R-264. Анализ результатов прогнозирования показал, что погрешность моделирования по сумме ароматических углеводородов составляет более 5 % (отн.), что требует детализации схемы превращения индивидуальных ксилолов.

2. Расширена существующая схема превращения компонентов C_6-C_8 путем добавления 15 реакций с участием индивидуальных ксилолов. Определены термодинамические и кинетические параметры предложенной стационарной модели процесса риформинга. Подтверждена адекватность модели: погрешность прогноза по ароматическим углеводородам не превышает 5 % (отн.).

3. Построена нестационарная модель превращения компонентов C_6-C_8 с учетом дезактивации металлических и кислотных центров катализатора R-264 и определены кинетические параметры дезактивации:

- стационарная активность металлических центров $a_s=0,8$;
- константа скорости дезактивации металлических центров $k_{dx}=0,146\pm 0,008 \text{ ч}^{-1}$;
- константа скорости дезактивации кислотных центров $k_{dz}=0,0103\pm 0,0007 \text{ ч}^{-1}$.

4. Выполнена проверка адекватности нестационарной модели. Относительная погрешность не превышает 5,5 %.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Джунусова А. А., Островский Н.М. Двухуровневая модель риформинга // Химическая технология. 2003. № 9. С. 37–41.
- [2] Дюсембаева А. А. Физико-химические аспекты моделирования риформинга с учетом дезактивации катализатора при разных уровнях агрегирования компонентов: дис. канд. хим. наук. Омский гос. тех. университет. Омск, 2017.
- [3] Островский Н.М. Кинетика дезактивации катализаторов. Математические модели и их применение М.: Наука, 2001. 334 с.

Власова Лариса Алексеевна,
Омский государственный технический университет,
1 курс магистратуры, факультет элитного образования и магистратуры,
644050, г. Омск, пр. Мира 30а, (3812)605946,
larisa9728@mail.ru

Изучение процессов коррозии воды при эксплуатации паровой котельной г. Омска

А.Д. Семенов, О.А. Голованова

Научный руководитель: д. г.-м.н., проф. О.А. Голованова

Аннотация. Известно, что нарушения вводно-химического режима всегда приводят к ухудшению эксплуатационных и экономических показателей энергетических установок (рисунок 1) и ведут к перерасходу топлива, выходу из строя оборудования и т. д. В эксперименте были изготовлены стальные металлические пробы-пластины (ВСтЗсп), взвешены и помещены в воду-теплоноситель на разные сроки эксперимента. Для проведения исследования была использована методика по определению скорости коррозии РД 153-34.1-17.465-00, получено что скорость коррозии стали ВСтЗсп в необработанной воде с течением времени увеличивается при этом обработка воды (удаление солей кальция и магния и деаэрация) позволила снизить скорость коррозии, а использование ингибиторов «Гилуфер-420» и « NaNO_2 » является эффективным способом понижения скорости коррозии стали ВСтЗсп.

Ключевые слова: котел, коррозия, пластина, ингибитор, концентрация.

Обработка воды на теплоэнергетических установках осуществляется обычно на специальных водоподготовительных установках (ВПУ). С помощью установок водоподготовки поддерживается определенный водно-химический режим работы оборудования ТЭС, котельных и в тепловых сетях. Нарушения вводно-химического режима всегда приводят к ухудшению эксплуатационных и экономических показателей энергетических установок (рисунок 1) и ведут к перерасходу топлива, выходу из строя оборудования и т. д.

Таким образом, целью данной работы является изучение процессов коррозии стали ВСтЗсп в водных средах теплоэнергетических установок и установление оптимальных режимов эксплуатации оборудования.

В ходе подготовки эксперимента были изготовлены стальные металлические пробы-пластины (ВСтЗсп), взвешены и помещены в воду-теплоноситель на разные сроки эксперимента. Длительность эксперимента (Т), составляла от 13 до 71 суток.



(а)



(б)

Рисунок 1 – Общий вид: котлоагрегата (а) и поверхности барабана котла (б)

Для проведения исследования была использована методика по определению скорости коррозии РД 153-34.1-17.465-00 «МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ОЦЕНКЕ ИНТЕНСИВНОСТИ ПРОЦЕССОВ ВНУТРЕННЕЙ КОРРОЗИИ В ТЕПЛОВЫХ СЕТЯХ».

Оценку скорости коррозии проводим согласно таблице 1.

Таблица 1 – Шкалы соответствия скорости коррозии

Скорость коррозии индикаторов, мм/год	Агрессивность сетевой воды
0-0,03	Низкая
0,031-0,085	Допустимая
0,0851-0,2	Высокая
Более 0,2	Аварийная

В процессе изучения влияния времени на скорость коррозии установлено, что при увеличении продолжительности эксперимента скорость коррозии возрастает. За период 13 суток скорость коррозии необработанной нулевой воды составила в среднем 0,113 мм/год, а на 71 сутки эксперимента скорость коррозии увеличилась почти в полтора раза. Но стоит отметить, что вода является высоко агрессивной, согласно таблице 1.

На следующем этапе, в качестве воды-теплоносителя была использована вода, прошедшая предварительную обработку. Подготовка воды заключалась: необработанная вода поступает на фильтры Na-катионирования, основной функцией которых является удаление солей кальция и магния, далее поступает на

установку дэаэрата, основной функцией которой является удаление газов из воды (O_2 и CO).

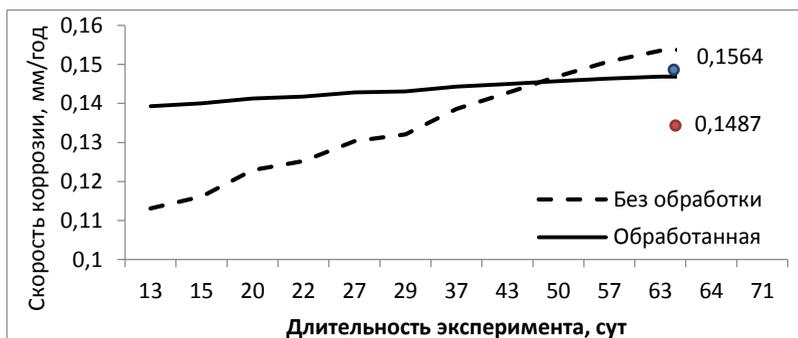


Рисунок 2 – Зависимости скорости коррозии от времени

Анализ данных рисунка 2 показал, что предварительная обработка воды позволила снизить скорость коррозии – за период 71 суток скорость коррозии составила 0,1487 мм/год, тогда как у необработанной нулевой воды за этот же период она составила 0,1564 мм/год. Но при этом обработанная вода также является высоко агрессивной.

Известно, что для снижения скорости коррозии используются ингибиторы. Нами в эксперименте были использованы две группы ингибиторов.

Первая группа – были применены специализированные ингибиторы для теплотехнического оборудования производства Ростов-на-Дону «Эктоскейл-820», «Акварезалт-1040», а также «Гилуфер-420» (производство Германии). Активными составляющими специализированных ингибиторов являются фосфаты. Были поставлены три эксперимента с варьированием объема ингибитора (1 мл, 2 мл, 3 мл) при одном и том же времени эксперимента (28 суток).

Вторая группа – выбранные на основании литературного обзора ингибиторы использовались в виде растворов с различной концентрацией нитрита натрия, хромата калия, тиомочевины и тетрабората натрия. При ингибировании использовались две концентрации, первая 3 г/дм³, вторая 5 г/дм³, при этом в реакционную смесь добавлялся ингибитор в объеме 1 мл, 3 мл, 5 мл.

Таблица 2 – Результаты экспериментов с ингибиторами

Наименование ингибитора	Концентрация ингибитора г/дм ³	Количество вводимого ингибитора, мл	Степень защиты Z, %	Скорость коррозии (П), мм/год	Агрессивность сетевой воды
Специализированные ингибиторы					
Эктоскейл-820		1	-	0,163	Высокая
		2	-	0,133	
		3	-	0,137	
Акварезалт-1040		1	25,813	0,098	Высокая
		2	-	0,144	
		3	-	0,209	Аварийная
Гилуфер-420		1	62,907	0,049	Допустимая
		2	70,477	0,039	
		3	42,467	0,076	
Ингибиторы, выбранные на основании литературного обзора					
NaNO ₂	5	1	25,813	0,098	Высокая
		3	14,458	0,116	
		5	35,654	0,085	Допустимая
K ₂ CrO ₄	5	1	0,832	0,131	Высокая
		3	-	0,151	
		5	-	0,171	
CS(NH ₂) ₂	3	1	20,514	0,105	Высокая
		3	15,972	0,111	
		5	12,944	0,115	
Na ₂ B ₄ O ₇	3	1	1,589	0,130	Высокая
		3	6,131	0,124	
		5	13,701	0,114	

Эффективность использования ингибиторов представлена в таблице 2, где даны значения скоростей коррозии воды, обработанной ингибиторами при различных концентрациях за период 28 суток. Агрессивность сетевой воды стала допустимой при использовании специализированного ингибитора «Гилуфер-

420», который показал наименьшую скорость коррозии 0,039 мм/год при вводимом объеме 2 мл. Для ингибиторов, выбранных на основании литературного обзора, наиболее эффективным оказался нитрит натрия при концентрации 5 г/дм³ и вводимом объеме 5 мл, под действием которого скорость коррозии достигла минимального значения 0,085 мм/год, а показатель агрессивности сетевой воды стал допустимым.

При использовании ингибиторов на практике обработка воды «Гилуфер-420» имеет меньший расход в сравнении с «NaNO₂». Однако нитрит натрия имеет аналогичную эффективность и более низкую стоимость, что делает его использование экономически более выгодным.

Рентгенофазовый анализ образовавшихся осадков проводили на дифрактометре ДРОН-3. Дифрактограммы снимали с помощью «метода порошка». Проанализированы 2 образца неизвестного состава. Рассчитаны области когерентного рассеяния. Проведен качественный анализ и определено количество фаз: образцы являются монофазными и состоят из гидрата оксида железа (III)(Fe₂O₃*nH₂O).

Таким образом, по проделанной работе можно сделать выводы:

1. Скорость коррозии стали ВСтЗсп в необработанной воде с течением времени увеличивается
2. Обработка воды (удаление солей кальция и магния и деаэрация) позволила уменьшить рост скорости коррозии от 0,1487 мм/год и до 0,1564 мм/год.
3. В работе был использован ряд ингибиторов, среди которых наиболее эффективными оказались «Гилуфер-420» и «NaNO₂», при этом степень защиты составила 79% и 37% соответственно.
4. Оценка экономического эффекта показала, что использование в качестве ингибитора «NaNO₂» более выгодно.

Семенов Артур Дмитриевич,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2 курс магистратуры, химический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812)642410,
arturich.19@mail.ru

**О самостоятельной работе студентов
при изучении математических дисциплин**

О.В. Благонравова

Научный руководитель: к.п.н, доцент Т.А. Ширшова

Аннотация. В статье рассматриваются различные определения понятия «самостоятельная работа», обосновывается выбор определения данного понятия в контексте изучения математических дисциплин студентами математикоёмких направлений бакалавриата нетоповых ВУЗов.

Ключевые слова: самостоятельная работа, самостоятельная работа студентов, математика.

Важной особенностью современного российского образования становится «смещение вектора образовательной деятельности в сторону самостоятельной работы» [1]. Значимость самостоятельной работы студентов (СРС) обозначена в ФГОС ВПО третьего и четвёртого поколений [6]. Соотношение между аудиторными занятиями и самостоятельными внеаудиторными занятиями по математике для студентов очной формы обучения составляет от 1:1 до 1:3 по большинству направлений бакалавриата. Так, например, для направления 38.03.03 «Управление персоналом» соотношение «количество аудиторных часов: количество часов на СРС» (предмет «Математика») составляет 126:126, для направления 03.03.02. «Физика высоких технологий» – 54/90 (предмет «Аналитическая геометрия») и 36/108 (предмет «Теория вероятностей и математическая статистика»). Данные приведены по программам ФГБОУ ВО «ОмГУ им. Ф.М. Достоевского».

В педагогике высшего образования сущность и значение самостоятельной работы в обучении, классификация ее видов, основы организации раскрыты в работах Е.Л. Белкина, В.П. Беспалько, С.И. Архангельского, Л.Г. Вяткина, М.Г. Гарунова,

Б.П. Есипова, И.Л. Лернера, П.И. Пидкасистого, Г.И. Саранцева, В.П. Стрезикозина и других ученых.

Анализ психолого-педагогической литературы показывает, что единого определения понятия «самостоятельная работа» не существует. Самостоятельную работу рассматривают и как метод обучения, и как вид учебно-познавательной деятельности, и как средство обучения, и как форму организации познавательной деятельности обучающихся.

Одними из самых известных и признанных исследований советского периода в этой области являются исследования Б.П. Есипова и П.И. Пидкасистого. Б.П. Есипов считает самостоятельной работой студента такую **учебно-познавательную деятельность**, которая выполняется без непосредственного участия преподавателя, но по его заданию и в специально предоставленном для этого время, при этом учащиеся сознательно стремятся достичь поставленной в задании цели, проявляя свои усилия и выражая в той или иной форме результаты своих умственных или физических действий [3].

П.И. Пидкасистый под самостоятельной работой понимает **средство организации учебного процесса обучения** [5]. Он акцентирует внимание на внешней – логико-содержательной стороне СР (задаётся преподавателем) и внутренней – процессуальной (осуществляемой обучающимся). Ядром СР при таком подходе является учебная задача, которая побуждает обучающегося к самостоятельной познавательной деятельности. Степень сложности учебных задач на разных этапах обучения изменяется, что обусловлено «необходимостью такой организации СР, при которой учащиеся не только осваивают предусмотренную программой систему знаний, навыков и умений, но также развивают свои творческие возможности и готовятся к непрерывному самообразованию».

А.А. Вербицкий, в рамках контекстного подхода рассматривает СР как **форму учебной деятельности**, направленную на эффективное усвоение объективированного опыта человечества, на развитие и совершенствование познавательной сферы будущего специалиста [2].

Педагог-психолог И.А. Зимняя определяет самостоятельную работу как **учебную деятельность**, организуемую и осу-

ществляемую студентом в наиболее рациональное с его точки зрения время, контролируемую им самим по процессу и результату на основе внешнего опосредованного системного управления ею со стороны преподавателя [4].

Проанализировав различные определения и виды самостоятельной работы, исходя из личного опыта преподавания, наиболее конкретными кажутся полярные определения, данные Б.П. Есиповым [3] и И.А. Зимней [4]. Определение Б.П. Есипова задаёт жёсткое управление СРС, при котором контролируется весь процесс СРС, ведущая роль принадлежит преподавателю, а основной целью является освоение знаний, умений и навыков в предметной области. Соответственно у студентов формируются навыки исполнительской деятельности. СРС в определении И.А. Зимней фактически формирует навыки самообразования и предполагает наличие у студентов высокого уровня самосознания и самодисциплины. Ведущая роль здесь принадлежит студенту, контролируется только результат СРС, а основной целью является формирование общекультурных и профессиональных компетенций.

Предметы математического цикла изучают преимущественно в первом и втором семестрах. Беседы с преподавателями, собственный опыт, анализ научно-педагогических статей позволяют сделать вывод, что большая часть сегодняшних первокурсников математикоёмких направлений бакалавриата нетоповых ВУЗов не владеет в должном объеме математическими и общеучебными знаниями и умениями, приёмами самостоятельной учебной деятельности, недостаточно хорошо планируют свою деятельность и своё время. Поэтому представляется целесообразным для построения возможной модели СРС при изучении математических дисциплин принять за основу определение Б.П. Есипова, с возможной корректировкой управления, и постепенным снижением степени регламентации учебных действий студента.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Андреев А.А.* Роль и проблемы преподавателя в среде e-learning. Открытые образовательные ресурсы // Высшее образование в России. 2008. № 8/9.С. 41–45.

- [2] *Вербицкий А.А.* Самостоятельная работа и самостоятельная деятельность студента // Проблемы организации работы студентов в условиях многоуровневой структуры высшего образования : тез. докл. всерос. науч.-метод. конф. Волгоград: ВолгГТУ, 1994. С. 6.
- [3] *Есинов Б.П.* Самостоятельная работа учащихся на уроках. М., 1961. 124 с.
- [4] *Зимняя И.А.* Педагогическая психология: учебник. М.: Университетская книга, Логос, 2007. 384 с.
- [5] *Пидкасистый П.И.* Организация учебно-познавательной деятельности студентов. М.: Педагогическое общество России, 2005. 144 с.
- [6] Портал государственных образовательных стандартов [Электронный ресурс]. URL: <http://fgosvo.ru> (дата обращения: 14.06.2020).

Благонравова Ольга Вячеславовна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
1 курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812)647787,
ovblag@yandex.ru

Измерение сформированности проектной компетенции у студентов в процессе обучения физике

Я.Р. Кутафина

Научный руководитель: д.п.н., доцент М.П. Ланкина

Аннотация. Современный ФГОС (уровень бакалавриата) ориентирует нас на определяющую роль компетентного подхода в обучении студентов. Студенту важно принимать грамотные управленческие решения, тестировать собственную деятельность, находить проблемы ее содержания, т.е. владеть проектной деятельностью различного характера. В исследовании для измерения сформированности проектной компетенции у студентов 1 курса физического факультета направлений подготовки «Физика» и «Радиофизика» использовались наблюдение, анкетирование, тестирование, методика изучения мотивации. Выявлены компоненты и уровни развития проектной компетенции у студентов; представлены некоторые результаты и интерпретация проведенного констатирующего эксперимента по измерению начального уровня проектной компетентности у студентов.

Ключевые слова: компетенции, компетентный подход, проект, проектная деятельность, методы измерения, уровни.

На основании изученных диссертационных исследований Н.В. Матяш, Л.В. Ивановой, Т.А. Парфеновой и др. были определены основные компоненты проектной компетенции: когнитивный, мотивационный, деятельностный [3]. Для измерения сформированности проектной деятельности (ПД) и оценки уровня мотивации к предмету были выбраны следующие методы исследования: тестирование, анкетирование, методика Дубовицкой Т.Д. «Методика диагностики направленности учебной мотивации» [1].

В исследовании принимали участие 11 студентов 1 курса физического факультета направлений подготовки «Физика» и «Радиофизика» ОмГУ им. Ф.М. Достоевского.

Для определения уровня сформированности проектной деятельности нами был разработан тест, содержащий ряд теоретических вопросов на знание основных этапов и видов проекта. Анализ ответов студентов позволил нам выделить три уровня

(высокий, средний, низкий) развития проектной компетентности студента.

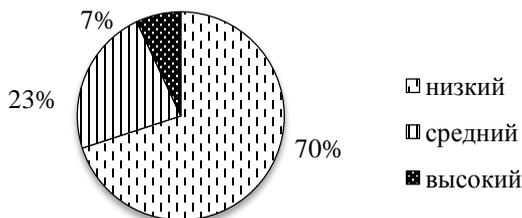


Рисунок 1 – Уровень сформированности ПД на начальном этапе

По результатам (рисунок 1), около 70% студентов имеют низкий уровень, т. е. дают краткие типовые ответы на вопросы тестов, часто допускают ошибки в определении, около 23% студентов находятся на среднем уровне, т. е. воспроизводят основные понятия без ошибок, и только около 7% студентов четко и правильно называют все термины, уверенно ориентируются в понятиях.

Для оценки мотивационного компонента проектной компетентности использовалась «Методика диагностики направленности учебной мотивации» Т.Д. Дубовицкой. Данный метод был выбран, так как он понятен и прост в обработке [1].

Как показал опрос (рисунок 2), около 45 % студентов показали достаточно высокий уровень мотивации к успеху, что предполагает средний уровень риска, а также скромные надежды на успех. Около 55 % показали среднюю мотивацию к успеху, т. е. мотивация направлена на избегание неудач. На основании результатов изучения уровня развития мотивационного компонента проектной компетентности можно сделать вывод о его недостаточности.



Рисунок 2 – Уровень мотивации к предмету у учащихся.

Для оценки деятельностного компонента были изучены результаты участия студентов в учебном проекте, их возможности по применению начальных знаний о проектной деятельности на практике. Студентам было предложено выполнить лабораторные работы с применением образовательной робототехники: 1. «Изучение законов гармонического движения на примере математического маятника». «Скатывание твердого тела с наклонной плоскости».

Критериями оценки были: первоначальные навыки планирования своей деятельности в работе над проектом, организаторские умения, умение координировать процесс работы, делегировать задания, способность проводить промежуточный контроль [2]. Наличие или отсутствие тех или иных навыков фиксировалось в процессе наблюдения. Уровень оценки был достаточно низким, что объясняется отсутствием опыта проектной деятельности. Сложность у студентов вызвало распределение ролей, это связано с непониманием той или иной роли в проекте, а также нежеланием брать на себя персональную ответственность.

Некоторые результаты (таблица 1) констатирующего исследования позволяют сделать выводы о качестве подготовки студентов к проектному виду профессиональной деятельности и признать его недостаточным. Основные сложности связаны с невысоким уровнем знаний, соответственно, малыми возможностями их применения на практике в ходе выполнения учебных проектов, довольно низкой мотивации к участию в проектной деятельности.

Таблица 1 – Анализ и интерпретация результатов

Уровень	Компонент проектной компетентности					
	Когнитивный		Мотивационный			Деятельностный
	Результаты студентов (%)					
	До	После	Мотивация к пред. до	Мотивация к ПД до	Мотивация к ПД после	
Низкий	70	53	-	70	55	70
Средний	23	40	55	-	-	25
Высокий	7	7	45	30	45	5

Однако, опираясь на результаты вторичного тестирования, можно сделать вывод, что после участия в проектах уровень сформированности проектной деятельности у студентов заметно вырос. Это предполагает организацию дальнейших этапов проектной деятельности для повышения уровня проектной компетентности студентов по направлениям подготовки «Физика» и «Радиофизика».

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Дубовицкая Т.Д.* Методика диагностики направленности учебной мотивации // Психологическая наука и образование. 2002. №2. С. 42–45.

[2] *Ионова Ю.В.* Измерение качества сформированности проектной компетенции бакалавров менеджмента // Русско-Британский институт управления: сб. статей. Челябинск, 2017. С. 85–96.

[3] *Матяш Н.В.* Методика оценки проектной компетентности студентов [Электронный ресурс] // Психологические исследования: электрон. науч. журн. 2011. № 3(17). URL: <http://psystudy.ru> (дата обращения: 14.06.2020). 0421100116/0032.

Кутафина Яна Рубеновна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812)644447,
hyana789@gmail.com

Применение интерактивных методов при дистанционном обучении

А.М. Сокольникова

Научный руководитель: к. п. н., доц. И.А. Круглова

Аннотация. В статье рассматриваются возможности применения интерактивных методов обучения в контексте перехода вузов на дистанционное образование. Анализируются методы, позволяющие вовлечь студентов в процесс обучения как равноправных участников.

Ключевые слова: интерактивные методы обучения, дистанционное обучение.

В современной педагогической литературе понятие активности или пассивности при использовании того или иного метода обучения связаны, в первую очередь, с формой взаимодействия преподавателя и студента, используемой во время занятий. Обычно выделяется три формы:

- 1) взаимодействие студентов и преподавателя;
- 2) взаимодействие студентов;
- 3) взаимодействие студента и предмета обучения.

Активный метод – это форма общения студентов и преподавателя, при которой они взаимодействуют друг с другом в ходе занятия. Студенты здесь не пассивные слушатели, а активные участники; студенты и преподаватель находятся на равных правах. Если пассивные методы предполагают авторитарный стиль взаимодействия, то активные – демократический [1].

Интерактивный метод («inter» – это взаимный, «act» – действовать) – означает взаимодействовать, находиться в режиме беседы, диалога преподавателя со студентом. В отличие от активных методов, интерактивные ориентированы на более широкое взаимодействие студентов не только с преподавателем, но и друг с другом, на активность студентов в процессе обучения. Роль преподавателя на интерактивном занятии сводится к направлению деятельности студентов [2].

То есть в интерактивных методах на первое место выходит взаимосвязь «ученик – ученик» («студент – студент»), хотя взаимосвязь «учитель – ученик» («студент – преподаватель»)

продолжает использоваться. Но преподавателю теперь отводится мотивирующая роль. Его основная задача – создать благоприятные условия для проявления инициативы обучающихся, добиться их полного вовлечения в процесс обучения.

Нами была сделана попытка рассмотреть, насколько реализуемы и востребованы интерактивные методы в реалиях дистанционного образования.

Итак, интерактивный метод, прежде всего, требует организации взаимодействия студентов между собой, вовлечение их в учебный процесс не только в роли пассивных слушателей, но активных участников. Приведем несколько примеров наиболее применяемых вариантов интерактивных форм обучения.

В педагогической литературе вопрос интерактивных методов при стандартном режиме работы рассмотрен достаточно подробно [1], мы проанализировали возможность их реализации при дистанционной форме обучения.

Лекция с запланированными ошибками. Данный формат лекции легко трансформируется в формат дистанционного. Заранее объявляется тема лекции и число допущенных в ней ошибок. Это заставляет слушателей не отвлекаться, вникать в излагаемый преподавателем материал. Конечно, важно, какие «пряники» будут предложены, то есть насколько преподаватель сумеет замотивировать студентов на данный вид работы. При хорошей мотивации можно рассчитывать на внимание сильной части «аудитории» в полной мере. Сразу же можно заметить, что для слабых студентов данный вид деятельности непригоден.

Сложнее организовать в онлайн-формате практические занятия, так как интерактивность подразумевает, в первую очередь, групповую работу студентов. Однако, и с этим можно справиться. Например, организация работы по «кабинетам» в Discord и Zoom позволяет развести слушателей в отдельные группы. То есть можем реализовать *метод группового решения* задач. При этом в каждой группе можно назначить «старших», предоставив им права ведущих. Перед началом занятия студенты получают задание, затем параллельно проходит обсуждение в группах-кабинетах, а после можно устроить защиту своего решения каждой из групп, общее обсуждение, дискуссию. При организации данной формы проведения занятий на первый план

выходят не технические, а психологические проблемы. Многое будет зависеть от готовности студентов к действиям в команде, ответственности за общие результаты.

Остро встает вопрос о мотивации студентов на подобный вид деятельности. Основную нагрузку при такой работе берут на себя сильные студенты, а слабые могут от работы уклониться. Но эти же проблемы возникают при организации групповой работы и при очном обучении. Стоит отметить, что данный вид деятельности возможен только при нормальном психологическом климате в коллективе.

В рамках дистанционного обучения вполне реализуем формат деловой игры. Могут быть использованы как обучающие, так и поисковые, исследовательские деловые игры. Возможны задания, для выполнения которых понадобятся теоретические знания (замотивированность на внимательное изучение предшествующего лекционного материала), задания на отработку навыков умения решать стандартные задачи курса (потребуются практические навыки, что может служить, например, некой проверкой выполнения домашних заданий), задания на умение применять изученный материал при решении нестандартных задач (тот самый «пряник» для сильных студентов). Если при этом группы будут грамотно сформированы равнозначными по уровню подготовки, то работа найдется всем. Для реализации формата «деловой игры» в целом необходимо предоставить группам право защиты своих решений, возможность отстаивать свою точку зрения. Может быть заранее выдано одно задание для всей подгруппы и оговорены критерии защиты всего проекта целиком с помощью презентации. Для этого можно использовать возможности Discord, Zoom или других платформ.

После изучения достаточно большой части материала, объединенного по какому-либо признаку, может быть проведен брейн-ринг (на доске возникают условия задач по порядку; первая из подгрупп, готовая предложить решение, отстает его у доски (остальные могут задавать вопросы). То есть все, как и при обычном обучении, лишь доска превращается в виртуальную).

Изложенные выше методы позволяют наиболее полноценно вовлечь студентов в процесс дистанционного обучения как полноправных участников, а не пассивных слушателей.

Заметим, что проблема мотивации студентов в рамках дистанционного обучения становится более острой. Это общая проблема преподавателей и студентов. Ведущие преподаватели понимают, что в формате онлайн-обучения необходимо менять традиционные формы работы. «Большой ошибкой будет преподавать сейчас тот же материал и теми же способами, которые планировались раньше, и в целом воспринимать онлайн-занятия как версию стандартных. Они просто другие, с другими правилами, этикетом и динамикой» [3].

И в эти новые правила, динамику и этикет интерактивные методы обучения вписываются, на наш взгляд, весьма удачно.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Болотюк Л.А., Сокольникова А.М., Швед Е.А.* Применение интерактивных методов обучения на практических занятиях по теории вероятностей и эконометрике [Электронный ресурс] // Интернет журнал «Науковедение». 2013. № 3 (16). С. 90. URL: <https://naukovedenie.ru/PDF/70pvn313.pdf> (дата обращения: 14.06.2020).

[2] *Двуличанская Н.Н.* Интерактивные методы обучения как средство формирования ключевых компетенций [Электронный ресурс] // Наука и образование. 2011, № 4. URL: <http://technomag.edu.ru/doc/172651.html> (дата обращения: 14.06.2020).

[3] *Мельник Д.* Карантин как повод пересмотреть подход к высшему образованию [Электронный ресурс]. URL: <https://tass.ru/opinions/8028493> (дата обращения: 14.06.2020).

Сокольникова Алла Михайловна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
1 курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812)647787,
allpix@mail.ru

Возможности формирования педагогических профессиональных компетенций вожатых профильных смен в режиме дистанционного обучения

В.А. Шиповалова

Научный руководитель: к.п.н., доцент И.А. Круглова

Аннотация. В статье рассматривается проблема формирования ключевых компетенций, необходимых студентам естественно-математических направлений для работы в выездных профильных сменах, формируемых в режиме дистанционного обучения.

Ключевые слова: компетенции, компетентностный подход, методики формирования компетенций, профильные смены, подготовка вожатых, дистанционное обучение.

Ограничительные мероприятия, связанные с распространением новой коронавирусной инфекции (COVID-19), отразились на большинстве сфер жизни и отраслей экономики. Не остался в стороне и сектор летнего оздоровительного отдыха. В Омской области достаточно рано стало известно о том, что все июньские смены в лагерях отменены. В настоящее время Минпросвещения рекомендует начать летнюю оздоровительную кампанию в регионах с 1 июля [3], но полной гарантии на возможность ее осуществления нет. Главный вопрос, стоящий сейчас перед руководителями профильных смен – подготовка высококвалифицированного вожатско-преподавательского состава.

Целью нашего научного исследования является анализ возможности формирования компетенций, необходимых студентам естественно-математических направлений для работы в выездных профильных сменах. Для этого мы проанализировали список профессиональных компетенций предложенных в стандарте педагога, выбрали наиболее важных из них для работы в выездных профильных школах [2].

При решении одной из поставленных в рамках научной работы задач мы выяснили, что при подготовке вожатых работе в профильных сменах необходимо делать упор на формирование системных компетенций, таких как:

- способность учиться;
- способность применять знания на практике;

- способность адаптироваться к новым ситуациям;
- способность порождать новые идеи (креативность) [2].

Специфичность летнего оздоровительного сезона 2020 года обусловлена тем, что привычный формат подготовки вожатско-преподавательского состава невозможен из-за ограничительных мероприятий. Самый очевидный выход из ситуации – обучать вожатых дистанционно. Перед нами возник вопрос о качестве обучения педагогического состава и степени сформированности у сотрудников компетенций, необходимых для работы в выездных школах, при новом формате подготовки.

Дистанционное обучение – это обучение, при котором его субъекты разделены в пространстве и, возможно, во времени, реализуется с учетом передачи и восприятия информации в виртуальной среде [1].

В настоящее время запущены различные проекты для дистанционной подготовки вожатых, в том числе:

- дистанционное обучение для вожатых по информационно-медийному направлению от «Лиги вожатых» [4];
- школа вожатых, разработанная Институтом непрерывного образования Сибирского федерального университета для студентов, не имеющих оконченного высшего образования [5];
- проект «Онлайн-вожатый», реализацией которого занимается Ульяновский государственный педагогический университет [6].

Проекты можно разделить на две большие категории: подготовка вожатых для онлайн-лагерей и для обычных смен. В рамках диссертационной работы нас интересует второе направление.

К каждому проекту прилагается программа занятий с описанием применяемых форм и методов. По результатам анализа предлагаемых программ и сопоставления их со списком требуемых компетенций мы сформировали таблицу 1 возможности овладения компетенциями в дистанционном формате.

Для повышения объективности оценки среди руководителей профильных выездных школ проведено анкетирование с целью выяснения их отношения к новому формату подготовки вожатско-преподавательского состава. Респондентам были заданы следующие вопросы:

1. Готовы ли они без дополнительной подготовки взять в сезон студента 1-3 курса, если он прошел хотя бы минимальный курс подготовки вожатых онлайн?

Таблица 1

№ п\п	Компетенция	Формы и методы	Степень освоения
1	Способность учиться	Демонстрация учебных фильмов с последующим обсуждением	Высокая
2	Способность применять знания на практике	В рамках дистанционного обучения невозможно воссоздать ситуации, которые могут случиться с вожатым в лагере, чтобы понять, как он себя поведет	Низкая
3	Способность адаптироваться к новым ситуациям		Средняя
4	Креативность	Решение задачи несколькими способами. Ролевые игры.	Высокая

2. Есть ли у них возможность реализовать онлайн подготовку вожатско-преподавательского состава?

3. Считают ли они подготовку вожатых в режиме онлайн достаточной, чтобы провести успешный сезон?

По результатам сопоставления результатов анкетирования и таблицы возможности овладения компетенциями в дистанционном формате выявлено, что существующие дистанционные программы подготовки вожатых не являются оптимальными, так как предложенные методы и формы обучения не адаптированы под полноценное формирование необходимого перечня компетенций.

Кроме того, онлайн-формат не позволяет оценить степень сформированности ряда компетенций, необходимых для работы в профильных выездных школах. В частности, из-за дистанционного формата затруднительно произвести апробацию способности вожатого адаптироваться к новым ситуациям. Что примечательно, руководители профильных смен готовы начать подготовку в дистанционном формате, но не уверены в том, что она сможет обеспечить необходимый уровень компетенций вожатых.

Исходя из результатов проведенного исследования, можно сделать вывод, что использование дистанционного формата обучения вожатско-преподавательского состава возможно. Тем не менее, для достижения удовлетворительного результата необходимо значительно переработать программы подготовки.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Андреев А.А.* Дидактические основы дистанционного обучения. М.: РАО, 1999. 120 с.
- [2] *Круглова И.А., Шиповалова В.А.* Возможности формирования профессиональных компетенций у студентов для работы в профильных сменах выездных школ //Материалы VI Всероссийской научно-практической конференции «Методика преподавания математических и естественных дисциплин: современные проблемы и тенденции развития». Омск: Изд-во ОмГТУ, 2019. С. 17–19.
- [3] Комитет совета федерации по социальной политики [Сайт]. URL: <http://social.council.gov.ru/events/news/116510/> (дата обращения: 06.06.2020).
- [4] Программа профессионального обучения «Школа вожатых» [Электронный ресурс] // Научно-образовательный центр «Институт непрерывного образования» СФУ [сайт]. URL: <http://ino.sfu-kras.ru/program/2/527> (дата обращения: 28.05.2020).
- [5] Лига Вожатых [Сайт].URL: <http://вожатый.рф> (дата обращения: 28.05.2020).
- [6] Media73 [Электронный ресурс] // ОАУ «Государственная корпорация СМИ «Медиа 73» [сайт]. URL: <https://media73.ru/2020/v-ulgru-nachalas-podgotovka-onlayn-vozhatykh> (дата обращения: 28.05.2020).

Шиповалова Виктория Александровна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, ИМИТ,
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812)644238,
viktoriiaShipovalova@gmail.com