

Том 14, номер 3

ISSN 2304-487X

МАЙ – ИЮНЬ 2025

<https://vestnikmephi.elpub.ru>

ВЕСТНИК НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЯДЕРНОГО УНИВЕРСИТЕТА «МИФИ»



Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

ВЕСТНИК НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЯДЕРНОГО УНИВЕРСИТЕТА «МИФИ»

Том 14 № 3 2025 МАЙ – ИЮНЬ

Основан в июле 2012 г.

Выходит 6 раз в год

ISSN: 2304-487X

ПИ № ФС 77-41948

Главный редактор

Михаил Николаевич Стриханов, д. ф.-м. наук, профессор, НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Заместитель главного редактора

Николай Алексеевич Кудряшов, д.ф.-м.н., профессор, НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Выпускающий редактор

Наталья Вячеславовна Ермолаева, к.т.н., НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Ответственный секретарь

Михаил Александрович Чмыхов, к.ф.-м.н., доцент, НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Редакционная коллегия:

Аксёнов Александр Васильевич – д.ф.-м.н., профессор, МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва (Россия)

Бедриковецкий Павел – д.ф.-м.н., профессор, Университет Аделаиды, Аделаида, (Австралия)

Гаранин Сергей Григорьевич – чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор,

Институт лазерно-физических исследований РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров (Россия)

Евтихий Николай Николаевич – д.ф.-м.н., профессор, НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Калашников Николай Павлович – д.ф.-м.н., профессор, НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Каргин Николай Иванович – д.т.н., профессор, НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Кашенко Сергей Александрович – д.ф.-м.н., профессор,

Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова, г. Ярославль (Россия)

Лазаров Райчо – доктор наук, профессор математики, Техасский университет А&М,
г. Колледж-Стейшен (США)

Нагорнов Олег Викторович – д.ф.-м.н., профессор, НИЯУ МИФИ, г. Москва (Россия)

Полянин Андрей Дмитриевич – д.ф.-м.н., профессор,

Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, г. Москва (Россия)

Цегельник Владимир Владимирович – д.ф.-м.н., профессор,

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск (Белорусь)

Четверушкин Борис Николаевич – член РАН, д.ф.-м.н., профессор, Институт прикладной математики
им. М.В. Келдыша РАН, г. Москва (Россия)

Эфендиев Ялчин – д.ф.-м.н., профессор, Техасский университет А&М, г. Колледж-Стейшен (США)

Компьютерная верстка: Девятилова Светлана Константиновна

Учредитель и издатель: Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Адрес редакции: 115409, Москва, Каширское шоссе, д. 31, Вестник НИЯУ МИФИ

Сайт: <https://vestnikmephi.elpub.ru>

Электронная почта: vestnik@mephi.ru

Москва
НИЯУ МИФИ

СОДЕРЖАНИЕ

Том 14, № 3, 2025

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА

- Теплогидравлический расчет конструкции облучательного устройства для проведения внутрореакторных испытаний макетов твэлов ВВЭР-СКД с сердечниками на основе имитаторов распухания ядерного топлива**
А. Л. Ижutow, В. С. Моисеев, Н. К. Калинина, М. С. Каплина, Д. С. Моисеев 185
- Сравнение методов детектирования близких спектральных линий: роль второй производной и шумовых искажений**
С. И. Иванов, С. В. Боритко 192
- Исследование малых вариаций потока мюонов космических лучей в атмосфере**
С. С. Тимаков, А. А. Петрухин 203
-

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

- Точные решения обобщенного нелинейного уравнения Вахненко – Паркеса**
К. М. Зуев, Н. А. Кудряшов 214
- Влияние социальных контактов на формирование эндемического равновесия в SEIS-модели**
А. Р. Каримов, М. А. Соломатин 225
-

ПРИКЛАДНАЯ МАТЕМАТИКА И ИНФОРМАТИКА

- Квантовые киберугрозы и их воздействие на безопасность критической информационной инфраструктуры**
И. А. Василенко 240
- Обратимая многошаговая диффузионная модель для преобразования изображений на основе радиолокационных и оптических данных**
А. С. Минаев, В. В. Федоров 249
-

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

- Терагерцовые спектры пропускания конденсатов нитросоединений**
Е. Р. Живаго, А. А. Плеханов, Г. Е. Котковский, И. Л. Мартынов, С. В. Фадеев, А. А. Чистяков 256
- Учет геометрических поправок при расчете парной корреляционной функции**
Ф. С. Джеббаров, Д. В. Львов, А. Н. Тюлюсов, Й. Шмайснер 264

CONTENTS

Volume 14, Number 3, 2025

THEORETICAL AND EXPERIMENTAL PHYSICS

- Thermohydraulic calculation of the design of an irradiation device for in-reactor tests of VVER-SKD fuel rod models with cores based on nuclear fuel swelling simulators**
A. L. Izhutov, V. S. Moiseev, N. K. Kalinina, M. S. Kaplina, D. S. Moiseev 185
- Comparison of detection methods for closely spaced spectral lines: the role of the second derivative and noise distortions**
S. I. Ivanov, S. V. Boritko 192
- Study of small variations in the atmosphere in the cosmic ray muon flux**
S. S. Timakov, A. A. Petrukhin 203
-

MATHEMATICAL MODELS AND NUMERICAL METHODS

- Exact solutions of generalized nonlinear Vakhnenko–Parkes equation**
K. M. Zuev, N. A. Kudryashov 214
- Influence of social contacts on formation of endemic equilibrium in SEIS model**
A. R. Karimov, M. A. Solomatin 225
-

APPLIED MATHEMATICS AND COMPUTER SCIENCE

- Quantum cyber threats and their impact on the security of critical information infrastructure**
I. A. Vasilenko 240
- Reversible multi-step diffusion model for image translation between radar and optical data**
A. S. Minaev, V. V. Fedorov 249
-

CONDENSED MATTER PHYSICS

- Terahertz transmission spectra of condensates of nitro compounds**
E. R. Zhivago, A. A. Plekhanov, G. E. Kotkovskii, I. L. Martynov, S. V. Fadeev, A. A. Chistyakov 256
- Geometric corrections for calculating the pair correlation function**
F. S. Dzheparov, D. V. Lvov, A. N. Tyulyusov, J. Schmeissner 264

УДК 621.039.553

Теплогидравлический расчет конструкции облучательного устройства для проведения внутриреакторных испытаний макетов твэлов ВВЭР-СКД с сердечниками на основе имитаторов распухания ядерного топлива

© 2025 г. А. Л. Ижугтов, В. С. Моисеев, Н. К. Калинина, М. С. Каплина, Д. С. Моисеев

АО «ГНЦ НИИАР» (Государственный научный центр – научно-исследовательский институт атомных реакторов), Димитровград, 433510, Россия

Один из перспективных проектов реакторов IV поколения – водо-водяные энергетические реакторы со сверхкритическим давлением теплоносителя (ВВЭР-СКД), который способен повысить эффективность энергоблоков ВВЭР за счет повышения давления до 23.5–25 МПа и повышения температуры теплоносителя до 380–540 °С. Одной из основных проблем, с которыми придется столкнуться при разработке проекта ВВЭР-СКД, является выбор материалов оболочки для тепловыделяющего элемента (твэл) способного работать при сверхкритических параметрах теплоносителя. Для решения этой задачи необходимо провести внутриреакторные испытания и послереакторные исследования кандидатных конструкционных материалов оболочек твэлов. Для этого требуется разработать облучательное устройство (ОУ), которое могло бы обеспечить проведение внутриреакторных испытаний кандидатных конструкционных материалов оболочек твэлов в условиях СКД теплоносителя. В ходе работы были проведены теплогидравлические расчеты конструкции облучательного устройства с помощью программного комплекса SolidWorks. Результаты расчетов показали, что данная конструкция облучательного устройства позволит провести внутриреакторные испытания макетов твэлов ВВЭР-СКД при сверхкритических параметрах теплоносителя в исследовательской реакторной установке (РУ) СМ-3.

Ключевые слова: макет твэла, ВВЭР-СКД, облучательное устройство, теплогидравлические расчеты, кандидатные материалы, внутриреакторные испытания.

Введение

Перспективным направлением развития атомной энергетики, включенным в «Энергетическую стратегию России на период до 2030 года», является разработка нового поколения водо-водяных энергетических реакторов со сверхкритическим давлением¹. Главной характеристикой этого типа реактора станет высокий коэффициент полезного действия – КПД (45 %) и его адаптация для применения в замкнутом ядерном топливном цикле (ЗЯТЦ) [1]. Водо-водяной энергетический реактор (ВВЭР), или его зарубежный аналог PWR, на сегодняшний день является самым распространенным. Имеется многолетний опыт эксплуатации реакторов данного типа, а также выявлены его сильные и слабые стороны технических, конструктивных и технологических решений [1]. Реактор ВВЭР имеет низкую температуру теплоносителя на выходе из активной зоны (АЗ), следовательно, невысокую эффективность энергоблока. Повышение эффективности может быть достигнуто путем перехода к сверхкритическим параметрам водяного теплоносителя [2].

¹ Проблемные вопросы по активной зоне корпусного реактора ВВЭР-СКД // Атомная энергия 2.0 URL: <https://www.atomic-energy.ru/papers/29795> (дата обращения: 12.03.2025).

✉ В.С. Моисеев: vitaliy.moiseev.2016@mail.ru

Поступила в редакцию: 25.03.2025

После доработки: 07.05.2025

Принята к публикации: 20.05.2025

Одна из основных проблем при создании реактора ВВЭР-СКД – отсутствие материалов, способных с учетом фактора радиации выдержать температуру теплоносителя 550–600 °С и давление теплоносителя ~ 25 МПа [3]. Одним из основных этапов при выборе и обосновании работоспособности конструкционных материалов оболочек твэлов является проведение внутриреакторного облучения с последующим исследованием и обоснованием радиационной стойкости кандидатных материалов, стойкости к общей коррозии и к коррозионному растрескиванию под напряжением. Чтобы облучить макеты твэлов ВВЭР-СКД, необходимо разработать конструкцию облучательного устройства (ОУ), которая позволит разместить исследуемые макеты оболочек твэлов в ячейке исследовательского реактора. Создание CFD-модели позволяет оценить конструктивные особенности ОУ, а проведенные теплогидравлические расчеты помогут определить параметры внутриреакторных испытаний макетов твэлов ВВЭР-СКД с сердечниками на основе имитаторов распухания [4].

Условия испытаний макетов твэлов

Объекты реакторных испытаний – макеты твэлов с имитаторами распухания, изготовленные из кандидатных конструкционных материалов. Предварительная конструкция макета представлена на рис. 1. В качестве имитатора распухания выбран карбид бора естественного состава (обогащение по ^{10}B – 19,9 %).

Условия для испытания макетов твэлов соответствуют условиям эксплуатации реактора ВВЭР-СКД:

- давление во внутренней полости ОУ ~ 25 МПа;
- температура оболочки макета твэла ~ 550 °С;
- плотность потока быстрых ($E \geq 0.1$ МэВ) нейтронов – до $5.0 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$.

Данные условия могут быть достигнуты при облучении макетов твэлов в одной из ячеек первого ряда отражателя исследовательской реакторной установки (РУ) СМ-3.

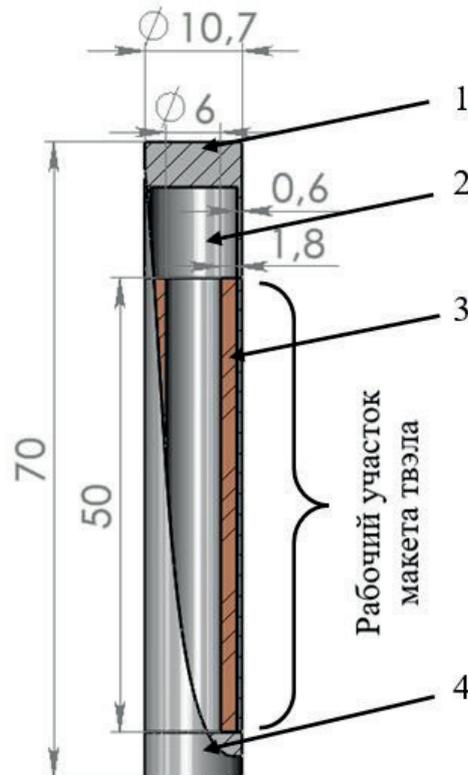


Рис. 1. Конструкция макета твэла с имитатором распухания: 1 – верхняя заглушка; 2 – пространство для сбора гелия; 3 – таблетки карбида бора; 4 – нижняя заглушка

Конструкция облучательного устройства

Конструкция облучательного устройства (рис. 2) состоит из наружного и внутреннего корпусов, выполненных из стали 12Х18Н10Т, алюминиевой межкорпусной проставки и подвески с макетами твэлов. На уровне активной зоны РУ СМ-3 в межкорпусном пространстве располагается цилиндрическая алюминиевая проставка для улучшения сброса тепла и предотвращения перегрева внутреннего корпуса.

Межкорпусное пространство облучательного устройства заполняется гелием с давлением до 15 МПа. Внутренняя полость ОУ заполняется специально подготовленным водяным раствором с давлением до 20 МПа. В процессе выхода реактора на мощность во внутренней полости ОУ достигается рабочее давление 25–30 МПа и температура до 550 °С. Регулирование температуры на макетах твэлов во время проведения внутриреакторного облучения осуществляется за счет изменения давления и/или состава газа в межкорпусном пространстве.

Для организации циркуляции теплоносителя внутри ОУ размещается разделитель потока из нержавеющей стали 12Х18Н10Т. В разделителе потока предусмотрены переливные окна, расположенные на

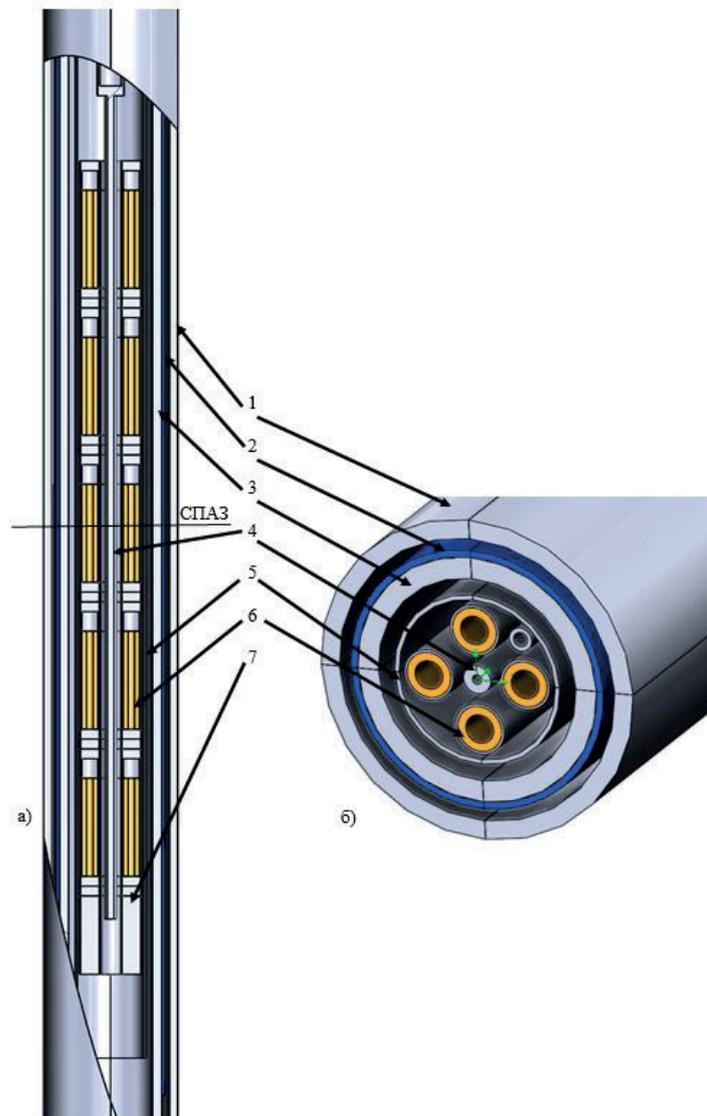


Рис. 2. Конструкция ОУ: а – общий вид; б – поперечное сечение; 1 – наружный корпус; 2 – алюминиевая проставка; 3 – внутренний корпус; 4 – подвеска; 5 – разделитель потока; 6 – макеты твэлов; 7 – радиационные нагреватели

расстоянии ~ 1.5 м выше уровня средней плоскости активной зоны (СПАЗ) РУ СМ-3. Внутри разделителя потока размещается подвеска. К подвеске крепится пять этажей с макетами твэлов. На каждом этаже размещено четыре макета. Каждому макету соответствует позиция, определяющая ориентацию к активной зоне РУ СМ-3. Макеты первой позиции наиболее приближены к активной зоне, макеты третьей позиции наиболее удалены от АЗ. В нижней части рабочего участка размещен этаж с радиационными нагревателями, выполненными из вольфрамовых стержней, очехлованных нержавеющей сталью. Макеты и нагреватели на этажах расположены симметрично относительно центральной оси ОУ. Данная конструкция ОУ позволяет проводить реакторное облучение до 20 макетов твэлов одновременно.

Результаты теплогидравлического расчета

Построение расчетной модели ОУ выполнено в САД-системе SolidWorks, которая соответствует эскизу, приведенному на рис. 2. Расчет проводился во встроенном в SolidWorks программном обеспечении Flow Simulation [5]. Радиационное энерговыделение в конструкционных элементах ОУ, макетах твэлов и воды СКД рассчитано по коду MCU, в которой реализован алгоритм решения уравнения переноса нейтронов методом Монте-Карло [6]. Тепло, генерируемое в макетах и элементах конструкции ОУ, снимается за счет охлаждения наружного корпуса водой первого контура реакторной установки СМ-3.

Так как свойства воды при сверхкритических параметрах сильно зависят от температуры (рис. 3), то при проведении теплогидравлических расчетов данные зависимости были учтены посредством внесения в имеющуюся базу данных SolidWorks Flow Simulation значений плотности, теплопроводности, удельной теплоемкости и динамической вязкости.

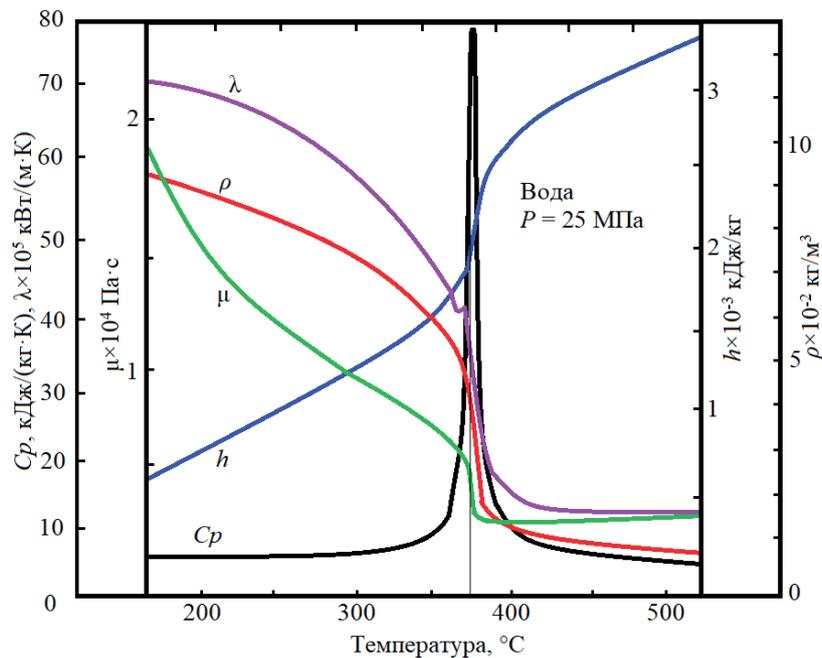


Рис. 3. Изменение свойств воды при сверхкритических параметрах: λ – теплопроводность; ρ – плотность; μ – динамическая вязкость; h – энтальпия; C_p – удельная теплоемкость

Свойства материалов CFD-модели ОУ задавались из существующей в SolidWorks Flow Simulation базы данных. Свойства воды под давлением задавались вручную посредством внесения в имеющуюся базу данных значений плотности, теплопроводности и теплоемкости. Теплогидравлические свойства воды при давлении 25 МПа взяты из [7].

В данном расчете учитывалось высотное и радиально-азимутальное распределение энерговыделения конструкционных элементов ОУ. Распределение температуры в облучательном устройстве на уровне СПАЗ представлено на рис. 4.

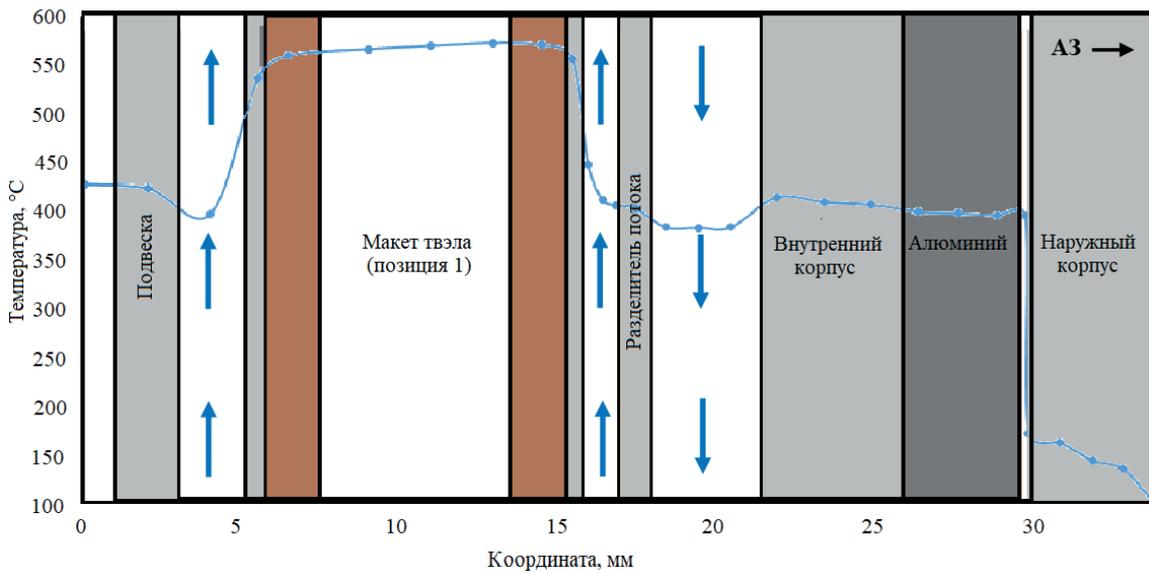


Рис. 4. Распределение температуры в ОУ на уровне СПАЗ

Максимальная температура в конструкции ОУ на уровне СПАЗ наблюдается в карбиде бора, здесь температура составляет 575 °С. Максимальная температура оболочки макета твэла – 567 °С. Так как количество тепла, образовавшееся внутри разделителя теплоносителя, больше чем снаружи, а проходное сечение для теплоносителя внутри разделителя потока меньше, то нагрев теплоносителя запускает процесс естественной циркуляции. На рис. 4 стрелками показано движение водяного теплоносителя. Скорость теплоносителя СКД в месте расположения макетов твэлов достигает 0.55 м/с, а с внешней стороны разделителя потока – 0.41 м/с. Из этого следует, что во внутренней полости ОУ присутствует естественная циркуляция СКД теплоносителя, при которой макеты твэлов омываются снизу вверх.

На рис. 5 представлено распределение температуры по высоте макетов твэлов.

Локальные температурные максимумы соответствуют центрам рабочих участков макетов твэлов с имитаторами распухания, локальные минимумы – верхним и нижним заглушкам. Максимальная температура наблюдается на оболочке макетов, расположенных на уровне СПАЗ РУ СМ-3. Расчетная температура макетов твэлов на уровне рабочих участков находится в диапазоне 510 ± 57 °С.

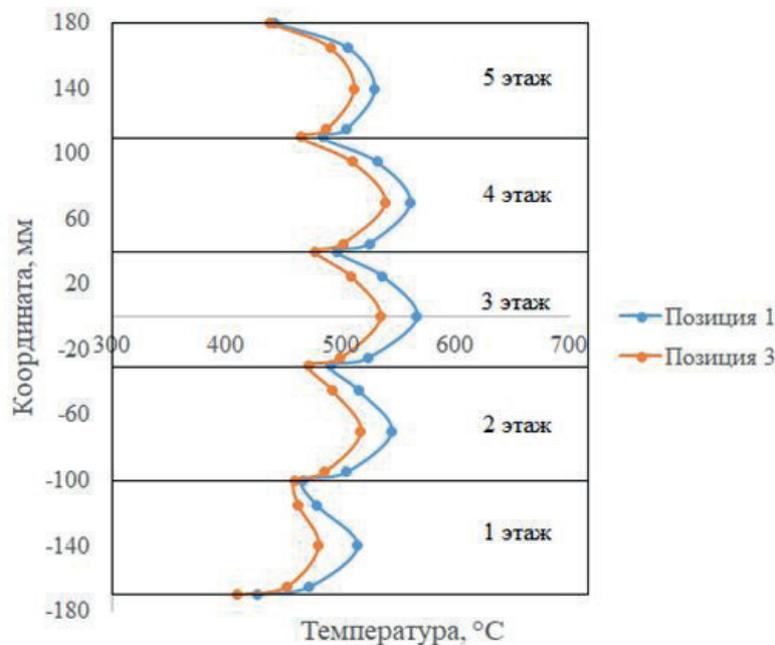


Рис. 5. Распределение температуры по высоте макетов твэлов на этажах в позициях 1 и 3

Заключение

В ходе работы была разработана конструкция облучательного устройства для проведения внутриреакторных испытаний макетов твэлов ВВЭР-СКД с сердечниками на основе имитаторов распухания. По результатам теплогидравлических расчетов определены конструкционные особенности ОУ и геометрические размеры элементов ОУ. Результаты расчетов показали, что данная конструкция облучательного устройства позволит провести внутриреакторные испытания макетов твэлов ВВЭР-СКД при сверхкритических параметрах теплоносителя в РУ СМ-3. Так, расчетная температура оболочки макетов твэлов находится в диапазоне 510 ± 57 °С. Полученные данные о температурном распределении на оболочке макетов твэлов в условиях, соответствующих эксплуатации реактора ВВЭР-СКД, подтверждают работоспособность предложенной конструкции и ее готовность к практическому применению. Создание облучательного устройства, способного одновременно облучать до 20 макетов твэлов, открывает новые горизонты для экспериментального изучения радиационной стойкости и коррозионных свойств кандидатных конструкционных материалов, что является залогом успешной реализации проектов по созданию реакторов ВВЭР-СКД.

Финансирование

Авторы заявляют об отсутствии источников финансирования.

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

А.Л. Ижutow – формулировка идеи и целей исследования, постановка задачи, выбор методов исследования; разработка концепции исследования; участие в обсуждении результатов.

В.С. Моисеев – разработка конструкции ОУ; создание геометрической CFD-модели ОУ, проведение теплогидравлических расчетов; участие в обсуждении результатов; подготовка текста статьи.

Н.К. Калинина – формулировка идеи и целей исследования, постановка задачи, выбор методов исследования; разработка концепции исследования; разработка конструкции ОУ; участие в обсуждении результатов; подготовка текста статьи.

М.С. Каплина – разработка конструкции ОУ; участие в обсуждении результатов; подготовка текста статьи.

Д.С. Моисеев – проведение нейтронно-физических расчетов, участие в обсуждении результатов; подготовка текста статьи.

Список литературы

1. *Глебов А.П., Клушин А.В., Баранаев Ю.Д.* Перспективы использования реактора ВВЭР-СКД в замкнутом топливном цикле // Известия вузов. Ядерная энергетика, 2015. № 1. С. 5–17. DOI: 10.26583/ipe.2015.1.01.

2. *Калякин С.Г., Кириллов П.Л., Баранаев Ю.Д. и др.* Перспективы разработки инновационного водоохлаждаемого ядерного реактора со сверхкритическими параметрами теплоносителя // ТЕПЛОФИЗИКА: сборник статей, к 65-летию создания Теплофизического отдела ФЭИ. Обнинск: ГНЦ – ФЭИ, 2019. С. 204–214.

3. *Семченков Ю.М., Духовенский А.А., Прошин А.А. и др.* Проблемы и перспективы легководных реакторов нового поколения со сверхкритическим давлением // Труды отраслевого научно-технического семинара «Реакторы на сверхкритических параметрах воды» (Обнинск, 6–7 сентября 2007 г.). С. 48–61.

4. *Белова О.В., Волков В.Ю., Скибин А.П.* Методологические основы CFD-расчетов для поддержки проектирования пневмогидравлических систем // Наука и Инновации, 2013. № 5 (17). С. 1–13.

5. *Алямовский А.А.* SolidWorks. Компьютерное моделирование в инженерной практике. СПб.: Издательство БХВ, 2005. 800 с.

6. *Гомин Е.А.* Статус MCU-4 // Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика ядерных реакторов», 2006. Вып. 1. С. 6–32.

7. *Александров А.А.* Таблицы теплофизических свойств воды и водяного пара. М.: Издательство МЭИ, 1999. 164 с.

Thermohydraulic calculation of the design of an irradiation device for in-reactor tests of VVER-SKD fuel rod models with cores based on nuclear fuel swelling simulators

A. L. Izhutov, V. S. Moiseev [✉], N. K. Kalinina, M. S. Kaplina, D. S. Moiseev

SSC RIAR (State Scientific Center, Research Institute for Nuclear Reactors), Dimitrovgrad, Ulyanovsk region, 433510, Russia

[✉] vitaliy.moiseev.2016@mail.ru

Received March 25, 2025; revised May 07, 2025; accepted May 20, 2025

One of the promising projects of the IV generation reactors is water-cooled power reactors with supercritical coolant pressure (VVER-SKD), which is capable of increasing the efficiency of VVER power units by increasing the pressure to 23.5-25 MPa and increasing the coolant temperature to 380 – 540 °C. One of the main problems that will have to be faced when developing the VVER-SKD project is the choice of cladding materials for a fuel element capable of operating at supercritical coolant parameters. To solve this problem, it is necessary to conduct in-reactor tests and post-reactor studies of candidate structural materials for fuel element cladding. For this purpose, it is necessary to develop an irradiation device that could ensure in-reactor tests of candidate structural materials for fuel element cladding under SCP coolant conditions. In the course of the work, thermal hydraulic calculations of the irradiation device design were carried out using the SolidWorks software package. The calculation results showed that this design of the irradiation device will allow for in-reactor testing of VVER-SKD fuel rod mockups at supercritical coolant parameters in the SM-3 research reactor facility.

Keywords: fuel rod mockup, VVER-SKD, irradiation device, thermal-hydraulic calculations, candidate materials, in-reactor testing.

References

1. Glebov A.P., Klushin A.V., Baranaev Yu.D. Perspektivy ispol'zovaniya reaktora VVER-SKD v zamknom toplivnom cikle [Prospects of VVER-SKD in a closed fuel cycle]. *Izvestiya vuzov. Yadernaya energetika*, 2015. No. 1. Pp. 5–17. (in Russian)
2. Kalyakin S.G., Kirillov P.L., Baranaev Yu.D. et al. Perspektivy razrabotki innovacionnogo vodoohlazhdaemogo yadernogo reaktora so sverhkriticheskimi parametrami teplonositelya [Prospects for the development of an innovative water-cooled nuclear reactor with supercritical coolant parameters]. *Teplofizika: sbornik statej, k 65-letiyu sozdaniya Teplofizicheskogo otdela FEI*. [Thermophysics: collection of articles, dedicated to the 65th anniversary of the creation of the Thermophysical Department of IPPE]. Obninsk, GNC – IPPE Publ., 2019. Pp. 204–214 (in Russian).
3. Semchenkov Yu.M., Dukhovensky A.A., Proshin A.A., et al. Problemy i perspektivy legkovodnyh reaktorov novogo pokoleniya so sverhkriticheskim davleniem [Problems and prospects of new generation light-water reactors with supercritical pressure]. *Trudy otraslevogo nauchno-tekhnicheskogo seminara «Reaktory na sverhkriticheskikh parametroh vody»*. [Proceedings of the industry scientific and technical seminar «Reactors on supercritical water parameters»]. Obninsk, 2007. Pp. 48–61 (in Russian).
4. Belova O.V., Volkov V.YU., Skibin A.P. Metodologicheskie osnovy CFD-raschetov dlya podderzhki proektirovaniya pnevmogidravlicheskikh sistem [Methodological foundations of CFD calculations to support the design of pneumohydraulic systems]. *Nauka i Innovacii*, 2013. No. 5 (17). Pp. 1–13 (in Russian).
5. Alyamovsky A.A. SolidWorks. Komp'yuternoe modelirovanie v inzhenernoj praktike. [SolidWorks. Computer Modeling in Engineering Practice]. Saint Petersburg, BHV Publ., 2005. 800 p.
6. Gomin E. A. Status MCU-4 [MCU-4 Status]. *Voprosy atomnoj nauki i tekhniki. Seriya «Fizika yadernyh reaktorov»*, 2006. Iss. 1. Pp. 6–32 (in Russian).
7. Aleksandrov A.A. Tablicy teplofizicheskikh svoystv vody i vodyanogo para [Tables of Thermophysical Properties of Water and Water Vapor]. Moscow, MEI Publ., 1999. 164 p.

УДК 535.8

Сравнение методов детектирования близких спектральных линий: роль второй производной и шумовых искажений

© 2025 г. С. И. Иванов, С. В. Боритко

Научно-технологический центр уникального приборостроения РАН, Москва, 117342, Россия

Цель данной работы – сравнительный анализ методов повышения спектрального разрешения при детектировании близкорасположенных спектральных линий, в условиях их частичного перекрытия. Основное внимание уделено методу второй производной, который позволяет усиливать контраст между компонентами за счет акцентирования высокочастотных особенностей сигнала. В рамках численного моделирования в среде MATLAB исследованы два подхода: прямое детектирование суммарного сигнала и анализ его второй производной. Моделирование проводилось для двух идентичных гауссовых сигналов с варьируемым межпиковым расстоянием d , дополненным аддитивным шумом. Результаты показали, что метод второй производной снижает минимальное расстояние визуального разрешения с $d_{\text{прям}} = 2.1$ до $d_{\text{мод}} = 1.6$, обеспечивая выигрыш в разрешающей способности на 31 %. Однако шумовые флуктуации ($\text{SNR} = 40$ дБ) существенно искажают производные сигналы, маскируя провалы между пиками. Сглаживание данных методом скользящих средних частично подавляет шумы, но приводит к уширению пиков на 15 %, демонстрируя компромисс между точностью и сохранением формы сигнала.

Ключевые слова: спектральное разрешение, метод второй производной, численное моделирование, гауссовы сигналы, шумовая устойчивость, модуляционный подход.

Введение

Спектрометрия является важнейшим инструментом в современной науке и технике, позволяющим изучать состав и структуру различных объектов, а также определять их химические и физические свойства путем анализа спектров электромагнитного излучения [1]. Например, данный метод используется в химии для определения структуры [2] и свойств молекул, а также для анализа состава веществ [3]. В биологии спектрометрия применяется для изучения структуры и функций таких биомолекул, как белки и нуклеиновые кислоты [4]. В физике спектрометрия используется для исследования свойств материалов на атомном и субатомном уровнях [5].

Для использования данного метода важно точное определение положения спектральных линий и насколько достоверно они разрешаются. Данная работа посвящена второй задаче.

Спектральное разрешение является ключевым параметром спектральных приборов, который характеризует их способность разрешать близкорасположенные спектральные линии в электромагнитном спектре или в спектре энергий в целом. Данная величина выражается через отношение длины волны λ к минимальной разнице $\Delta\lambda$ между длинами волн соседних спектральных линий, которые могут быть различимы в регистрируемом сигнале [6]. Спектральное разрешение напрямую определяется шириной аппаратной функции прибора (функции отклика на монохроматический сигнал). Если спектральное расстояние между двумя линиями меньше полуширины аппаратной функции, их пики перекрываются, что делает невозможным их однозначное разделение.

✉ С.И. Иванов: ivanov.si797@gmail.comС.В. Боритко: boritko@mail.ru

Поступила в редакцию: 19.03.2025

После доработки: 24.05.2025

Принята к публикации: 30.05.2025

В работе рассматривается другая ситуация: когда присутствуют два пика, они начинают пересекаться один с другим. Вследствие этого энергия складывается, провал между ними уменьшается. Складывается ситуация, показанная на рис. 1 (снизу). При сближении и пересечении спектров их энергия суммируется, и спектрометр фиксирует только одну спектральную линию, в то время как на самом деле их две. Выход из этой ситуации известен – достаточно дважды продифференцировать спектр (рис. 1, сверху), тогда на главном минимуме появятся дополнительный локальный максимум.

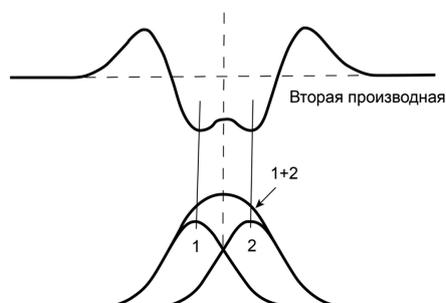


Рис. 1. Постановка задачи

Однако искажения в продифференцированных спектрах, вносимые различными процедурами их вычисления, могут приводить к неверной интерпретации результатов, а учет этого обстоятельства существенно усложняет процедуру вычислений, и снижает достоверность получаемых результатов. В работах [7, 8] теоретически была показана возможность непосредственной регистрации спектра оптического излучения и его производных в процессе проведения измерений. Задача состоит в том, чтобы не проводить математическую постобработку зарегистрированной характеристики, а работать в аналоговом режиме в реальном масштабе времени.

В рамках этой задачи был проведен численный эксперимент с целью определения возможности разрешения двух идентичных сигналов непосредственным (прямым) методом детектирования и методом на основе второй производной, который находит активное применение в различных областях, например в фармацевтической химии [9–11].

Численный эксперимент

Спектральные данные, полученные экспериментально, неизбежно содержат шумовую составляющую, обусловленную как инструментальными погрешностями (например, тепловым шумом детектора), так и статистической природой измеряемого сигнала. Непосредственное применение численного дифференцирования к таким данным приводит к усилению высокочастотных шумовых компонент, что делает результат математически некорректным и физически не интерпретируемым. Такой подход неизбежно относится к методам постобработки данных. Проанализируем этот аспект подробнее.

Для исследования критерия разрешения перекрывающихся спектральных компонент в рамках физической задачи в среде MATLAB выполнено численное моделирование сближения двух идентичных гауссовых сигналов. Цель работы – определение минимального расстояния между максимумами сигналов, при котором их можно достоверно различить в суммарном спектре.

Сигналы заданы функциями

$$g_1(t) = e^{-\frac{(t-d/2)^2}{2\sigma^2}}, \quad g_2(t) = e^{-\frac{(t+d/2)^2}{2\sigma^2}}, \quad (1)$$

где $\sigma = 1$ – стандартное отклонение, $t \in [-10, 10]$ с шагом дискретизации 0.02 (1000 точек), d – расстояние между центрами сигналов.

Суммарный сигнал:

$$S(t) = g_1(t) + g_2(t). \quad (2)$$

Как следует из данных, представленных на рис. 2, при межсигнальном расстоянии $d = 1.00$ суммарный сигнал $S(t)$ не демонстрирует выраженного провала между максимумами ($\Delta S < 5\%$). Наблюдаемое уширение результирующего пика (ширина на полувысоте увеличивается на 18% по сравнению с одиночной гауссианой) свидетельствует о частичном перекрытии компонент, однако не позволяет однозначно идентифицировать их как отдельные спектральные линии. Отсутствие локального минимума в центральной области ($x = 0$) указывает на то, что расстояние между сигналами не превышает предела разрешения, определяемого их полушириной ($FWHM = 2\sigma\sqrt{2\ln 2} \approx 2.35$ для $\sigma = 1$).

Для систематического анализа зависимости глубины провала ΔS от межсигнального расстояния d построена калибровочная кривая (рис. 3).

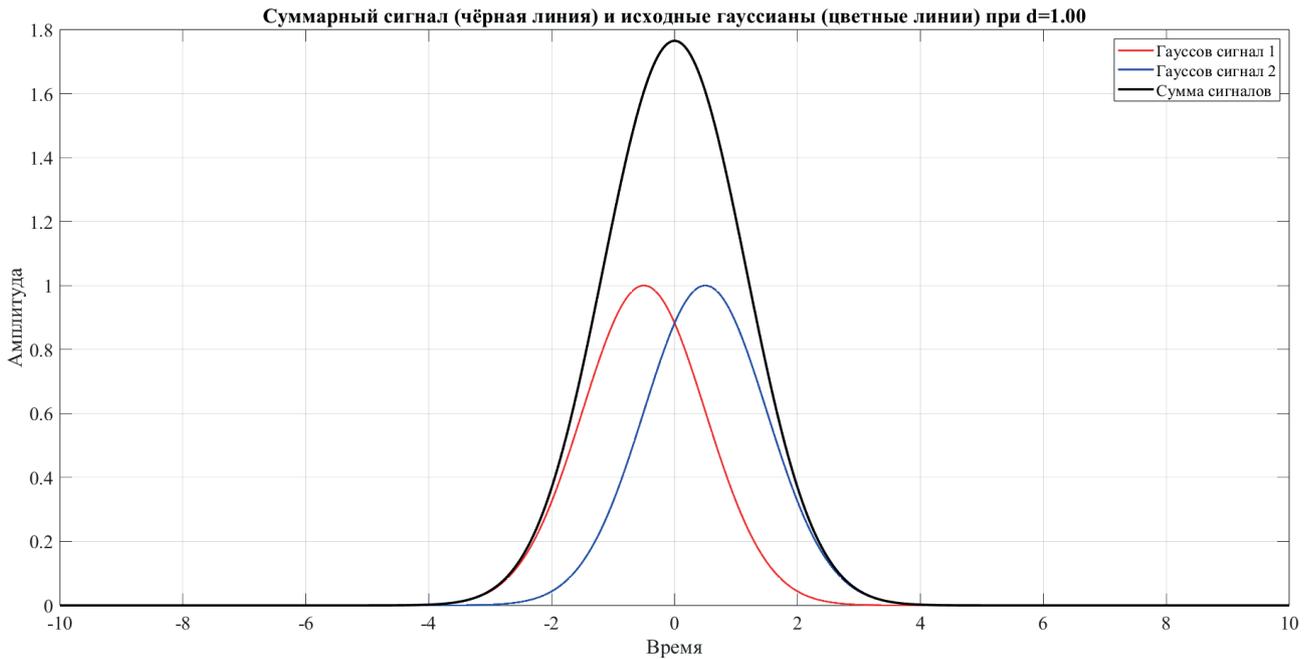


Рис. 2. Суммарный сигнал (черная линия) и исходные гауссианы (цветные линии) при $d = 1.00$

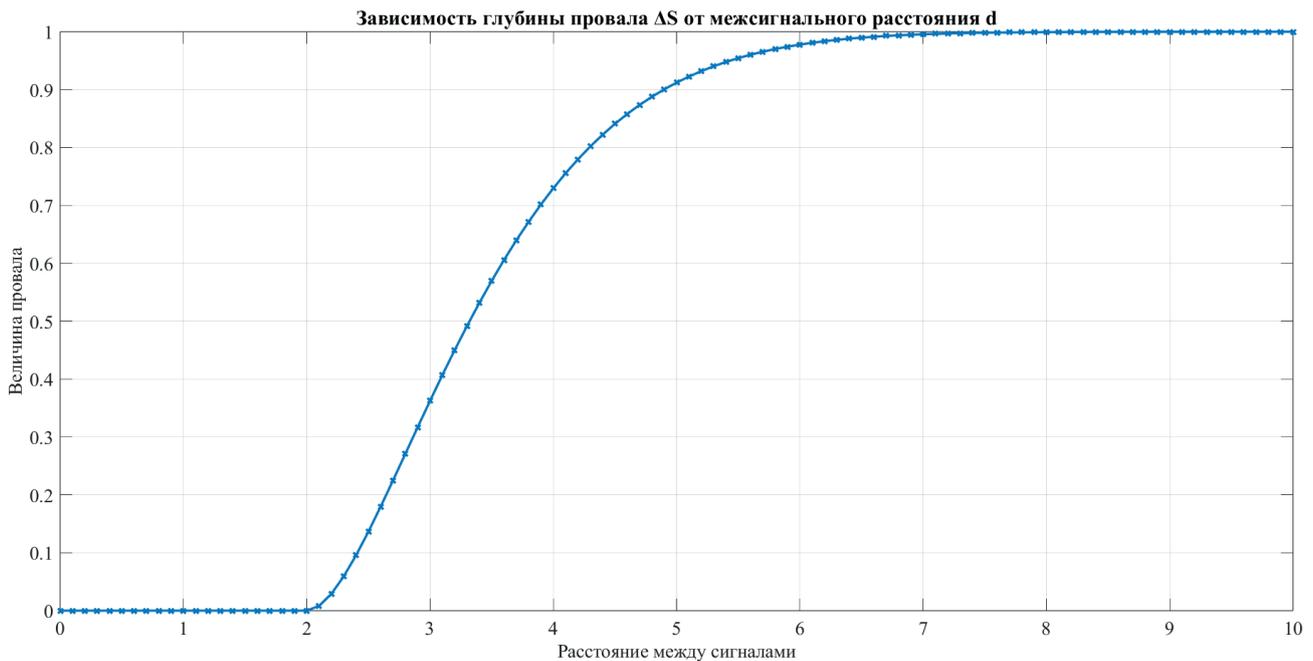


Рис. 3. Зависимость глубины провала ΔS от межсигнального расстояния d

Сравнение методов детектирования близких спектральных линий:
роль второй производной и шумовых искажений

Функция имеет характерную сигмоидальную форму с тремя ключевыми областями.

Зона неразрешения ($d < 2$): $\Delta S \approx 0$, что соответствует полному перекрытию гауссиан.

Переходная область ($2 \leq d \leq 7$). Монотонный рост ΔS от 5 до 95 %.

Зона полного разрешения ($d > 7$). Насыщение сигнала ($\Delta S \rightarrow 100\%$) вследствие исчезающего перекрытия компонент.

Наибольший диагностический интерес представляет переходная область ($d = 2.0 - 3.4$), где:

1) при $d = 2.1$ (рис. 4) появляется провал ($\Delta S = 2 \pm 1\%$, $p < 0.05$), что позволяет гипотетически предположить наличие двух компонент, но визуальное разделение пиков отсутствует;

2) при $d = 3.4$ (рис. 5) достигается визуальное разделение пиков ($\Delta S = 50 \pm 3\%$), соответствующее классическому критерию разрешения Рэля (минимум между максимумами $\geq 20\%$ от амплитуд).

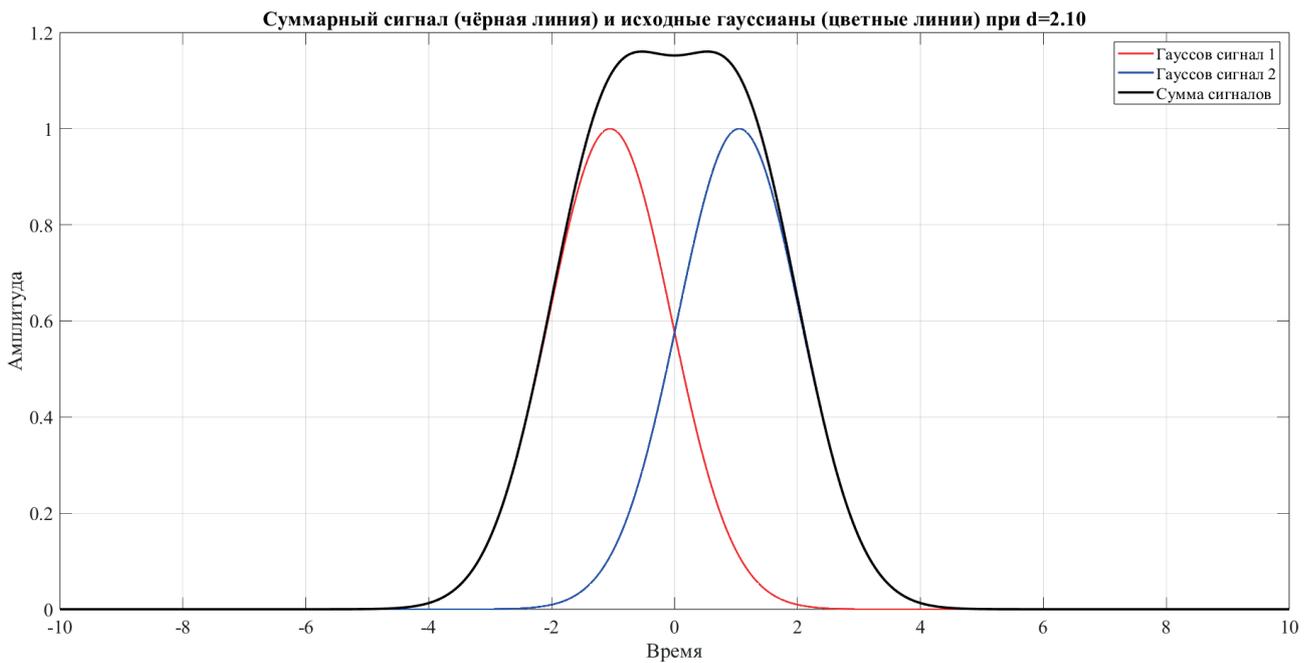


Рис. 4. Суммарный сигнал при $d = 2.1$

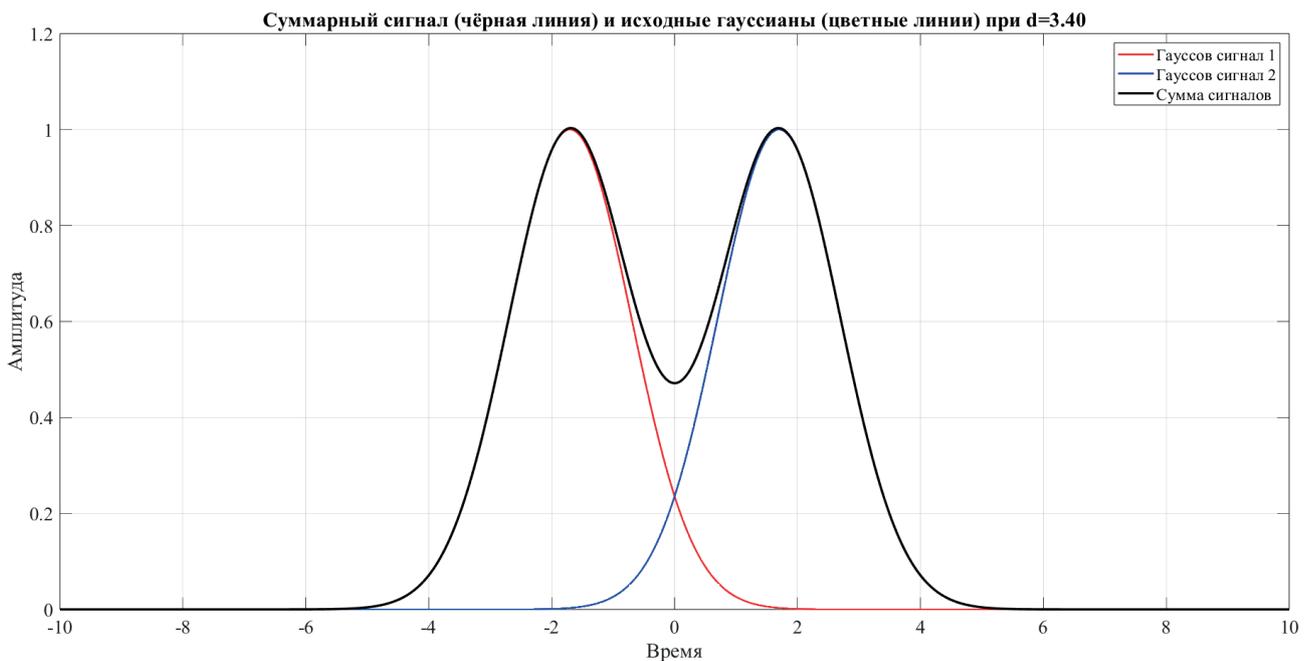


Рис. 5. Суммарный сигнал при $d = 3.4$

Из проведенного выше анализа следует:

1) критическое расстояние визуального разрешения ($d \geq 3.4$) согласуется с теоретическим пределом $d_{\text{теор}} = 2\sigma\sqrt{2\ln 2} \approx 2.35$, учитывая несовершенство методов численного моделирования.

2) субкритический режим ($d = 2.1$) демонстрирует принципиальную возможность детектирования перекрытия компонент через анализ высших производных сигнала.

Для повышения разрешающей способности спектрального анализа предложен метод, основанный на исследовании второй производной суммарного сигнала $S''(t)$. Глубина провала $\Delta S''$ определялась как разность между локальными минимумами производной и центральным максимумом:

$$\Delta S'' = \frac{S''_{\max} - \frac{S''_{\min 1} + S''_{\min 2}}{2}}{S''_{\max}}, \quad (3)$$

где $S''_{\min 1}, S''_{\min 2}$ – амплитуды минимумов по краям провала; S''_{\max} – амплитуда центрального максимума.

Зависимость $\Delta S''(d)$ (рис. 6) демонстрирует нелинейный рост провала с увеличением межсигнального расстояния.

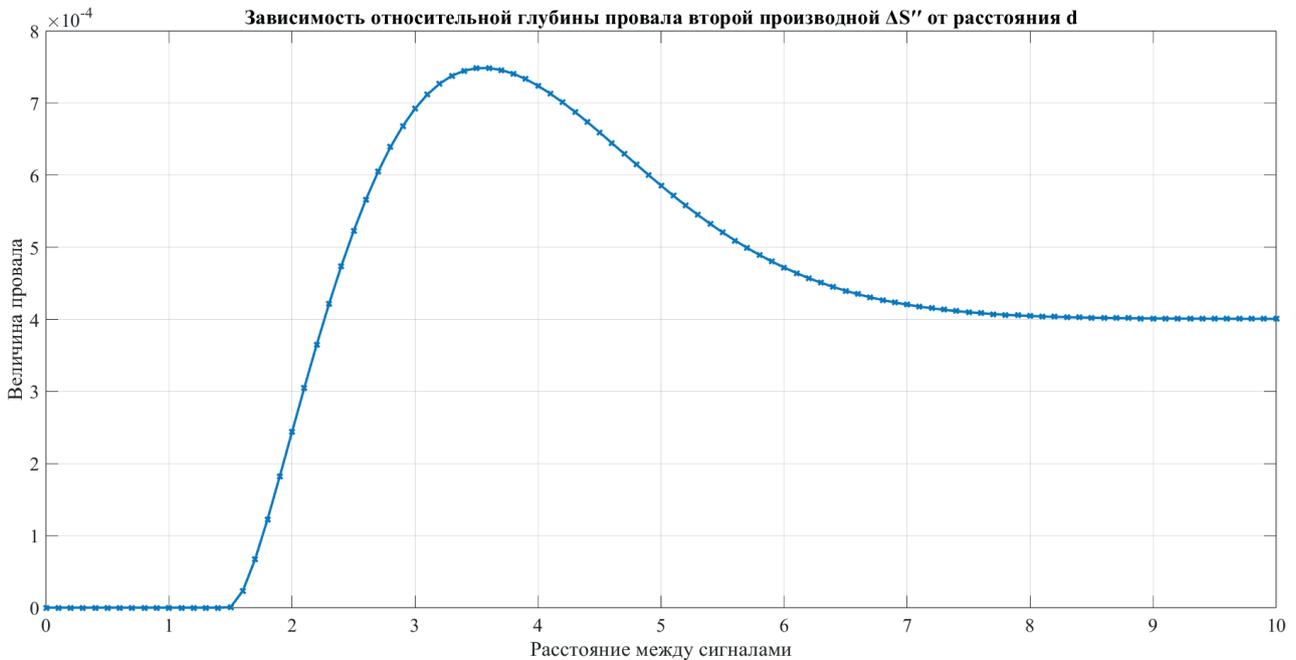


Рис. 6. Зависимость относительной глубины провала второй производной $\Delta S''$ от расстояния d

Критический порог обнаружения снижен до $d = 1.6$, где $\Delta S''$ достигает $12 \pm 1 \%$.

Следует подчеркнуть, что поведение сигнала в области за пределами максимума ($d > 3.5$) не имеет диагностической значимости, так как в этом диапазоне зависимость глубины провала $\Delta S''$ от расстояния d достигает насыщения (рис. 6). Данный эффект объясняется полным разделением спектральных компонент.

Основной интерес представляет область $d < 3.5$, где наблюдается максимальный градиент чувствительности ($\frac{\partial \Delta S''}{\partial d} > 15 \%$ /ед.). Именно в этом диапазоне модуляционный метод демонстрирует преимущество перед прямым детектированием.

Метод производной спектроскопии усиливает контраст между перекрывающимися компонентами за счет:

1) подавления низкочастотных шумов – производная фильтрует медленные флуктуации фона.

2) акцентирования крутизны фронтов – вторая производная чувствительна к резким изменениям сигнала, соответствующим границам спектральных линий.

3) линеаризации отклика – в области перекрытия ($d < 3$) $\Delta S''$ демонстрирует линейную зависимость от d .

Сравнение с прямым методом

Как показано на рис. 7, при межсигнальном расстоянии $d = 1.6$ прямое детектирование суммарного сигнала $S(t)$ не позволяет идентифицировать две компоненты (отсутствие провала в центральной области). Однако вторая производная $S''(t)$ демонстрирует выраженный локальный минимум ($\Delta S'' = 12 \pm 1 \%$), что свидетельствует о наличии скрытого перекрытия спектральных линий.

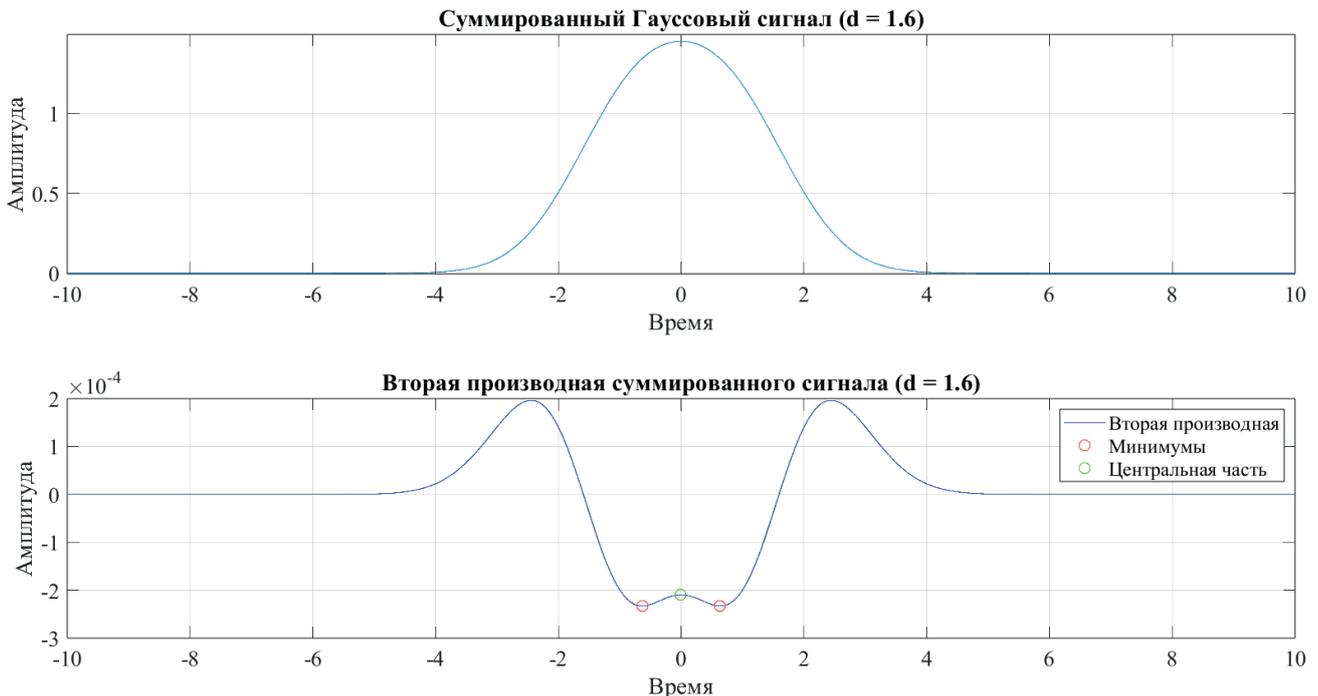


Рис. 7. Суммарный сигнал и его вторая производная при $d=1.6$

Сравнение пороговых расстояний для двух методов выявило, что при прямом методе минимальное расстояние визуального разрешения $d_{\text{прям}} = 2.1$, а при модуляционном методе критическое расстояние обнаружения $d_{\text{мод}} = 1.6$.

Относительный выигрыш в разрешающей способности составляет:

$$\eta = \left((d_{\text{прям}} - d_{\text{мод}}) / d_{\text{мод}} \right) \times 100 \% = (2.1 - 1.6) / 1.6 \times 100 \% \approx 31 \%. \quad (4)$$

Данный результат подтверждает эффективность метода второй производной для детектирования субкритических перекрытий.

Как упоминалось ранее, рассмотрение включения шумовых компонент в гауссовы распределения является необходимым

Исследование влияния шума на разрешающую способность метода второй производной

Хорошо известно, что шум в спектральных составляющих оказывает значительное влияние на производные спектра и приводит к погрешностям и неточностям в результатах измерений. Для оценки устойчивости метода к шумовым воздействиям проведено численное моделирование в среде MATLAB.

В исходные гауссовы сигналы $g_1(t)$ и $g_2(t)$ (межсигнальное расстояние $d = 1.7$) добавлен аддитивный белый гауссов шум:

$$g_i^{\text{noise}}(t) = g_i(t) + \eta(t), \quad \eta(t) \sim N(0, \sigma_{\text{noise}}^2), \quad (5)$$

где $\sigma_{\text{noise}} = 0.01$ – стандартное отклонение шума, соответствующее отношению сигнал-шум SNR = 40 дБ.

На рис. 8 представлены результаты моделирования. Рис. 8а демонстрирует исходный суммарный сигнал $S(t)$ без шума. Параметр $\Delta S'' = 30\%$ указывает на наличие двух компонент. На рис. 8б пред-

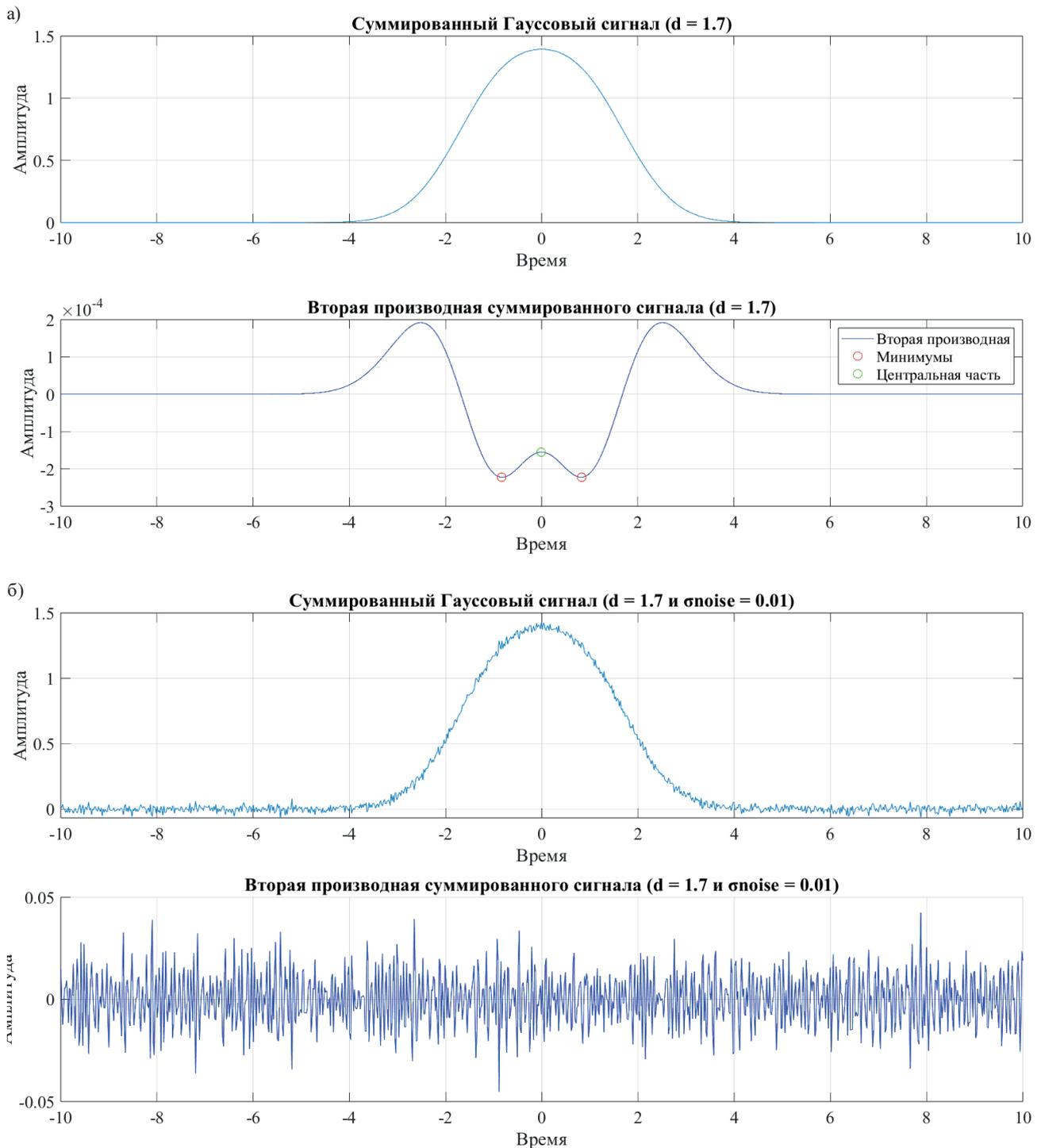


Рис. 8. Сравнение суммарных сигналов (сверху) и их вторых производных (снизу): а) $\sigma_{\text{noise}} = 0$; б) $\sigma_{\text{noise}} = 0.01$

ставлен зашумленный сигнал $S_{\text{noise}}(t)$. Видно, что флуктуации шума ($\sigma S'' = 0.25\%$) маскируют провал производной, снижая $\Delta S''$ фактически до 0% , что статистически незначимо.

Если сравнить эти два графика, становится очевидным, что невозможно однозначно утверждать о наличии двух спектральных составляющих на основе второй производной при зашумленном сигнале. Визуально наблюдается лишь шумовая составляющая, что затрудняет интерпретацию данных.

Для повышения устойчивости метода второй производной к шумовым воздействиям был применен алгоритм скользящего среднего с окном дискретизации $W = 50$. Данный подход позволяет снизить высокочастотные шумы, сохраняя форму исходного сигнала.

Как видно из рис. 9, сглаживание зашумленного сигнала ($\sigma_{\text{noise}} = 0.01$) приводит к уменьшению стандартного отклонения шума. Однако статистическая значимость восстановленного провала остается ниже порога обнаружения, а уширение пика из-за эффекта «размытия» фронтов указывает на компромисс между подавлением шума и сохранением резкости сигнала.

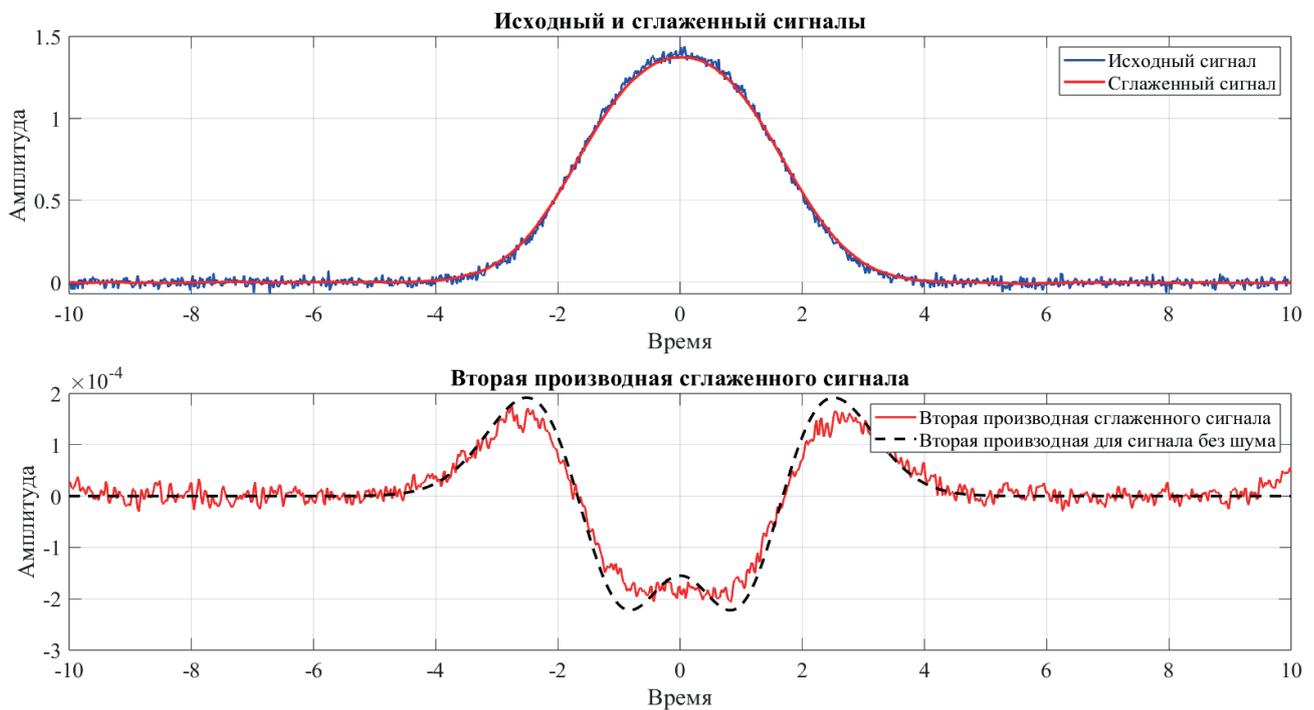


Рис. 9. Влияние сглаживания второй производной и вторая производная без шума

Таким образом, результаты математического моделирования подтвердили два ключевых вывода.

1. Метод второй производной обеспечивает увеличение разрешающей способности при разделении двух близкорасположенных спектральных компонент как минимум на 31% по сравнению с прямым детектированием.

2. Шумовые флуктуации существенно искажают восстановление как общего спектра сигнала, так и его второй производной, снижая достоверность результатов.

Заключение

Проведенное исследование подтвердило эффективность метода второй производной для повышения спектрального разрешения при анализе близкорасположенных спектральных линий. Численное моделирование двух перекрывающихся гауссовых сигналов продемонстрировало, что метод позволяет снизить минимальное расстояние детектирования с $d_{\text{прям}} = 2.1$ до $d_{\text{мод}} = 1.6$, обеспечивая выигрыш в разрешающей способности на 31% по сравнению с прямым детектированием.

Однако метод чувствителен к шумовым воздействиям: аддитивный гауссов шум (SNR = 40 дБ) маскирует провалы в производных, снижая надежность интерпретации. Применение сглаживания скользящим средним частично решает проблему, но вносит компромисс между подавлением шумов и сохранением резкости сигнала.

Результаты работы подчеркивают необходимость интеграции модуляционных методов в спектрометрию, например использование аналоговой обработки сигналов в реальном времени, чтобы минимизировать этап постобработки.

Перспективным направлением дальнейших исследований является разработка алгоритмов, сочетающих производную спектроскопию с адаптивной фильтрацией шумов, а также изучение влияния нелинейных эффектов на точность восстановления спектральных компонент. Полученные результаты имеют значимость для химии, биофизики и материаловедения, где требуется анализ сложных спектров с перекрывающимися линиями.

Благодарности

Результаты работы получены с использованием оборудования Центра коллективного пользования Научно-технологического центра уникального приборостроения РАН (НТЦ УП РАН) [НТИРФ ID: 456451, <https://ckp.ntcup.ru/>].

Финансирование

Работа выполнена без привлечения внешних источников финансирования.

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

С.И. Иванов – выполнение экспериментальных работ, обработка результатов, проведение математического моделирования, выполнение измерений, анализ экспериментальных данных, математического моделирования, выполнение измерений, анализ экспериментальных данных, выявление закономерностей, подбор литературных источников, участие в проведении исследования и обсуждении результатов, подготовка статьи и редактирование текста.

С.В. Боритко – научный руководитель эксперимента, формулировка идеи и целей исследования, постановка задачи, выбор методов исследования, разработка концепции исследования, участие в постановке задачи, выбор методов исследования, разработка концепции исследования, участие в обсуждении результатов.

Список литературы

1. Иванкин А.Н., Олиференко Г.Л., Беляков В.А., Вострикова Н.Л. Физико-химические методы анализа. Спектрометрия: учеб. пособие. М.: МГУЛ, 2016. 127 с.
2. Scheubert K., Hufsky F., Böcker S. Computational mass spectrometry for small molecules. // J. Cheminform, 2013. V. 5. P. 12. DOI: 10.1186/1758-2946-5-12.
3. Ильиных Е.С., Ким Д.Г. Масс-спектрометрия в органической химии: учебное пособие. Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2016. 63 с.
4. Абрамова З.И. Исследование белков и нуклеиновых кислот: учебное пособие. Казань: КГУ им. В.И. Ульянова-Ленина, 2006. 157 с.
5. Беляцкий В.Н. Основы методов атомно-абсорбционной и атомно-эмиссионной спектроскопии: учеб.-метод. пособие. Минск: БГМУ, 2015. 40 с.
6. Дробышев А.И., Савинов, С.С. Аппаратная функция и разрешающая способность цифрового спектрографа. Теория и реальность // Применение анализаторов МАЭС в промышленности: Материалы XIV Международного симпозиума (19–21 августа 2014 г., г. Новосибирск). Издательство СО РАН, 2014. С. 24–29.
7. Пустовойт В.И., Пожар В.Э. Управление характеристиками коллинеарного акустооптического фильтра путем модуляции ультразвука // Радиотехника и электроника, 1998. Т. 43. № 1. С. 121–127.

8. Пожар В.Э., Пустовойт В.И. Дифракция света на акустической кусочно-однородной волне со скачкообразным изменением фазы // Успехи современной радиоэлектроники, 2006. № 9. С. 47–61.

9. Федерякина А.С., Родионова Р.А. Применение производной спектрофотометрии для количественного определения действующих веществ лекарственного средства «ПАРАКСОФЕН» // Вестник фармации, 2009. Т. 44. № 2. С. 31–42.

10. Nhung N., Aboul-Enein H. Recent Developments and Applications of Derivative Spectrophotometry in Pharmaceutical Analysis. // Current Pharmaceutical Analysis, 2013. V. 9. P. 261–277. DOI: 10.2174/1573412911309030005.

11. Redasani V., Patel P., Marathe D., Chaudhari S., Shirkhedkar A., Surana S. A Review on Derivative UV-Spectrophotometry Analysis of Drugs in Pharmaceutical Formulations and Biological Samples/ Journal of the Chilean Chemical Society, 2018. V.63. P.4126–4134. DOI:10.4067/s0717-97072018000304126.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2025, vol. 14, no. 3, pp. 192–202

Comparison of detection methods for closely spaced spectral lines: the role of the second derivative and noise distortions

S. I. Ivanov , S. V. Boritko 

Scientific and Technological Centre of Unique Instrumentation of the RAS, Moscow, 117342, Russia

 ivanov.si797@gmail.com

 boritko@mail.ru

Received March 19, 2025; revised May 24, 2025; accepted May 30, 2025

The aim of this work is a comparative analysis of methods for improving spectral resolution in the detection of closely spaced spectral lines under conditions of their partial overlap. The main focus is on the second derivative method, which enhances the contrast between components by emphasizing high-frequency features of the signal. Within numerical modeling in the MATLAB environment, two approaches were investigated: direct detection of the total signal and analysis of its second derivative. The simulation was performed for two identical Gaussian signals with a variable interpeak distance d , supplemented by additive noise. The results showed that the second derivative method reduces the minimum visual resolution threshold from $d_{direct} = 2.1$ to $d_{mod} = 1.6$, providing a 31% gain in resolving power. However, noise fluctuations (SNR = 40 dB) significantly distort the derivative signals, masking the troughs between peaks. Smoothing the data with a moving average partially suppresses the noise but leads to peak broadening by 15%, demonstrating a compromise between accuracy and preservation of the signal shape.

Keywords: spectral resolution, second derivative method, numerical modeling, Gaussian signals, noise immunity, modulation approach.

References

1. Ivankin A.N., Olifenko G.L., Belyakov V.A., Vostrikova N.L. Fiziko-khimicheskiemetodyanaliza. Spektrometriya [Physicochemical Methods of Analysis. Spectrometry]. Moscow, MGUL Publ., 2016. 127 p. (in Russian).
2. Scheubert K., Hufsky F., Böcker S. Computational mass spectrometry for small molecules. J. Cheminform, 2013. Vol. 5. Pp. 12. DOI: 10.1186/1758-2946-5-12.
3. Il'inykh E.S., Kim D.G. Mass-spektrometriya v organicheskoi khimii [Mass Spectrometry in Organic Chemistry]. Chelyabinsk, YuUrGU Publ., 2016. 63 p. (in Russian).
4. Abramova Z.I. Issledovanie belkov i nukleinykh kislot [Study of Proteins and Nucleic Acids]. Kazan, KGU Publ., 2006. 157 p. (in Russian).

5. *Belyatskii V.N.* Osnovy metodov atomno-absorbtsionnoi i atomno-emissionnoi spektroskopii [Fundamentals of Atomic Absorption and Emission Spectroscopy Methods]. Minsk, BGMU, 2015. 40 p. (in Russian).

6. *Drobyshev A.I., Savinov S.S.* Apparatsnaya funktsiya i razreshayushchaya sposobnost' tsifrovogo spektrografa. Teoriya i real'nost' [Hardware Function and Resolution of a Digital Spectrograph. Theory and Reality]. Primenenie analizatorov MAES v promyshlennosti: Materialy XIV Mezhdunarodnogo simpoziuma (19–21 avgusta 2014 g.) [Application of MAES analyzers in industry: Proceedings of the XIV International Symposium (August 19–21, 2014)]. Novosibirsk, SO RAN Publ. Pp. 24–29 (in Russian).

7. *Pustovoi V.I., Pozhar V.E.* Upravlenie kharakteristikami kollinarnogo akustoopticheskogo fil'tra putem modulyatsii ul'trazvuka [Control of Collinear Acousto-Optic Filter Characteristics via Ultrasound Modulation]. Radiotekhnika i Elektronika, 1998. Vol. 43. No. 1. Pp. 121–127 (in Russian).

8. *Pozhar V.E., Pustovoi V.I.* Difraktsiya sveta na akusticheskoi kusochno-odnorodnoi volne so skachkoobraznym izmeneniyem fazy [Light Diffraction on an Acoustic Piecewise-Homogeneous Wave with a Stepwise Phase Change]. Uspekhi Sovremennoi Radioelektroniki, 2006. No. 9. Pp. 47–61 (in Russian).

9. *Federiakina A.S., Rodionova R.A.* Primenenie proizvodnoi spektrofotometrii dlya kolichestvennogo opredeleniya deistvuyushchikh veshchestv lekarstvennogo sredstva «PARAKSOFEN» [Application of Derivative Spectrophotometry for Quantitative Determination of Active Substances in the Drug «PARAKSOFEN»]. Vestnik Farmatsii, 2009. Vol. 44. No. 2 (in Russian).

10. *Nhung N., Aboul-Enein H.* Recent Developments and Applications of Derivative Spectrophotometry in Pharmaceutical Analysis. Current Pharmaceutical Analysis, 2013. Vol. 9. Pp. 261–277. DOI: 10.2174/1573412911309030005.

11. *Redasani V., Patel P., Marathe D., Chaudhari S., Shirkhedkar A., Surana S.* A Review on Derivative UV-Spectrophotometry Analysis of Drugs in Pharmaceutical Formulations and Biological Samples. Journal of the Chilean Chemical Society, 2018. Vol. 63. Pp. 4126–4134. DOI: 10.4067/s0717-97072018000304126.

УДК 53.05

Исследование малых вариаций потока мюонов космических лучей в атмосфере

© 2025 г. С. С. Тимаков, А. А. Петрухин

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115409, Россия

В статье рассматривается способ анализа данных детекторов мюонов космических лучей, позволяющий выявлять незначительные вариации потока, неразличимые в интегральных рядах скорости счета мюонов. Приводится полный математический аппарат способа. Он требует, чтобы детектор мог различать мюоны по азимутальным углам прилета, а для максимальной эффективности – состоял из нескольких независимых детекторов со схожими характеристиками. Ключевой особенностью нового способа является то, что наряду с амплитудой сигнала, отражающего вариации в потоке мюонов, рассматривается направление этого сигнала, которое можно сопоставлять с пространственными характеристиками источников изменения потока мюонов – различных атмосферных явлений. Каждый этап нового способа рассматривается на примере приближения теплого фронта к Москве, а также демонстрируется на примере атмосферного явления, сопровождаемого линией облаков. Дополнительно в работе приведена визуализация данных для нового способа, позволяющая сводить большой объем данных к одной диаграмме, которую можно наносить на спутниковые изображения, и на месте сопоставлять наблюдаемые вариации мюонов с атмосферными явлениями.

Ключевые слова: мюоны, обработка данных, вариации потока мюонов, космические лучи, атмосферные явления.

1. Введение

Мюоны рождаются в результате распадов вторичных частиц, образующихся при взаимодействии первичного космического излучения с атмосферой Земли на глубине примерно 100 г/см^2 , которая соответствует высотам около 15 км, называемым слоем генерации мюонов. Ионизационные потери мюона в атмосфере составляют около $2 \text{ МэВ} \cdot \text{см}^2/\text{г}$, а средняя энергия околоразличительных мюонов у поверхности Земли – 4 ГэВ. Поток мюонов, регистрируемый в наземных детекторах, зависит главным образом от количества преодолеваемого вещества и расстояния до точки генерации. Благодаря тому, что мюоны проходят практически через всю атмосферу Земли, они могут использоваться для ее непрерывного мониторинга.

Большинство работ по изучению влияния атмосферы на поток мюонов ограничивается его зависимостью от основных характеристик атмосферы в точке наблюдения, таких как температура и давление. Изучение влияния локальных атмосферных явлений (отдельные облака, внутренние гравитационные волны и др.) затруднено сразу несколькими факторами. Во-первых, для таких исследований детектор должен регистрировать достаточное количество мюонов, чтобы обеспечить необходимую статистику для изучения явлений, наблюдение которых возможно только в диапазоне времени от десятков минут до двух-трех часов. Во-вторых, детектор мюонов должен располагаться на поверхности Земли, а не под землей. Подземные детекторы мюонов полезны при изучении процессов в атмосфере, происходящих на высоте слоя генерации мюонов, поскольку они регистрируют мюоны более высоких энергий, чем схожие по характеристикам детекторы на поверхности Земли, но частицы таких энергий менее чувствительны к любым атмосферным изменениям на пути от точки генерации до регистрирующей установки.

✉ С.С. Тимаков: SSTimakov@mephi.ru
А.А. Петрухин: AAPetrukhin@mephi.ru

Поступила в редакцию: 02.06.2025
После доработки: 10.06.2025
Принята к публикации: 10.06.2025

На сегодняшний день среди исследований локальных атмосферных явлений можно выделить изучение вариаций, обусловленных грозами [1]. Электрические поля в грозовых облаках оказывают достаточно сильное влияние на поток мюонов, чтобы можно было наблюдать вызванные ими изменения на большинстве детекторов мюонов.

Данная статья посвящена принципиально новому способу анализа данных мюонных детекторов, благодаря которому можно обнаруживать незначительные изменения в потоке мюонов, вызванные локальными атмосферными явлениями. Для реализации этого способа необходим детектор, способный различать потоки мюонов с различных азимутальных направлений. Таким детектором является мюонный годоскоп (далее – МГ) УРАГАН [2]. Он непрерывно регистрирует около 4500 мюонов в секунду на трех супермодулях (1500 на супермодуль) и способен восстанавливать их траектории с точностью в 1° по зенитному и азимутальному углам. По его данным можно не только обнаруживать вариации, но и устанавливать направления, в которых наблюдался недостаток или избыток мюонов. Это иллюстрируется на специальных мюонограммах, демонстрирующих отклонение потока частиц от среднего значения в различных направлениях [1].

Мюонограммы удобны при анализе анизотропии потока мюонов и применяются при исследовании атмосферных явлений [3–5], но их сложно сопоставлять с атмосферными источниками локальных возмущений из-за низкой статистики потока мюонов с отдельных направлений и зенитной неоднородности потока. Для обоснованных выводов о влиянии локальных явлений на вариации потока мюонов необходим большой набор данных о реакции потока на явления одного типа, что сложно реализовать в условиях динамической атмосферы, в которой каждое событие является практически уникальным. Требуется создание нового метода, который бы позволял в условиях низкой статистики обнаруживать слабые изменения потока мюонов, вызванных локальными атмосферными явлениями. Рассмотрим такой метод на примере МГ УРАГАН.

2. Метод азимутального сканирования

Каждую минуту МГ УРАГАН, состоящий из трех независимых супермодулей (СМ 8, СМ 10, СМ 11), сохраняет информацию о зарегистрированных мюонах в матрице зенитно-азимутальных углов $M_{\theta\varphi}$, которая имеет размеры 90×90 ячеек [6]. Каждый элемент матрицы соответствует числу мюонов с конкретных зенитного θ (с шагом в 1°) и азимутального φ (с шагом в 4°) углов, зарегистрированных в течение живого времени $0 \leq \tau < 60$ с. Таким образом, для каждого целочисленного промежутка времени T мин имеется набор из T матриц, который можно описать в виде тензора $M_{\theta\varphi T}$. При делении элементов каждой матрицы $M_{\theta\varphi}$ этого тензора на соответствующее им живое время τ получается тензор скорости счета мюонов $C_{\theta\varphi\tau}$, каждый элемент которого соответствует скорости счета мюонов с конкретных зенитного θ и азимутального φ углов для момента времени t .

Тензоры могут быть использованы для вычисления временного ряда скорости счета мюонов со всех зенитных углов для определенного азимутального направления φ :

$$S_{\varphi}(t) = \sum_{\theta} C_{\theta\varphi t}. \quad (1)$$

Временной шаг может быть выбран любым (но кратным 1 мин) путем сложения между собой минутных матриц. Используется полярная система координат: φ – азимутальный угол (0° – направление на север), θ – зенитный угол (0° – по направлению к зениту).

Допустим, что какое-то явление оказывает влияние на атмосферу, вызывая в ней колебания с некоторым периодом, которые можно представить как поперечные волны, распространяющиеся от источника возмущения. Такие волны могут смещать слой генерации мюонов, что должно отразиться на потоке мюонов. Рассмотрим случай, когда такая волна проходит над детектором. Если отобразить мюоны в плоскости, которая перпендикулярна рабочим плоскостям МГ УРАГАН, а вектор нормали этой плоскости будет сонаправлен с волновым вектором волны, то все отображенные мюоны будут приходить с одной фазы возмущенной области слоя генерации. В таком ряде скорости счета, построенном на основе отображенных мюонов, вызванные волной вариации потока мюонов обнаружить легче всего. Это не значит, что они будут отчетливо видны, поскольку существует много других факторов, влияющих

на вариацию потока мюонов. Однако при любом другом способе отбора мюонов эффект будет менее заметным, поскольку они будут отбираться с разных фаз волны, что может компенсировать вариации: уменьшение потока из той части атмосферы, где слой генерации приподнят, будет конкурировать с увеличением потока из той части, где он опущен.

Введем понятие сканирующей плоскости по следующим критериям: вектор нормали такой плоскости перпендикулярен вектору, направленному от установки к зениту, а сама плоскость проходит через геометрический центр детектора. Допустимо пренебречь геометрическими размерами детектора и рассматривать его как точку. Тогда два вышеприведенных условия можно преобразовать в одно: плоскость проходит через детектор и точку зенита для этого детектора. Этим условиям удовлетворяет целое семейство плоскостей, отличающихся лишь значениями азимутальной компоненты φ их нормалей.

Чтобы провести отбор мюонов в сканирующей плоскости с азимутальным углом вектора нормали φ_0 , необходимо отобрать все мюоны, траектории которых принадлежат семейству сканирующих плоскостей с азимутальными углами вектора нормали в диапазоне

$$\varphi_0 \leq \varphi < \varphi_0 + 4^\circ. \quad (2)$$

Далее вместо выражения «сканирующая плоскость, вектор нормали которой имеет азимутальный угол φ » будет использоваться обозначение P_φ . Когда рассматриваются траектории мюонов, лежащие в сканирующей плоскости, имеются в виду все траектории мюонов, принадлежащих зазору – всему семейству сканирующих плоскостей, описываемых формулой (2). Для увеличения статистики зазор можно дополнительно расширить, тогда семейство плоскостей будет описываться формулой

$$\varphi_0 - \Delta\varphi \leq \varphi < \varphi_0 + \Delta\varphi + 4^\circ, \quad (3)$$

где $\Delta\varphi$ – искусственно введенный зазор. Отметим особенность сканирующих плоскостей: $P_\varphi \equiv P_{\varphi+180^\circ}$, а, значит, любые результаты, полученные для потока мюонов в плоскости P_φ , будут повторяться в $P_{\varphi+180^\circ}$.

Основной алгоритм метода выглядит таким образом:

1. Для рассматриваемого интервала времени (t_1, t_2) создаются временные ряды скорости счета в сканирующих плоскостях: $S_0(t), S_1(t), \dots, S_{179}(t)$ по формуле (1).

2. Каждый из полученных рядов подвергается анализу с помощью комплексного вейвлета Морли в диапазоне периодов (T_1, T_2) с шагом ΔT мин, и получается матрица комплексных коэффициентов, для которых вычисляются их модули.

3. Проводится анализ матриц коэффициентов мощностей вейвлет-разложения, описанный далее.

Результат анализа для выбранного φ представлен на рис. 1: на нем представлен ряд дифференциальной интенсивности (сверху) и матрица мощности коэффициентов вейвлет-разложения W_{T_i} (снизу), где каждый элемент соответствует значению мощности для рассматриваемого периода T и момента

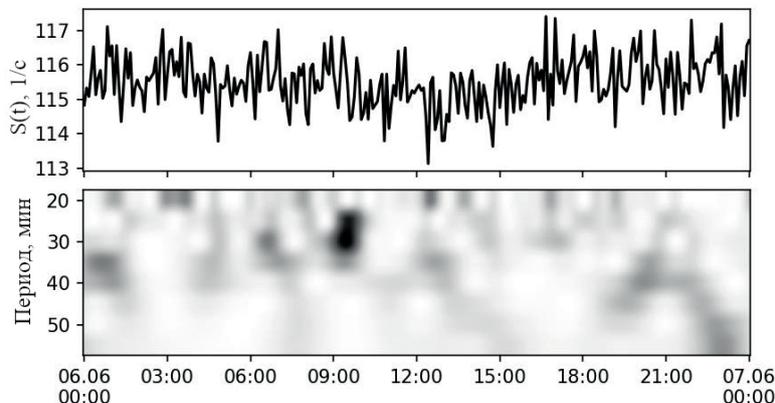


Рис. 1. Пример вейвлета для ряда в сканирующей плоскости, полученный для даты 06.06.2021: сверху – ряд $S_\varphi(t)$; снизу – матрица мощности коэффициентов вейвлет-разложения; более темные области соответствуют высоким относительным значениям коэффициентов

времени t . Все вейвлеты можно объединить в один тензор $W_{T\varphi t}$, где индекс φ отвечает за положение сканирующей плоскости и соответствует ее азимутальному направлению нормали. Описанный алгоритм доступен для любого детектора, способного различать отдельные траектории мюонов хотя бы по азимутальным углам. Возможная конструкция детектора описана в патенте, посвященном этому способу анализа данных [7]. Подробное описание каждого шага можно найти в ранее опубликованной статье, посвященной этому методу [8].

3. Сопоставление данных МГ УРАГАН с метеонаблюдениями

Один из способов оценки влияния атмосферных явлений на вариации потока мюонов – сопоставление с актуальной метеорологической обстановкой в зоне наблюдения с помощью данных метеорологических радаров или спутников. Такие данные чаще всего представляют собой набор изображений для разных моментов времени, которые неудобно сопоставлять с результатами вейвлет-анализа. Для решения этой проблемы применяется особая фильтрация, которая одновременно уменьшает количество обрабатываемой информации и подготавливает ее к визуальному анализу:

Весь диапазон периодов вейвлетов (T_1, T_2) вручную разбивается на поддиапазоны вида $\tau_k = (\tau_k, \tau_{k+1})$, $1 \leq k \leq L$, где L – число поддиапазонов.

Для каждого из поддиапазонов ищется максимальное значение мощности коэффициентов вейвлет-разложения:

$$R_{\tau\varphi t} = \left(\max_{\tau_k \leq T < \tau_{k+1}} W_{T\varphi t} \right) \Big|_{1 \leq k < L}. \quad (4)$$

Полученные значения тензора $R_{\tau\varphi t}$, которые будут называться откликами, необходимо перемасштабировать от 0 до 1:

$$F_{\tau\varphi t} = (R_{\tau\varphi t} - R_{\min}) / (R_{\max} - R_{\min}), \quad (5)$$

где R_{\min} и R_{\max} – соответственно, минимальное и максимальное значение тензора.

Для каждого момента времени t отклик $F_{\tau\varphi t}$ можно нанести на круговую диаграмму. Направление отрезка от окружности к центру в этой диаграмме соответствует азимутальному направлению вектора нормали сканирующей плоскости, а величина отрезка пропорциональна мощности коэффициентов вейвлет-разложения.

Отклики могут быть нанесены на любое изображение, например, на спутниковые изображения Meteosat¹, в которых наблюдается наступление атмосферного фронта 02.05.2021 (рис. 2). Со 2 по 3 мая с юга к Москве подходит теплый фронт. Он был крупным, четко различимым и единственным в области наблюдения, что обеспечило наиболее чистые условия для тестирования метода.

Для всего рассматриваемого промежутка времени были вычислены отклики для каждого супермодуля МГ УРАГАН. Диапазон периодов был выбран от 1 до 3 ч. При приближении теплого фронта на всех супермодулях наблюдаются отклики, направленные вдоль его вектора движения – в направлении юг-север (рис. 3, верхний ряд). Величина коэффициентов на откликах представлена длиной отрезка, от окружности к центру.

Несмотря на общее согласие в откликах супермодулей (примерно одно направление и время), между ними имеются различия – углы откликов немного варьируются, а их времена возникновения могут не сходиться с разницей в несколько часов. Если предполагается, что отклики вызваны одним физическим явлением, то ожидаемое проявление вариаций мюонов должно быть одинаковым на всех супермодулях, так как расстояние между ними (несколько метров) несоизмеримо меньше характерных размеров атмосферных явлений. Расхождения могут быть вызваны случайными флуктуациями, которые являются независимыми для каждого модуля. Если амплитуда флуктуаций сопоставима с амплитудой искомых

¹ Архив спутников Meteosat [Электронный ресурс]. URL: <https://weather.us/satellite/russia-west/top-alert-15min/20210502-0245z.html> (дата обращения: 28.06.2024).

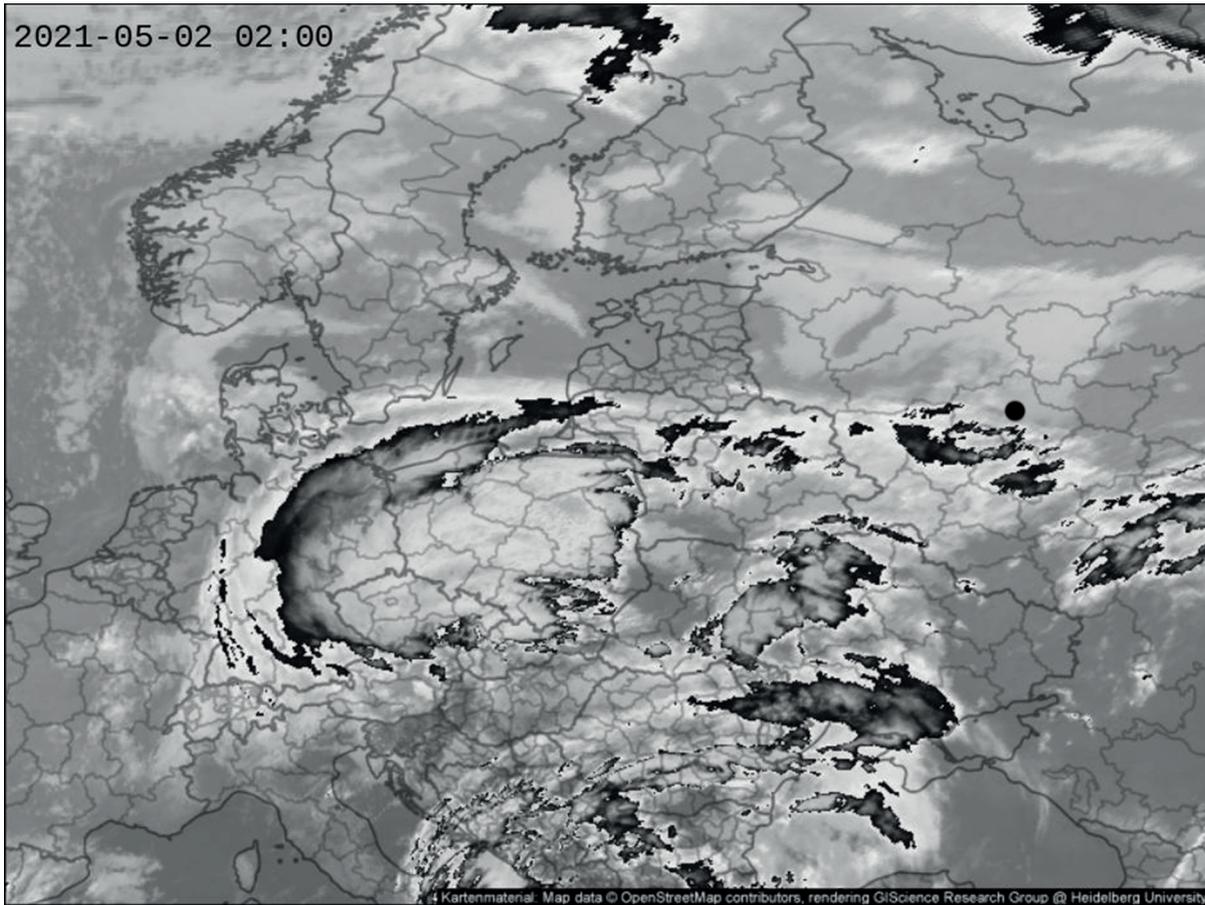


Рис. 2. Спутниковое изображение, на котором видно приближение теплого фронта к Москве с юга. Положение Москвы отмечено точкой справа посередине

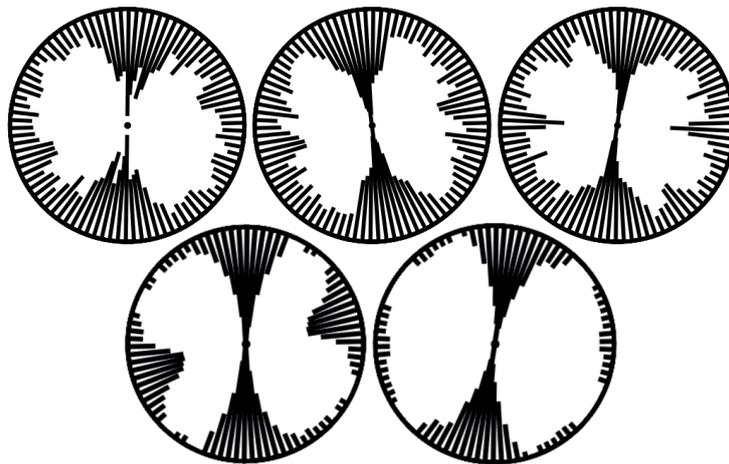


Рис. 3. Отклики при приближении теплого фронта к Москве 02.05.2021, 02:00. Сверху, слева направо: отклики для СМ 08, СМ 10, СМ 11. Снизу, слева направо: отклики $*D_{\text{тот}}$ с дополнительными окнами и обрезкой 25 %, отклики $A_{\text{тот}}$ для сканирующих полуплоскостей

вариаций, то флуктуации могут оказывать на них сильное влияние, которое в контексте откликов будет проявляться в виде смещений по углу и времени.

4. Способы повышения эффективности метода

Одним из способов исправить эту ситуацию является увеличение статистики путем сложения скоростей счета N разных супермодулей:

$$M_{\theta\varphi t}^{all} = \sum_{i=1}^N M_{\theta\varphi t}^i \quad (6)$$

Однако этот способ будет плохо работать в том случае, если амплитуда флуктуаций сопоставима с амплитудой вариаций, поскольку невозможно разделять полезные сигналы и шумовые.

Допустим, что полезные сигналы хоть в какой-то степени проявляются на каждом супермодуле, тогда как шумовые нет: предполагаем, что флуктуации могут заглушить амплитуду, сместить во времени или по углу, но не погасить полностью. В соответствии с этим допущением дополним алгоритм сопоставлением между собой разных супермодулей:

$$D_{\tau\varphi t} = \min_{1 \leq i < N} F_{\tau\varphi t}^i \quad (7)$$

Индекс i проходит через все супермодули, от которых был получен отклик. В результате такого сопоставления получается матрица откликов $D_{\tau\varphi t}$, которые являются минимальными значениями откликов для каждого угла, момента времени и поддиапазона периодов среди всех супермодулей. Можно сделать правила создания откликов $D_{\tau\varphi t}$ менее строгими, если сравнивать не конкретные величины тензоров откликов $F_{\tau\varphi t}$, а суммы элементов в некоторых окнах по углу $\Delta\phi$ и по времени Δt . Для этого вычислим соответствующие суммы для каждого супермодуля:

$${}^*F_{\tau\varphi t} = \sum_{t-\Delta t\phi-\Delta\phi}^{t+\Delta t\phi+\Delta\phi} \sum F_{\tau\varphi t} \quad (8)$$

Подставим получившиеся отклики в формулу (7) и получим оконные отклики ${}^*D_{\tau\varphi t}$. Чтобы избавиться от пьедестала, получившегося в результате суммирования, модернизируем формулу (8) и введем понятие обрезки U – пороговое условие для суммирования. Суммируются только те элементы тензора, которые больше порога:

$${}^*F_{\tau\varphi t} = \sum_{t-\Delta t\phi-\Delta\phi}^{t+\Delta t\phi+\Delta\phi} \sum F_{\tau\varphi t} \Big|_{>U} \quad (9)$$

Значения откликов $D_{\tau\varphi t}$ принадлежат диапазону от 0 до 1. На рис. 3, слева в нижнем ряду представлены получившиеся отклики ${}^*D_{\tau\varphi t}$ при пороге 0.25.

Таким образом, были выделены полезные сигналы, присутствующие на всех супермодулях, и подавлены шумовые. В данном случае шумовым считается любой сигнал, отсутствующий хотя бы в одном СМ. Обрезка позволяет убрать из сумм по окнам все отклики, которые мы считаем шумовыми по умолчанию (с маленькой амплитудой).

Важно отметить один факт: с каждым новым этапом фильтрации данных мы все больше теряем изначальный физический смысл получаемых значений и делаем их более абстрактными. Если сравнить отклики ${}^*D_{\tau\varphi t}$ с вейвлетами, то не получается ясно обозначить связь между ними, ведь отклики прошли несколько этапов сравнения, суммирования и перемасштабирования. Определим физический смысл откликов ${}^*D_{\tau\varphi t}$ следующим образом: значение элемента тензора ${}^*D_{\tau\varphi t}$ отражает минимальную величину мощности коэффициентов вейлет-разложения, полученного для всех супермодулей для рассматриваемого момента времени t , диапазона периодов τ и сканирующей плоскости, вектор нормали которой направлен по азимутальному углу φ .

Мюоны отбираются в сканирующих плоскостях, и мощность коэффициентов вейвлет-разложения ассоциируется с падением скорости счета мюонов по всем направлениям, лежащим в зазоре сканирующей плоскости. Но если падение произошло только в одной полуплоскости или в некотором узком диапазоне азимутальных и зенитных углов, то такой отбор может привести к неверной интерпретации наблюдаемых откликов. Чтобы понятнее описать эту проблему, представим следующую ситуацию. К северу от точки наблюдения есть что-то, что влияет на поток мюонов. Для сканирующей плоскости P_{90} , нормаль которой направлена на восток, создаются отклики. Часть этой плоскости затрагивает возмущенные направления с севера. На круговой диаграмме наблюдаются отклики в направлении восток-запад, и делается вывод о наличии над точкой наблюдения возмущения, движущегося вдоль направления восток-запад, что неверно.

5. Сканирующие полуплоскости

Для устранения таких ситуаций незначительно изменим метод: ограничим часть сканирующей плоскости прямой, проходящей через геометрический центр детектора и соответствующую центру точку зенита. Для описания направления полученной полуплоскости будем использовать угловую компоненту φ характеризующего вектора, лежащего в этой полуплоскости и ортогонального ограничивающей прямой. Все предыдущие шаги останутся без изменений, с поправкой на то, что суммирование потоков мюонов с отдельных углов будет проводиться лишь для одной половины сканирующей плоскости. Введем еще один этап, заключающийся в сопоставлении противоположных откликов ${}^*D_{\tau\varphi t}$ для каждого момента времени и поддиапазона периодов между собой:

$$A_{\tau\varphi t} = \min \left({}^*D_{\tau\varphi_x t}, {}^*D_{\tau\varphi_y t} \right) \Big|_{\varphi_y = \varphi_x + 180^\circ}. \quad (10)$$

Пример откликов $A_{\tau\varphi t}$ на приближение теплого фронта представлен на рис. 3, справа, в нижнем ряду. Введем условия возникновения откликов в методе $A_{\tau\varphi t}$:

1. В существующем поле скалярной величины X (например, плотность воздуха) существует изменение (градиент), описываемое изоповерхностью, которую для простоты считаем вертикальной плоскостью. Отклик возникает, когда изоповерхность с вектором нормали φ совпадает со сканирующей плоскостью P_φ .

2. Величина градиента достаточно большая, чтобы оказывать такое влияние на поток мюонов, которое будет заметно в ряде скорости счета, составленном для мюонов, траектории которых лежат в сканирующей плоскости.

Первое условие качественное – при наблюдении отклика $A_{\tau\varphi t}$ предполагается именно такое объяснение его причины. Второе условие количественное и зависит от характеристик детектора. На основе имеющихся данных о направлении ветра фронтальная зона, проходившая через Москву 02.05.2021, начала свое движение над детектором примерно в полночь на 2 мая. Плоскость, разделяющая теплую и холодную массы воздуха в теплом фронте, наклонена под большим углом в сторону движения. В вертикальном профиле атмосферы в точке наблюдения теплая масса воздуха постепенно вытесняет холодную сверху вниз, поэтому для отклика 02.05.2021 г. в 02:00 объяснение реакции мюонов на приближающийся теплый фронт лежит в области высокой тропосферы или нижней стратосферы, где в рассматриваемый момент времени проходит верхняя часть фронтальной зоны. Исходя из этих соображений, в соответствии с ранее введенными условиями, можно сделать вывод, что градиент тесно связан с характеристиками верхней части фронтальной зоны.

Описанный метод позволяет обнаруживать вариации потока мюонов настолько слабой амплитуды, что они не наблюдаются в интегральных рядах. В качестве дополнительного примера приведем событие 01.04.2024 г. – возмущение в атмосфере неизвестной природы, сопровождавшееся линией облаков шириной около 10 км и длиной порядка сотен км (рис. 4). Во время прохождения облаков через Москву не наблюдается резких изменений в давлении или температуре, и единственным способом обнаружения остается визуальный анализ данных метеорологических радаров или спутниковых изображений².

² Архив спутников дистанционного зондирования Sentinel [Электронный ресурс]. URL: <https://apps.sentinel-hub.com/eo-browser/> (дата обращения: 28.06.2024).

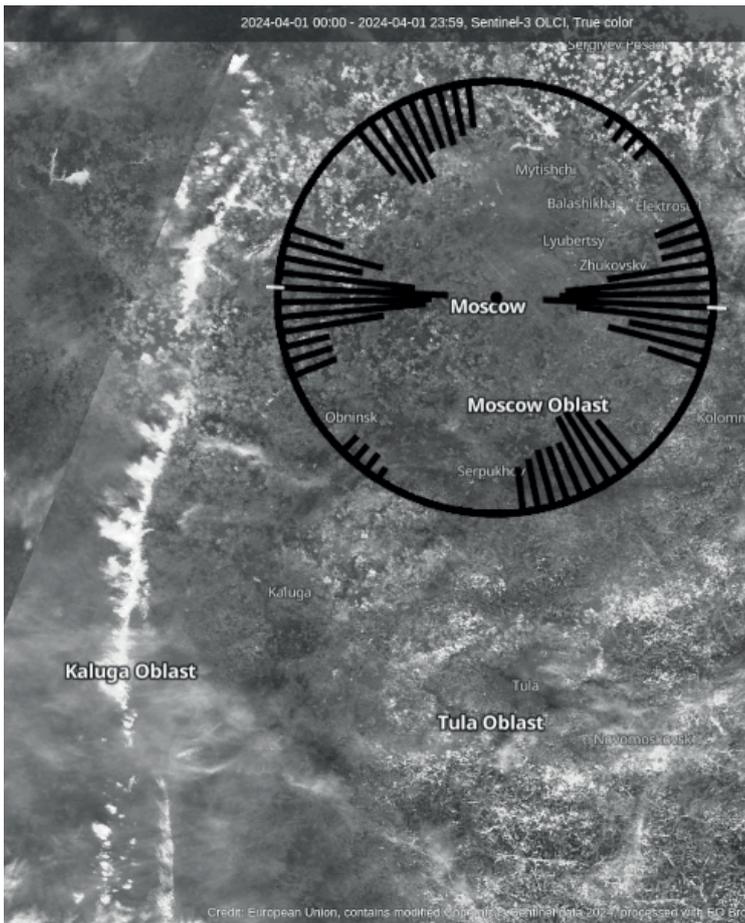


Рис. 4. Спутниковый снимок линии облаков, сделанный 01.04.2024, 07:40 (наиболее близкий ко времени отклика из доступных). На изображение нанесен отклик $A_{\text{тфр}}$, сделанный для 11:40, когда линия облаков проходила над Москвой

За основу для анализа были взяты данные сети погодных радаров. До 9:00 01.04.2024 наблюдается линия облаков, которая затем пропадает. В 11:40 наблюдается сильный отклик $A_{\text{тфр}}$. Руководствуясь теми соображениями, что на относительно небольших масштабах ход облачных масс можно аппроксимировать линейным уравнением движения, было реконструировано перемещение явления по наблюдаемой его части. В соответствии с реконструкцией, отклик направлен по ходу движения линии облаков (облака идут с запада на восток). Совпадение времени возникновения отклика со временем наблюдения перистых облаков над Москвой может указывать на процессы в верхней тропосфере или нижней стратосфере, которые и вызвали изменение потока мюонов.

График интегральной скорости счета мюонов (рис. 5) не позволяет установить причину отклика мюонов из-за слишком сильных флуктуаций.

Особенность создания откликов $A_{\text{тфр}}$ заключается в поиске согласованных (по времени и направлению) сигналов, а амплитуда откликов определяется минимальной амплитудой среди всех

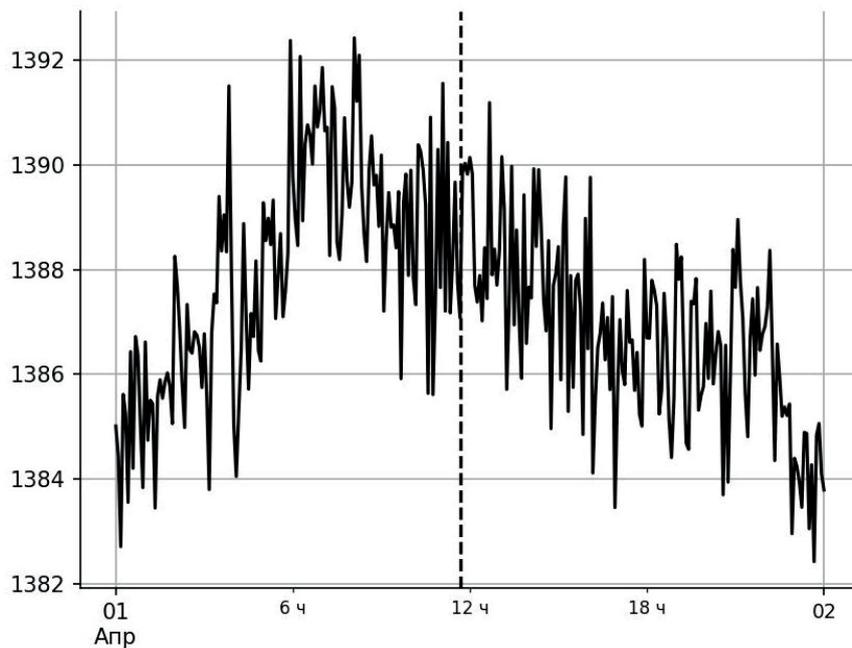


Рис. 5. График интегральной скорости счета детектора УРАГАН (мюонов в секунду) с шагом в 5 мин для 01.04.2024. Пунктирная линия обозначает момент отклика

супермодулей для каждого направления и момента времени. Благодаря этому можно обнаруживать малые вариации, как в приведенном выше примере.

6. Заключение

Разработан метод исследования временных рядов мюонных детекторов, способных различать отдельные азимутальные направления прилета мюонов – метод азимутального сканирования. Для него не требуется массивов предварительно набранных данных, он может использоваться непосредственно на измерениях, получаемых непрерывно во время работы установки. На примерах соответствия откликов с визуально наблюдаемыми атмосферными феноменами были обнаружены малые вариации потока мюонов на атмосферные явления, недоступные для наблюдения при анализе интегральных рядов. Это стало возможным, поскольку в основе метода лежит специальный способ отбора данных и алгоритм сопоставления между собой трех супермодулей МГ УРАГАН. Если детектор состоит из одного детектирующего модуля, то часть описанного алгоритма будет ему недоступна, поскольку требует набора из нескольких модулей.

Важным преимуществом описанного способа анализа данных является получение сразу двух характеристик для сопоставления с атмосферным явлением: амплитуда и направление. Благодаря этому он позволяет обнаруживать очень малые вариации и может использоваться как самостоятельно, так и служить вспомогательным инструментом для выделения промежутков в интегральных рядах темпа счета мюонов, для которых требуется более тщательный анализ.

Благодарности

Работа выполнена на уникальной научной установке «Экспериментальный комплекс НЕВОД» при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (государственное задание, проект № FSWU-2023-0068 “Фундаментальные и прикладные исследования космических лучей”).»

Финансирование

Авторы заявляют об отсутствии источников финансирования.

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

С.С. Тимаков – разработка математической модели, проведение численных расчетов, анализ экспериментальных данных, выявление закономерностей, подготовка текста статьи.

А.А. Петрухин – формулировка идеи, концепции и цели исследования, постановка задач, участие в анализе полученных данных, обсуждение результатов, редактирование текста статьи.

Список литературы

1. *Barbashina N.S., Petrukhin A.A., Yashin I.I.* Muon Hodoscope URAGAN as a New Meteorological Tool // Proceeding of 6-th International TEPA Symposium, 2021. V. 124. P. 102505.

2. *Barbashina N.S., Kokoulin R.P., Kompaniets K.G., Mannocchi G., Petrukhin A.A., Saavedra O., Timashkov D.A., Trinchero G., Chernov D.V., Shutenko V.V., Yashin I.I.* The URAGAN wide-aperture large-area muon hodoscope // Instruments and Experimental Techniques, 2008. V. 51. № 2. P. 180–186.

3. *Barbashina N.S., Astapov I.I., Belyakova T.A., Dmitrieva A.N., Kozyrev A.V., Pavlyukov Yu.B., Petrukhin A.A., Serebryannik N.I., Shutenko V.V., Yashin I.I.* Muon flux variations detected by the URAGAN muon hodoscope during thunderstorms // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics, 2017. V. 81. № 2. P. 230–233.

4. *Качур А.П., Дмитриева А.Н., Ковыляева А.А., Шутенко В.В.* Отклик мюонного годоскопа УРАГАН на грозовые события в Московском регионе // Ученые записки физического факультета Московского Университета, 2018. V. 4. P. 1840404.

5. *Kachur A.P., Barbashina N.S., Pavlyukov Yu.B., Petrukhin A.A., Serebryannik N.I., Shutenko V.V.* Investigating Thunderstorm Activity in Moscow Region Via Methods of Muonography // *Physics of Atomic Nuclei*, 2021. V. 84. № 6. P. 1098–1104.

6. *Yashin I.I., Astapov I.I., Barbashina N.S., Borog V.V., Chernov D.V., Dmitrieva A.N., Kokoulin R.P., Kompaniets K.G., Mishutina Yu.N., Petrukhin A.A., Shutenko V.V., Yakovleva E.I.* Real-time data of muon hodoscope URAGAN // *Advances in Space Research*, 2015. V. 56. № 12. P. 2693–2705.

7. *Тимаков С.С.* Способ азимутального сканирования атмосферы с использованием потока мюонов космических лучей. Патент РФ. № 2819137. 2024.

8. *Timakov S.S., Petrukhin A.A., Epifanov V.R.* Investigation of Atmospheric Fronts by Means of Cosmic Ray Muon Flux // *Physics of Atomic Nuclei*, 2023. V. 86. № 6. P. 1114–1118.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2025, vol. 14, no. 3, pp. 203–213

Study of small variations in the atmosphere in the cosmic ray muon flux

S. S. Timakov , A. A. Petrukhin 

¹National Research Nuclear University MEPhI, Moscow, 115409, Russia

 SStimakov@mephi.ru

 AAPetrukhin@mephi.ru

Received June 2, 2025; revised June 10, 2025; accepted June 10, 2025

This paper presents a method for analyzing data from cosmic-ray muon detectors, enabling the detection of subtle flux variations that are indistinguishable in the integral muon count rate. The method requires detectors capable of distinguishing muons by their azimuthal arrival angles and, for optimal performance, multiple independent detectors with similar characteristics. A key feature of the proposed approach is that it considers not only the amplitude of the signal (reflecting muon flux variations) but also its direction, which can be correlated with the spatial characteristics of variation sources, such as atmospheric phenomena. Each step of the method is illustrated using the example of a warm front approaching Moscow, as well as an atmospheric event accompanied by a cloud line. Additionally, the paper presents a data visualization for the new method that allows a large amount of data to be reduced to a single diagram that can be plotted on satellite images and the observed muon variations can be compared with atmospheric phenomena in situ.

Keywords: muons, data processing, muon flux variations, cosmic rays, atmospheric phenomena.

References

1. *Barbashina N.S., Petrukhin A.A., Yashin I.I.* Muon Hodoscope URAGAN as a New Meteorological Tool. Proceeding of 6-th International TEPA Symposium, 2021. Vol. 124. Pp. 102505.

2. *Barbashina N.S., Kokoulin R.P., Kompaniets K.G., Mannocchi G., Petrukhin A.A., Saavedra O., Timashkov D.A., Trincherro G., Chernov D.V., Shutenko V.V., Yashin I.I.* The URAGAN wide-aperture large-area muon hodoscope. Instruments and Experimental Techniques, 2008. Vol. 51. No. 2. Pp. 180–186.

3. *Barbashina N.S., Astapov I.I., Belyakova T.A., Dmitrieva A.N., Kozyrev A.V., Pavlyukov Yu.B., Petrukhin A.A., Serebryannik N.I., Shutenko V.V., Yashin I.I.* Muon flux variations detected by the URAGAN muon hodoscope during thunderstorms. Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics, 2012. Vol. 81. No. 2. Pp. 230–233.

4. *Kachur A.P., Dmitrieva A.N., Kovylyaeva A.A., Shutenko V.V.* Otklik muonnogo godoskopa URAGAN na grosovyje sobytija v Moskovskom regione [Response of the muon hodoscope URAGAN to thunderstorm events in the Moscow region]. Uchenyje zapiski fizicheskogo fakulteta Moskovskogo Universiteta, 2018. Vol. 4. Pp. 1840404 (in Russian).

5. *Kachur A.P., Barbashina N.S., Pavlyukov Yu.B., Petrukhin A.A., Serebryannik N.I., Shutenko V.V.* Investigating Thunderstorm Activity in Moscow Region Via Methods of Muonography. *Physics of Atomic Nuclei*, 2021. Vol. 84. No. 6. Pp. 1098–1104.

6. *Yashin I.I., Astapov I.I., Barbashina N.S., Borog V.V., Chernov D.V., Dmitrieva A.N., Kokoulin R.P., Kompaniets K.G., Mishutina Yu.N., Petrukhin A.A., Shutenko V.V., Yakovleva E.I.* Real-time data of muon hodoscope URAGAN. *Advances in Space Research*, 2015. Vol. 56. No. 12. Pp. 2693–2705.

7. *Timakov S.S.* Sposob azimutalnogo skanirovaniya atmosfery s ispolzovaniem potoka muonov kosmicheskikh lychei [Method of azimuthal scanning of the atmosphere using the cosmic ray muon flux]. Patent RF. No. 2819137, 2024.

8. *Timakov S.S., Petrukhin A.A., Epifanov V.R.* Investigation of Atmospheric Fronts by Means of Cosmic Ray Muon Flux. *Physics of Atomic Nuclei*, 2023. Vol. 86. No. 6. Pp. 1114–1118.

УДК 517.9

Точные решения обобщенного нелинейного уравнения Вахненко – Паркеса

© 2025 г. К. М. Зуев, Н. А. Кудряшов

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115409, Россия

Рассматривается одно из уравнений семейства обобщенных уравнений Вахненко – Паркеса, описывающих распространение коротковолновых возмущений в релаксирующих средах в случае, когда амплитуда колебаний зависит от скорости распространения волны. Для данного уравнения получено общее решение, записанное через квадратуру, путем сведения его к обыкновенному дифференциальному уравнению второго порядка с использованием переменных бегущей волны. Исследовано влияние параметров уравнения на полученное решение. Найдены его точные решения. Периодические точные решения выражены через эллиптические функции Якоби. Кроме того, представлено явное решение, выражаемое через степенную функцию пространственной и временной переменных. Полученные точные решения могут быть использованы в качестве тестовых функций при анализе результатов численного моделирования процессов в релаксирующих средах, описываемых уравнениями типа Вахненко – Паркеса.

Ключевые слова: уравнение Вахненко – Паркеса, точные решения, решения в квадратурах, решения в переменных бегущей волны, эллиптические функции Якоби.

1. Введение

В 1992 г. в [1] для описания распространения коротковолновых возмущений в релаксирующих средах предложено уравнение, ныне известное как уравнение Вахненко:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} \right) u + u = 0. \quad (1)$$

Переменная $u = u(x, t)$ соответствует безразмерному давлению. Релаксирующими называются среды с характерным временем изменения физических процессов (т.е. временем, за которое система стремится вернуться к состоянию равновесия, будучи выведенной из него посредством возмущения). Примерами подобного рода физических процессов могут быть распространение звуковых волн в вязкой жидкости, распространение ультразвука в биологических тканях и т. д. Известно, что в линейном приближении коротковолновые возмущения в релаксирующих средах описываются уравнением Клейна – Гордона. Уравнение (1) получается в случае учета нелинейности, обусловленной зависимостью скорости распространения волны от ее амплитуды. В [1] представлено однопетлевое солитонное решение данного уравнения, полученное путем редукции его к ОДУ с использованием переменных бегущей волны.

В работе [2] рассматривается уравнение в частных производных

$$uu_{xxt} - u_x u_{xt} + u^2 u_t = 0, \quad (2)$$

✉ К.М. Зуев: eutayn_2001@mail.ru
Н.А. Кудряшов: nakudr@gmail.com

Поступила в редакцию: 02.04.2025
После доработки: 15.04.2025
Принята к публикации: 22.04.2025

известное как уравнение Островского или уравнение Вахненко – Паркеса. В [2] оно получается в процессе поиска точного двух- и многопетлевого солитонного решения уравнения (1) с использованием введения новых независимых переменных, определяемых равенствами:

$$x = \theta(X, T) = T + \int_{-\infty}^X U(X', T) dX' + x_0, \quad t = X, \quad (3)$$

где $U(X, T) = u(x, t)$, x_0 – постоянная величина. При этом предполагается, что при $U \rightarrow 0$, $|X| \rightarrow \infty$ производная указанного выше интеграла по верхнему пределу стремится к нулю. В [3–11, 14] приведены его некоторые точные решения. В [19, 22] показано, что уравнение (2) проходит тест Пенлеве, и на основании группового анализа получена одна из форм записи солитонного решения. В [12] в результате группового анализа (2) получены три инфинитезимальных оператора, соответствующих группам преобразований данного уравнения.

Дальнейшие исследования, связанные с уравнением Вахненко – Паркеса, заключаются в изучении свойств и поиске решений различного рода модификаций (2). Известны обобщения уравнения (2) на двумерные и трехмерные случаи и их некоторые солитонные и периодические решения, представленные в [13, 15–18]. В рамках данной работы эта область исследований не рассматривается.

Другие обобщения уравнения (2) связаны с изменением степенной нелинейности множителя производной по времени. Так, в работе [19] по аналогии с введением в рассмотрение модифицированного уравнения Кортевега – де Вриза вводится уравнение

$$uu_{xxt} - u_x u_{xt} + u^3 u_t = 0. \quad (4)$$

Известно, что уравнения КдВ и мКдВ включают в себя члены uu_x и $u^2 u_x$ соответственно. В свою очередь уравнение Вахненко – Паркеса (2) и уравнение (4) содержат соответственно $u^2 u_t$ и $u^3 u_t$, в связи с чем уравнение (4) известно как модифицированное уравнение Вахненко – Паркеса. В [19] показано, что данное уравнение проходит тест Пенлеве и имеет солитонное решение. В [20] продемонстрировано, что (4) путем некоторых преобразований приводится к уравнению sin-Гордона, следовательно, его решение может быть выражено в виде топологического солитона.

В [21] рассматривается семейство уравнений Вахненко – Паркеса (2):

$$uu_{xxt} + au_x u_{xt} + bu^{2n} u_t = 0, \quad (5)$$

где a, b – ненулевые действительные константы, $n \in \mathbb{Z}^+$; при $a = -1, b = 1$ и $n = 1$ уравнение (5) переходит в уравнение Вахненко – Паркеса (2). В [21] представлены решения данного уравнения в виде солитонов при $n > \frac{1}{2}$ и в виде топологического солитона при $n = \frac{3}{2}$. В [22] на основе группового анализа получены некоторые точные решения уравнения.

В [23] изучается семейство модифицированного уравнения Вахненко – Паркеса (4):

$$uu_{xxt} + au_x u_{xt} + bu^{3n} u_t = 0, \quad (6)$$

где a, b – ненулевые действительные константы, $n \neq \frac{1}{3}$. При $a = -1, b = 1$ и $n = 1$ данное уравнение переходит в уравнение (4). В [23] установлено, что при $a = -1, n = 1$ уравнение (6) обладает свойством Пенлеве, а также выявлены его групповые симметрии. Найден ряд точных решений путем поиска решений в виде ряда, а также с использованием переменных бегущей волны.

Если учесть нелинейности семейств уравнений (5) и (6) вместе, то в результате имеем семейство уравнений, называемых обобщенными уравнениями Вахненко – Паркеса:

$$uu_{xxt} + \alpha u_x u_{xt} + (\beta u^{2n} + \gamma u^{3n}) u_t = 0, \quad (7)$$

где α, β, γ – ненулевые действительные константы, $n \neq \frac{1}{3}$. В [24] данное семейство уравнений с использованием переменных бегущей волны сводится к динамической системе. Для полученной динамической системы найдены первые интегралы. Далее, в зависимости от параметров α, n и γ и константы интегрирования, возникающей при нахождении первых интегралов этой динамической системы, исследуются изменения положения равновесия данной системы, а также бифуркации ее фазовых портретов.

2. Поиск решения обобщенного уравнения Вахненко – Паркеса в переменных бегущей волны

Рассмотрим уравнение (7) при $n = 1$:

$$uu_{xx} + \alpha u_x u_{xt} + (\beta u^2 + \gamma u^3)u_t = 0. \quad (8)$$

В [24] представлены точные решения данного уравнения. Эти решения изучаются в зависимости от значений γ и константы интегрирования в первых интегралах динамической системы. Рассматриваются значения этих параметров, обуславливающие существование решений в виде действительных функций. Так, в случае $\alpha = -1$ приведены выражения точного решения, выраженного через эллиптический синус Якоби. Приведем два из них:

при $\gamma < 0$

$$\phi(\xi) = r_3 + \frac{(r_5 - r_3)(r_4 - r_3)}{(r_5 - r_4) \operatorname{sn}^2 \left(\frac{1}{4} \sqrt{-\gamma(r_6 - r_4)(r_5 - r_3)} |\xi|; \sqrt{\frac{(r_5 - r_4)(r_6 - r_3)}{(r_6 - r_4)(r_5 - r_3)}} \right) + r_3 - r_5}, \quad (9)$$

где r_i – корни многочлена в правой части уравнения ($i = \overline{3, 6}$),

$$\phi_\xi^2 = -\frac{\gamma}{4}(\phi - r_3)(\phi - r_4)(r_5 - \phi)(r_6 - \phi); \quad (10)$$

при $\gamma > 0$

$$\phi(\xi) = -\frac{\beta}{\gamma} + \frac{12\beta}{9\gamma + \beta^2 \xi^2}. \quad (11)$$

Также в случае $\alpha > 1$ приведены выражения точного решения в виде негладких волн при различных условиях на γ и g , обеспечивающих действительность решения.

Целью данной работы является поиск точных решений уравнения (8) при других значениях α . Для этого будем искать решения в переменных бегущей волны:

$$u = \phi(\xi), \quad \xi = x - C_0 t, \quad (12)$$

где C_0 – скорость распространения волны. Подставляя переменные (12) в уравнение (8) и умножая его на ϕ_ξ , проинтегрируем его один раз по ξ . В итоге приходим к следующему нелинейному обыкновенному дифференциальному уравнению второго порядка:

$$\phi \phi_{\xi\xi} + \frac{\alpha - 1}{2} (\phi_\xi)^2 + \frac{\gamma}{4} \phi^4 + \frac{\beta}{3} \phi^3 + g = 0, \quad (13)$$

где g – постоянная интегрирования.

Первые два слагаемых данного уравнения могут быть преобразованы при помощи следующей формулы:

$$\phi\phi_{\xi\xi} + \frac{\alpha-1}{2}(\phi_{\xi})^2 = \frac{2}{\alpha+1}\phi^{\frac{3-\alpha}{2}}\left(\phi^{\frac{\alpha+1}{2}}\right)_{\xi\xi}. \quad (14)$$

Данный прием используется, например, в работе [25]. С учетом введенного преобразования запишем уравнение (13) в виде

$$\frac{2}{\alpha+1}\phi^{\frac{3-\alpha}{2}}\left(\phi^{\frac{\alpha+1}{2}}\right)_{\xi\xi} + \frac{\gamma}{4}\phi^4 + \frac{\beta}{3}\phi^3 + g = 0. \quad (15)$$

Для поиска первого интеграла уравнения (15) используем новую функцию $z(\phi) = \phi^{\frac{\alpha+1}{2}}$; при этом $\phi = z^{\frac{2}{\alpha+1}}$ и

$$z_{\xi} = \frac{\alpha+1}{2}\phi^{\frac{\alpha-1}{2}}\phi_{\xi}. \quad (16)$$

Тогда уравнение (15) принимает вид

$$z_{\xi\xi} + \frac{(\alpha+1)\gamma}{8}z^{\frac{\alpha+5}{\alpha+1}} + \frac{(\alpha+1)\beta}{6}z^{\frac{\alpha+3}{\alpha+1}} + \frac{(\alpha+1)g}{2}z^{\frac{\alpha-3}{\alpha+1}} = 0. \quad (17)$$

Умножая это уравнение на z_{ξ} и интегрируя один раз по ξ , имеем форму первого интеграла уравнения (13), принимая во внимание введенную замену переменных:

$$\frac{z_{\xi}^2}{2} + \frac{(\alpha+1)^2\gamma}{16(\alpha+3)}z^{\frac{2\alpha+6}{\alpha+1}} + \frac{(\alpha+1)^2\beta}{12(\alpha+2)}z^{\frac{2\alpha+4}{\alpha+1}} + \frac{(\alpha+1)^2g}{4(\alpha-1)}z^{\frac{2\alpha-2}{\alpha+1}} + C_1 = 0, \quad (18)$$

где C_1 – постоянная интегрирования. Полученное выражение для первого интеграла справедливо при $\alpha \neq -3$, $\alpha \neq -2$, $\alpha \neq 1$. Проведя обратную замену с помощью соотношения (16), имеем

$$\frac{\alpha+1}{2}\phi^{\frac{\alpha-1}{2}}\phi_{\xi} = \sqrt{-\frac{(\alpha+1)^2\gamma}{8(\alpha+3)}\phi^{\alpha+3} - \frac{(\alpha+1)^2\beta}{6(\alpha+2)}\phi^{\alpha+2} - \frac{(\alpha+1)^2g}{2(\alpha-1)}\phi^{\alpha-1} - 2C_1}, \quad (19)$$

откуда после деления переменных получаем

$$\xi = \frac{\alpha+1}{2} \int \frac{\phi^{\frac{\alpha-1}{2}} d\phi}{\sqrt{-\frac{(\alpha+1)^2\gamma}{8(\alpha+3)}\phi^{\alpha+3} - \frac{(\alpha+1)^2\beta}{6(\alpha+2)}\phi^{\alpha+2} - \frac{(\alpha+1)^2g}{2(\alpha-1)}\phi^{\alpha-1} - 2C_1}}. \quad (20)$$

Вынося $\frac{(\alpha+1)^2}{4}\phi^{\alpha-1}$ из-под радикала и выполняя сопутствующие преобразования, находим общее решение уравнения (13), выраженное через квадратуру:

$$\xi = \int \frac{d\phi}{\sqrt{-\frac{\gamma}{2(\alpha+3)}\phi^4 - \frac{2\beta}{3(\alpha+2)}\phi^3 - \frac{8C_1}{(\alpha+1)^2}\phi^{1-\alpha} - \frac{2g}{\alpha-1}}}. \quad (21)$$

3. Точные решения обобщенного уравнения Вахненко – Паркеса

При произвольном значении параметра α интеграл (21) не выражается в явной форме. Поэтому в рамках данного раздела рассмотрим поиск точных решений уравнения (13), получаемых из квадратуры (21) в зависимости от α и постоянных g и C_1 .

Решения уравнения (13) при $\alpha = -1$, $\alpha = 1$, $\alpha = -2$, $\alpha = -3$ не определяются с помощью полученной квадратуры (21). В последних трех случаях из (13) имеем:

при $\alpha = 1$

$$\begin{aligned}\phi_\xi^2 &= -\frac{\gamma}{8}\phi^4 - \frac{2\beta}{9}\phi^3 + g \ln \phi + C_2, \\ \xi &= \int \frac{d\phi}{\sqrt{-\frac{\gamma}{8}\phi^4 - \frac{2\beta}{9}\phi^3 + g \ln \phi + C_2}};\end{aligned}\quad (22)$$

при $\alpha = -2$

$$\begin{aligned}\phi_\xi^2 &= -\frac{\gamma}{2}\phi^4 - \frac{2\beta}{3}\phi^4 \ln \phi + C_3\phi^3 + \frac{2g}{3}, \\ \xi &= \int \frac{d\phi}{\sqrt{-\frac{\gamma}{2}\phi^4 - \frac{2\beta}{3}\phi^4 \ln \phi + C_3\phi^3 + \frac{2g}{3}}};\end{aligned}\quad (23)$$

при $\alpha = -3$

$$\begin{aligned}\phi_\xi^2 &= -\frac{\gamma}{2}\phi^4 \ln \phi - \frac{2\beta}{3}\phi^3 + C_4\phi^4 + \frac{g}{2}, \\ \xi &= \int \frac{d\phi}{\sqrt{-\frac{\gamma}{2}\phi^4 \ln \phi - \frac{2\beta}{3}\phi^3 + C_4\phi^4 + \frac{g}{2}}}.\end{aligned}\quad (24)$$

Здесь C_2, C_3, C_4 – постоянные интегрирования.

Случай $\alpha = -1$. Значение интеграла (21) не определено. Покажем, что уравнение (13) имеет нетривиальные решения при указанном значении α . Для этого разделим его на ϕ :

$$\phi_{\xi\xi} - (\phi_\xi)^2 \phi^{-1} + \frac{\gamma}{4}\phi^3 + \frac{\beta}{3}\phi^2 + g\phi^{-1} = 0. \quad (25)$$

Введем следующую замену:

$$\phi_\xi = w, \quad (26)$$

тогда уравнение (25) может быть записано в виде

$$w_\phi - \phi^{-1}w + \frac{\gamma}{4}\phi^3 w^{-1} + \frac{\beta}{3}\phi^2 w^{-1} + g\phi^{-1}w^{-1} = 0. \quad (27)$$

Определим подстановку

$$w = \sqrt{q(\phi)}, \quad (28)$$

тогда (27) приобретает вид:

$$q_\phi - \frac{2q}{\phi} = -\frac{\gamma}{2}\phi^3 - \frac{2\beta}{3}\phi^2 - 2g\phi^{-1}. \quad (29)$$

Умножим уравнение (29) на ϕ^{-2} :

$$\phi^{-2}q_\phi - \frac{2}{\phi^3} = (\phi^{-2}q)_\phi = -\frac{\gamma}{2}\phi - \frac{2\beta}{3} - 2g\phi^{-3}. \quad (30)$$

Интегрируя (30) по ϕ , после умножения на ϕ^2 имеем

$$q = -\frac{\gamma}{4}\phi^4 - \frac{2\beta}{3}\phi^3 + C_5\phi^2 + g, \quad (31)$$

где C_5 – постоянная интегрирования. Учитывая, что $q = w^2 = \phi_\xi^2$, можно переписать получившееся уравнение в виде

$$\phi_\xi^2 = -\frac{\gamma}{4}\phi^4 - \frac{2\beta}{3}\phi^3 + C_5\phi^2 + g. \quad (32)$$

Разделяя переменные, получаем квадратуру уравнения (25):

$$\xi = \int \frac{d\phi}{\sqrt{-\frac{\gamma}{4}\phi^4 - \frac{2\beta}{3}\phi^3 + C_5\phi^2 + g}}. \quad (33)$$

Квадратуру (33) можно выразить через эллиптические функции Якоби. Пусть $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$ – действительные корни многочлена под корнем в (33).

Они подчинены выражениям

$$\begin{aligned} \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 + \lambda_4 &= -\frac{8\beta}{3\gamma}, \\ \lambda_1\lambda_2 + \lambda_1\lambda_3 + \lambda_1\lambda_4 + \lambda_2\lambda_3 + \lambda_2\lambda_4 + \lambda_3\lambda_4 &= -\frac{4C_5}{\gamma}, \\ \lambda_1\lambda_2\lambda_3 + \lambda_1\lambda_2\lambda_4 + \lambda_1\lambda_3\lambda_4 + \lambda_2\lambda_3\lambda_4 &= 0, \\ \lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4 &= -\frac{4g}{\gamma}. \end{aligned} \quad (34)$$

При этом квадратура (33) с учетом разложения многочлена под корнем на множители записывается в виде

$$\xi = \sqrt{-\frac{4}{\gamma}} \int \frac{d\phi}{\sqrt{(\phi - \lambda_1)(\phi - \lambda_2)(\phi - \lambda_3)(\phi - \lambda_4)}}, \quad (35)$$

Путем приведения данного интеграла к эллиптическому интегралу первого рода в итоге имеем выражение точного решения уравнения (13) при $\alpha = -1$:

$$\phi(\xi) = \lambda_1 + \frac{\lambda_1\lambda_2 - \lambda_2\lambda_3 + \lambda_1\lambda_3 - \lambda_1^2}{(\lambda_3 - \lambda_2) \operatorname{sn}^2\left(\frac{1}{4}\sqrt{\gamma(\lambda_2 - \lambda_4)(\lambda_1 - \lambda_3)}(\xi - C_5); k\right)}, \quad (36)$$

где

$$k^2 = \frac{(\lambda_1 - \lambda_4)(\lambda_1 - \lambda_3)}{(\lambda_2 - \lambda_3)(\lambda_2 - \lambda_4)}. \quad (37)$$

Полученный результат (36) с точностью до констант совпадает с решением (9), представленным в [24] в случае $\alpha = -1$.

Случай $C_1 = 0$. Интеграл (21) принимает вид

$$\xi = \int \frac{d\phi}{\sqrt{-\frac{\gamma}{2(\alpha+3)}\phi^4 - \frac{2\beta}{3(\alpha+2)}\phi^3 - \frac{2g}{\alpha-1}}}. \quad (38)$$

Видно, что полученная квадратура может быть выражена через эллиптические функции Якоби при помощи приема, аналогичного вычислению явного вида решения (36). Пусть $\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4$ – действительные корни многочлена под знаком радикала в (21), удовлетворяющие соотношениям

$$\begin{aligned} \mu_1 + \mu_2 + \mu_3 + \mu_4 &= -\frac{4\beta(\alpha+3)}{3\gamma(\alpha+2)}, \\ \mu_1\mu_2 + \mu_1\mu_3 + \mu_1\mu_4 + \mu_2\mu_3 + \mu_2\mu_4 + \mu_3\mu_4 &= 0, \\ \mu_1\mu_2\mu_3 + \mu_1\mu_2\mu_4 + \mu_1\mu_3\mu_4 + \mu_2\mu_3\mu_4 &= 0, \\ \mu_1\mu_2\mu_3\mu_4 &= \frac{4g(\alpha+3)}{\gamma(\alpha-1)}. \end{aligned} \quad (39)$$

При помощи приведения (38) к эллиптическому интегралу первого рода, получаем явный вид точного решения, выраженный через эллиптический синус Якоби:

$$\phi(\xi) = \mu_1 + \frac{\mu_1\mu_2 - \mu_2\mu_3 + \mu_1\mu_3 - \mu_1^2}{(\mu_3 - \mu_2) \operatorname{sn}^2\left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\gamma(\mu_2 - \mu_4)(\mu_1 - \mu_3)}{2(\alpha+3)}}(\xi - C_6); l\right)}, \quad (40)$$

где

$$l^2 = \frac{(\mu_1 - \mu_4)(\mu_1 - \mu_3)}{(\mu_2 - \mu_3)(\mu_2 - \mu_4)}, \quad (41)$$

C_6 – постоянная интегрирования. Очевидно, что полученное формальное решение (40) определено при значениях $\alpha \neq -3, \alpha \neq -2, \alpha \neq 1$.

Случай $g = 0, \alpha = 1$. Покажем, что при заданных значениях g и α имеется точное решение уравнения (13), также выражающееся через эллиптический синус Якоби. Квадратура (21) принимает вид

$$\xi = \int \frac{d\phi}{\sqrt{-\frac{\gamma}{8}\phi^4 - \frac{2\beta}{9}\phi^3 - 2C_1}}. \quad (42)$$

Пусть v_1, v_2, v_3, v_4 – действительные корни многочлена в знаменателе. Тогда, с учетом

$$\begin{aligned} v_1 + v_2 + v_3 + v_4 &= -\frac{16\beta}{9\gamma}, \\ v_1v_2 + v_1v_3 + v_1v_4 + v_2v_3 + v_2v_4 + v_3v_4 &= 0, \\ v_1v_2v_3 + v_1v_2v_4 + v_1v_3v_4 + v_2v_3v_4 &= 0, \\ v_1v_2v_3v_4 &= \frac{16C_1}{\gamma}, \end{aligned} \quad (43)$$

имеем точное решение уравнения (13):

$$\phi(\xi) = v_1 + \frac{v_1v_2 - v_2v_3 + v_1v_3 - v_1^2}{(v_3 - v_2) \operatorname{sn}^2\left(\frac{1}{4}\sqrt{\gamma(v_2 - v_4)(v_1 - v_3)}(\xi - C_7); m\right)}, \quad (44)$$

где

$$m^2 = \frac{(v_1 - v_4)(v_1 - v_3)}{(v_2 - v_3)(v_2 - v_4)}, \quad (45)$$

C_7 – постоянная интегрирования.

Случай $g = 0, C_1 = 0$. Полагая все константы интегрирования в квадратуре (21) равными нулю, получим еще одно точное решение уравнения (13). При этом квадратура (21) непосредственно выражается через степенную функцию от ϕ следующим образом:

$$\xi = \int \frac{d\phi}{\sqrt{-\frac{\gamma}{2(\alpha+3)}\phi^4 - \frac{2\beta}{3(\alpha+2)}\phi^3}} = \frac{3(\alpha+2)}{\beta} \sqrt{-\frac{\gamma}{2(\alpha+3)} - \frac{2\beta}{3(\alpha+2)}\phi^{-1}} + C_8, \quad (46)$$

где C_8 – постоянная интегрирования. Видно, что полученное представление решения может быть записано в явном виде. В результате его преобразований имеем

$$\phi(\xi) = -\frac{1}{\frac{\beta}{6(\alpha+2)}(\xi + C_8)^2 + \frac{3\gamma(\alpha+2)}{4\beta(\alpha+3)}}. \quad (47)$$

В результате получена зависимость $\phi \propto \xi^{-2}$. В частности, при $\alpha = -1$ решение (47) с точностью до констант совпадает со степенным решением (11), представленным в [24]. Однако данное решение справедливо и при других значениях параметра α , лишь только оно не является тривиальным, что выполняется в случаях $\alpha \neq -2, \alpha \neq -3$.

4. Заключение

Рассмотрено обобщенное уравнение Вахненко – Паркеса. С использованием переменных бегущей волны проведена редукция данного уравнения к обыкновенному дифференциальному уравнению. Найдено его общее решение, записанное через квадратуру, а также некоторые точные решения. При $\alpha = -1$ найденное точное решение, выражающееся через эллиптические функции Якоби, эквивалентно (9), представленному в [24]. Кроме того, найдены периодические решения в случаях $C_1 = 0, g = 0$, также выражающиеся через эллиптические функции Якоби. В случае одновременного выполнения

равенств $C_1 = 0$, $g = 0$ точное решение выражается в виде степенной функции координаты и времени при $\alpha \neq -2$, $\alpha \neq -3$, что по характеру поведения совпадает с представленным в [24] решением (11) при $\alpha = -1$. Полученные точные решения могут быть использованы в качестве тестовых функций при анализе результатов численного моделирования процессов в релаксирующих средах, описываемых уравнениями типа Вахненко – Паркеса.

Финансирование

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект государственного задания № FSWU-2023-0031).

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

К.М. Зуев – построение точных решений, подготовка текста статьи, обсуждение результатов.
Н.А. Кудряшов – постановка задачи, обсуждение результатов.

Список литературы

1. *Vakhnenko V.O.* Solitons in a nonlinear model medium // *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 1992. V. 25. № 15. P. 4181–4187. DOI: 10.1088/0305-4470/25/15/025.
2. *Vakhnenko V.O., Parkes E.J.* The two loop soliton solution of the Vakhnenko equation // *Nonlinearity*, 1998. V. 11. P. 1457–1464. DOI: 10.1088/09517715/11/6/001.
3. *Roshid H., Kabir M., Bhowmik R., Datta B.K.* Investigation of Solitary wave solutions for Vakhnenko – Parkes equation via exp-function and $\text{Exp}(-\phi(\xi))$ expansion method // *SpringerPlus*, 2014. V. 3 article number 692. DOI: 10.1186/21931801-3-692.
4. *Baskonus H.M., Bulut H., Emir D.G.* Regarding new complex analytical solutions for the nonlinear partial Vakhnenko – Parkes differential equation via Bernoulli sub-equation function method // *Mathematics Letters*, 2015. V. 1. № 1. P. 1–9. DOI: 10.11648/j.ml.20150101.11.
5. *Vakhnenko V.O., Parkes E.J.* Approach in Theory of Nonlinear Evolution Equations: The Vakhnenko – Parkes Equation // in book: *Top 5 Contributions in Applied Mathematics: 2nd Edition*, 2019. DOI: 10.29290/T5CAMATH2.2.1.2019.2-41.
6. *Hoque M., Rahman M.A.* Multisoliton solutions, completely elastic collisions and non-elastic fusion phenomena of two PDEs // *Pramana-Journal of Physics*, 2017. V. 88:86. P. 9. DOI: 10.1007/s12043-017-1390-3.
7. *Gu Yongyi, Yuan W., Aminakbari N., Jiang Q.* Exact Solutions of the Vakhnenko – Parkes Equation with Complex Method // *Journal of Function Spaces*, 2017. V. 2017. P. 1–6. DOI: 10.1155/2017/6521357.
8. *Yel Gu'lnur, Akturk Tolga.* Application of the modified exponential function method to Vakhnenko – Parkes equation // *Mathematics in Natural Science*, 2020. V. 6. P. 8–14. DOI: 10.22436/mns.06.01.02
9. *Attia Raghda A.M., Elagan S.K., Alharthi Meteub, Khater M.* New types of exact solutions of high-frequency waves model in the relaxation medium // *Thermal Science*, 2021. V. 25. P. 233–238. DOI: 10.2298/TSCI21S2233A.
10. *Pankaj R. D.* A novel narration for propagation of wave in relaxing medium by expansion scheme // *Advances and Applications in Mathematical Sciences*, 2021. V. 20. P. 1517–1521.
11. *Khater M. MA, Shabbir Muhammad, Al-Ghamdi A., Higazy M.* Novel soliton wave solutions of the Vakhnenko–Parkes equation arising in the relaxation medium // *Journal of Ocean Engineering and Science*, 2022. DOI: 10.1016/j.joes.2022.02.015.
12. *Hussain A., Kara A.H., Zaman F.D.* An invariance analysis of the Vakhnenko–Parkes Equation // *Chaos, Solitons & Fractals*, 2023. V. 171. P.113423. DOI: 10.1016/j.chaos.2023.113423
13. *Fan Z-Y.* New soliton solutions for the local fractional Vakhnenko – Parkes equation // *Thermal Science*, 2023. V.27. iss.5. P. 3877–3882 DOI: 10.2298/TSCI2305877F
14. *Seadawy A., Albarakati W., Ali A., Baleanu D.* Propagation of traveling wave solutions to the Vakhnenko – Parkes dynamical equation via modified mathematical methods // *Applied Mathematics-A Journal of Chinese Universities*, 2022. V. 37. P. 21–34. DOI: 10.1007/s11766-022-4056-y.
15. *Yeşim Sağlam Özkan, Seadawy Aly R., Yaşar Emrullah.* Multi-wave, breather and interaction solutions to (3+1) dimensional Vakhnenko–Parkes equation arising at propagation of high-frequency waves in a relaxing medium // *Journal of Taibah University for Science*, 2021. V. 15. № 1. P. 666–678. DOI: 10.1080/16583655.2021.1999053.
16. *Meng Q., He B.* New Interaction Solutions for a (2 + 1) Dimensional Vakhnenko Equation // *Complexity*, 2020. P. 1–9. DOI: 10.1155/2020/5620245.

17. *Adeyemo O. D., Khalique Ch. M.* Novel exact solutions and conserved vectors of the first extended modified (3+1)-dimensional integrable Vakhnenko – Parkes equation // *Discrete and Continuous Dynamical Systems – S*, 2024. V. 18. Iss. 4. DOI: 10.3934/dcdss.2024196
18. *Kumar S., Mann N.* Abundant closed-form solutions of the (3+1)-dimensional Vakhnenko – Parkes equation describing the dynamics of various solitary waves in ocean engineering // *Journal of Ocean Engineering and Science*, 2022. DOI: 10.1016/j.joes.2022.04.007.
19. *Wazwaz A.M.* The integrable Vakhnenko – Parkes (VP) and the modified Vakhnenko – Parkes (MVP) equations: Multiple real and complex soliton solutions // *Chinese Journal of Physics*, 2019. V. 57. P. 375–381. DOI: 10.1016/j.cjph.2018.11.004.
20. *Sakovich S.* On a Modified Vakhnenko – Parkes Equation // *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*, 2019. V. 22(2). P. 205–207.
21. *Majid F., Houria T., Hayat T., Aldossary O., Biswas A.* Solitary wave solutions of the Vakhnenko – Parkes equation // *Nonlinear Analysis: Modelling and Control*, 2012. V. 17. P. 60–65. DOI: 10.15388/NA.17.1.14078.
22. *Kumar S.* Painlevé analysis and invariant solutions of Vakhnenko – Parkes (VP) equation with power law nonlinearity // *Nonlinear Dynamics*, 2016. V. 85. DOI: 10.1007/s11071-016-2759-4.
23. *Jyoti D., Kumar S.* Modified Vakhnenko–Parkes equation with power law nonlinearity: Painlevé analysis, analytic solutions and conservation laws // *The European Physical Journal Plus*, 2020. V. 135. P. 762. DOI: 10.1140/epjp/s13360-020-00785-y.
24. *Fan F., Chen X.* Dynamical behavior of traveling waves in a generalized VP-mVP equation with non-homogeneous power law nonlinearity // *AIMS Mathematics*, 2023. V. 8. № 8. Pp. 17514–17538. DOI: 10.3934/math.2023895.
25. *Кудряшов Н.А.* Алгоритм построения первых интегралов одного класса нелинейных дифференциальных уравнений второго порядка // *Вестник НИЯУ МИФИ*, 2022. Т. 11. № 2. С. 109–116. DOI: 10.56304/S2304487X22020080.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2025, vol. 14, no. 3, pp. 214–224

Exact solutions of generalized nonlinear Vakhnenko – Parkes equation

K. M. Zuev , N. A. Kudryashov 

National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409, Russia

 eutayn_2001@mail.ru

 nakudr@gmail.com

Received April 02, 2025; revised April 15, 2025; accepted April 22, 2025

In this paper, one of generalized Vakhnenko–Parkes' family equations is considered describing the propagation of short-wave disturbances in relaxing media, taking into account the dependence of the wave velocity on the amplitude. A general quadrature solution is obtained for the equation under consideration by reducing it to an ordinary differential equation using traveling wave variables. Some formal exact solutions of the initial equation are found. Periodic exact solutions are expressed in terms of Jacobi elliptic functions. An explicit solution is also presented, expressed in terms of a power function of spatial and temporal variables. The obtained exact solutions can be used as test functions when analyzing the results of numerical simulation of processes in relaxing medium described by Vakhnenko–Parkes type equations.

Keywords: Vakhnenko – Parkes equation, exact solutions, solutions in quadratures, solutions in traveling wave variables, Jacobi elliptic functions

References

1. *Vakhnenko V.O.* Solitons in a nonlinear model medium. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 1992. Vol. 25. No.15. Pp. 4181–4187. DOI: 10.1088/0305-4470/25/15/025.
2. *Vakhnenko V.O., Parkes E.* The two loop soliton solution of the Vakhnenko equation. *Nonlinearity*, 1998. Vol. 11. pp. 1457–1464. DOI: 10.1088/09517715/11/6/001.
3. *Roshid H., Kabir M., Bhowmik R., Datta B.K.* Investigation of Solitary wave solutions for Vakhnenko–Parkes equation via exp-function and $\text{Exp}(-\phi(\xi))$ expansion method. *SpringerPlus*, 2014. Vol. 3, article number 692. DOI: 10.1186/21931801-3-692.
4. *Baskonus H.M., Bulut H., Emir D.G.* Regarding new complex analytical solutions for the nonlinear partial Vakhnenko–Parkes differential equation via Bernoulli sub-equation function method. *Mathematics Letters*, 2015. Vol. 1. No. 1. Pp. 1–9. DOI: 10.11648/j.ml.20150101.11.
5. *Vakhnenko V.O., Parkes E.J.* Approach in Theory of Nonlinear Evolution Equations: The Vakhnenko – Parkes Equation / in book: *Top 5 Contributions in Applied Mathematics: 2nd Edition*, 2019. DOI: 10.29290/T5CAMATH2.2.1.2019.2-41.
6. *Hoque M., Rahman M.A.* Multisoliton solutions, completely elastic collisions and non-elastic fusion phenomena of two PDEs. *Pramana-Journal of Physics*, 2017. Vol. 88:86. Pp. 9. DOI: 10.1007/s12043-017-1390-3.
7. *Gu Yongyi, Yuan W., Aminakbari N., Jiang Q.* Exact Solutions of the Vakhnenko – Parkes Equation with Complex Method. *Journal of Function Spaces*, 2017. Vol. 2017. Pp. 1–6. DOI: 10.1155/2017/6521357.
8. *Yel Gu'lnur, Akturk Tolga.* Application of the modified exponential function method to Vakhnenko–Parkes equation. *Mathematics in Natural Science*, 2020. Vol. 6. Pp. 8–14. DOI: 10.22436/mns.06.01.02.
9. *Attia Raghda A.M., Elagan S.K., Alharthi Meteub, Khater M.* New types of exact solutions of high-frequency waves model in the relaxation medium. *Thermal Science*, 2021. Vol. 25. Pp. 233–238. DOI: 10.2298/TSCI21S2233A.
10. *Pankaj R.D.* A novel narration for propagation of wave in relaxing medium by expansion scheme. *Advances and Applications in Mathematical Sciences*, 2021. Vol. 20. Pp. 1517–1521.
11. *Khater M. MA, Shabbir Muhammad, Al-Ghamdi A., Higazy M.* Novel soliton wave solutions of the Vakhnenko–Parkes equation arising in the relaxation medium. *Journal of Ocean Engineering and Science*, 2022. DOI: 10.1016/j.joes.2022.02.015.
12. *Hussain A., Kara A.H., Zaman F.D.* An invariance analysis of the Vakhnenko–Parkes Equation. *Chaos, Solitons & Fractals*, 2023. Vol. 171. Pp. 113423. DOI: 10.1016/j.chaos.2023.113423.
13. *Fan Z-Y.* New soliton solutions for the local fractional Vakhnenko – Parkes equation. *Thermal Science*, 2023. Vol. 27. Iss. 5. Pp. 3877–3882. DOI: /10.2298/TSCI2305877F.
14. *Seadawy A., Albarakati W., Ali A., Baleanu D.* Propagation of traveling wave solutions to the Vakhnenko – Parkes dynamical equation via modified mathematical methods. *Applied Mathematics-A Journal of Chinese Universities*, 2022. Vol. 37. Pp. 21–34. DOI: 10.1007/s11766-022-4056-y.
15. *Yeşim Sağlam Özkan, Seadawy Aly R., Yaşar Emrullah.* Multi-wave, breather and interaction solutions to (3+1) dimensional Vakhnenko–Parkes equation arising at propagation of high-frequency waves in a relaxing medium. *Journal of Taibah University for Science*, 2021. Vol. 15. № 1. Pp. 666–678. DOI: 10.1080/16583655.2021.1999053.
16. *Meng Q., He B.* New Interaction Solutions for a (2+1) Dimensional Vakhnenko Equation. *Complexity*, 2020. Pp. 1–9. DOI: 10.1155/2020/5620245.
17. *Adeyemo O. D., Khalique Ch. M.* Novel exact solutions and conserved vectors of the first extended modified (3+1)-dimensional integrable Vakhnenko – Parkes equation. *Discrete and Continuous Dynamical Systems – S*, 2024. Vol. 18. Iss. 4. DOI:10.3934/dcdss.2024196.
18. *Kumar S., Mann N.* Abundant closed-form solutions of the (3+1)-dimensional Vakhnenko – Parkes equation describing the dynamics of various solitary waves in ocean engineering. *Journal of Ocean Engineering and Science*, 2022. DOI: /10.1016/j.joes.2022.04.007.
19. *Wazwaz A.M.* The integrable Vakhnenko–Parkes (VP) and the modified Vakhnenko–Parkes (MVP) equations: Multiple real and complex soliton solutions. *Chinese Journal of Physics*, 2019. Vol. 57. Pp. 375–381. DOI: 10.1016/j.cjph.2018.11.004.
20. *Sakovich S.* On a Modified Vakhnenko – Parkes Equation. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*, 2019. Vol. 22(2). Pp. 205–207.
21. *Majid F., Houria T., Hayat T., Aldossary O., Biswas A.* Solitary wave solutions of the Vakhnenko – Parkes equation. *Nonlinear Analysis: Modelling and Control*, 2012. Vol. 17. Pp. 60–65. DOI: 10.15388/NA.17.1.14078.
22. *Kumar S.* Painlevé analysis and invariant solutions of Vakhnenko–Parkes (VP) equation with power law nonlinearity. *Nonlinear Dynamics*, 2016. Vol. 85. DOI: 10.1007/s11071-016-2759-4.
23. *Jyoti D., Kumar S.* Modified Vakhnenko–Parkes equation with power law nonlinearity: Painlevé analysis, analytic solutions and conservation laws. *The European Physical Journal Plus*, 2020. Vol. 135. Pp. 762. DOI: 10.1140/epjp/s13360-020-00785-y.
24. *Fan F., Chen X.* Dynamical behavior of traveling waves in a generalized VP-mVP equation with non-homogeneous power law nonlinearity. *AIMS Mathematics*, 2023. Vol. 8. No. 8. Pp. 17514–17538. DOI: 10.3934/math.2023895.
25. *Kudryashov N.A.* Algoritm postroeniya pervykh integralov odnogo klassa nelineinykh differentsial'nykh uravneniy vtorogo poriyadka [Algorithm for Constructing the First Integrals for One Class of Nonlinear Differential Equations of the Second Order]. *Vestnik NIYaU MIFI*, 2022. Vol. 11. No. 2. Pp. 109–116. DOI: 10.56304/S2304487X22020080 (in Russian).

УДК 57.087

Влияние социальных контактов на формирование эндемического равновесия в SEIS-модели

© 2025 г. А. Р. Каримов^{1,2}, М. А. Соломатин¹¹ Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115409, Россия² Институт высоких температур РАН, Москва, 127412, Россия

В рамках приближения среднего поля обсуждается влияние социальных контактов на распространение эпидемии в популяции постоянной численности. Этот аспект, который, по-видимому, еще не полностью изучен, привлекает все большее внимание в математической эпидемиологии. Ключевым моментом является выделение в механизме передачи инфекции составляющей, связанной непосредственно с перемещением людей (транспортные процессы), и контактов неподвижных людей, обусловленных только их социальной активностью (социальные контакты, включающие также тактильные контакты). Такой подход позволяет единообразно подойти к описанию констант скорости передачи инфекции на основе развиваемой физико-химической аналогии. Полученные таким образом константы скоростей передачи инфекции используются для модификации SEIS-модели так, чтобы исследовать влияние социальной активности на формирование эндемического равновесия в рассматриваемой популяции. Для оценки частоты таких контактов использовались подход Данбара, учитывающий когнитивные ограничения на число устойчивых социальных связей человека, а также прямой статистический анализ на основе биномиального распределения. Оба метода показали близкие результаты и позволили определить допустимый диапазон значений константы скорости передачи инфекции, использованный для установления эндемического равновесия. Также были получены необходимые условия существования этого равновесия, зависящие как от социальных, так и от медико-биологических факторов.

Ключевые слова: SEIS-модель, число Данбара, эпидемиологические константы, биномиальное распределение.

1. Введение

Распространение заболеваний, передающихся воздушно-капельным путем, определяется как медико-биологическими и физическими процессами [1, 2] (например, влиянием окружающей среды на размножение и передачу вирусов), так и социокультурными процессами, определяющими частоту социальных контактов [3, 4]. Данные факторы определяют величину соответствующих констант скоростей эпидемиологических переходов [5–14], которые играют такую же роль в эволюции заболеваний в популяции, как константы скоростей реакций в химической кинетике, устанавливающие допустимые равновесные состояния [15, 16]. Можно сказать, что эпидемиологические константы, независимо от используемой компартментной модели, являются управляющими параметрами, задающими возможные направления развития заболевания в популяции.

Следует также отметить существенные отличия эпидемиологической динамики от закономерностей формальной химической кинетики, в рамках которой константы скоростей реакций зависят только от

✉ М.А. Соломатин: mis4455@yandex.ru

Поступила в редакцию: 21.03.2025

После доработки: 08.06.2025

Принята к публикации: 10.06.2025

частоты соударений молекул и энергии активации реакции, т.е. физико-химических факторов, имеющих чисто марковский характер [15–17]. В случае же эпидемиологической динамики определенную роль могут играть немарковские процессы различной природы [18–21]. Например, размножение вирусов следует относить к процессам с памятью, тогда как их распространение можно трактовать как чисто марковский процесс. При этом оба процесса зависят от физических, биологических и социокультурных факторов, что чрезвычайно осложняет анализ эпидемиологической динамики даже в рамках наиболее простых компартментных моделей [3, 5, 14, 22–23].

Поэтому было бы интересно подойти к обсуждению влияния подобных процессов на развитие эпидемий в социуме. В частности, рассмотреть, как такие процессы влияют на передачу инфекции в ситуации, где они проявляются наиболее простым образом, не теряя при этом своего основного содержания. В настоящей работе, оставаясь в рамках марковского описания, предпринимается попытка сделать шаг в данном направлении, рассмотрев на примере SEIS-модели формирование динамического равновесия между зараженными и выздоровевшими в популяции постоянной численности и предположении отсутствия деградации штамма вируса, вызвавшего заболевание.

Ключевым моментом является выделение в механизме передачи инфекции составляющей, связанной непосредственно с перемещением людей (транспортные процессы), и контактов неподвижных людей, обусловленных только их социальной активностью (социальные контакты, включающие также тактильные контакты). Такой подход позволил единообразно подойти к описанию констант скорости передачи инфекции от ее носителей к здоровым [12], используя физико-химические характеристики выдыхаемых аэрозольных частиц, являющихся носителями вирусов (так называемые респираторные частицы), и окружающей среды, а также демографические показатели о плотности населения [10–13, 24].

В работах [12, 13] мы в основном анализировали влияние транспортного механизма передачи инфекции, так как при наличии взаимного перемещения людей этот механизм является заведомо преобладающим. Однако, в случае, когда люди достаточно длительное время находятся в каком-либо ограниченном пространстве, например, в салоне самолета или детском лагере, следует учитывать только социальные контакты. В настоящей работе мы рассмотрим именно данный предел, воспользовавшись концепцией Данбара [25, 26] и прямым статистическим подсчетом частоты социальных контактов. Полученная зависимость далее используется при обсуждении особенностей установления эндемического равновесия в SEIS-модели.

2. SEIS-модель

SEIS-модель [5–8], записанная для замкнутой популяции постоянной численностью N в предположении о случайном и равновероятном характере передачи инфекции, представляет собой систему уравнений:

$$\frac{dS}{dt} = -(\beta_I I + \beta_E E)S + \gamma I + \alpha E, \quad (1)$$

$$\frac{dE}{dt} = (\beta_I I + \beta_E E)S - (\delta + \alpha)E, \quad (2)$$

$$\frac{dI}{dt} = \delta E - \gamma I, \quad (3)$$

где S – доля неинфицированных в популяции в текущий момент времени t , E – доля уже инфицированных, но еще не заболевших (группа латентных больных), I – доля инфицированных, являющихся больными в данный момент времени t , β_I – представляет собой эпидемиологическую константу, определяющую скорость передачи вируса от больных к здоровым людям, а β_E – константа передачи заболевания от категории латентных E к здоровым, γ – константа, характеризующая скорость перехода из группы больных в число здоровых, α – константа перехода из латентной группы в разряд здоровых, δ – константа скорости перехода из инфицированных в группу больных.

Следует отметить, что при записи (1)–(3) мы не учли людей, обладающих либо врожденным иммунитетом, либо приобретенным после болезни, поэтому выздоровевшие могут повторно заразиться. В этом случае мы не отличаем истинно здоровых от выздоровевших людей, объединяя эти категории в одну группу S .

В данной модели разделение констант скоростей передачи инфекции на две категории β_E и β_I объясняется различной природой передачи во время латентной и активной формы болезни. Латентные больные, не знающие о своей болезни, имеют больше контактов при передвижении, в то время как больные в активной фазе болезни общаются только со своим ближайшим окружением. Такое выделение двух механизмов распространения заболевания отражается в формуле для соответствующих констант скорости передачи инфекции [12]:

$$\beta_j = \beta_0 (\zeta_j v_{sc} + \xi_j v_{tr}) \left[1 - \exp\left(-\frac{l_x l_y^2}{a^3}\right) \right], \quad (4)$$

где $j = E, I$; a – характерное расстояние между людьми, связанное с плотностью населения соотношением $a = 1/\sqrt{n}$, здесь единицей измерения плотности является количество людей на квадратный метр (по сути, это – аналог числа Лошмидта, но в двухмерной геометрии), l_x – расстояние, которое выдыхаемая респираторная частица может пролететь в плоскости, расположенной горизонтально относительно поверхности земли, за счет своего начального импульса при учете только Стоксова трения [10, 11], l_y – расстояние, которое эта же частица может преодолеть вертикально под действием силы тяжести, v_{tr} – частота переноса, которая обусловлена взаимным перемещением людей относительно друг друга, а v_{sc} – частота социальных контактов, которая не связана напрямую с перемещением людей, ζ_j и ξ_j – весовые коэффициенты, отражающие вклад в суммарную частоту контактов транспортных и социальных процессов в зависимости от условий, в которых находится рассматриваемая группа людей, β_0 – константа, определяемая из эмпирических данных (в рассматриваемой модели мы положили для простоты эту константу одинаковой для транспортных и социальных процессов).

Как видно из соотношения (4), скорость передачи инфекции напрямую зависит от частот контактов v_{tr} и v_{sc} , имеющих, правда, совершенно разную физическую природу, а также наборов коэффициентов (ζ_E, ζ_I) и (ξ_E, ξ_I). В общем случае одновременно должны работать оба механизма, но их проявление может иметь совершенно разный характер. Например, положив среднюю скорость передвижения человека $V_{tr} \approx 0$, приходим к пределу, где $v_{tr} = 0$, а, значит, работает только социальный механизм передачи инфекции. В результате при наборе $C := (\zeta_E = 1, \zeta_I = 1)$, согласно (4), получаем $\beta_E = \beta_I$, т.е. скорости передачи инфекции от латентных и больных совпадают. Причем, данный вариант можно представить в виде суперпозиции $C = A + B$, где $A := (\zeta_E = 0, \zeta_I = 1)$ и $B := (\zeta_E = 1, \zeta_I = 0)$. Случай A ($\beta_I = 0$), рассмотренный в [27], физически соответствует распространению инфекции только категорией E , когда все больные категории I изолированы. Такая ситуация является типичной для городской среды, где есть большое количество транспортных потоков и социальных контактов. Набор коэффициентов B ($\beta_E = 0$) реализуется, когда положительное инфицирование начинается с определенной дозы вирусов, соответствующей, например, больному. Тогда, несмотря на наличие категории E , передача инфекции осуществляется только больными категории I , именно этот случай рассматривается в настоящей работе. Для удобства перепишем (2)–(4) в виде

$$\frac{dS}{dt} = (\gamma - \beta_I S)(1 - S - E) + \alpha E, \quad (5)$$

$$\frac{dE}{dt} = \beta_I S(1 - S - E) - (\delta + \alpha) E, \quad (6)$$

здесь мы исключили компоненту I с помощью соотношения

$$S + E + I = 1. \quad (7)$$

При этом, считается, что в популяции изначально содержится некоторое количество инфицированных и больных, т.е. для уравнений (5)–(6) рассматривается задача Коши:

$$S(t=0) = S_0 > 0, \quad E(t=0) = E_0 \geq 0. \quad (8)$$

Причем, в общем случае величины S_0 и E_0 могут принимать произвольные значения, однако всегда должно выполняться

$$I(t=0) = I_0 = 1 - S_0 - E_0 \geq 0.$$

В этой связи возникает естественный вопрос о том, как эпидемиологические константы, а в особенности β_I , влияют на установление соответствующего эндемического равновесия в популяции.

3. Анализ основных эпидемиологических констант

Прежде всего, остановимся на выборе эпидемиологических констант α , γ и δ , которые в основном зависят от медико-биологических факторов, а характеристики окружающей среды и рассматриваемой популяции, по-видимому, напрямую не сильно влияют на них. Поэтому в настоящих расчетах эти управляющие параметры возьмем постоянными, оценив их характерные значения по соответствующим эмпирическим данным. Например, значение константы δ оценивается по среднему времени инкубационного периода $\tau_{\text{инк}}$ [28, 29], за который принимается время между моментом заражения и началом проявления симптомов у инфицированного человека, как $\delta = 1/\tau_{\text{инк}}$. Анализ наблюдений показывает, что типичные значения $\tau_{\text{инк}}$ составляют от 3 до 5 дней [30]. Аналогичным образом оценивается величина γ . Так, согласно [31] средняя продолжительность инфекционного периода ($1/\gamma$) составляет от 3 до 14 дней. Введенный в модель постоянный коэффициент α , отвечающий за переход из группы латентных больных в категорию здоровых, соответствует среднему инфекционному периоду в 7 дней, т.е. в настоящих расчетах использовалось значение $\alpha = 1/7$ дней⁻¹.

Грубую оценку v_{sc} по порядку величины проведем на основе статистических данных по числу контактов, которые имеет человек в течение активного дневного периода. В данном случае за активный период принимается промежуток времени, когда человек может непосредственно общаться с другими людьми, например, в течение рабочего дня, длящегося $4 \leq \Delta t \leq 8$ ч ($1/6 \leq \Delta t \leq 1/3$ сут). Согласно [32–35] в среднем человек имеет $10 \leq k \leq 15$ ежедневных контактов.

Также к оценке дневного числа контактов можно подойти со стороны модели Данбара о социальном окружении человека, устанавливающей, в частности, максимальное количество постоянных социальных связей, которые человек может в принципе поддерживать [26]. Данбар выделил четыре группы людей (см. диаграмму, изображенную на рис. 1), отличающихся по интенсивности ежедневных контактов, обусловленных социальными, географическими, профессиональными причинами. Согласно выводам этой теории, у среднестатистического человека есть ближний круг общения (по сути, это члены семьи и ближайшие друзья), состоящий из 5 человек, с кем происходит постоянное общение. Ко второй группе численностью 15–20 человек относятся коллеги по работе, учебе, с которыми постоянно контактирует человек в течение дня. В третий круг, состоящий из 50 человек, входят те, с кем происходит осознанное, но очень редкое общение, т.е. прямое включение этой группы сильно увеличит число социальных контактов k , а, значит, и величину v_{sc} . В результате Данбар пришел к заключению, что число контактов N_D (так называемое число Данбара), которое может поддерживать человек, лежит в интервале $100 \leq N_D \leq 230$.

По-видимому, при оценке числа ежедневных контактов k следует учитывать только первые две группы, положив допустимое число ежедневных контактов равным $15 \leq k \leq 20$. Следовательно, продолжительность одного контакта $\tau_{sc} = \Delta t/k$ лежит в диапазоне $1/120 \leq \tau_{sc} \leq 1/45$ сут.

Определив частоту социальных контактов как $v_{sc} = 1/\tau_{sc}$, получим оценку допустимого интервала для v_{sc} :

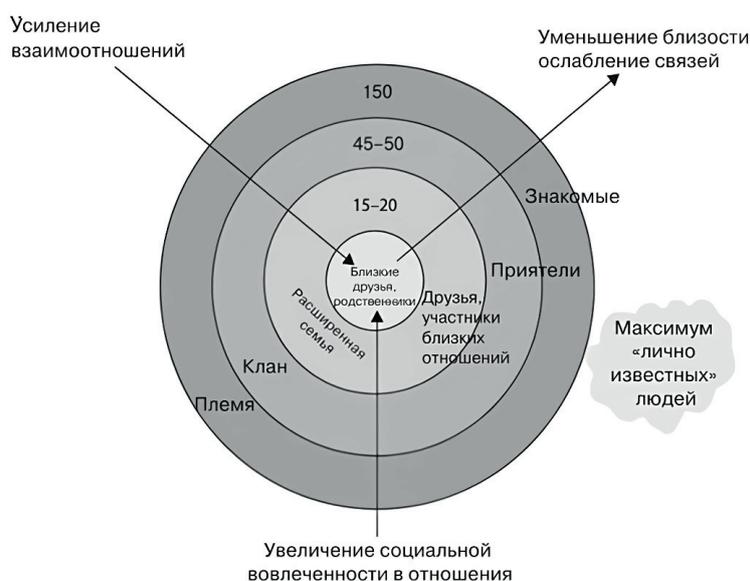


Рис. 1. Распределение социальных связей [26]

$$45 \leq v_{sc} \leq 120 \text{ день}^{-1}. \tag{9}$$

Грубо оценить число возможных социальных контактов также можно статистическим образом, рассматривая каждый социальный контакт как независимое событие, характеризуемое вероятностью p для замкнутой группы, состоящей из l людей. Естественно, в качестве l следует взять число Данбара, что в соответствии с [32–35] позволяет для оценок взять значение $p = 10^{-1}$. При этом мы полностью игнорируем временной фактор, т.е. в принципе пренебрегаем длительностью каждого контакта, учитывая только факт самого контакта.

Тогда вероятность реализации k контактов определяется биномиальным распределением:

$$P(k) = C_l^k \cdot p^k \cdot (1-p)^{l-k}, \tag{10}$$

где C_l^k – число сочетаний.

На рис. 2 представлены расчеты вероятности числа контактов $P(k)$ для $1 \leq k \leq 40$ и $l = N_D$, меняющимся в указанном для числа Данбара интервале. Как видно из приведенных зависимостей, максимальная вероятность при любом числе l лежит в диапазоне $10 \leq k \leq 25$, более того, для $k \leq 5$ и $k \leq 30$ вероятность контактов оказывается пренебрежимо малой, т.е. данные [32–35] о числе контактов заведомо лежат в указанном интервале.

При определении допустимого k также необходимо учитывать соответствующий статистический разброс. Поскольку для биномиального распределения (10) стандартное отклонение определяется соотношением $\sigma = \sqrt{p(1-p)l}$, то для выбранного диапазона числа Данбара получаем оценку $3 \leq \sigma < 5$, которая показывает, что допустимый интервал k может быть расширен на соответствующую величину.

Все это указывает на то, что значение приведенной грубой оценки частоты социальных контактов по порядку величины будет совпадать при использовании совершенно различных подходов к ее оценке для популяции постоянной численности при любом $N \gg 1$. Поэтому именно данную оценку мы будем использовать далее при проведении расчетов β_l по соотношению (4) для наиболее характерных физических (l_x, l_y) и демографических (a) параметров городской среды.

При этом следует иметь в виду, что значения v_{sc} , a , l_x и l_y никогда не могут быть заданы точно, поскольку они меняются как по времени, так и по координате, а также зависят от неконтролируемых факторов. Однако, исходя из соотношения (4) и оценки числа контактов на основе концепции Данбара и биномиального распределения, можно выделить область допустимых значений этих управляющих параметров.

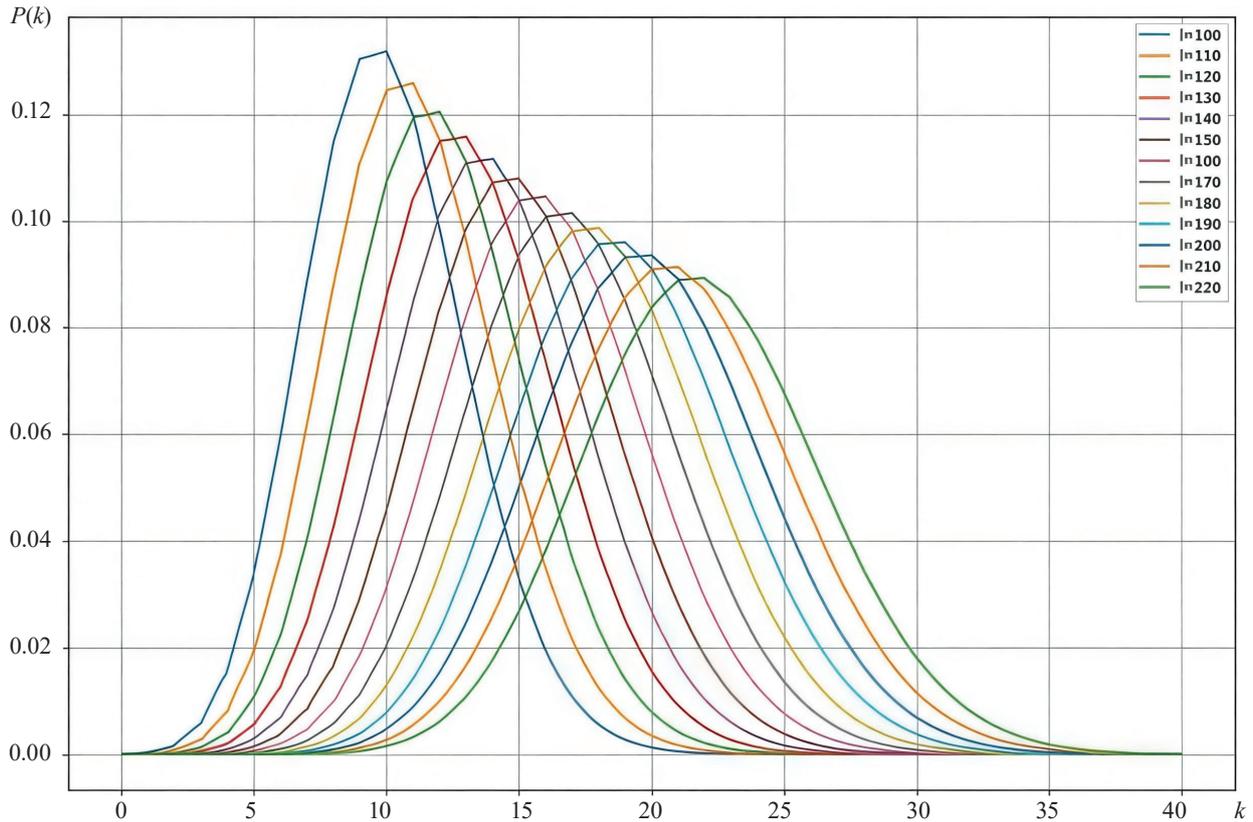


Рис. 2. Зависимость вероятности контакта от количества контактов по биномиальному распределению

Для наглядности перепишем (4) в виде

$$\beta_l = \beta_* \zeta, \tag{11}$$

здесь величина

$$\zeta = 1 - \exp(-\xi) \tag{12}$$

находится в пределах $0 \leq \zeta \leq 1$, когда безразмерная переменная $\xi = l_x l_y^2 / a^3$ меняется в диапазоне $0 \leq \xi \leq \infty$, а коэффициент β_* определяется соотношением $\beta_*(\beta_0, v_{sc}) = \beta_0 v_{sc}$. При этом выбор величины β_0 в рамках настоящей модели допускает определенную свободу; например, в качестве примера можно взять $\beta_0 = 1/n$, где $n = 5 \text{ м}^2$ – характерная плотность людей в метро [36]. Тогда для указанных минимальных и максимальных частот социальных контактов (9) получаем $\beta_{\min} = \beta_*(\beta_0, v_{\min}) = 9 \text{ м}^2/\text{день}$ и $\beta_{\max} = \beta_*(\beta_0, v_{\max}) = 24 \text{ м}^2/\text{день}$ соответственно. Таким образом, при учете только социальных контактов в SEIS допустимые значения β_l , согласно (11), лежат в области $\Gamma = \{(\zeta, \beta_l), 0 \leq \zeta \leq 1, \zeta \beta_{\min} \leq \beta_l \leq \zeta \beta_{\max}\}$, изображенной на рис. 3.

4. Формирование эндемического равновесия в социальных контактах

Рассматриваемый предел, позволяющий в явном виде исследовать воздействие общей социальной активности на установление эндемического равновесия, особенно актуален в современном мире, когда большое количество людей переходит на удаленную работу, и количество их социальных контактов снижается. Такому состоянию отвечает часть Γ с малыми значениями β_l : $\beta_l < 1 \text{ м}^2/\text{день}$. Причем, значения β_l и всех остальных эпидемиологических констант выбирались так, чтобы используемая SEIS-модель описывала известные случаи для сезонного гриппа, COVID-19 и краснухи [37–40].

Так, в настоящих расчетах использовалась константа $\alpha = 0.14 \text{ дней}^{-1}$, что, как отмечалось, соответствует среднему инфекционному периоду в 7 дней; $\gamma = 0.19 \text{ дней}^{-1}$, что соответствует среднему

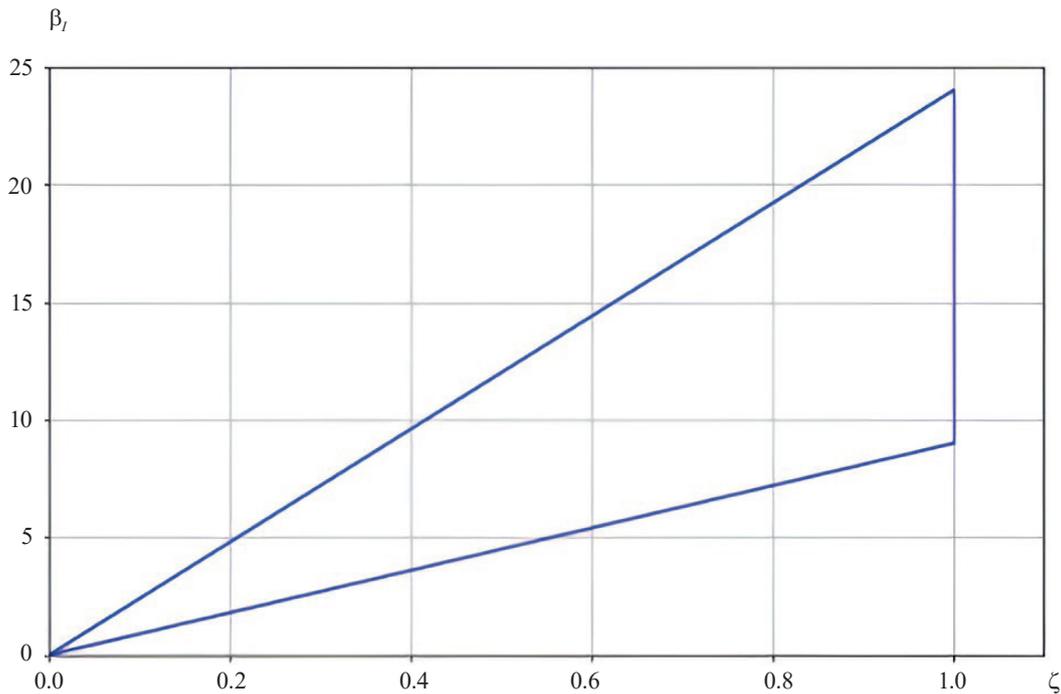


Рис. 3. Область допустимых значений β_I при $v_{sc} = 9$ день⁻¹, $v_{sc} = 24$ день⁻¹

инкубационному периоду в 5 дней; $\delta = 0.1$ дней⁻¹, что соответствует среднему времени инкубации в 10 дней. Предполагается, что в начальный момент времени в популяции присутствует некоторое число носителей инфекции и больных: $S_0 = 0.98$, $E_0 = I_0 = 0.01$.

Зависимости, представленные на рис. 4–6, иллюстрируют динамику установления эндемического равновесия при изменении β_I от значения 0.5 до 0.9 м²/день. Как видно из графиков, качественно характер развития эндемии для данного диапазона β_I остается неизменным. Однако с увеличением β_I сокращается время достижения равновесного состояния τ_* от 90 до 45 сут. Для времен $t > \tau_*$ можно считать, что устанавливается эндемическое равновесие, когда выполняются условия

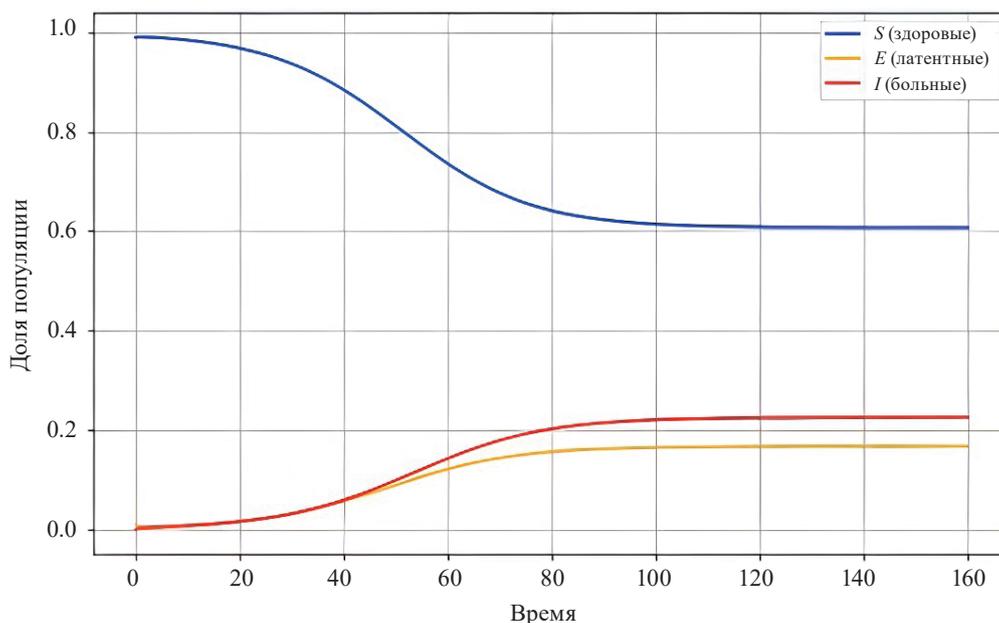


Рис. 4. Динамика установления эндемического равновесия при $\beta_I = 0.5$ м²/день

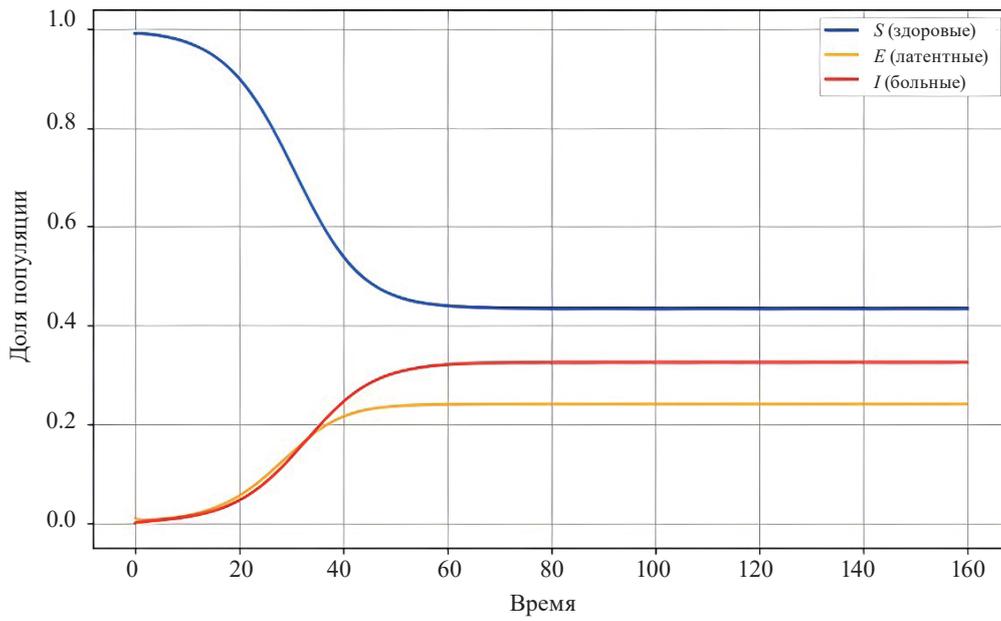


Рис. 5. Динамика установления эндемического равновесия при $\beta_I = 0.7 \text{ м}^2/\text{день}$

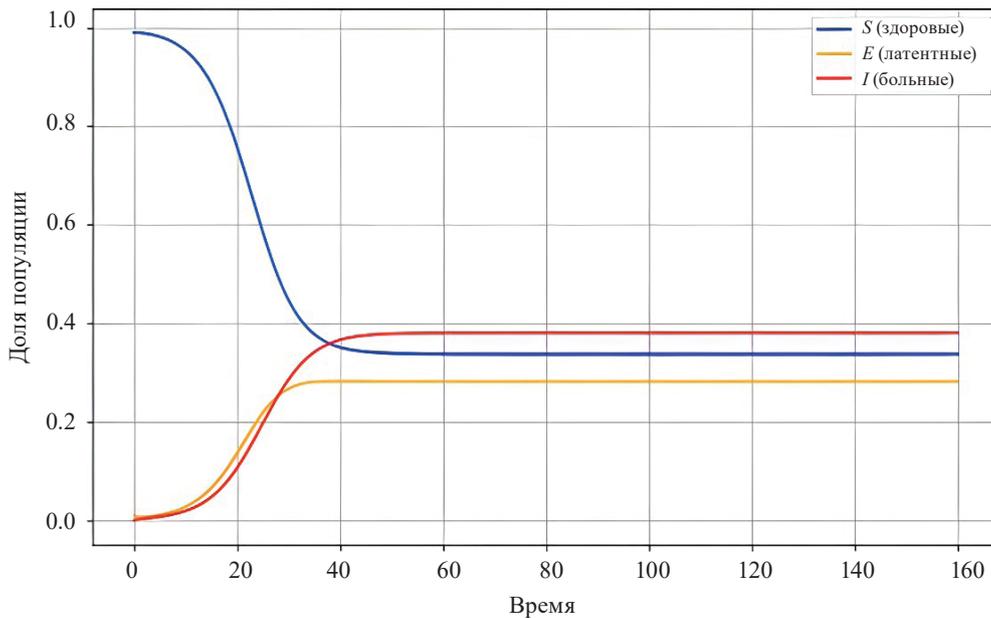


Рис. 6. Динамика установления эндемического равновесия при $\beta_I = 0.9 \text{ м}^2/\text{день}$

$$\frac{dS}{dt} = \frac{dE}{dt} = 0. \quad (13)$$

С учетом данных соотношений из уравнений (5), (6) и условия баланса (7) находим соответствующие равновесные значения:

$$S_* = \frac{\gamma(\alpha + \delta)}{\delta\beta_I}, \quad I_* = \frac{\delta}{\delta + \gamma} \left[1 - \frac{\gamma(\delta + \alpha)}{\delta\beta_I} \right], \quad E_* = \frac{\gamma}{\delta + \gamma} \left[1 - \frac{\gamma(\delta + \alpha)}{\delta\beta_I} \right]. \quad (14)$$

Можно сказать, данные выражения устанавливают итоговое соотношение между здоровыми, латентными и больными в зависимости от величины эпидемиологических констант. Так, уменьшение уровня заболевших и носителей происходит при уменьшении β_I , что наглядно иллюстрируется приведенными на рис. 4–5 зависимостями. При этом, вблизи равновесия между латентными и заболевшими согласно (14) устанавливается соотношение в пропорции $I_*/E_* = \delta/\gamma$. Однако следует иметь в виду, что соотношения (14) имеют смысл только при $I_* \geq 0$ и $E_* \geq 0$. Поэтому между эпидемиологическими константами должно выполняться неравенство

$$\delta \beta_I > \gamma(\delta + \alpha), \quad (15)$$

которое следует трактовать как необходимое условие, накладываемое на эпидемиологические константы, если в популяции достигается эндемическое равновесие. Важно отметить, что это условие справедливо в предположении отсутствия существенной деградации циркулирующего штамма или появления новых вариантов возбудителя, способных изменить эпидемиологическую картину. Таким образом, полученные результаты относятся к случаю стабильного штамма и постоянной восприимчивости популяции к данному возбудителю.

5. Заключение

В настоящей работе стандартная SEIS-модель распространения инфекционных заболеваний была модифицирована так, чтобы раздельно исследовать заражение через группу больных и инфицированных. Этого удалось добиться за счет использования зависимости эпидемиологической константы скорости передачи инфекции (4), в которой реальное перемещение людей и их социальная активность учитываются раздельно. Однако в настоящей работе мы ограничились обсуждением влияния только социального фактора на β_I , исключив из рассмотрения группу латентных больных, отвечающих за распространение инфекции по транспортному механизму, положив $\beta_E = 0$. Для грубой оценки допустимого интервала частоты социальных контактов мы воспользовались подходом Данбара о числе социальных контактов и прямым статистическим подсчетом на основе биномиального распределения (10), давших близкие значения. Также стоит еще раз отметить, что при оценке частоты социальных контактов мы оставались в рамках марковской парадигмы, хотя, в общем случае, именно в v_{sc} можно ожидать проявления немарковского поведения, обусловленного социокультурными процессами [41].

Используемое соотношение (4) зависит от трудно контролируемых факторов различной природы: v_{sc} , a , l_x и l_y . Поэтому, используя полученные грубые оценки, мы выделили допустимую область изменения β_I , когда перечисленные факторы меняются в ожидаемых пределах (см. рис. 3). В настоящих расчетах мы ограничились рассмотрением нижней части области Γ , где $\beta_I < 1$, что определялось возможностью сопоставления с известными эмпирическими результатами. Верхняя часть области Γ будет рассмотрена в последующих работах.

Выбранные таким образом значения β_I были использованы при исследовании эндемических равновесий в популяции постоянной численности. Такая ситуация может возникнуть, как нетривиальное, стационарное распределение [см. соотношения (13)] при установлении ненулевого баланса между заболевшими и выздоровевшими. Приведенные на рисунках 4–6 зависимости, с одной стороны, служат наглядной иллюстрацией установления эндемического равновесия, а с другой стороны, выбранные значения β_I относятся к конкретным случаям заболеваний, т.е. приведенные графики могут быть полезны для прогноза подобных эпидемий и установления необходимых характеристик в соотношении (4).

В этой связи стоит отметить, что введенная безразмерная константа передачи инфекции (12) также может быть использована для установления зависимости допустимого социального расстояния между людьми a_* от характеристик окружающей среды и начальной скорости респираторных частиц v_{x0} , имеющих радиус R . Действительно, для функции $\zeta = \zeta(\xi)$ всегда можно найти такую ξ_* , что при $\xi \geq \xi_*$ константа передачи инфекции ζ будет всегда пренебрежимо малой величиной. Тогда, рассматривая это значение ξ_* как предельное расстояние, на которое может распространиться инфекция, положим

$$a_* = \left(\frac{l_x l_y^2}{\xi_*} \right)^{1/3} \quad (16)$$

Согласно [10, 11], характерные расстояния l_x и l_y задаются соотношениями

$$l_x = \frac{2}{9} \frac{\rho_0}{\rho_{вз}} \text{Re} R, \quad (17)$$

и

$$l_y = \frac{2}{81} \left(\frac{\rho_0}{\rho_{вз}} \right)^2 \frac{\text{Re}^2}{\text{Fr}} R, \quad (18)$$

здесь $\text{Re} = Rv_{x0} / \nu$ – число Рейнольдса, $\text{Fr} = v_x / g'R$ – число Фруда, ν – кинематическая вязкость воздуха, $\rho_{вз}$ – плотность воздуха, ρ_0 – плотность аэрозольной частицы, g' – эффективное ускорение свободного падения, которое при учете статического поля Земли $E(y)$ и дипольного момента системы аэрозоль-вирус $p \sim qRe_y$, где q – заряд этой системы, определяется соотношением [10, 11]:

$$g' = g \pm \frac{3qe\delta n_q}{\rho_0 R^2}, \quad (19)$$

здесь g – ускорение свободного падения, δn_q – разность плотностей ионов и электронов в атмосфере. В данном случае наличие дипольного момента у системы аэрозоль-вирус определяется особенностями строения и состава этого комплекса. Например, согласно [42], респираторные частицы, состоящие из воды, растворенных в ней солей и гликопротеинов, содержат распределенные по объему ионы Na^+ и Cl^- , что заведомо обеспечивает ненулевой дипольный момент у системы аэрозоль-вирус. При этом знак в соотношении (18) определяется тем, как дипольный момент капли ориентирован (параллельно или антипараллельно) относительно E . Подставив (17) и (18) в (16), получим соотношение

$$a_* \approx \frac{1}{27} \left(\frac{\rho_0}{\rho_{вз}} \right)^{5/3} \text{Re}^{5/3} \xi_*^{-1/3} \text{Fr}^{-1/3} R, \quad (20)$$

которое демонстрирует влияние параметров окружающей среды и физиологических особенностей человека на безопасное социальное расстояние. Как видно из данного соотношения, значения безразмерных параметров ξ_* и Fr сравнительно слабо влияют на a_* , тогда как есть сильная зависимость от размера аэрозольных частиц, соотношения плотностей воздуха и дисперсной фазы, а также числа Рейнольдса. Однако, принимая во внимание относительно слабое изменение Re в типичных условиях обитания человека (например, замкнутом городском пространстве), влиянием данного фактора, как и числа Фруда, можно пренебречь. Однако, отсюда следует, что при анализе зависимости безопасного социального расстояния необходимо включать техногенные, географические и метеорологические факторы, определяющие состав и размеры аэрозольных частиц (по этому поводу см. [17, 43–45]), а также эффективное ускорение свободного падения g' .

В качестве иллюстрации на рис. 7 приведены зависимости, показывающие влияние размеров частиц на безопасное социальное расстояние при различных значениях безразмерного параметра ξ_* при $\text{Re} = 0.5$ и $\text{Fr} = 0.1$, что соответствует типичным городским условиям. Чтобы отразить влияние ξ_* на a_* , здесь мы выбрали достаточно широкий диапазон ξ_* , в котором происходит наиболее сильное изменение ξ_* .

Как видно из приведенных графиков, при изменении ξ_* в пределах $0.44 \leq \xi_* \leq 0.84$ максимальный разброс в значениях a_* при $R = 100$ мкм не превышает 10 %, что наглядно показывает относительно слабое влияние выбора ξ_* на допустимое социальное расстояние. При выбранных значениях Re и Fr для малых и средних частиц ($R \leq 50$ мкм) безопасное социальное расстояние $a_* < 1.5$ м, тогда как для гигантских аэрозолей ($R \sim 100$ мкм) происходит увеличение до $a_* \sim 3$ м. Это еще раз показывает необхо-

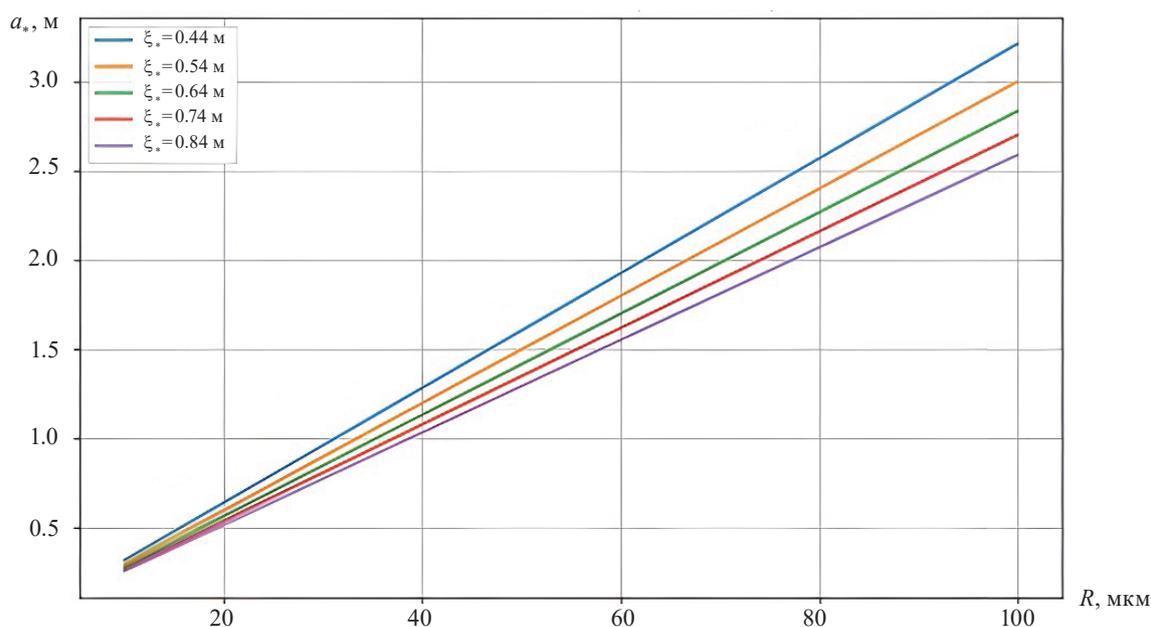


Рис. 7. График зависимости a_* от размера аэрозольных частиц для $Re = 0.5$, $Fr = 0.1$ и плотностей воздуха при температуре $+20^\circ\text{C}$, влажного и сухого воздуха

димось учета компонентного состава аэрозолей в данной географической точке, а также возможность их использования в качестве переносчиков вирусов при оценке величины безопасного социального расстояния. Стоит отметить, что данная очень грубая оценка совпадает с эмпирическими принятыми значениями минимального безопасного расстояния между людьми, принятыми в разных странах в разгар пандемии COVID-19. Так, согласно [46], минимальная дистанция для обеспечения безопасности была установлена на уровне от 1.5 до 2 м. В нашем случае это соответствует частицам не более $R \leq 80$ мкм. Правда, при учете влияния электрических полей естественного и техногенного происхождения на заряд или дипольный момент системы аэрозоль-вирус данные результаты могут измениться существенным образом, но этот вопрос требует отдельного рассмотрения.

Финансирование

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (договор № 075-00270-24-00).

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

А.Р. Каримов – формулировка идеи и целей исследования, постановка задачи, выбор методов исследования и разработка концепции исследования, подбор литературных источников, редактирование текста статьи.

М.А. Соломатин – проведение численных расчетов; выполнение измерений, анализ экспериментальных данных, выявление закономерностей, подбор литературных источников, редактирование текста статьи.

Список литературы

1. Hunter E., Mac Namee B., Kelleher J. An open-data-driven agent-based model to simulate infectious disease outbreaks // *PLoS One.*, 2018. V. 13. DOI: 10.1371/journal.pone.0208775/
2. Wilson N., Corbett S., Tovey E. Airborne transmission of COVID-19 // *BMJ*, 2020. V. 370. P. 10–11. DOI: 10.1136/bmj.m3206 /
3. Mossong J., Hens N., Jit M., Beutels P., Auranen K., Mikolajczyk R., et al. Social contacts and mixing patterns relevant to the spread of infectious diseases // *PLoS Med.*, 2008. V.5(3): e74. DOI: 10.1371/journal.pmed.0050074.
4. Словохотов Ю.Л. Физика и социофизика. Ч. 2 // *Проблемы управления*, 2012. Вып. 2. С. 2–31.
5. Колесниченко А.А. Сравнительный анализ моделей распространения инфекций // *Общество, образование, наука в современных парадигмах развития*, 2020. С. 214–220.
6. Tolles J., Luong T. Modeling epidemics with compartmental models // *JAMA*, 2020. V. 323. № 24. P. 2515–2516. DOI:10.1001/jama.2020.8420/.
7. Tang L., Zhou Y., Wang L., Purkayastha S., Zhang L., He J., Wang F., Song P. X. K. A review of multi-compartment infectious disease models // *International Statistical Review*, 2020. V. 88. P. 462–513. DOI: 10.1111/insr.12402 /
8. Акимов В. А., Бедило М. В., Иванова Е. О. Математические модели эпидемий и пандемий как источников чрезвычайных ситуаций биолого-социального характера // *Технологии гражданской безопасности*, 2022. Т. 19, № 3 (73). С. 10–14.
9. Авиллов К.К., Романюха А.А. Математические модели распространения и контроля туберкулеза // *Математическая биология и биоинформатика*, 2007. Т. 2, № 2. С. 188–318.
10. Karimov A.R., Stenflo L., Yu M. Y. Dynamics of charged aerosols relevant to transmission of airborne infections // *Physica Scripta*, 2022. V. 97, № 8. P. 085007.
11. Каримов А.Р., Соломатин М.А. Особенности распространения аэрозольных частиц в техногенных условиях // *Вестник НИЯУ МИФИ*, 2024. Т. 13. Вып. 1. С. 30–39. DOI:10.26583/vestnik.2024.303/.
12. Karimov A. R., Solomatin M. A., Bocharov A. N. Influence of transfer epidemiological processes on the formation of endemic equilibria in the extended SEIS model // *Mathematics*, 2024. Vol. 12, № 22. P. 3585. DOI:10.3390/math12223585/.
13. Каримов А.Р., Соломатин М.А., Валиуллин Р.А., Шарафутдинов Р.Ф. Влияние скорости передачи инфекции на формирование эндемического равновесия в расширенной SEIR-модели // *Вестник Башкирского университета*, 2024. Т. 29, № 4. С. 202–212.
14. Попова А.Ю., Зайцева Н.В., Алексеев В.Б., Летюшев А.Н., Кирьянов Д.А., Клейн С.В. и др. Неоднородность параметров модифицированной SIR-модели волн эпидемического процесса COVID-19 в Российской Федерации // *Гигиена и санитария*, 2023. Т. 102, № 8. С. 740–749.
15. Братусь А.С., Новожилов А.С., Платонов А.П. *Динамические системы и модели биологии*. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. 400 с.
16. Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г. *Курс химической кинетики*. М.: Высшая школа, 1984. 463 с.
17. Van Kampen N. G. *Stochastic processes in physics and chemistry*. Amsterdam: North-Holland, 1992.
18. Азроянц Э. А., Шелепин Л.А. Немарковские процессы и их приложения // *Препринт ФИАН*, 1998. № 58.
19. Vacchini B., Smirne A., Laine E. M., Piilo J., Breuer H. P. Markovianity and non-Markovianity in quantum and classical systems // *New Journal of Physics*, 2011. V. 13(9). P. 093004.
20. Luczka J. Non-Markovian stochastic processes: colored noise // *Chaos*, 2005. V. 15(2). P. 026107.
21. Di Lauro F., KhudaBukhsh W.R., Kiss I.Z., Kenah E., Jensen M., Rempala G.A. Dynamic survival analysis for non-Markovian epidemic models // *Journal of The Royal Society Interface*, 2022. Vol. 19(191). P. 20220124.
22. Kudryashov N.A., Chmykhov M., Vigdorowitsch M. An estimative (warning) model for recognition of pandemic nature of virus infections // *International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation*, 2021. V. 24, № 1. P. 213–226. DOI:10.1515/ijnsns-2020-0154/.
23. Kudryashov N. A., Chmykhov M. A., Vigdorowitsch M. Analytical features of the SIR model and their applications to COVID-19 // *Applied Mathematical Modelling*, 2021. V. 90. P. 466–473. DOI: 10.1016/j.apm.2020.08.057.
24. Припачкин Д.А., Высоцкий В.Л., Будыка А.К. Влияние условий моделирования на оценку скорости сухого осаждения аэрозольных частиц на сильно неоднородные подстилающие поверхности // *Известия Российской академии наук. Физика атмосферы и океана*, 2024. Т. 60, № 2. С. 173–182.
25. Dunbar R. *How many friends does one person need? Dunbar's number and other evolutionary quirks*. Harvard University Press, 2010.
26. Wellman B. Is Dunbar's number up? // *British Journal of Psychology*, 2012. V. 103, № 2.
27. Каримов А.Р., Соломатин М.А. Эндемическое равновесие в расширенной SEIR-модели // *Ядерная физика и инжиниринг*, 2025. Т. 16, № 2. С. 254–258.
28. Lauer S.A., Grantz K.H., Bi Q., Jones F.K., Zheng Q., Meredith H.R., Azman A.S., Reich N.G., Lessler J. The incubation period of coronavirus disease 2019 (COVID-19) from publicly reported confirmed cases: estimation and application // *Annals of Internal Medicine*, 2020. V. 172. P. 577–582.
29. Guan W., Zheng-Yi Ni Yu Hu, et al. Clinical characteristics of coronavirus disease 2019 in China // *New England Journal of Medicine*, 2020. V. 382, № 18. P. 1708–1720.

30. He X., Lau E. H. Y., Wu P., Deng X., Wang J., Hao X. et al. Temporal dynamics in viral shedding and transmissibility of COVID-19 // *Nature Medicine*, 2020. V. 26, № 5. P. 672–675.
31. Tudor-Locke C., Craig C.L., Brown W.J., Clemes S.A., De Cocker K., Giles-Corti B. et al. How many steps/day are enough? For adults // *International Journal of Behavioral Nutrition and Physical Activity*, 2011. V. 8. P. 1–17.
32. Li Q., Guan X., Wu P. et al. Early transmission dynamics in Wuhan, China, of novel coronavirus-infected pneumonia // *New England Journal of Medicine*, 2020. V. 382, № 13. P. 1199–1207.
33. Schönrrath K., Klein-Szanto A.J., Braunewell K.H. The putative tumor suppressor VILIP-1 counteracts epidermal growth factor-induced epidermal-mesenchymal transition in squamous carcinoma cells // *PLoS One*, 2012. Vol. 7, № 3. e33116.
34. Read J.M. et al. Social mixing patterns in rural and urban areas of southern China // *Proceedings of the Royal Society B: Biological Sciences*, 2014. Vol. 281, № 1785. P. 20140268.
35. Zhang J. et al. Changes in contact patterns shape the dynamics of the COVID-19 outbreak in China // *Science*, 2020. V. 368, № 6498. P. 1481–1486.
36. Budzynski M., Luczkiewicz A., Szmaglini J. Assessing the risk in urban public transport for epidemiologic factors // *Energies*, 2021. V. 14. P. 4513.
37. White L.F., Pagano M.A. Likelihood-based method for real-time estimation of the serial interval and reproductive number of an epidemic // *Statistics in Medicine*, 2008. V. 27, № 16. P. 2999–3016.
38. Ferguson N.M. et al. Impact of non-pharmaceutical interventions (NPIs) to reduce COVID-19 mortality and health-care demand // *Imperial College London Report*, 2020. V. 9(1). P. 1–20.
39. Edmunds W.J. et al. The pre-vaccination epidemiology of measles, mumps and rubella in Europe: implications for modelling studies // *Epidemiology and Infection*, 2000. V. 125, № 3. P. 635–650.
40. Пономарёв Р.Л., Судаков В.А., Сивакова Т.В., Энтентеев А.Р., Ескин В.И. Разработка модели распространения COVID-19 в городских агломерациях // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша*, 2021. № 74. 20 с.
41. Словохотов Ю.Л. Физика и социофизика. Ч. 3. Квазифизическое моделирование в социологии и политологии. Некоторые модели лингвистики, демографии и математической истории // *Проблемы управления*, 2012, № 3, С. 2–34.
42. Луканина К.И., Будыка А.К., Ребров И.Е., Антипова К.Г., Малахов С.Н., Шепелев А.Д., Григорьев Т.Е., Ямщиков В.А., Чвалун С.Н. Эффективность средств индивидуальной защиты органов дыхания от вирусов sars-cov-2 и перспективы ее увеличения // *Российские нанотехнологии*, 2021. Т. 16. № 1. С. 80–102.
43. Ivlev L.S. Atmospheric aerosols. *Aerosols – Science and Technology* / Ed. by I. Agranovski. Weinheim: Wiley–VCH, 2010. P. 345.
44. Kondratyev K.Y., Ivlev L.S., Krapivin V.F., Varotsos C.A. Programmes of atmospheric aerosol experiments: the history of studies // *Atmospheric Aerosol Properties: Formation, Processes and Impacts*, 2006. P. 3–60.
45. Пискунов В.Н. Динамика аэрозолей. М: Физматлит, 2010. 293 с.
46. Sun C., Zhai Z. The efficacy of social distance and ventilation effectiveness in preventing COVID-19 transmission // *Sustainable Cities and Society*, 2020. V. 62. P. 102390.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2025, vol. 14, no. 3, pp. 225–239

Influence of social contacts on formation of endemic equilibrium in SEIS model

A. R. Karimov^{1,2}, M.A. Solomatin^{1,✉}

¹ National Research Nuclear University MEPhI, Moscow, 115409, Russian Federation

² Joint Institute of High Temperatures, Russian Academy of Sciences, Moscow, 127412, Russian Federation

✉ mis4455@yandex.ru

Received March 21; revised June 8, 2025; accepted June 10, 2025

In the framework of mean-field approximation, the influence of social contacts on the spread of an epidemic in a population of constant size is discussed. This aspect, which seems to be not fully explored yet, is getting increasing attention in mathematical epidemiology. The key point of the proposed model is that it highlights two-infection transfer mechanisms depending on the physical nature of the contact between people. We separate the transfer mechanism related directly to the movement of people (the

so-called transport processes) from the one occurring at zero relative speed of persons (the so-called social contacts). Under the framework of the proposed physical chemical analogy, this approach allows us uniformly to come to the description of the rate constants of infection transmission of different nature. The resulting transmission rate constants are used to modify the SEIS model to examine the influence of social activity on the formation of endemic equilibrium in the population under consideration. The frequency of social contacts is estimated with the Dunbar approach and direct statistical calculation based on the binomial distribution. Both methods provide close values, the ones are used to determine the permissible range of values for the infection transmission rate constant, employed to establish endemic equilibrium. The necessary conditions for the existence of this equilibrium, depending on both social and medical-biological factors, are also obtained.

Keywords: SEIS model, Dunbar's number, epidemiological constants, binomial distribution.

References

1. Hunter E., Mac Namee B., Kelleher J. An open-data-driven agent-based model to simulate infectious disease outbreaks. *PLoS One.*, 2018. Vol. 13. DOI: 10.1371/journal.pone.0208775.
2. Wilson N., Corbett S., Tovey E. Airborne transmission of COVID-19. *BMJ*, 2020. Vol. 370. Pp. 10–11. DOI: 10.1136/bmj.m3206.
3. Mossong J., Hens N., Jit M., Beutels P., Auranen K., Mikolajczyk R. et al. Social contacts and mixing patterns relevant to the spread of infectious diseases. *PLoS Med.*, 2008. Vol. 5. (3): e74. DOI: 10.1371/journal.pmed.0050074.
4. Slovokhotov Yu. L. Fizika i sociofizika. Ch.2 [Physics and sociophysics. Part 2]. *Problemy Upravleniya*, 2012. Iss. 2. Pp. 2–31 (in Russian).
5. Kolesnichenko A.A. Sravnitel'nyy analiz modelej rasprostraneniya infekcij [Comparative analysis of infection spread models]. *Obshchestvo, Obrazovanie, Nauka v Sovremennykh Paradigmakh Razvitiya*, 2020. Pp. 214–220 (in Russian).
6. Tolles J., Luong T. Modeling epidemics with compartmental models. *JAMA*, 2020. Vol. 323. Pp. 2515–2516. DOI:10.1001/jama.2020.8420.
7. Tang L., Zhou Y., Wang L., Purkayastha S., Zhang L., He J., Wang F., Song P. X. K. A review of multi-compartment infectious disease models. *International Statistical Review*, 2020. Vol. 88. Pp. 462–513. DOI: 10.1111/insr.12402.
8. Akimov V.A., Bedilo M.V., Ivanova E.O. Matematicheskie modeli epidemij i pandemij kak istochnikov chrezvychajnykh situacij biologo-social'nogo haraktera [Mathematical models of epidemics and pandemics as sources of biologically-social emergencies]. *Tekhnologii Grazhdanskoj Bezopasnosti*, 2022. Vol. 19. No. 3 (73). Pp. 10–14 (in Russian).
9. Avilov K.K., Romanyukha A.A. Matematicheskie modeli rasprostraneniya i kontrolya tuberkuleza [Mathematical models of tuberculosis spread and control]. *Matematicheskaya Biologiya i Bioinformatika*, 2007. Vol. 2. No. 2. Pp. 188–318 (in Russian).
10. Karimov A.R., Stenflo L., Yu M. Y. Dynamics of charged aerosols relevant to transmission of airborne infections. *Physica Scripta*, 2022. Vol. 97. No. 8. Pp. 085007.
11. Karimov A.R., Solomatin M.A. Osobennosti rasprostraneniya aerol'nykh chastic v tekhnogennykh usloviyah [Features of aerosol particle dispersion under technogenic conditions]. *Vestnik NIYaU MIFI*, 2024. Vol. 13(1). Pp. 30–39. DOI:10.26583/vestnik.2024.303 (in Russian).
12. Karimov A.R., Solomatin M.A., Bocharov A.N. Influence of transfer epidemiological processes on the formation of endemic equilibria in the extended SEIS model. *Mathematics*, 2024. Vol. 12. No. 22. Pp. 3585. DOI:10.3390/math12223585.
13. Karimov A.R., Solomatin M.A., Valiullin R.A., Sharafutdinov R.F. Vliyanie skorosti peredachi infekcii na formirovanie endemicheskogo ravnovesiya v rasshirennoj SEIR-modeli [Impact of infection transmission rate on endemic equilibrium formation in an extended SEIR model]. *Vestnik Bashkirskogo Universiteta*, 2024. Vol. 29. No. 4. Pp. 202–212 (in Russian).
14. Popova A.Yu., Zaytseva N.V., Alekseev V.B., Letyushev A.N., Kiryanov D.A., Klein S.V. et al. Neodnorodnost' parametrov modifitsirovannoj SIR-modeli voln epidemicheskogo processa COVID-19 v Rossijskoj Federacii [Parameter heterogeneity of a modified SIR model for epidemic waves of COVID-19 in the Russian Federation]. *Gigiena i Sanitariya*, 2023. Vol. 102. No. 8. Pp. 740–749 (in Russian).
15. Bratus A.S., Novozhilov A.S., Platonov A.P. Dinamicheskie sistemy i modeli biologii. [Dynamical systems and models in biology]. Moscow, Fizmatlit, 2010. 400 p.
16. Emanuel N.M., Knorre D.G. Kurs himicheskoy kinetiki [The course in chemical kinetics]. Moscow, Vysshaja Shkola, 1984.
17. van Kampen N.G. Stochastic processes in physics and chemistry. Amsterdam, North-Holland, 1992.
18. Azroyants E.A., Shelepin L.A. Nemarkovskie processy i ih prilozheniya [Non-Markovian processes and their applications]. Preprint FIAN. 1998. No. 58.
19. Vacchini B., Smirne A., Laine E. M., Piilo J., Breuer H. P. Markovianity and non-Markovianity in quantum and classical systems. *New Journal of Physics*. 2011. Vol. 13. No. 9. Pp. 093004.
20. Łuczka J. Non-Markovian stochastic processes: Colored noise. *Chaos*, 2005. Vol. 15. No. 2. Pp. 026107.

21. Di Lauro F., KhudaBukhsh W.R., Kiss I.Z., Kenah E., Jensen M., Rempala G.A. Dynamic survival analysis for non-Markovian epidemic models. *Journal of The Royal Society Interface*, 2022. Vol. 19. No. 191. Pp. 20220124.
22. Kudryashov N.A., Chmykhov M., Vigdorowitsch M. An estimative (warning) model for recognition of pandemic nature of virus infections. *International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation*, 2021. Vol. 24. No. 1. Pp. 213–226. DOI:10.1515/ijnsns-2020-0154.
23. Kudryashov N. A., Chmykhov M. A., Vigdorowitsch M. Analytical features of the SIR model and their applications to COVID-19. *Applied Mathematical Modelling*, 2021. Vol. 90. Pp. 466–473. DOI: 10.1016/j.apm.2020.08.057.
24. Pripachkin D.A., Vysotskiy V.L., Busyka A.K. Vliyanie usloviy modelirovaniya na ocenku skorosti suhogo osazhdeniya aerazol'nyh chastic na sil'no neodnorodnye podstilaushchie poverhnosti [Influence of simulation conditions on estimation of dry deposition velocity of aerosol particles on strongly heterogeneous underlying surfaces]. *Izvestiya Rossiiskoi Akademii Nauk. Fizika Atmosfery i Okeana*, 2024. Vol. 60. No. 2. Pp. 173–182 (in Russian).
25. Dunbar R. How many friends does one person need? Dunbar's number and other evolutionary quirks. Harvard University Press, 2010.
26. Wellman B. Is Dunbar's number up? *British Journal of Psychology*, 2012. Vol. 103. No. 2.
27. Karimov A.R., Solomatin M.A. Эндемическое равновесие в расширенной SEIR-модели [Endemic equilibrium in an extended SEIR model]. *Yadernaya Fizika i Inzhiniring*, 2025. Vol. 16. No. 2. Pp. 254–258 (in Russian).
28. Lauer S. A., Grantz K. H., Bi Q., Jones F. K., Zheng Q., Meredith H. R., Azman A. S., Reich N. G., Lessler J. The incubation period of coronavirus disease 2019 (COVID-19) from publicly reported confirmed cases: Estimation and application. *Annals of Internal Medicine*, 2020. Vol. 172. Pp. 577–582.
29. Guan W., Zheng-Yi Ni Yu Hu, et al. Clinical characteristics of coronavirus disease 2019 in China. *New England Journal of Medicine*, 2020. Vol. 382. No. 18. Pp. 1708–1720.
30. He X., Lau E. H. Y., Wu P., Deng X., Wang J., Hao X. et al. Temporal dynamics in viral shedding and transmissibility of COVID-19. *Nature Medicine*. 2020. Vol. 26. No. 5. Pp. 672–675.
31. Tudor-Locke C., Craig C.L., Brown W.J., Clemes S.A., De Cocker K., Giles-Corti B. et al. How many steps/day are enough? For adults. *International Journal of Behavioral Nutrition and Physical Activity*, 2011. Vol. 8. Pp. 1–17.
32. Li Q., Guan X., Wu P. et al. Early transmission dynamics in Wuhan, China, of novel coronavirus–infected pneumonia. *New England Journal of Medicine*, 2020. Vol. 382. No. 13. Pp. 1199–1207.
33. Schönrrath K., Klein-Szanto A.J., Braunewell K.H. The putative tumor suppressor VILIP-1 counteracts epidermal growth factor-induced epidermal-mesenchymal transition in squamous carcinoma cells. *PLoS One*, 2012. Vol. 7. No. 3. e33116.
34. Read J. M. et al. Social mixing patterns in rural and urban areas of southern China. *Proceedings of the Royal Society B: Biological Sciences*, 2014. Vol. 281, No. 1785. pp. 20140268.
35. Zhang J. et al. Changes in contact patterns shape the dynamics of the COVID-19 outbreak in China. *Science*, 2020. Vol. 368. No. 6498. Pp. 1481–1486.
36. Budzynski M., Luczkiewicz A., Szmaglini J. Assessing the risk in urban public transport for epidemiologic factors. *Energies*, 2021. Vol. 14. Pp. 4513.
37. White L. F., Pagano M. A likelihood-based method for real-time estimation of the serial interval and reproductive number of an epidemic. *Statistics in Medicine*, 2008. Vol. 27. No. 16. Pp. 2999–3016.
38. Ferguson N.M. et al. Impact of non-pharmaceutical interventions (NPIs) to reduce COVID-19 mortality and healthcare demand. *Imperial College London Report*, 2020. Vol. 9. No. 1. Pp. 1–20.
39. Edmunds W.J. et al. The pre-vaccination epidemiology of measles, mumps and rubella in Europe: Implications for modelling studies. *Epidemiology and Infection*, 2000. Vol. 125. No. 3. Pp. 635–650.
40. Ponomaryov R.L., Sudakov V.A., Sivakova T.V., Ententevev A.R., Eskin V.I. Razrabotka modeli rasprostraneniya COVID-19 v gorodskih aglomeratsiyah [Development of a model for the spread of COVID-19 in urban agglomerations]. *Preprints of IPM im. M. V. Keldysha*, 2021. No. 74. 20 p. (in Russian).
41. Slovohotov Yu.L. Fizika i sociofizika. Ch. 3. Kvazifizicheskoe modelirovanie v sociologii i politologii. Nekotorye modeli lingvistiki, demografii i matematicheskoy istorii [Physics and Sociophysics. Part 3. Quasi-Physical Modeling in Sociology and Political Science. Some Models of Linguistics, Demography, and Mathematical History]. *Problemy upravleniya*, 2012, no. 3, pp. 2–34 (in Russian).
42. Lukanina K.I., Budika A.K., Rebrov I.E., Antipova K.G., Malakhov S.N., Shepelev A.D., Grigoriev T.E., Yamshchikov V.A., Chvalun S.N. Effectiveness of personal respiratory protection against SARS-CoV-2 viruses and prospects for its improvement. *Russian Nanotechnologies*, 2021. Vol. 16. No. 1. Pp. 80–102.
43. Ivlev L.S. Atmospheric aerosols / Ed. by I. Agranovski. *Aerosols – Science and Technology*. Weinheim: Wiley–VCH, 2010. P. 345.
44. Kondratyev K.Y., Ivlev L.S., Krapivin V.F., Varotsos C.A. Programmes of atmospheric aerosol experiments: The history of studies Atmospheric Aerosol Properties: Formation, Processes and Impacts, 2006. Pp. 3–60.
45. Piskunov V.N. Dinamika aërozolei [Aerosol Dynamics]. Moscow, Fizmatlit Publ, 2010. 293 p.
46. Sun C., Zhai Z. The efficacy of social distance and ventilation effectiveness in preventing COVID-19 transmission. *Sustainable Cities and Society*, 2020. Vol. 62. P. 102390.

УДК 004.056.5

Квантовые киберугрозы и их воздействие на безопасность критической информационной инфраструктуры

И. А. Василенко

АНОО ВО «Университет «Сириус», федеральная территория «Сириус», 354349, Россия

Использование квантовых технологий в современном мире создает масштабные вызовы для сохранности критически значимой информационной инфраструктуры, на которой базируются такие основные отрасли, как медицина, энергетика, транспорт и связь. Криптографические алгоритмы RSA и ECC, долгое время считавшиеся надежными, утратили свою устойчивость перед мощью квантовых вычислений, что делает первостепенной задачей поиск современных решений для обеспечения защиты данных. Главные риски, которые несут квантовые компьютеры, включают возможность компрометации алгоритмов шифрования и возникающие вследствие этого угрозы целостности информации и устойчивости функционирования жизненно важных систем. Методологическая основа исследования основывается на анализе 318 источников из таких международных баз данных, как Scopus, Web of Science и др. Из этого количества были отобраны 24 публикации, наиболее релевантных теме. Был проведен сравнительный метод анализа классических и квантовых угроз. Цель исследования – изучить влияние квантовых атак на безопасность критической информационной инфраструктуры (КИИ) на современном уровне и предложить пути перехода к квантово-устойчивым решениям. Результаты работы подчеркивают необходимость внедрения таких инновационных криптографических подходов, как алгоритмы на основе решеток и кодов, а также комбинированных (гибридных) технологий. Успешная защита инфраструктуры требует системного подхода, включающего комплексный аудит текущих систем, обучение специалистов и снятие технических и нормативных ограничений. Разработанный поэтапный план минимизирует риски и создает основу для безопасного внедрения новых стандартов.

Ключевые слова: квантовые киберугрозы, критическая информационная инфраструктура, защита информации, интернет, потенциальные атаки.

Введение

Инфраструктура критической значимости (КИИ) включает в себя совокупность информационных систем, телекоммуникационных сетей и автоматизированных управляющих комплексов, обеспечивающих стабильное функционирование ключевых отраслей, которые играют основополагающую роль для государства и общества. К таким сферам относятся здравоохранение, научные исследования, транспорт, связь, энергетика, финансовый сектор, топливно-энергетический комплекс, а также промышленность оборонного назначения, космическая, горнодобывающая, металлургическая и химическая отрасли. Ключевые риски, угрожающие КИИ, связаны с утратой конфиденциальности, искажением целостности и ограничением доступности информации. При этом конфиденциальность подразумевает предотвращение несанкционированного доступа к данным, целостность гарантирует их точность и полноту, а доступность – обеспечение своевременного доступа к информации для тех, кто обладает соответствующими правами [1]. Развитие квантовых вычислительных технологий представляет собой серьезный

✉ И.А. Василенко: iravas988@yandex.ru

Поступила в редакцию: 09.04.2025

После доработки: 03.06.2025

Принята к публикации: 03.06.2025

вызов таким традиционным криптографическим механизмам, как RSA и ECC, которые рискуют утратить свою надежность, что открывает путь для потенциальной компрометации защищенных систем. Вдобавок к этому активное внедрение технологий Интернета вещей (IoT) и увеличение количества устройств, подключенных к сети, создают дополнительные точки уязвимости, что многократно усиливает угрозы для КИИ. В частности, согласно статистическим данным, за первую половину 2022 г. в России было зафиксировано увеличение числа атакованных IoT-устройств на 40 %, что подтверждает масштаб растущих рисков для информационной безопасности¹. Таким образом, поддержание безопасности КИИ требует систематического наблюдения за технологическими изменениями, оперативной адаптации к новым угрозам, внедрения передовых защитных инструментов и постоянного повышения квалификации специалистов в области кибербезопасности. Основная цель исследования заключается в изучении влияния квантовых угроз на устойчивость КИИ и разработке практических рекомендаций для ее надежной защиты.

Методология исследования

В ходе исследования научных публикаций было обработано 318 источников, извлеченных из таких известных баз данных, как Elibrary, Scopus, Web of Science и SpringerLink. Из общего объема отобрано 24 наиболее значимых работ, посвященных вопросам квантовых вычислений, уязвимостям актуальных криптографических методов и подходам к их защите. Для уточнения поиска применялись запросы: «quantum computing», «post-quantum cryptography», «cybersecurity threats», «critical infrastructure», «RSA vulnerability», «ECC attacks». Результаты проведенного анализа позволили выделить ключевые векторы развития постквантовой криптографии, а также обозначить основные угрозы, касающиеся RSA и ECC. Кроме того, сравнительное изучение традиционных и квантовых киберугроз дало возможность упорядочить методы атак, их влияние на системы и последствия для криптографической инфраструктуры.

Определение угроз квантовых вычислений и защита информации

Опираясь на законы квантовой механики, квантовые вычисления открывают новые горизонты в информатике, полностью трансформируя подходы к обработке данных. Их ключевыми принципами являются суперпозиция, запутанность и интерференция – уникальные свойства, позволяющие квантовым машинам справляться с задачами, которые недостижимы для традиционных систем [2]. Вместо привычных битов, фиксированных в состояниях 0 или 1, в квантовых компьютерах используются кубиты, способные одновременно находиться в нескольких состояниях, что значительно повышает их вычислительные возможности за счет параллелизма. Однако, несмотря на значительный прогресс, данные технологии ставят под угрозу безопасность существующих криптографических систем, вызывая необходимость пересмотра методов защиты информации в условиях квантовой эпохи [3].

Квантовые вычисления несут три основные угрозы безопасности информационных систем.

1. Компрометация криптографических алгоритмов: квантовые компьютеры, используя алгоритм Шора, подрывают безопасность таких широко применяемых систем шифрования, как RSA, DSA и ECC. Эти механизмы, основанные на сложности математических задач (факторизации крупных чисел и вычислении дискретных логарифмов), утрачивают свою эффективность перед вычислительными возможностями квантовых технологий [4, 5].

2. Угроза искажения и подмены информации в результате компрометации криптографических механизмов. Квантовые атаки, получив доступ к ключам шифрования, могут открыть путь для вмешательства в передаваемые данные. Хотя сами по себе квантовые алгоритмы не искажают данные напрямую, уязвимости, возникающие после взлома, делают возможными вмешательства стороннего нарушителя. Это создает значительные риски для платформ, критически зависящих от достоверности информации, например, в области финансовых транзакций или управления стратегической инфраструктурой [6].

¹ Количество атак на IoT-устройства в России выросло на 40 % за первое полугодие 2022 г. [Электронный ресурс]. URL: https://www.kaspersky.ru/about/press-releases/kolichestvo-atak-na-iot-ustrojstva-v-rossii-vyroslo-na-40-za-pervoe-polugodie-2022-goda?utm_source=chatgpt.com (дата обращения: 02.12.2024).

3. Риск нарушения доступа к данным, обусловленный вторичными эффектами квантовой атаки. В случае успешного обхода защиты или блокировки систем может быть затруднен и невозможен доступ к информационным ресурсам. В результате возможна дестабилизация ключевых отраслей: основополагающие секторы, включая энергетику, транспорт, медицину и государственное управление, подвергаются опасности отказа в работе. Такие последствия опосредованно связаны с квантовыми возможностями, что несет угрозу устойчивости и функционированию систем жизненной важности.

Современные методы криптографической защиты, включая алгоритмы RSA, ECC и симметричные протоколы, теряют свою эффективность перед угрозами, возникающими из-за квантовых вычислений. Защита RSA (Rivest – Shamir – Adleman), базирующаяся на сложности разложения больших чисел на простые множители, ранее считалась практически неуязвимой, так как классическим компьютерам для выполнения подобных операций требуются миллионы лет [7]. Однако с появлением алгоритма Шора мощные квантовые компьютеры способны решать такие задачи за несколько часов, что обесценивает надежность RSA. Также криптография эллиптических кривых (ECC), использующая сложность дискретных логарифмов для обеспечения безопасности при меньших длинах ключей, оказывается неспособной противостоять вычислительным возможностям квантовых систем [8, 9].

Для всестороннего понимания проблемы требуется выполнить детальный сравнительный анализ угроз, создаваемых классическими и квантовыми кибератаками, включая их методы воздействия и последствия для систем безопасности. Этот анализ необходим для выявления различий между этими угрозами и выработки практических рекомендаций по защите критической инфраструктуры в условиях ускоряющегося развития квантовых технологий. Представленная ниже таблица служит инструментом для структурирования информации, подчеркивая основные различия, возможные риски и доступные способы защиты (табл. 1) [10–13].

Таблица 1. Сравнительный анализ классических и квантовых киберугроз

Категория	Классические киберугрозы	Квантовые киберугрозы
Типы угроз	Вирусы и черви. Фишинг. DDoS-атаки. Взлом паролей. Эксплойты уязвимостей ПО	Взлом асимметричных криптографических алгоритмов (RSA, ECC) с использованием квантовых компьютеров. Ускоренный перебор ключей симметричных алгоритмов (например, AES) с помощью алгоритма Гровера. Потенциальные атаки на квантовые коммуникационные каналы
Методы атаки	Использование известных уязвимостей. Социальная инженерия. Брутфорс. Малварь	Применение алгоритма Шора для факторизации больших чисел и взлома RSA. Использование алгоритма Гровера для ускоренного перебора ключей. Возможность подслушивания квантовых каналов связи при недостаточной защите.
Влияние на криптографию	Требуют увеличения длины ключей и улучшения алгоритмов шифрования. Необходимость регулярного обновления и патчей для устранения уязвимостей	Угроза полной компрометации текущих асимметричных алгоритмов шифрования. Необходимость разработки и внедрения пост-квантовых криптографических алгоритмов
Меры противодействия	Антивирусные программы. Фаерволы. Системы обнаружения вторжений (IDS). Обучение сотрудников кибергигиене. Регулярные обновления ПО	Разработка и внедрение квантово-устойчивых криптографических алгоритмов. Использование квантового распределения ключей (QKD) для обеспечения безопасной связи. Обновление инфраструктуры безопасности для противодействия квантовым атакам
Влияние на системы безопасности	Могут привести к утечке данных, финансовым потерям, нарушению работы систем. Требуют постоянного мониторинга и обновления систем безопасности	Потенциальная компрометация всей цифровой инфраструктуры, основанной на текущих криптографических стандартах. Необходимость глобального перехода на новые стандарты шифрования и обновления всех систем безопасности

Противопоставление традиционных и квантовых киберугроз позволяет выявить их принципиальные различия в механизмах воздействия, источниках угроз и степени риска для безопасности систем. Такие традиционные атаки, как вирусные программы, фишинг, DDoS-атаки и использование уязвимостей, опираются на эксплуатацию известных слабых мест в программном обеспечении и ошибках пользователей. Для защиты от таких угроз применяются проверенные методы, включая антивирусы, системы фильтрации трафика (фаерволы), инструменты обнаружения вторжений и регулярные обновления программного обеспечения. Однако, несмотря на наличие устоявшихся мер защиты, необходимость их усовершенствования и постоянного контроля остается актуальной [14].

В то же время меры противодействия квантовым угрозам требуют принципиально нового подхода. В отличие от классических атак, квантовые угрозы обусловлены вычислительными возможностями квантовых компьютеров, которые делают уязвимыми традиционные криптографические алгоритмы [15, 16]. Для минимизации рисков требуется внедрение таких технологий, как постквантовая криптография и квантовое распределение ключей (QKD). Однако их реализация сталкивается с масштабными трудностями, включая значительные технические ограничения, высокую стоимость и необходимость изменений в организационных процессах. Квантовые угрозы оказывают более разрушительное воздействие на системы безопасности, чем классические атаки. Если последствия традиционных угроз сводятся к утечкам данных и временным сбоям в работе систем, квантовые атаки способны поставить под угрозу устойчивость всей цифровой инфраструктуры, использующей современные криптографические стандарты. Таким образом, переход к технологиям, устойчивым к квантовым атакам, требует не только разработки инновационных решений, но и кардинального изменения подходов к планированию и распределению ресурсов на долгосрочную перспективу [17].

Постквантовая криптография (PQC) разрабатывает методы, которые способны эффективно противостоять угрозам, исходящим от квантовых компьютеров. Среди ключевых направлений выделяются три основные группы алгоритмов [18].

Первая категория включает такие решеточные схемы, как Learning With Errors (LWE) и NTRU. Они основываются на решении задач, связанных с векторными решетками, что обеспечивает их высокую устойчивость к квантовым атакам, и делает эти алгоритмы одними из наиболее перспективных для стандартизации. Вторая группа представлена кодовыми алгоритмами, в том числе схемой МакЭлиса, которые используют сложность декодирования случайных линейных кодов. Однако их внедрение затрудняется из-за значительных размеров ключей, необходимых для их работы. Третья категория – мультивариантные алгоритмы, построенные на решении нелинейных систем уравнений. Примером может служить схема Rainbow, особенно подходящая для реализации цифровых подписей. В августе 2024 г. Национальный институт стандартов и технологий США (NIST) утвердил глобальные стандарты постквантового шифрования – FIPS 203, FIPS 204 и FIPS 205. Это решение стало важным этапом в развитии информационной безопасности, отражая необходимость адаптации криптографических методов к вызовам квантовой эры [19].

Квантовая криптография, в частности технология квантового распределения ключей (QKD), представляет собой инновационный подход к защите данных, основанный на фундаментальных законах квантовой механики. QKD позволяет участникам безопасно обмениваться секретными ключами, а попытки несанкционированного доступа могут быть выявлены на этапе передачи. Однако процесс интеграции QKD в действующую инфраструктуру требует существенных финансовых вложений и решения ряда сложных инженерных задач. Эффективная защита ключевых инфраструктур от рисков, связанных с квантовыми угрозами, предполагает стратегическое использование комбинированных решений [20]. Такой гибридный подход, сочетающий традиционные и постквантовые криптографические алгоритмы, обеспечивает не только постепенный переход к новым стандартам безопасности, но и позволяет минимизировать риски, возникающие из-за потенциальных уязвимостей недавно разработанных технологий.

Во-вторых, важнейшим элементом перехода на постквантовые стандарты выступает детальное планирование. Оно начинается с комплексного анализа существующих систем, направленного на выявление применяемых криптографических методов и их слабых мест перед квантовыми атаками. Результаты этой работы становятся основой для разработки пошагового плана, определяющего последовательность внедрения постквантовых алгоритмов и сроки их реализации [21]. При этом ключевое

внимание уделяется профессиональной подготовке кадров: повышение компетенций специалистов в области новых криптографических технологий гарантирует правильное внедрение и эксплуатацию обновленных решений.

В-третьих, важным аспектом реализации постквантовой защиты является устранение препятствий, которые могут возникнуть в процессе адаптации. К числу технических задач относится обеспечение совместимости инновационных алгоритмов с действующими системами. С точки зрения экономики требуется проведение анализа затрат для оптимизации ресурсов, выделяемых на внедрение. Наряду с этим необходимо адаптировать нормативные документы, включая стандарты и регламенты, к требованиям постквантовой криптографии [22]. Только такой комплексный подход позволит минимизировать риски и создать надежную основу для устойчивой защиты критически важных объектов инфраструктуры [23].

Чтобы обеспечить эффективный переход к новым стандартам, процесс управления должен быть четко структурирован. Этапы анализа текущих систем, выбора наиболее подходящих мер защиты и их внедрения требуют строгой координации [24]. Схема, представленная в тексте, детализирует ключевые шаги, необходимые для нейтрализации угроз, связанных с развитием квантовых технологий.

На иллюстрированной схеме (рис. 1) подробно описан алгоритм последовательных действий, направленных на защиту КИИ от рисков, связанных с квантовыми угрозами. Первым шагом предусмотрено

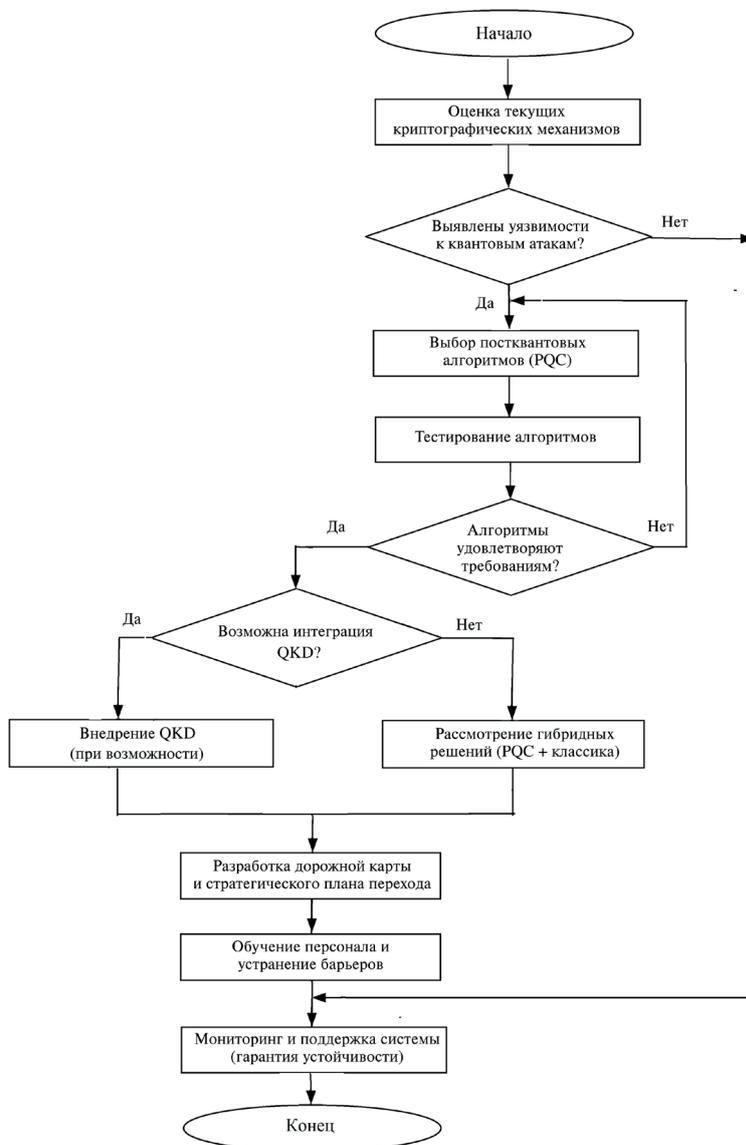


Рис. 1. Алгоритм защиты критической информационной инфраструктуры от квантовых угроз

требуется глубокая оценка текущих криптографических механизмов для выявления их уязвимостей перед атаками с использованием квантовых технологий. Если анализ подтверждает наличие таких слабостей, следующим этапом становится выбор подходящих алгоритмов, после чего проводится их тщательное тестирование. Внедрение постквантовой криптографии (PQC) и квантового распределения ключей (QKD) могут использоваться параллельно, поэтапно или альтернативно, в зависимости от условий конкретной системы. В случае невозможности реализации QKD предлагается рассматривать гибридные подходы, где комбинируются классические и постквантовые решения.

Далее предусмотрен этап стратегического планирования, включающий разработку дорожной карты, которая определяет основные этапы перехода на постквантовые стандарты, сроки выполнения работ и ключевые задачи. Важным компонентом этого этапа является обучение специалистов новым криптографическим методам и устранение существующих барьеров технического, экономического и нормативного характера. Финальный шаг направлен на обеспечение постоянного мониторинга и технической поддержки системы, что гарантирует ее устойчивость перед потенциальными вызовами. Такая структурированная модель обеспечивает не только надежное управление процессом адаптации к новым стандартам безопасности, но и минимизирует риски, связанные с возможными недостатками внедряемых решений.

Заключение

Развитие квантовых технологий формирует беспрецедентные вызовы для безопасности КИИ, на основе которой функционируют ключевые отрасли. Криптографические алгоритмы RSA и ECC, которые на протяжении десятилетий служили опорой защиты данных, становятся уязвимыми перед вычислительными возможностями квантовых компьютеров. Атаки, основанные на таких технологиях, представляют угрозу не только конфиденциальности информации, но и ее целостности и доступности, ставя под удар устойчивость важнейших систем. Эффективное противодействие этим угрозам требует не только тактических решений, но и стратегического переосмысления подходов к защите КИИ. Переход на алгоритмы постквантовой криптографии, отличающиеся устойчивостью к квантовым атакам, становится одним из ключевых направлений. Однако их внедрение сопряжено с рядом серьезных вызовов: технологическими ограничениями, высокими финансовыми издержками и необходимостью пересмотра существующей нормативной базы. Вместе с тем использование гибридных методов, сочетающих традиционные и постквантовые подходы, позволяет минимизировать риски и обеспечить постепенный переход к обновленным стандартам кибербезопасности, что критически важно в условиях динамично развивающейся квантовой угрозы. Для надежного противодействия угрозам, связанным с квантовыми технологиями, необходимо скоординированное взаимодействие на уровнях организаций, государств и международных структур. Важнейшими шагами на этом пути являются внедрение стандартов постквантовой криптографии, повышение квалификации специалистов, всесторонний аудит текущих систем и тестирование новых решений. Только целостный и комплексный подход способен эффективно снизить риски, связанные с развитием квантовых вычислений, и обеспечить длительную защиту критической информационной инфраструктуры. Проведенное исследование подтверждает, что интеграция квантово-устойчивых технологий должна стать ключевым элементом стратегий кибербезопасности. Промедление с адаптацией к новым угрозам может привести к уязвимости значительной части цифровой инфраструктуры, что в свою очередь, может повлечь серьезные последствия как для отдельных организаций, так и для общества в целом.

Финансирование

Работа выполнена без привлечения внешних источников финансирования.

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Список литературы

1. Зудинов А.С. Защита информации на объектах критической информационной инфраструктуры // StudNet, 2021. Т. 4. № 6. DOI: 10.24411/2658-4964-2021-10354.
2. Гаврилов С.В., Клабукова И.С. Квантовые компьютеры. Операционные системы для квантовых компьютеров // Материалы Международной научно-методической конференции «Интеграция науки и образования в вузах нефтегазового профиля, 2022. Передовые технологии и современные тенденции». Салават: УНПЦ «Издательство УГНТУ», 2022. С. 443–445.
3. Ulyanov S.V., Ulyanov V.S. Fast quantum search algorithm modelling on conventional computers: Information analysis of the halting problem // Software & Systems, 2023. № 3. P. 361–377. DOI: 10.15827/0236-235X.143.361-377.
4. Бирюков А.А., Шлеенков М.А. Моделирование процессов в элементах квантового компьютера на основе методов квантовой теории с целью совершенствования их эффективности // Сборник трудов по материалам X Международной конференции и молодежной школы «Информационные технологии и нанотехнологии» (ИТНТ-2024). Самара: СНИУ им. академика С.П. Королева, 2024. Т. 1. С. 10462.
5. Begmyradov M., Shohradova J. The impact of quantum computers on cryptography: the Future of encryption technologies // EO IPSO, 2024. № 11. P. 46–48.
6. La Cour B. Advances in Quantum Computing // Entropy, 2023, V. 25(12), 1633. DOI: 10.3390/e25121633.
7. Li Y., Bi R., Jiang N., Li F., Wang M., Jing X. Methods and Challenges of Cryptography-Based Privacy-Protection Algorithms for Vehicular Networks // Electronics, 2024, V. 13, 2372. DOI: 10.3390/electronics13122372.
8. Singh A., Sharma V.S., Basheer S., Chowdhary C.L. A Deep Cryptographic Framework for Securing the Healthcare Network from Penetration // Sensors, 2024. V. 24. № 21, 7089. DOI: 10.3390/s24217089.
9. Li S., Chen Y., Chen L., Liao J., Kuang C., Li K., Liang W., Xiong N. Post-Quantum Security: Opportunities and Challenges // Sensors, 2023. V. 23. № 21. 8744. DOI: 10.3390/s23218744.
10. Ning Y.-D., Chen Y.-H., Shih C.-S., Chu S.-I. Lookup Table-Based Design of Scalar Multiplication for Elliptic Curve Cryptography // Cryptography. 2024. V.8(1), 11. DOI: 10.3390/cryptography8010011.
11. Sebé F., Simón S. E-Coin-Based Priced Oblivious Transfer with a Fast Item Retrieval // Cryptography, 2024, V.8 (1). DOI: 10.3390/cryptography8010010.
12. Raheman F. The Future of Cybersecurity in the Age of Quantum Computers // Future Internet, 2022 V. 14 (11). 335. DOI: 10.3390/fi14110335.
13. Tsantikidou K., Sklavos N. Threats, Attacks, and Cryptography Frameworks of Cybersecurity in Critical Infrastructures // Cryptography, 2024, V.8(1). 7. DOI: 10.3390/cryptography8010007.
14. Wang Y., Li L., Zhou Y., Zhang H. A Comprehensive Review of MI-HFE and IPHFE Cryptosystems: Advances in Internal Perturbations for Post-Quantum Security // Axioms, 2024 V.13, 741. DOI: 10.3390/axioms13110741.
15. Li S., Chen Y., Chen L., Liao J., Kuang C., Li K., Liang W., Xiong N. Post-Quantum Security: Opportunities and Challenges // Sensors 2023. V. 23, 8744. DOI:10.3390/s23218744.
16. Токаев К. О. Квантовый компьютер как угроза информационной безопасности / К.О. Токаев, В. И. Соловьев // Материалы национальной научно-практической конференции «Цифровые системы и модели: теория и практика проектирования, разработки и применения». Казань: КГЭУ, 2024. С. 1376–1380.
17. Черепнев М. А., Грачева С.С. Угрозы, связанные с применением квантовых эффектов в криптографии // Информационные технологии, 2024. Т. 30. № 8. С. 417–424. DOI: 10.17587/it.30.417–424.
18. Петренко А.С., Петренко С.А., Ожиганова М.И. Модель угроз безопасности по аналитике зарубежных национальных квантовых программ // Защита информации. Инсайд, 2021. № 4(100). С. 50–59.
19. Гаврилова М.А., Козулина А.А., Новикова А.А. Квантовый компьютер: человеческое благо или угроза всему миру? // Моя профессиональная карьера, 2021. Т. 1, № 25. С. 31–38.
20. Петренко А.С., Петренко С.А., Костюков А.Д., Ожиганова М.И. Модель квантовых угроз безопасности для современных блокчейн-платформ // Защита информации. Инсайд, 2022. № 3(105). С. 10–20.
21. Ступин Д.Д., Петренко А.С., Петренко С.А. Развитие технологий квантовых вычислений и связанные с ним угрозы для критической информационной инфраструктуры Российской Федерации // Материалы XVI Всероссийской мультиконференции по проблемам управления (МКПУ-2023). Волгоград: ВГТУ, 2023. Т. 2. С. 168–172.
22. Овчинский В.С. Об угрозах квантовых компьютерных вычислений // Цифровые технологии в борьбе с преступностью: проблемы, состояние, тенденции: Сборник материалов I Всероссийской научно-практической конференции. Москва: ФГКОУ ВО «Университет прокуратуры Российской Федерации», 2021. С. 54–60.
23. Дьяков Д.М. Насколько серьезна угроза квантовых вычислений для национальной криптовалюты Венесуэлы // Информационная безопасность в банковско-финансовой сфере. Москва: ООО «Издательство «КноРус», 2020. С. 61–67.
24. Петренко А.С., Петренко С.А. Оценка квантовой угрозы для современных блокчейн-систем // Сборник трудов VII Международной научно-практической конференции. «Информационные системы и технологии в моделировании и управлении». Ялта, 24–25 мая 2023 г. Симферополь: ООО «Издательство Типография «Ариал», 2023. С. 171–173.

Quantum cyber threats and their impact on the security of critical information infrastructure

I. A. Vasilenko 

Sirius University, Sirius Federal Territory, 354349, Russia

 iravas988@yandex.ru

Received April 09, 2025; revised June 03, 2025; accepted June 03, 2025

The use of quantum technologies in the modern world poses significant challenges to the security of critical information infrastructure, which underpins key sectors such as healthcare, energy, transportation, and communications. Cryptographic algorithms like RSA and ECC, long considered reliable, have lost their resilience in the face of quantum computing capabilities, making the search for modern solutions to ensure data protection a top priority. The main risks posed by quantum computers include the potential compromise of encryption algorithms, disruption of data integrity, and destabilization of critical system operations. The methodological foundation of this study is based on the analysis of 318 sources from international databases such as Scopus, Web of Science, and others. From this body of literature, 24 publications most relevant to the topic were selected. A comparative method was employed to analyze classical and quantum threats. The aim of the study is to examine the impact of quantum attacks on the security of critical information infrastructure (CII) at the current level and propose pathways for transitioning to quantum-resilient solutions. The results emphasize the necessity of implementing innovative cryptographic approaches, such as lattice-based and code-based algorithms, as well as combined (hybrid) technologies. Successful protection of the infrastructure requires a systematic approach, including a comprehensive audit of existing systems, training of specialists, and the removal of technical and regulatory barriers. The developed step-by-step plan minimizes risks and establishes a foundation for the secure implementation of new standards.

Keywords: quantum cyber threats, critical information infrastructure, information protection, internet, potential attacks.

References

1. *Zudinov A.S.* Zashchita informatsii na ob'ektakh kriticheskoy informatsionnoj infrastruktury [Information security at critical information infrastructure facilities]. StudNet, 2021. Vol. 4. No. 6. DOI: 10.24411/2658-4964-2021-10354 (in Russian).
2. *Gavrilov S.V., Klaubukova I.S.* Kvantovye komp'yutery. Operatsionnye sistemy dlya kvantovykh komp'yutеров [Quantum computers. Operating systems for quantum computers]. Materialy Mezhdunarodnoj nauchno-metodicheskoy konferentsii « Integratsiya nauki i obrazovaniya v vuzakh neftegazovogo profilya, 2022. Peredovye tekhnologii i sovremennye tendentsii» [Proceedings of the International Scientific and Methodological Conference « Integration of Science and Education in Universities with Oil and Gas Profile, 2022. Advanced Technologies and Modern Trends»]. Salavat, UNPTS «Izdatel'stvo UGNPTU» Publ., 2022. Pp. 443–445 (in Russian).
3. *Ulyanov S.V., Ulyanov V.S.* Fast quantum search algorithm modelling on conventional computers: Information analysis of the halting problem. Software & Systems, 2023. No. 3. Pp. 361–377. DOI: 10.15827/0236-235X.143.361-377.
4. *Biryukov A.A., Shleenkov M.A.* Modelirovanie protsessov v elementakh kvantovogo komp'yutera na osnove metodov kvantovoy teorii s tsel'yu sovershenstvovaniya ikh effektivnosti [Modeling of processes in quantum computer elements based on quantum theory methods for improving efficiency]. Cbornik trudov po materialam X Mezhdunarodnoj konferentsii i molodezhnoj shkoly «Informatsionnye tekhnologii i nanotekhnologii» (ITNT-2024). [Collection of papers based on the materials of the X International Conference and Youth School «Information technologies and nanotechnologies (ITNT-2024)»]. Samara, SNRU Publ., 2024. Vol. 6. Pp. 10462 (in Russian).
5. *Begmyradov M., Shohradova J.* The impact of quantum computers on cryptography: the future of encryption technologies. EO IPSO, 2024. No. 11. Pp. 46–48.

6. *La Cour B.* Advances in quantum computing. *Entropy*, 2023. Vol. 25(12), art. 1633. DOI: 10.3390/e25121633.
7. *Li Y., Bi R., Jiang N., Li F., Wang M., Jing X.* Methods and challenges of cryptography-based privacy-protection algorithms for vehicular networks. *Electronics*, 2024, vol.13, art. 2372. DOI: 10.3390/electronics13122372.
8. *Singh A., Sharma V.S., Basheer S., Chowdhary C.L.* A deep cryptographic framework for securing the healthcare network from penetration. *Sensors*, 2024. Vol. 24. No. 21, art. 7089. DOI: 10.3390/s24217089.
9. *Li S., Chen Y., Chen L., Liao J., Kuang C., Li K., Liang W., Xiong N.* Post-quantum security: Opportunities and challenges. *Sensors*, 2023. Vol. 23. No. 21, art. 8744. DOI: 10.3390/s23218744.
10. *Ning Y.-D., Chen Y.-H., Shih C.-S., Chu S.-I.* Lookup table-based design of scalar multiplication for elliptic curve cryptography. *Cryptography*, 2024. Vol. 8. art. 11. DOI: 10.3390/cryptography8010011.
11. *Sebé F., Simón S.* E-coin-based priced oblivious transfer with a fast item retrieval. *Cryptography*, 2024. Vol. 8, art. 10. DOI: 10.3390/cryptography8010010.
12. *Raheman F.* The future of cybersecurity in the age of quantum computers. *Future Internet*, 2022. Vol. 14, art. 335. DOI: 10.3390/fi14110335.
13. *Tsantikidou K., Sklavos N.* Threats, attacks, and cryptography frameworks of cybersecurity in critical infrastructures. *Cryptography*, 2024. Vol. 8 (1), art.7. DOI: 10.3390/cryptography8010007.
14. *Wang Y., Li L., Zhou Y., Zhang H.* A comprehensive review of MI-HFE and IPHFE cryptosystems: Advances in internal perturbations for post-quantum security. *Axioms*, 2024. Vol. 13, art. 741. DOI: 10.3390/axioms13110741.
15. *Li S., Chen Y., Chen L., Liao J., Kuang C., Li K., Liang W., Xiong N.* Post-quantum security: Opportunities and challenges. *Sensors*, 2023. Vol. 23, art. 8744. DOI: 10.3390/s23218744.
16. *Tokan K.O., Soloviev V.I.* Kvantovyy komp'yuter kak ugroza informatsionnoj bezopasnosti [Quantum computer as a threat to information security]. *Materialy nacional'noj nauchno-prakticheskoy konferencii «Cifrovye sistemy i modeli: teoriya i praktika proektirovaniya, razrabotki i primeneniya»*. [Proceedings of the national scientific and practical conference «Digital systems and models: theory and practice of design, development and application»]. Kazan, KSPEU Publ., 2024. Pp. 1376–1380 (in Russian).
17. *Cherepnev M.A., Gracheva S.S.* Ugrozy, svyazannye s primeneniem kvantovykh effektov v kriptografii [Threats associated with quantum effects in cryptography]. *Informatsionnye tekhnologii*, 2024. Vol. 30. No. 8, Pp. 417–424. DOI: 10.17587/it.30.417-424 (in Russian).
18. *Petrenko A.S., Petrenko S.A., Ozhiganova M.I.* Model' ugroz bezopasnosti po analitike zarubezhnykh natsional'nykh kvantovykh programm [Threat model analysis based on foreign national quantum programs]. *Zashchita informatsii. Insaïd*, 2021. No. 4(100). Pp. 50–59 (in Russian).
19. *Gavrilova M.A., Kozulina A.A., Novikova A.A.* Kvantovyy komp'yuter: chelovecheskoe blago ili ugroza vsemu miru? [Quantum computer: human benefit or threat to the world?]. *Moya professional'naya kar'era*, 2021. Vol. 1. No. 25. Pp. 31–38 (in Russian).
20. *Petrenko A.S., Petrenko S.A., Kostyukov A.D., Ozhiganova M.I.* Model' kvantovykh ugroz bezopasnosti dlya sovremennykh blokcheïn-platform [Quantum threat model for modern blockchain platforms]. *Zashchita informatsii. Insaïd*, 2022. No. 3(105). Pp. 10–20 (in Russian).
21. *Stupin D.D., Petrenko A.S., Petrenko S.A.* Razvitie tekhnologij kvantovykh vychislenij i svyazannye s nim ugrozy dlya kriticheskoy informatsionnoj infrastruktury Rossiïskoï Federatsii [Quantum computing technologies development and threats to Russian critical information infrastructure]. XVI Vserossiyskaya multikonferentsiya po problemam upravleniya (MKPU-2023). [Proceedings of the XVI All-Russian Multi-Conference on Management Problems (MKPU-2023)]. Volgograd, VSTU Publ., 2023. Vol. 2. Pp. 168–172 (in Russian).
22. *Ovchinskij V.S.* Ob ugrozhakh kvantovykh komp'yuternykh vychislenij [On the threats of quantum computing]. *Materials of 1st All-Russian Scientific-Practical Conf. «Tsifrovye tekhnologii v bor'be s prestupnost'yu: problemy, sostoyanie, tendentsii»*. [Collection of materials of the I All-Russian scientific and practical conference «Digital technologies in the fight against crime: problems, status, trends»]. Moscow, FGKOU VO «Universitet prokuratury Rossijskoj Federacii» Publ., 2021. Pp. 54–60 (in Russian).
23. *Diamond D.M.* Naskol'ko ser'yozna ugroza kvantovykh vychislenij dlya natsional'noj kriptovalyuty Venesuely [How serious is the quantum threat to Venezuela's national cryptocurrency]. *Informatsionnaya bezopasnost' v bankovsko-finansovoy sfere*. [Information security in the banking and financial sector]. Moscow, Knorus Publ., 2020. Pp. 61–67 (in Russian).
24. *Petrenko A.S., Petrenko S.A.* Otsenka kvantovoy ugrozy dlya sovremennykh blokcheïn-sistem [Quantum threat assessment for modern blockchain systems]. *Informatsionnye sistemy i tekhnologii v modelirovanii i upravlenii: Proc. of the 7th Int. Scientific-Practical Conf., Yalta, May 24–25, 2023*. [Proceedings of the VII International Scientific and Practical Conference «Information Systems and Technologies in Modeling and Management»]. Yalta, May 24–25, 2023]. Simferopol, Arial Publ., 2023. Pp. 171–173 (in Russian).

УДК 004.932:528.8

Обратимая многошаговая диффузионная модель для преобразования изображений на основе радиолокационных и оптических данных

© 2025 г. А. С. Минаев^{1,2}, В. В. Федоров^{1,2}

¹ Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина, Снежинск, 456770, Россия

² Снежинский физико-технический институт – филиал ФГАОУ ВО «Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ», Снежинск, 456776, Россия

В условиях активного развития дистанционного зондирования Земли, роста доступности спутниковых данных различных типов и необходимости оперативного анализа геопространственной информации особую актуальность приобретает эффективное преобразование и объединение данных, полученных в различных диапазонах электромагнитного спектра, в частности спутниковых радиолокационных (SAR) и оптических (RGB) изображений. В данной работе предложена обратимая диффузионная модель на основе моста Шредингера для двунаправленного преобразования SAR- и RGB-снимков без использования парной выборки. Многошаговый стохастический процесс постепенно зашумляет данные, а нейросеть архитектуры U-Net выполняет восстановление на каждом шаге. Двунаправленная схема обеспечивает сохранение структуры сцены: прямой генератор переводит оптику в радар, а обратный – радар в оптику, обучаясь итеративно с учетом энтропийно-регуляризованного стохастического управления. Тестирование на наборах данных SEN1-2 и SN6-SAROPT показало, что по метрикам PSNR, SSIM и FID метод превосходит классические GAN-подходы (CycleGAN) и однонаправленные диффузионные модели. В полном цикле (RGB → SAR → RGB) погрешность < 5–10 % (SSIM) относительно исходного снимка, при этом достоверно воспроизводятся спекл-шум и яркие отражения, а также восстанавливается детализированная оптическая информация. Обратимая диффузия без парной выборки позволяет избежать систематических искажений и облегчает генерацию недостающих данных в ДЗЗ, мультисенсорный анализ и устранение облачности в оптическом домене.

Ключевые слова: радиолокационные изображения (SAR), оптические изображения (RGB), диффузионные модели, генеративное моделирование, мост Шредингера, двунаправленная трансформация, глубокое обучение.

Введение

Объединение спутниковых SAR- и RGB-данных является актуальной задачей в дистанционном зондировании Земли [1, 2]. SAR слабо зависят от погодных условий и дают структурную информацию благодаря спекл-шуму и ярким отражениям, в то время как оптические снимки передают визуальные и цветовые признаки [3]. Вместе они способны обеспечить более полное описание земной поверхности, однако совместная обработка затруднена из-за различных физических принципов формирования данных и несопоставленных выборок [1].

В последние годы активно развиваются генеративные подходы к переводу SAR в оптику и обратно [4–6]. Наибольшее распространение получили GAN-сети, такие как CycleGAN для непарного перевода

✉ А.С. Минаев: asminaev@vniitf.ru
В.В. Федоров: vvfyodorov@vniitf.ru

Поступила в редакцию: 28.04.2025
После доработки: 28.05.2025
Принята к публикации: 10.06.2025

изображений [4] и UNIT [15], но они подвержены нестабильности обучения, коллапсу мод и потере важных деталей [5, 6]. Современные диффузионные модели демонстрируют более высокую стабильность и гибкость [8–10], однако нередко ориентированы лишь на однонаправленный перевод либо требуют больших объемов парных данных.

В данной работе предлагается обратимая диффузионная модель для двунаправленного преобразования SAR ↔ RGB. В отличие от предыдущих решений, она основана на мосте Шредингера [11–14] и не требует парной выборки. Ниже изложены математическая постановка, алгоритм обучения и результаты экспериментов, показывающие, что данный метод превосходит аналоги по качеству генерируемых изображений.

Математическая постановка задачи

Пусть заданы два пространства: X – множество RGB-изображений и Y – пространство SAR-изображений. Обозначим через p_X и p_Y истинные распределения в этих доменах. Задача двунаправленного преобразования состоит в том, чтобы выучить отображения $T: X \rightarrow Y$ и $T^{-1}: Y \rightarrow X$, способные при отсутствии парных образцов удовлетворять условиям $T(\mathbf{x}) \sim p_Y$ при $\mathbf{x} \sim p_X$ и $T^{-1}(\mathbf{y}) \sim p_X$ при $\mathbf{y} \sim p_Y$. В идеале, T^{-1} должно быть обратным отображением для T (т.е. $T^{-1}(T(\mathbf{x})) \approx \mathbf{x}$), однако строго обратимой функция может не быть из-за стохастического характера генерации (одно и то же SAR-изображение может соответствовать множеству допустимых оптических, и наоборот). Тем не менее, требуется, чтобы преобразование было статистически обратимым, т.е. сохраняло основную структуру сцены и не вносило систематических искажений при проходе туда и обратно.

Формализуем задачу через непрерывный диффузионный процесс X_t , $t \in [0, 1]$, со следующими свойствами: при $t = 0$ вектор X_0 имеет распределение p_X , при $t = 1$ – p_Y . Динамика X_t задается стохастическим дифференциальным уравнением Ито

$$dX_t = f(X_t, t)dt + g(t)dW_t, \quad t \in [0, 1], \quad (1)$$

где W_t – винеровский процесс (белый шум), $g(t)$ – заданная функция шума (постоянная или зависящая от t), а $f(X_t, t)$ – искомая функция дрейфа.

Чтобы удовлетворить граничным условиям p_X и p_Y , функция f должна «направлять» процесс от распределения p_X к p_Y . Для нахождения f используем подход моста Шредингера [7], вводя простой референтный процесс (например, «чистое» добавление шума) и минимизируя расхождение Кульбака–Лейблера относительно него при фиксированных начальном и конечном распределениях:

$$P^* \text{Pargmin}(KL(P||P^*), P(X_0 \sim p_X, X_1 \sim p_Y)). \quad (2)$$

Задача (2) приводит к решению в виде набора прямых и обратных диффузионных уравнений, которые можно приближать итеративными алгоритмами типа IPF (Iterative Proportional Fitting) [7–9]. Для нашей задачи функция f параметризуется нейросетью, обучаемой методом максимального правдоподобия по данным обоих доменов. Обучение чередует уточнение прямой (оптика → радар) и обратной (радар → оптика) цепочек диффузии до согласования их на промежуточных шагах.

Описание архитектуры и метода

Разработанный подход реализуется как серия дискретных шагов прямой и обратной диффузии, каждый из которых аппроксимируется сверточной U-Net-сетью. При прямом преобразовании $X \rightarrow Y$ каждый шаг преобразует $x_k \rightarrow x_{k+1}$, а при обратном $Y \rightarrow X$ – $y_k \rightarrow y_{k+1}$. Таким образом, итеративно строится стохастический мост [7, 8], обеспечивающий обратимость.

Чтобы повысить реалистичность синтеза SAR (спекл-шум, яркие отражения) и детализированность оптики, в архитектуру могут добавляться механизмы внимания (Axial Attention) и модули многосторонней сверточной обработки, а также использоваться gradient checkpointing для снижения затрат памяти при обучении.

Обучение ведется по принципу состязательных сетей (GAN). Дискриминаторы, работающие на нескольких масштабах (оригинал и уменьшенное изображение), проверяют реалистичность выходных кадров. Они используют сверточные блоки с вниманием, что повышает распознавание характерных паттернов. Потери вычисляются в схеме LSGAN [9], а генераторы минимизируют сумму adversarial-потерь и регуляризаторов: cycle-consistency, identity, перцептивных (с опорой на VGG [5]).

Модель обучается на несопоставленных выборках SAR- и оптических изображений. Для каждого шага прямой/обратной диффузии оптимизируются отдельные параметры, а также учитываются циклические реконструкции. В результате, полный каскад при прямом проходе генерирует радарное изображение из оптического, а при обратном восстанавливает исходную оптику, что дает статистическую обратимость.

На стадии тестирования достаточно последовательно пропустить изображение через n генераторов прямой либо обратной диффузии. Благодаря двунаправленной постановке [7, 8] результат при применении обратной цепочки согласован со входными данными, что подтверждает возможность обратного преобразования и сохранение структурных признаков.

Результаты

Выполнено обучение и тестирование модели на двух наборах данных: SEN1-2 [14], содержащем пары участков Sentinel-1 (SAR) и Sentinel-2 (RGB), а также на датасете SN6-SAROPT (SAR- и оптические изображения высокого разрешения). При этом использовались два графических процессора Tesla T4, размер входного изображения устанавливался равным 512, общее число шагов диффузии 4, а в качестве планировщика изменения скорости обучения применялась косинусная схема. Оптимизатор – Adam с начальным $lr = 10^{-4}$ и параметрами $\beta = (0.5, 0.999)$.

Для оценки точности перевода между доменами SAR и RGB использовались следующие метрики:

PSNR (дБ) – пиковое отношение сигнала к шуму (большие значения означают лучшее восстановление);

SSIM (0 ... 1) – показатель структурного сходства;

FID – Frechet Inception Distance, характеризующий статистическое расхождение распределений (меньше – лучше).

В табл. 1 приведено сравнение предложенной модели (обозначена как SB-Diffusion) с другими известными подходами. Для теста мы взяли независимый набор пар изображений из SEN1-2, а также аналогичную выборку из SN6-SAROPT. Отметим, что Pix2Pix использует парное обучение, поэтому в несопоставленном сценарии (unpaired) приведен лишь в качестве ориентира.

Как видно, наш метод показывает лучшие результаты по всем ключевым метрикам в обоих направлениях (SAR \rightarrow RGB и RGB \rightarrow SAR), а также сохраняет обратимость: при полном цикле (например, RGB \rightarrow SAR \rightarrow RGB) более 90 % пикселей восстанавливаются с точностью по яркости ± 5 единиц. Пример перевода представлен на рис. 1: слева исходный оптический снимок, рядом синтезированный радарный, затем вновь восстановленный оптический и справочно-реальный SAR. Видно, что характерные особенности (спекл-шум, яркие отражения, цвета) генерируются достоверно.

Таблица 1. Сравнение качества перевода изображений различными методами (SEN1-2, тестовый набор)

Модель	SAR \rightarrow RGB			RGB \rightarrow SAR		
	PSNR	SSIM	FID	PSNR	SSIM	FID
CycleGAN [4]	11.4	0.42	120.3	12.0	0.38	135.6
UNIT [15]	10.7	0.40	130.5	11.3	0.36	140.1
Pix2Pix	12.9	0.47	95.8	13.5	0.45	110.2
GAN Casc. [1]	12.1	0.44	84.9	13.0	0.45	90.5
BBDM [8]	13.2	0.55	82.1	14.0	0.50	88.7
SB-Diffusion (ours)	14.0	0.57	72.4	15.1	0.53	79.3

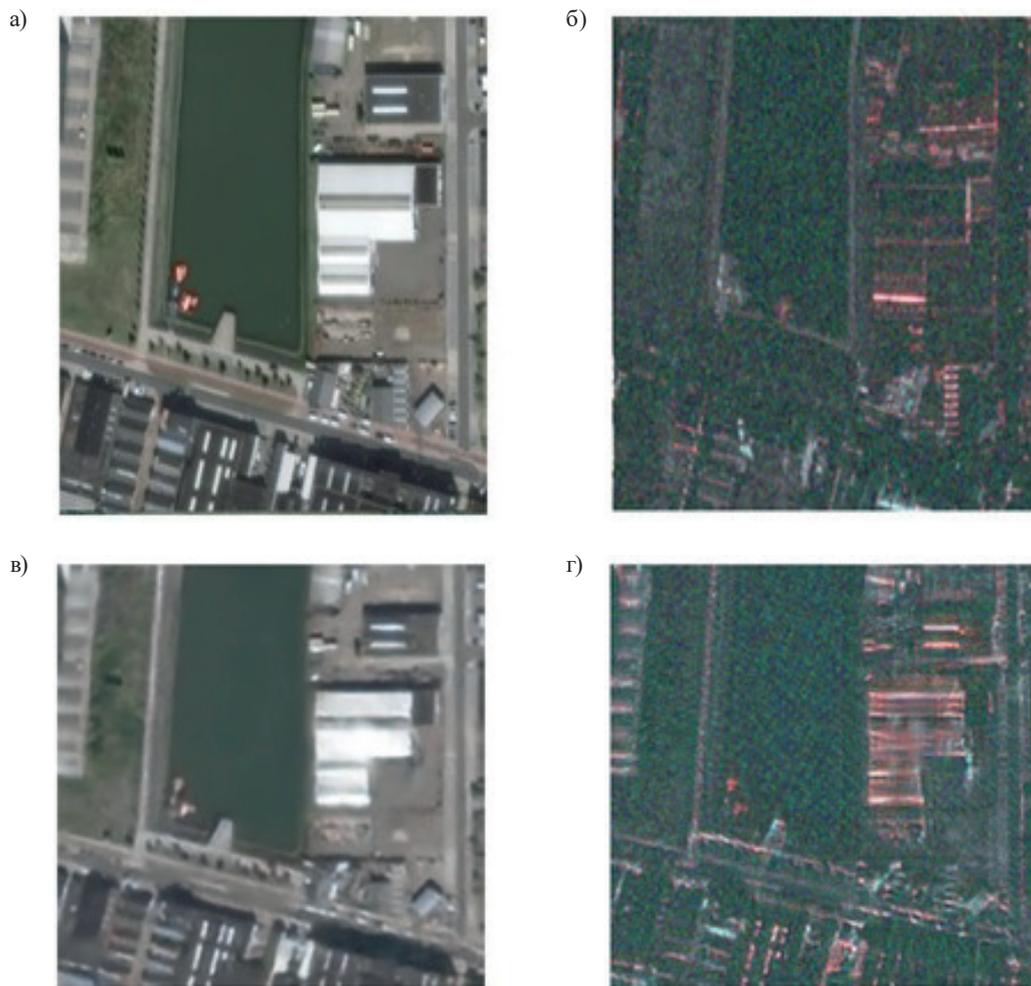


Рис. 1. Пример преобразования: а) исходный RGB; б) реальный SAR; в) восстановленный RGB; г) синтезированный SAR

По вычислительным затратам четырехшаговая диффузия на изображении 512×512 занимает $\sim 3-5$ с. в среднем на связке из двух $T4$. Ускорение возможно за счет методов прореживания шагов, дающих ~ 0.5 сек/кадр при незначительном снижении SSIM. Таким образом, модель пригодна для оффлайн-задач и может масштабироваться на более обширные сцены.

Обсуждение

Результаты подтверждают, что обратимая диффузионная модель надежно решает двунаправленную задачу $SAR \leftrightarrow RGB$ даже при отсутствии парных данных. В отличие от классических GAN, здесь подчеркивается согласованность распределений, а не минимизация пиксельной ошибки, что позволяет корректно воспроизводить спекл-шум и сохранять детали. Использование моста Шредингера дает статистическую обратимость: при полном цикле переводов исходная сцена восстанавливается без существенных искажений.

Ограничением остается потенциальное усреднение деталей в очень сложных сценах (плотная городская застройка). Перспективное направление – добавление детерминированных подсказок (например, контуров объектов), а также гибридизация с уже существующими подходами типа CycleGAN для улучшения мелких деталей.

Выводы

Представлен новый метод двунаправленного преобразования спутниковых изображений (SAR и оптических), основанный на мосте Шредингера и идее обратимой диффузии. Модель не требует парных данных и обучается так, чтобы при проходе в прямом и обратном направлениях сохранять структурные особенности сцены. Эксперименты на реальных наборах данных (SEN1-2, SN6-SAROPT) продемонстрировали превосходство по PSNR, SSIM и FID над классическими GAN и односторонними диффузионными методами. Метод особенно полезен для мультисенсорного анализа, пополнения недостающих снимков при дефиците радарных (или оптических) данных, а также для восстановления оптики при облачной обстановке.

Благодарности

Авторы выражают глубокую благодарность Всероссийскому научно-исследовательскому институту технической физики имени академика Е.И. Забабахина за финансовую и организационную поддержку исследования. Особая признательность Национальному исследовательскому ядерному университету «МИФИ» за предоставление вычислительных ресурсов и доступ к специализированному программному обеспечению. Авторы также благодарят коллег из научно-исследовательского отдела за ценные замечания и обсуждения, которые способствовали улучшению методологии и интерпретации результатов. Отдельное спасибо выражается международным научным сообществам, предоставившим открытые наборы данных SEN1-2 и SN6-SAROPT, что сделало возможным проведение сравнительных экспериментов.

Финансирование

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского федерального ядерного центра – Всероссийского научно-исследовательского института технической физики имени академика Е.И. Забабахина (РФЯЦ-ВНИИТФ).

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Вклад авторов

Авторы внесли эквивалентный вклад в подготовку публикации.

Список литературы

1. Прокофьев К.В., Иванов С.В. Генерация радиолокационных снимков местности из оптических // Информатика, телекоммуникации и управление. 2022. Т. 15. № 4. С. 7–21.
2. Zhu J., Park T., Isola P. et al. Unpaired image-to-image translation using cycle-consistent adversarial networks // Proceedings of IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV), 2017. P. 2242–2251.
3. Fu S., Xu F., Jin Y.Q. Reciprocal translation between SAR and optical remote sensing images with cascaded-residual adversarial networks // Science China Information Sciences, 2021. V. 64, 112401. DOI: 10.1007/s11432-020-3077-5
4. Ho J., Jain A., Abbeel P. Denoising diffusion probabilistic models // Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS), 2020. V. 33. P. 6840–6851.
5. Song Y., Sohl-Dickstein J., Kingma D. et al. Score-Based generative modeling through stochastic differential equations // Proceedings of International Conference on Learning Representations (ICLR), 2021. 22 p. DOI: 10.48550/arXiv.2011.13456
6. De Bortoli V., Thornton J., Heng J., Doucet A. Diffusion Schrodinger bridge with applications to score-based generative modeling // Advances in Neural Information Processing Systems, 2021. V. 34. P. 17695–17709.
7. Su X., Song J., Meng C., Ermon S. Dual diffusion implicit bridges for image-to-image translation // Eleventh International Conference on Learning Representations (ICLR), 2023. 18 p. DOI: 10.48550/ARXIV.2203.08382.
8. Li B., Xue K., Liu B. et al. BBDM: Image-to-image translation with Brownian bridge diffusion models // Proc. IEEE/CVF Conf. Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), 2023. P. 1952–1961.

9. Liu G.H., Vahdat A., Huang D.A. et al. I²SB: Image-to-image Schrodinger bridge // International Conference on Machine Learning (ICML), 2023. 18 p. DOI: 10.48550/ARXIV.2302.05872.
10. Kim B., Kwon G., Kim K. et al. Unpaired image-to-image translation via neural Schrodinger bridge // Proceedings of International Conference on Learning Representations (ICLR), 2024. DOI: 10.48550/arXiv.2305.15086.
11. Shi H., Wang Y., Xu M. et al. A brain-inspired approach for SAR-to-optical image translation based on diffusion models // Frontiers in Neuroscience, 2024. V. 18, 1352841. 14 p.
12. Seo M., Oh Y., Kim D. et al. Improved flood insights: Diffusion-based SAR to EO image translation // arXiv preprint arXiv:2307.07123. 2023. 10 p.
13. Wang X., Liao H., Yang Z. et al. Optical-ISAR image translation via denoising diffusion implicit model // Proc. IEEE Int. Conf. Image Processing and Computer Vision Applications (ICIPCA), 2023. P. 1437–1441.
14. Schmitt M., Hughes L.H., Zhu X.X. The SEN1-2 dataset for deep learning in SAR-optical data fusion // ISPRS Annals of Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Sciences, 2018. V. IV-1. P. 141–146.
15. Liu M.-Y., Breuel T., Kautz J. Unsupervised image-to-image translation networks // Proceedings of 31st Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS), 2017, P. 700–708.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2025, vol. 14, no. 3, pp. 249–255

Reversible multi-step diffusion model for image translation between radar and optical data

A. S. Minaev^{1,2,✉}, V. V. Fedorov^{1,2,✉}

¹ All-Russian Scientific Research Institute of Technical Physics named after Academician E.I. Zababakhin, Snezhinsk, 456776, Russia

² Snezhinsk Physics and Technology Institute of the National Research Nuclear University MEPhI, Snezhinsk, 456776, Russia

✉ asminaev@vniitf.ru

✉ vvfedorov@vniitf.ru

Received April 28, 2025; revised May 28, 2025; accepted June 10, 2025

In the context of expanding Earth remote sensing capabilities, increasing availability of diverse satellite data, and the need for efficient geospatial analysis, effective transformation and integration of synthetic aperture radar (SAR) and optical (RGB) imagery has become highly relevant. We propose a reversible diffusion model based on the Schrodinger bridge for bidirectional transformation of unpaired SAR and RGB images. A multi-step stochastic process progressively perturbs the data with noise, while a U-Net-based neural network denoises each step. A bidirectional scheme ensures reversibility: the forward generator converts optical images into radar, and the backward generator does the opposite. Both components are trained iteratively under an entropy-regularized stochastic control framework, aligning intermediate distributions and preserving key scene structures. The model was tested on the SEN1-2 and SN6-SAROPT datasets. According to PSNR, SSIM, and FID metrics, it surpasses traditional GAN-based approaches (e.g., CycleGAN) and one-way diffusion models. Moreover, for the complete RGB → SAR → RGB cycle, the discrepancy from the original image remains under 5–10% (SSIM). The approach can be applied to generate missing imagery, support multisensor data analysis, and mitigate cloud coverage in optical domains.

Keywords: synthetic aperture radar (SAR), optical images (RGB), diffusion models, generative modeling, Schrödinger bridge, bidirectional transformation, deep learning.

References

1. Prokofiev K.V., Ivanov S.V. Generatsiya radiolokatsionnykh snimkov mestnosti iz opticheskikh [Generation of radar imagery from optical]. *Informatika, telekommunikatsii i upravlenie*, 2022. Vol. 15. No. 4. Pp. 7–21 (in Russian).
2. Zhu J., Park T., Isola P., Efros A.A. Unpaired image-to-image translation using cycle-consistent adversarial networks. *Proceedings of IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV)*, 2017. Pp. 2242–2251.
3. Fu S., Xu F., Jin Y.Q. Reciprocal translation between SAR and optical remote sensing images with cascaded-residual adversarial networks. *Science China Information Sciences*, 2021. Vol. 64. 112401. DOI: 10.1007/s11432-020-3077-5.
4. Ho J., Jain A., Abbeel P. Denoising diffusion probabilistic models. *Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)*, 2020. Vol. 33. Pp. 6840–6851.
5. Song Y., Sohl-Dickstein J., Kingma D.P., Kumar M., Ermon S., Poole B. Score-based generative modeling through stochastic differential equations. *Proceedings of International Conference on Learning Representations (ICLR)*, 2021. 22 p. DOI: 10.48550/arXiv.2011.13456.
6. De Bortoli V., Thornton J., Heng J., Doucet A. Diffusion Schrodinger bridge with applications to score-based generative modeling. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2021. V. 34. P. 17695–17709.
7. Su X., Song J., Meng C., Wu Y., Zhu J. Dual diffusion implicit bridges for image-to-image translation. *Proceedings of Eleventh International Conference on Learning Representations (ICLR)*, 2023. 18 p. DOI: 10.48550/ARXIV.2203.08382.
8. Li B., Xue K., Liu B., Zhao J., Tao D. BBDM: Image-to-image translation with Brownian bridge diffusion models. *Proc. IEEE/CVF Conf. Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, 2023. P. 1952–1961.
9. Liu G.H., Vahdat A., Huang D.A., et al. I²SB: Image-to-image Schrodinger bridge. *International Conference on Machine Learning (ICML)*, 2023. 18 p. DOI: 10.48550/ARXIV.2302.05872.
10. Kim B., Kwon G., Kim K., et al. Unpaired image-to-image translation via neural Schrodinger bridge. *Proceedings of International Conference on Learning Representations (ICLR)*, 2024. DOI: 10.48550/arXiv.2305.15086.
11. Shi H., Wang Y., Xu M., et al. A brain-inspired approach for SAR-to-optical image translation based on diffusion models. *Frontiers in Neuroscience*, 2024. Vol. 18, 1352841. 14 p.
12. Seo M., Oh Y., Kim D., et al. Improved flood insights: Diffusion-based SAR to EO image translation. arXiv:2307.07123, 2023.
13. Wang X., Liao H., Yang Z., et al. Optical-ISAR image translation via denoising diffusion implicit model. *Proc. IEEE Int. Conf. Image Processing and Computer Vision Applications (ICIPCA)*, 2023. Pp. 1437–1441.
14. Schmitt M., Hughes L.H., Zhu X.X. The SEN1-2 dataset for deep learning in SAR-optical data fusion. *ISPRS Annals of Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Sciences*, 2018. Vol. IV-1. Pp. 141–146.
15. Liu M.-Y., Breuel T., Kautz J. Unsupervised image-to-image translation networks. *Proceedings of 31st Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS)*, 2017. Pp. 700–708.

УДК 537.86:538.9

Терагерцовые спектры пропускания конденсатов нитросоединений

© 2025 г. Е. Р. Живаго, А. А. Плеханов, Г. Е. Котковский, И. Л. Мартынов, С. В. Фадеев, А. А. Чистяков

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115409, Россия

Работа посвящена экспериментальному и теоретическому исследованию терагерцовых (ТГц) спектров пропускания пленки гексогена (RDX, циклотриметилентринитрамин) в частотной области интенсивной характеристической полосы поглощения RDX ~ 0.8 ТГц при различных углах падения ($0-60^\circ$) и поляризации зондирующего ТГц-излучения. Регистрация экспериментальных ТГц-спектров пропускания образца RDX проводилась с помощью установки ТГц радиовидения со спектральным разрешением. Для математического моделирования спектров использовался метод характеристических матриц среды (матриц переноса). Показано, что как в экспериментальных, так и в теоретических ТГц-спектрах пропускания пленки RDX для всех исследуемых углов падения и поляризации зондирующего ТГц-излучения отчетливо наблюдается проявление полосы поглощения гексогена в виде локального минимума в области частоты ~ 0.8 ТГц. Результаты работы могут быть использованы при разработке терагерцовых систем, предназначенных для спектральной идентификации веществ в конденсированном состоянии.

Ключевые слова: терагерцовый диапазон, спектроскопия, нитросоединения, RDX, идентификация веществ.

1. Введение

Терагерцовый (ТГц) диапазон в настоящее время представляет большой интерес с точки зрения развития методов спектроскопии и визуализации (радиовидения), поскольку в нем находятся характеристические полосы поглощения многих молекулярных сред в конденсированном состоянии, и в том числе нитросоединений [1]. К таким веществам относятся, например, циклотриметилентринитрамин (гексоген, RDX), циклотетраметилентетранитрамин (октоген, НМХ), тетранитропентаэритрит (пентрит, PETN) и др. Особенности этих соединений в терагерцовом диапазоне, вызванные в основном модами межмолекулярных колебаний, отчетливо наблюдаются в экспериментальных ТГц-спектрах пропускания (поглощения) и отражения. Нередко при решении задач безопасности образцы веществ могут быть скрыты за различными преградами (например, полимерными пленками, одеждой, бумагой и т.д.), многие из которых практически прозрачны для ТГц-излучения [2–4], что открывает широкие возможности для разработки ТГц-методов обнаружения и идентификации нитросоединений вне лабораторных условий.

Обычно в ТГц-исследованиях различные соединения в твердом состоянии изучаются в форме таблеток, предварительно спрессованных с прозрачным в ТГц-диапазоне связывающим материалом. При этом, как правило, терагерцовое излучение падает нормально на поверхность образца. С точки зрения развития методик обнаружения и идентификации конденсатов органических веществ вне лабораторных условий вызывает интерес изучение их ТГц-спектров пропускания для различных углов падения и поляризации зондирующего ТГц-пучка, а также для образцов в виде порошка или пленки, соответствующих реальной поисковой задаче.

✉ Е.Р. Живаго: zer002@campus.mephi.ru

Поступила в редакцию: 19.02.2025

После доработки: 22.05.2025

Принята к публикации: 03.06.2025

EDN TSQODE

В настоящей работе исследовались ТГц-спектры пропускания пленки RDX при различных углах падения терагерцового излучения и его поляризации. Для этого ТГц-спектры образца RDX рассчитывались с помощью метода характеристических матриц среды [5] (матриц переноса), а затем измерялись с помощью установки терагерцового радиовидения со спектральным разрешением [6].

2. Эксперимент и методы математического моделирования

2.1. Установка терагерцового радиовидения со спектральным разрешением

Для изучения спектров пропускания нитросоединений в ТГц-диапазоне на примере образца гексогена в виде пленки использовалась установка терагерцового радиовидения со спектральным разрешением, оптическая схема которой представлена на рис. 1. Подробное описание установки приводится в работе [6].

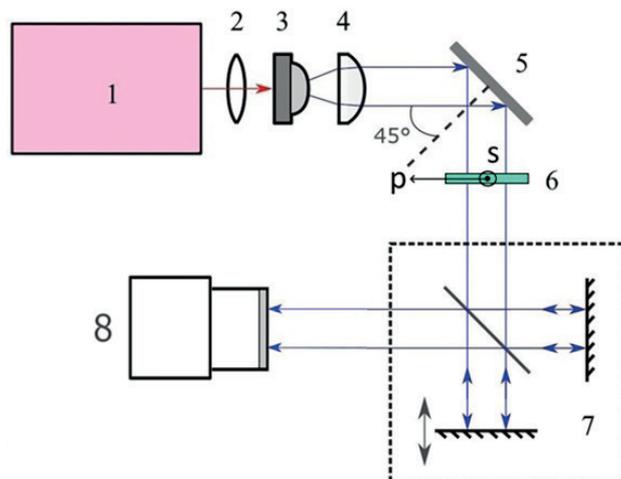


Рис. 1. Оптическая схема для регистрации ТГц-спектров пропускания образца RDX: 1 – фемтосекундный лазер; 2 – фокусирующая линза для лазерного излучения; 3 – фотопроводящая антенна; 4 – коллимирующая ТГц-линза; 5 – плоское металлическое зеркало; 6 – исследуемый образец; 7 – ТГц фурье-спектрометр на основе интерферометра Майкельсона; 8 – микроболометрическая ТГц-видеокамера с ИК-фильтром

Фотопроводящая антенна iPCA-21-05-1000-800-h использовалась в качестве источника широкополосного ТГц-излучения с практически линейной поляризацией [7]. При этом, исходя из направления фототока между электродами, возбуждаемого фемтосекундными лазерными импульсами, вектор напряженности электрического поля ТГц-излучения антенны был направлен вдоль оси s (рис. 1, позиция б). Ось s проходила через ТГц-пучок и поверхность исследуемого образца RDX так, что при его вращении вокруг этой оси реализовывался случай s -поляризации. Ось p , перпендикулярная оси s (рис. 1, позиция б), проходила через ТГц-пучок и поверхность исследуемого образца RDX так, что при его вращении вокруг этой оси реализовывался случай p -поляризации.

В ходе проведения эксперимента предварительно измерялся ТГц-спектр излучения фотопроводящей антенны при отсутствии образца в позиции б (см. рис. 1). Для изучения влияния угла падения в случае s - и p -поляризации ТГц-излучения на спектры пропускания образец RDX поворачивался на выбранный угол ($0-60^\circ$) вокруг осей s и p .

Все эксперименты проводились в атмосфере воздуха при температуре 22°C .

Обработка экспериментальных результатов заключалась в нормировке полученных спектров пропускания исследуемого образца RDX на спектр излучения фотопроводящей антенны (с учетом вычитания ТГц-спектра фонового сигнала [6]). При вычислении всех ТГц-спектров применялась треугольная аподизация [8].

2.2. Исследуемый образец пленки гексогена

Все нитросоединения, использованные в настоящей работе, были изготовлены в РХТУ им. Д.И. Менделеева и предназначались для сертификации аналитического оборудования согласно регламентам, действующим в Российской Федерации.

Для исследования был использован образец пленки RDX (толщиной ~ 60 мкм), высаженной из раствора в ацетоне. Исходя из заданной толщины пленки гексогена в этом образце, предварительно была вычислена требуемая концентрация RDX в растворе и размер круга, куда он наносился с помощью автоматической пипетки. При постоянном потоке воздуха происходило испарение растворителя с подложки. При изготовлении пленки соблюдались условия чистоты.

Подложка представляла собой натянутую пленку полиэтилена низкой плотности (LDPE), средняя толщина которой составляла 10 мкм. Этот материал не проявляет выраженных спектральных особенностей в ТГц-диапазоне и практически прозрачен в нем.

Поверхность изготовленной пленки RDX показана на рис. 2 (результат получен с помощью оптической микроскопии).

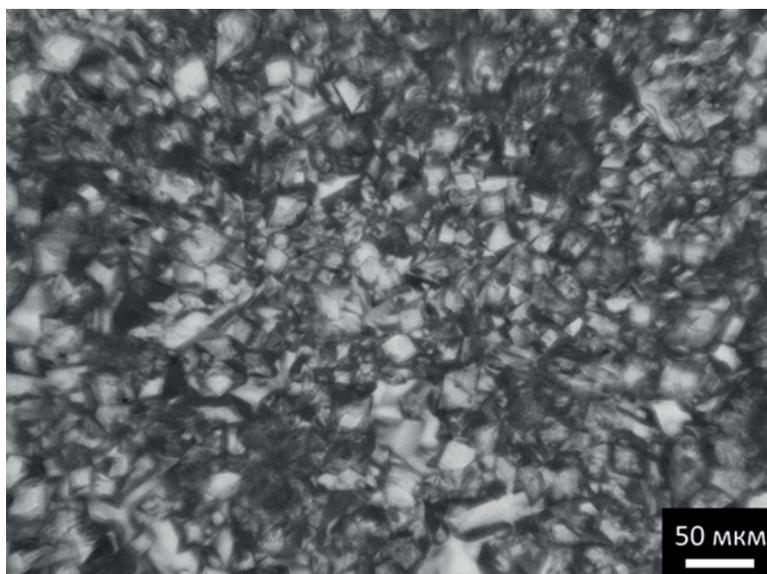


Рис. 2. Фотография поверхности пленки RDX (оптическая микроскопия)

Видно (см. рис. 2), что характерный размер неоднородностей пленки RDX составляет менее 50 мкм. При этом длина волны для исследуемого в работе диапазона 0.5–1 ТГц составляет не менее 300 мкм и многократно превышает характерный размер неоднородностей пленки RDX. Таким образом, рассеяние ТГц-излучения на пленке RDX в данном случае оказывается незначительным [6].

2.3. Математическая модель для расчета ТГц-спектров пропускания пленки гексогена

Для математического моделирования ТГц-спектров пропускания исследуемой пленки гексогена применялся метод характеристических матриц среды (матриц переноса) [5]. Общая схема образца RDX для используемой математической модели представлена на рис. 3.

Указанный метод основан на решении уравнений Максвелла для плоской монохроматической волны, падающей на слоистую среду. В результате определяются элементы характеристической матрицы, связывающие компоненты электрического (или магнитного) векторов до и после взаимодействия излучения с этой слоистой средой. Случаи *s*- и *p*-поляризованных волн подробно рассмотрены в работе Борна и Вольфа [5]. Соотношения рассматриваемого метода применимы как для прозрачных (используются вещественные показатели преломления), так и для поглощающих (проводящих) слоистых сред (используются комплексные показатели преломления) [5]. Необходимо отметить, что в случае

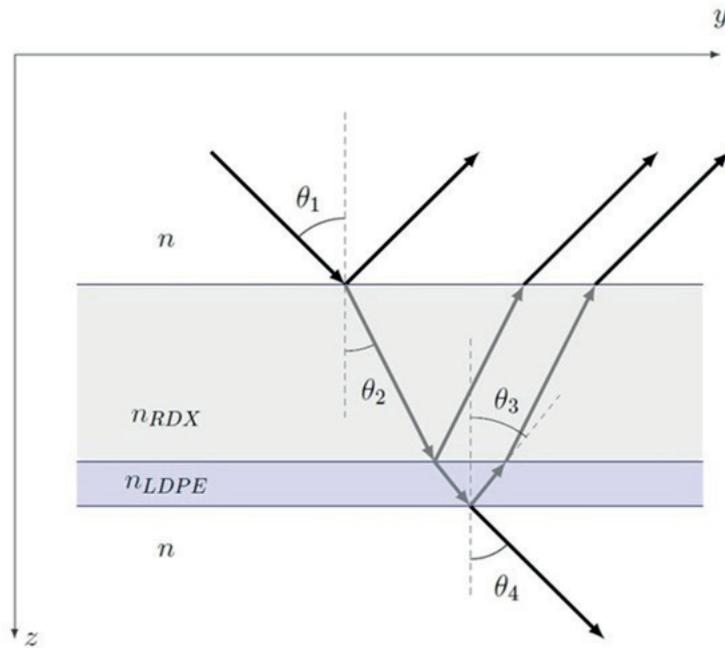


Рис. 3. Общая схема для математической модели пленки RDX на подложке

поглощающего слоя угол преломления оказывается комплексной величиной и в таком виде используется в рамках определения характеристических матриц среды, однако при этом уже теряет смысл, связанный с направлением распространения излучения, в отличие от случая преломления на границе двух прозрачных сред [9].

В итоге были получены характеристические матрицы пленки гексогена:

$$M_{RDX} = \begin{bmatrix} \cos(k_{0RDX} z n_{RDX} \cos \theta_2) & \frac{i}{p_{RDX}} \sin(k_{0RDX} z n_{RDX} \cos \theta_2) \\ ip_{RDX} \sin(k_{0RDX} z n_{RDX} \cos \theta_2) & \cos(k_{0RDX} z n_{RDX} \cos \theta_2) \end{bmatrix}, \quad (1)$$

а также полиэтиленовой подложки:

$$M_{LDPE} = \begin{bmatrix} \cos(k_{0LDPE} z n_{LDPE} \cos \theta_3) & \frac{i}{p_{LDPE}} \sin(k_{0LDPE} z n_{LDPE} \cos \theta_3) \\ ip_{LDPE} \sin(k_{0LDPE} z n_{LDPE} \cos \theta_3) & \cos(k_{0LDPE} z n_{LDPE} \cos \theta_3) \end{bmatrix}, \quad (2)$$

где n_i – комплексный показатель преломления вещества; $p_i = n_i \cos \theta_i$; θ_i – углы падения (преломления) для s -поляризованной волны. Итоговая матрица среды, состоящей из пленки RDX и подложки, вычисляется следующим образом:

$$M = M_{RDX} \cdot M_{LDPE}. \quad (3)$$

В случае p -поляризации матрицы выглядели аналогично с тем лишь отличием, что $p_i = \frac{1}{n_i} \cos \theta_i$.

Показатель преломления полиэтилена низкой плотности практически не изменяется в исследуемом диапазоне частот. Его подложки. Показатель преломления и коэффициент поглощения гексогена в исследуемом частотном диапазоне были измерены в работе [11]. Эти значения использовались для расчетов в теоретической модели в настоящей работе.

Коэффициент пропускания вычислялся по формуле

$$\mathcal{T} = \frac{P_l}{P_1} |t|^2, \quad (4)$$

где $t = \frac{2p_1}{(m_{11} + m_{12}p_l)p_1 + (m_{21} + m_{22}p_l)}$; m_{ij} – элементы характеристической матрицы (3); $p_1 = n_{\text{возд}} \cos \theta_i$;

$p_l = n_{\text{возд}} \cos \theta_4$; для s -поляризации; $p_1 = \frac{1}{n_{\text{возд}}} \cos \theta_i$; $p_l = \frac{1}{n_{\text{возд}}} \cos \theta_4$ для p -поляризации; $n_{\text{возд}} = 1$ – показатель

преломления воздуха. Коэффициент пропускания зависит от толщины пленки исследуемого вещества, показателя преломления гексогена и подложки, угла падения излучения, а также частоты падающего излучения.

3. Результаты и обсуждение

На рис. 4 и 5 представлены теоретические и экспериментальные ТГц-спектры пропускания пленки RDX для s - и p -поляризации, соответственно.

На всех спектрах (рис. 4 и 5) присутствует проявление характеристической полосы поглощения RDX около 0.8 ТГц в виде локального минимума.

Как можно заметить из рис. 4, в случае теоретических ТГц-спектров пропускания пленки RDX для обеих поляризаций падающего излучения и для всех углов падения наблюдается выраженный локальный минимум на частоте около 0.8 ТГц. Интенсивное поглощение на этой частоте обусловлено межмолекулярным взаимодействием в кристаллической структуре гексогена. Тем не менее присутствует изменение формы спектра пропускания RDX с изменением угла падения ТГц-излучения для разных поляризаций.

Действительно, видно (см. рис. 4), что при увеличении угла падения в случае s -поляризации коэффициент пропускания образца RDX снижается во всем диапазоне частот (0.5 – 1.0 ТГц), поскольку по мере роста угла падения ТГц-излучение проходит больший оптический путь в пленке RDX, и возрастает отражение от границы воздух/гексоген.

В случае p -поляризации изменение теоретического ТГц-спектра пропускания в зависимости от угла падения ТГц-излучения более сложное. Действительно, в диапазоне ~ 0.5–0.8 ТГц коэффициент

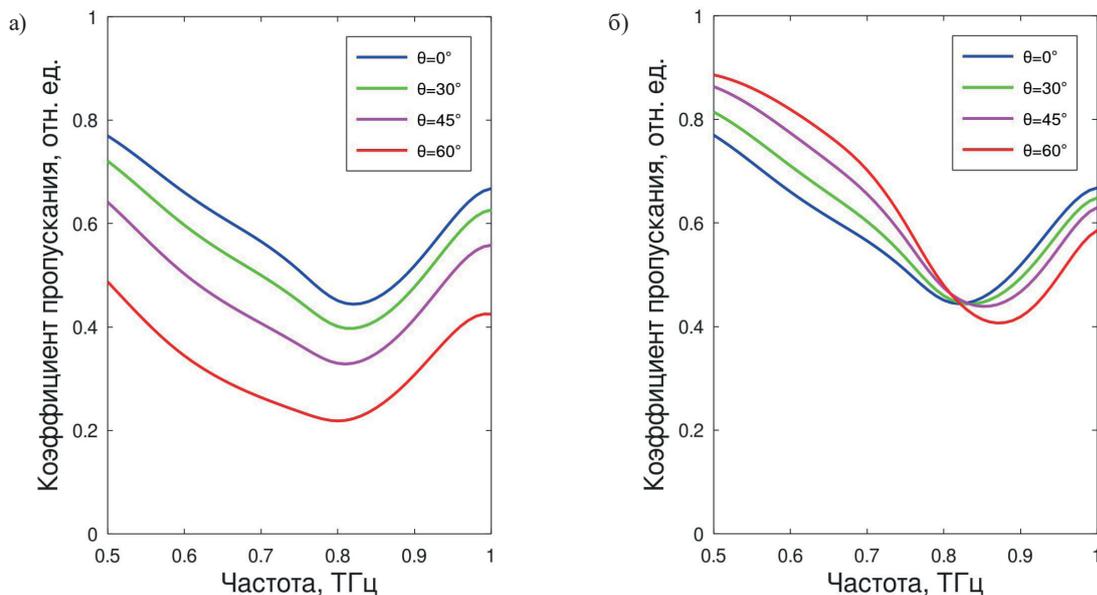


Рис. 4. Теоретические ТГц-спектры пропускания пленки RDX при различных углах падения ТГц-излучения θ : а) – для s -поляризации; б) – для p -поляризации

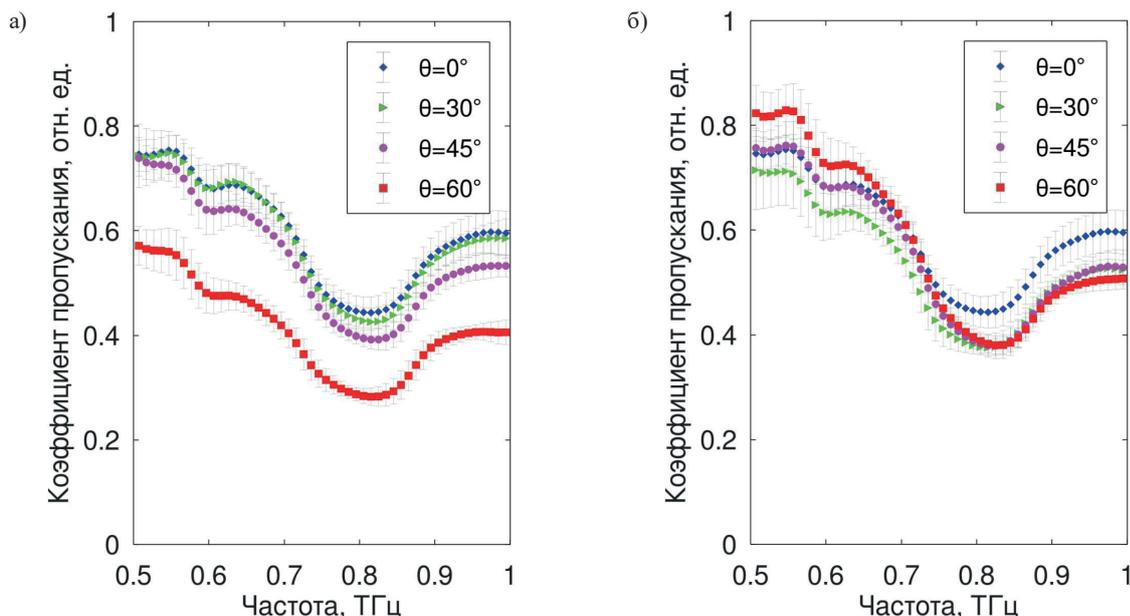


Рис. 5. Экспериментальные ТГц-спектры пропускания пленки RDX при различных углах падения ТГц-излучения θ (доверительная вероятность 0.99): а) – для *s*-поляризации; б) – для *p*-поляризации

пропускания возрастает по мере увеличения угла падения излучения, а в диапазоне $\sim 0.8–1.0$ ТГц, наоборот, снижается. С одной стороны, по мере увеличения угла падения ТГц-излучение проходит все больший оптический путь в веществе. Тогда доля поглощенного в пленке гексогена ТГц-излучения увеличивается, а коэффициент пропускания должен снизиться, как и в случае с *s*-поляризованным излучением. Однако видно (см. рис. 4,б), что для *p*-поляризации снижение коэффициента пропускания по мере увеличения угла падения проявляется гораздо слабее, чем для *s*-поляризации. Для объяснения этого различия необходимо учитывать, что в случае *p*-поляризации, чем ближе угол падения к углу Брюстера (для RDX он составляет около 60°), тем больше излучение проникает в пленку гексогена и тем меньше отражается. Таким образом, для *p*-поляризации снижение коэффициента пропускания образца RDX по мере увеличения угла падения проявляется в меньшей степени, чем для *s*-поляризации.

Сравнение экспериментальных (см. рис. 5) и теоретических (см. рис. 4) результатов показывает, что наличие характеристической полосы поглощения гексогена в области 0.8 ТГц явно проявляется не только на всех теоретических, но и на всех экспериментальных ТГц-спектрах в виде выраженного локального минимума. При этом форма экспериментальных спектров хорошо согласуется с теорией, что проявляется в похожих закономерностях при изменении угла падения зондирующего излучения. Экспериментальный ТГц-спектр пленки RDX (см. рис. 5,а) в случае *s*-поляризации показывает такую же закономерность снижения коэффициента пропускания по мере увеличения угла падения ТГц-излучения, что и теоретические спектры для *s*-поляризованного излучения. В случае *p*-поляризации также присутствует соответствие экспериментального (см. рис. 5,б) и теоретического спектров.

Заключение

В настоящей работе с помощью математического моделирования на основе характеристических матриц среды (матриц переноса) и экспериментального метода терагерцового радиовидения со спектральным разрешением были исследованы ТГц-спектры пропускания пленки RDX при *s*- и *p*-поляризации, а также при различных углах падения ТГц-излучения ($0–60^\circ$). Показано, что в диапазоне 0.5–1.0 ТГц спектры пропускания пленки RDX, полученные методом математического моделирования, хорошо совпали с соответствующими экспериментальными спектрами пропускания, демонстрируя схожие закономерности при изменении угла падения ТГц-излучения. На всех теоретических и экспериментальных спектрах наблюдался локальный минимум в области интенсивной полосы поглощения гексогена 0.8 ТГц.

Таким образом, особенность в виде локального минимума в исследованных ТГц-спектрах пропускания в области интенсивной полосы поглощения RDX ~ 0.8 ТГц оказалась выраженным идентифицирующим признаком для пленки RDX. Результаты работы могут быть использованы при разработке ТГц-систем безопасности.

Финансирование

Работа выполнена при поддержке Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ» (программа «Приоритет 2030»).

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

Е.Р. Живаго – разработка математической модели, выполнение измерений, анализ экспериментальных и теоретических данных, подбор литературных источников, участие в обсуждении результатов, редактирование текста статьи;

А.А. Плеханов – формулировка идеи и целей исследования, постановка задачи, выбор методов исследования, постановка эксперимента, выполнение измерений, анализ экспериментальных и теоретических данных, участие в обсуждении результатов, редактирование текста статьи;

Г.Е. Котковский – анализ экспериментальных и теоретических данных, участие в обсуждении результатов, редактирование текста статьи;

И.Л. Мартынов – анализ экспериментальных и теоретических данных, участие в обсуждении результатов, редактирование текста статьи;

С.В. Фадеев – подбор литературных источников, участие в обсуждении результатов;

А.А. Чистяков – формулировка идеи и целей исследования, постановка задачи, участие в обсуждении результатов.

Список литературы

1. Konek C., Wilkinson J., Esenturk O., Heilweil E., Kemp M. Terahertz spectroscopy of explosives and simulants: RDX, PETN, sugar, and L-tartaric acid // Terahertz Physics, Devices, and Systems III: Advanced Applications in Industry and Defense. SPIE, 2009. V. 7311. P. 121–127. DOI: 10.1117/12.817913.
2. Chen J., Chen, Y., Zhao, H., Bastiaans, G. J., & Zhang, X. C. Absorption coefficients of selected explosives and related compounds in the range of 0.1–2.8 THz // Optics express, 2007. V.15. № 19. P. 12060–12067. DOI: 10.1364/OE.15.012060.
3. Ornik J., Knoth D., Koch M., Keck C.M. Terahertz-spectroscopy for non-destructive determination of crystallinity of L-tartaric acid in smartFilms® and tablets made from paper // International journal of pharmaceutics, 2020. V.581. P.119253. DOI: 10.1016/j.ijpharm.2020.119253.
4. Yoo B.H., Kang S.B., Kwak M.H., Kim S.I., Kim T.Y., Ryu H.C., Jun D.S., Paek M.C., Kang K.Y., Chung D.C. Guided Wave THz Spectroscopy of Explosive Materials // Journal of the Korean Institute of Electromagnetic and Science, 2011. V. 11. № 1. P. 42–50. DOI: 10.5515/JKIEES.2011.11.1.042.
5. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М.: Наука, 1973. Т. 719.
6. Plekhanov A.A., Akmalov A.E., Kotkovskii G.E., Kozlovskii K.I., Kuzishchin Y.A., Martynov I.L., Maksimov E.M., Osipov E.V., Chistyakov A.A. Study of terahertz reflection spectra of optically thin RDX samples by terahertz imaging with spectral resolution // Optical Engineering, 2023. V. 62. № 3. P. 034109–034109. DOI: 10.1117/1.OE.62.3.034109.
7. Berry C.W., Jarrahi M. Broadband terahertz polarizing beam splitter on a polymer substrate // Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves, 2012. V. 33. P. 127–130. DOI: 10.1007/s10762-011-9858-6.
8. Ефимова А.И., Зайцев В.Б., Болдырев Н.Ю., Каишаров П.К. Инфракрасная фурье-спектрометрия: Учебное пособие. М.: Физический факультет МГУ, 2008. 133 с.
9. Zhang Q. The refractive angle of light propagation at absorbing media interface // Optik, 2015. V. 126. № 23. P. 4387–4391. DOI: 10.1016/j.ijleo.2015.08.148.
10. Smith D.R., Loewenstein E.V. Optical constants of far infrared materials. 3: plastics // Applied Optics, 1975. V. 14. № 6. P. 1335–1341. DOI: 10.1364/AO.14.001335.
11. Baker C., Lo T., Tribe W.R., Cole B.E., Hogbin M.R., Kemp M.C. Detection of concealed explosives at a distance using terahertz technology // Proceedings of the IEEE, 2007. V. 95. № 8. P. 1559–1565. DOI: 10.1109/JPROC.2007.900329.

Terahertz transmission spectra of condensates of nitro compounds

E. R. Zhivago , A. A. Plekhanov, G. E. Kotkovskii, I. L. Martynov, S. V. Fadeev, A. A. Chistyakov

National Research Nuclear University «MEPhI», Moscow, 115409, Russia

 zer002@campus.mephi.ru

Received February 19, 2025; revised May 22, 2025; accepted June 03, 2025

The work studied terahertz (THz) transmission spectra of hexogen (RDX, cyclotrimethylenetrinitramine) film experimentally and theoretically in the frequency region of the intense characteristic absorption band of RDX ~ 0.8 THz at different incidence angles (0 – 60°) and polarization of the probing THz radiation. Registration of experimental THz transmission spectra of the RDX sample was carried out using a THz radio vision setup with spectral resolution. For mathematical modeling of the spectra, the method of characteristic matrices of the medium (transfer matrices) was used. It is shown that both in the experimental and in the theoretical THz transmission spectra of the RDX film for all studied incidence angles and polarizations of the probing THz radiation, the manifestation of the hexogen absorption band in the form of a local minimum in the frequency region of ~ 0.8 THz is clearly observed. The results of the work can be used in the development of terahertz systems designed for the spectral identification of substances in a condensed state.

Keywords: terahertz range, spectroscopy, nitro compounds, RDX, identification of substances.

References

1. Konek C., Wilkinson J., Esenturk O., Heilweil E., Kemp M. Terahertz spectroscopy of explosives and simulants: RDX, PETN, sugar, and L-tartaric acid. *Terahertz Physics, Devices, and Systems III: Advanced Applications in Industry and Defense*. SPIE, 2009. Vol. 7311. Pp. 121–127. DOI: 10.1117/12.817913.
2. Chen J., Chen, Y., Zhao, H., Bastiaans, G. J., & Zhang, X. C. Absorption coefficients of selected explosives and related compounds in the range of 0.1–2.8 THz. *Optics express*, 2007. Vol. 15. No. 19. Pp. 12060–12067. DOI: 10.1364/OE.15.012060.
3. Ornik J., Knoth D., Koch M., Keck C.M. Terahertz-spectroscopy for non-destructive determination of crystallinity of L-tartaric acid in smartFilms® and tablets made from paper. *International journal of pharmaceutics*, 2020. Vol. 581. Pp. 119253. DOI: 10.1016/j.ijpharm.2020.119253.
4. Yoo B.H., Kang S.B., Kwak M.H., Kim S.I., Kim T.Y., Ryu H.C., Jun D.S., Paek M.C., Kang K.Y., Chung D.C. Guided Wave THz Spectroscopy of Explosive Materials. *Journal of the Korean Institute of Electromagnetic and Science*, 2011. Vol. 11. No. 1. Pp. 42–50. DOI: 10.5515/JKIEES.2011.11.1.042.
5. Born M., Wolf E. *Osnovy optiki [Fundamentals of Optics]*. Moscow, Nauka Publ., 1973. 719 p. (in Russian).
6. Plekhanov A.A., Akmalov A.E., Kotkovskii G.E., Kozlovskii K.I., Kuzishchin Y.A., Martynov I.L., Maksimov E.M., Osipov E.V., Chistyakov A.A. Study of terahertz reflection spectra of optically thin RDX samples by terahertz imaging with spectral resolution. *Optical Engineering*, 2023. Vol. 62. No. 3. Pp. 034109–034109. DOI: 10.1117/1.OE.62.3.034109.
7. Berry C.W., Jarrahi M. Broadband terahertz polarizing beam splitter on a polymer substrate. *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*, 2012. Vol. 33, Pp. 127–130. DOI: 10.1007/s10762-011-9858-6.
8. Efimova A.I., Zaitsev V.B., Boldyrev N.Yu., Kashkarov P.K. *Infrakrasnaya furye-spektrometriya [Infrared Fourier spectrometry]* Moscow, Phys. Department of Moscow State Univ. Publ., 2008. 133 p. (in Russian).
9. Zhang Q. The refractive angle of light propagation at absorbing media interface. *Optik*, 2015, Vol. 126. No. 23. Pp. 4387–4391. DOI: 10.1016/j.ijleo.2015.08.148.
10. Smith D.R., Loewenstein E.V. Optical constants of far infrared materials. 3: plastics. *Applied Optics*, 1975. Vol. 14. No. 6. Pp. 1335–1341. DOI: 10.1364/AO.14.001335.
11. Baker C., Lo T., Tribe W.R., Cole B.E., Hogbin M.R., Kemp M.C. Detection of concealed explosives at a distance using terahertz technology. *Proceedings of the IEEE*, 2007. Vol. 95. No. 8. Pp. 1559–1565. DOI:10.1109/JPROC.2007.900329.

УДК 539.171.4

Учет геометрических поправок при расчете парной корреляционной функции

© 2025 г. Ф. С. Джепаров^{1,2}, Д. В. Львов^{1,2}, А. Н. Тюлюсов^{1,2}, Й. Шмайстер^{1,2}¹ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, 123182, Россия² Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115409, Россия

Парная корреляционная функция неоднородностей образцов активно изучается методом малоуглового рассеяния. В последнее время появилась возможность ее определения из данных атомно-зондовой томографии (АЗТ). Рассмотрено влияние конечного размера и формы образца на парную корреляционную функцию неоднородностей, определяемую из данных АЗТ. В большом кубическом образце, размеры которого во всех направлениях много больше характерного радиуса корреляции, можно считать число примесей вблизи границы образца заметно меньшим, чем в объеме. В случае отказа от такого предположения возникает геометрический множитель, для которого получено общее выражение. Геометрический смысл множителя – вероятность наличия в образце определенного межточечного расстояния. Для случая, когда образец представляет собой вытянутый прямоугольный параллелепипед, получено аналитическое выражение в элементарных функциях для геометрического множителя. В качестве модельных систем были выбраны: полностью нескоррелированное расположение центров, расположение в виде простой кубической решетки и плотноупакованная система полидисперсных твердых шаров. Мотивация выбора состояла в том, что такие системы обладают различной пространственной упорядоченностью. Показано, что учет геометрического фактора приводит к правильной парной корреляционной функции для выбранных модельных систем неоднородностей.

Ключевые слова: парная корреляционная функция, радиальная функция распределения, атомно-зондовая томография.

Введение

В исследованиях мезомасштабной (от нескольких нанометров до нескольких микрон) структуры конденсированного состояния и технологических изделий широко применяется метод малоуглового рентгеновского и нейтронного рассеяния (МУР) [1, 2]. Информативность данных, получаемых методом МУР, зависит от химического состава, формы и пространственной концентрации исследуемых неоднородностей. Наиболее простой системой для применения МУР будет разреженная система монодисперсных неоднородностей, когда их пространственными корреляциями можно пренебречь. При большей концентрации неоднородностей для корректной обработки малоугловых спектров становится необходимым знание пространственной парной корреляционной функции (радиальной функции распределения) расположения рассеивателей. Существуют два способа определения распределения неоднородностей в пространстве. Первый – моделирование на основе известного или предлагаемого в качестве гипотезы взаимодействия рассеивателей [3]. Второй – независимое получение такой информации с помощью микроскопических методов. Одним из методов микроскопического исследования структуры является метод томографического атомного зонда [4–6]. Однако особенностью этого метода является специфическая геометрия исследуемых образцов. Они представляют собой тонкие вытянутые иголки [4], размер которых в одном осевом направлении заметно больше, чем в двух других. При

✉ Ф.С. Джепаров: dzheparov@itep.ru

Поступила в редакцию: 14.05.2025

После доработки: 25.05.2025

Принята к публикации: 03.06.2025

этом обычно применяемые алгоритмы расчета парной корреляционной функции основываются на предположении о возможности выделить кубический или сферический изучаемый объем, размер которого заметно превосходит характерную длину корреляции, с одной стороны, и содержит достаточное число центров для выделения поведения парной корреляционной функции из статистического шума – с другой. Таким образом, для вытянутого в одном направлении образца требуется построение нового алгоритма расчета парной корреляционной функции.

Задача определения парной корреляционной функции для образца конечного размера имеет давнюю историю, начиная с работы [7], в которой рассмотрены упаковки совокупностей жестких сфер, что важно для изучения термодинамических свойств простых жидкостей. Получение информации о пространственной корреляции имеет важное значение во многих областях науки для изучения как доменных систем [8], реальных физических систем для атомно-зондовой томографии [9], метеорологии [10], лазерной техники [11], коллективных колебаний толпы [12], так и для биологических клеточных систем [13]. Параллельно ведутся работы по разработке правильной методики расчета пространственной парной корреляционной функции с учетом геометрических особенностей систем [14]. В работах [15, 16] была рассмотрена задача определения парной корреляционной функции атомов, входящих в состав частицы нанометрового размера. Было показано, что парная корреляционная функция атомов наночастицы является произведением парной корреляционной функции атомов бесконечного образца и корректирующего множителя, определяемого формой и размером наночастицы, а также рассчитаны корректирующие множители для различных наночастиц.

Последнее время активно проводится изучение внутренней структуры материалов одновременно как микроскопическими, так и спектроскопическими методами. Ярким примером являются исследования сталей с помощью АЗТ и методом малоуглового рассеяния. При этом АЗТ позволяет увидеть тип и состав неоднородностей материала, а малоугловое рассеяние дает возможность получить функцию распределения неоднородностей по размерам. Следующим шагом в развитии совместного применения данных методик является изучение систем с коррелировано расположенными неоднородностями. В методе малоуглового рассеяния наблюдаемая интенсивность рассеяния в случае однократного рассеяния определяется парной корреляционной функцией. Поэтому важная задача – определение данной функции, исходя из данных, полученных на атомно-силовом микроскопе.

Теория

Исходные данные о координатах и размерах неоднородностей материала в методе АЗТ поступают от образцов, которые по форме близки к цилиндрам длиной L , радиусом R и объемом $V = \pi R^2 L$ при $L \gg R$. Далее мы ограничимся рассмотрением неоднородностей, имеющих форму, близкую к сферической.

Пусть имеется двухчастичный коррелятор неоднородностей в таком образце, если в бесконечной среде он равен:

$$C_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\Omega^2} \langle n_{\mathbf{r}_1} n_{\mathbf{r}_2} \rangle = c^2 w(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|). \quad (1)$$

Здесь число заполнения $n_r = 1$, если в узле \mathbf{r} есть центр неоднородности и $n_r = 0$ в обратном случае, $\mathbf{r}_1 \neq \mathbf{r}_2$, $c = f/\Omega$ – концентрация примесей, $f = \langle n_r \rangle$ – вероятность заполнения примесью узла решетки \mathbf{r} , а Ω – объем элементарной ячейки. При переходе к непрерывной среде $f \rightarrow 0$, $\Omega \rightarrow 0$, $f/\Omega = c = \text{const}$. Так как две неоднородности не могут находиться в одной точке, а корреляция в их расположении уменьшается с ростом расстояния между ними, то

$$w(r \rightarrow 0) = 0, \quad w(r \rightarrow \infty) = 1 \quad (2)$$

В большом образце

$$\int_V d^3x d^3y C_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = c^2 V^2 = N^2. \quad (3)$$

Здесь $N = cV$ – число примесей в образце. Результат (3) верен при $\Lambda = V^{1/3} \gg r_c$, где r_c – радиус корреляции. Соответственно,

$$D_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)/N^2$$

есть нормированная плотность вероятности обнаружить примеси в точках \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 в образце.

Нормированная плотность распределения межпримесных расстояний определяется соотношением

$$g(r) = \frac{1}{N^2} \int_V d^3x d^3y \delta(r - |\mathbf{x} - \mathbf{y}|) C_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}). \quad (4)$$

Здесь использовано стандартное определение функции распределения для переменной, которая сама является функцией случайных величин. Отметим, что соотношение (4) основано на важнейшем физическом предположении о том, что приготовление образца не влияет на распределение изучаемых объектов, т.е. двухчастичная функция распределения $C_2(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ в (1) и (4) – одна и та же.

Пусть r_{\max} – наибольшее межточечное расстояние в образце. Тогда из (4) и (3) следует, что

$$\int_0^{r_{\max}} dr g(r) = \frac{1}{N^2} \int_V d^3x d^3y C_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 1. \quad (5)$$

Это равенство, как и формула (3), верно в главном порядке по $N_{\text{corr}}/N \ll 1$, где $N_{\text{corr}} = c \frac{4\pi}{3} r_c^3$ – число примесей в объеме корреляции.

В большом кубическом образце с ребром $\Lambda = V^{1/3} \gg r_c$ из соотношений (1) и (4) следует, что

$$g(r) = \frac{1}{N^2} \int_V d^3x d^3y \delta(r - |\mathbf{x} - \mathbf{y}|) c^2 w(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) = 4\pi r^2 w(r) c / N. \quad (6)$$

При этом $Ng(r)dr$ есть число примесей в шаровом слое толщиной dr на расстоянии r от начала координат, где достоверно расположена примесь.

При выводе (6) было использовано то, что число примесей вблизи поверхности мало в сравнении с их числом в объеме. Этот критерий и определяет возможные стратегии определения $g(r)$ и $w(r)$ из экспериментальных данных. Основная из них состоит в построении гистограммы, соответствующей $g(r)$, т.е. разбиение всех возможных расстояний на несколько групп и прямой подсчет числа примесей в этих группах.

Связь $g(r)$ и $w(r)$ в общем случае определяется геометрическим множителем $F(r)$, обусловленным формой образца. Из (4) видно, что

$$g(r) = \frac{1}{N^2} c^2 w(r) \int_V d^3x d^3y \delta(r - |\mathbf{x} - \mathbf{y}|) = \frac{1}{N^2} c^2 w(r) F(r), \quad (7)$$

$$F(r) = \int_V d^3x d^3y \delta(r - |\mathbf{x} - \mathbf{y}|). \quad (8)$$

Ясно, что $F(r)$ пропорционально плотности вероятности наличия в образце межточечного расстояния r при $r < r_{\max}$. Точнее, $(1/N^2)c^2 F(r)dr$ есть вероятность попадания межточечного расстояния r в шаровой слой толщиной dr .

В методе АЗТ исследуемый образец имеет вытянутую форму, например цилиндр или брус с высотой много больше поперечного размера. Направим ось 3 вдоль оси цилиндра. При этом

$$F(r) = \int_{V_{\perp}} d^2x_{\perp} d^2y_{\perp} \int_0^L dx_3 dy_3 \delta\left(r - \left((\mathbf{x}_{\perp} - \mathbf{y}_{\perp})^2 + (x_3 - y_3)^2\right)^{1/2}\right). \quad (9)$$

По переменным x_3 и y_3 , по аналогии с теорией Андерсона – Вейсса – Кубо [17, 18], используем тождество

$$\int_0^t dt_1 dt_2 \varkappa(|t_1 - t_2|) = 2 \int_0^t dt_1 (t - t_1) \varkappa(t_1). \quad (10)$$

Поэтому

$$F(r) = 2 \int_{V_{\perp}} d^2x_{\perp} d^2y_{\perp} \int_0^L dz (L - z) \delta\left(r - \left((\mathbf{x}_{\perp} - \mathbf{y}_{\perp})^2 + z^2\right)^{1/2}\right). \quad (11)$$

Рассмотрим случай, когда образец имеет форму бруса толщиной D . Тогда по ортогональным переменным снова можно использовать соотношение (10), что дает

$$\begin{aligned} F(r) &= 2 \int_0^D dx_1 dx_2 dy_1 dy_2 \int_0^L dz (L - z) \delta\left(r - \left((x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2 + z^2\right)^{1/2}\right) = \\ &= 8 \int_0^D dx dy \int_0^L dz (D - x)(D - y)(L - z) \delta\left(r - \left(x^2 + y^2 + z^2\right)^{1/2}\right). \end{aligned} \quad (12)$$

Учтем, что

$$\delta\left(r - \left(a^2 + z^2\right)^{1/2}\right) = \frac{r}{\left(r^2 - a^2\right)^{1/2}} \delta\left(\left(r^2 - a^2\right)^{1/2} - z\right) \theta(r > a). \quad (13)$$

Здесь $\theta(x)$ – функция Хэвисайда. Тогда из (12) следует, что

$$F(r) = 8 \int_0^D dx dy (D - x)(D - y) \left(L - \left(r^2 - (x^2 + y^2)\right)^{1/2}\right) \frac{r \theta\left(r^2 > x^2 + y^2\right)}{\left(r^2 - (x^2 + y^2)\right)^{1/2}}. \quad (14)$$

Рассмотрим случай $r < D$. Сделаем в (14) замену переменных $x = \rho \cos \varphi$, $y = \rho \sin \varphi$, имеем

$$F(r < D) = 8 \int_0^{\pi/2} d\varphi \int_0^r \rho d\rho (D - \rho \cos \varphi)(D - \rho \sin \varphi) \left(L - \left(r^2 - \rho^2\right)^{1/2}\right) \frac{r}{\left(r^2 - \rho^2\right)^{1/2}}. \quad (15)$$

Данный интеграл вычисляется аналитически. В итоге получаем

$$F(r < D) = 4\pi D^2 L r^2 - 2\pi D(D + 2L)r^3 + \frac{8}{3}(L + 2D)r^4 - r^5. \quad (16)$$

При малых r геометрический множитель $F(r \rightarrow 0) = 4\pi D^2 L r^2$. Соответственно,

$$N^{-2} c^2 F(r \rightarrow 0) dr = N^{-2} c^2 dr 4\pi D^2 L r^2 = N^{-1} c 4\pi r^2 dr = 4\pi r^2 dr / V,$$

т.е. выражение (16) имеет правильную асимптотику при малых расстояниях.

Моделирование

Для учета влияния геометрического множителя на парную корреляционную функцию были рассмотрены системы с различным пространственным распределением неоднородностей. Был взят модельный образец (рис. 1) с коррелированными центрами общим числом в $N_{cl} = 26000$, распределенными в объеме куба с ребром $D = 125$. В дальнейшем будем полагать расстояния безразмерными, принимая во внимание, что без учета краевых эффектов вид парной корреляционной функции не зависит от масштабного фактора. Данный образец составлялся на основе той же программы, которая была применена ранее для вычисления интенсивности многократного малоуглового рассеяния нейтронов на системах с различной концентрацией неоднородностей [3]. Параметры модельного образца, распределение по размерам и пространственные корреляции, соответствовали гранулам порошка, изученного в эксперименте. Размеры параллелепипеда выбирались исходя из заданного фактора заполнения, равного отношению суммы объемов рассеивателей к объему параллелепипеда.

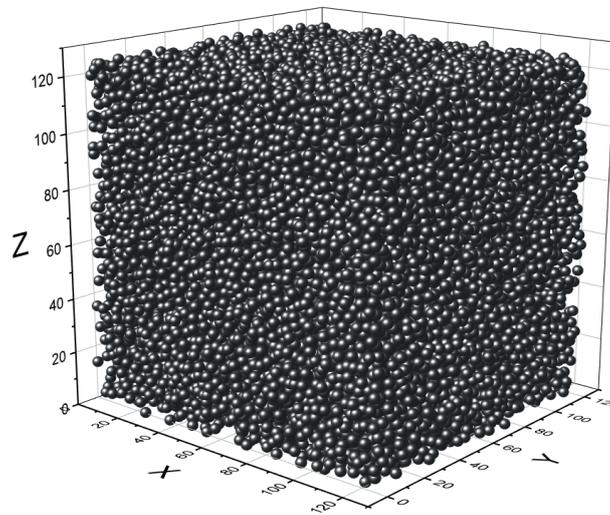


Рис. 1. Кубический образец с коррелированными центрами.
 $L = D = 125$

Для дополнительной проверки выражения (16) геометрического множителя радиальной функции распределения были выбраны бруски квадратного сечения (L – высота, D – ширина бруска), где расположение центров неоднородностей в них принималось в одной из следующих форм: простая кубическая решетка с постоянной решетки $a = 2$ (рис. 2а), случайно распределенные точки общим числом центров $N_{cl} = 1100$ (рис. 2б), а также центры, попавшие в брусок, вырезанный из коррелированного кубического образца, $N_{cl} = 145$ (рис. 2в).

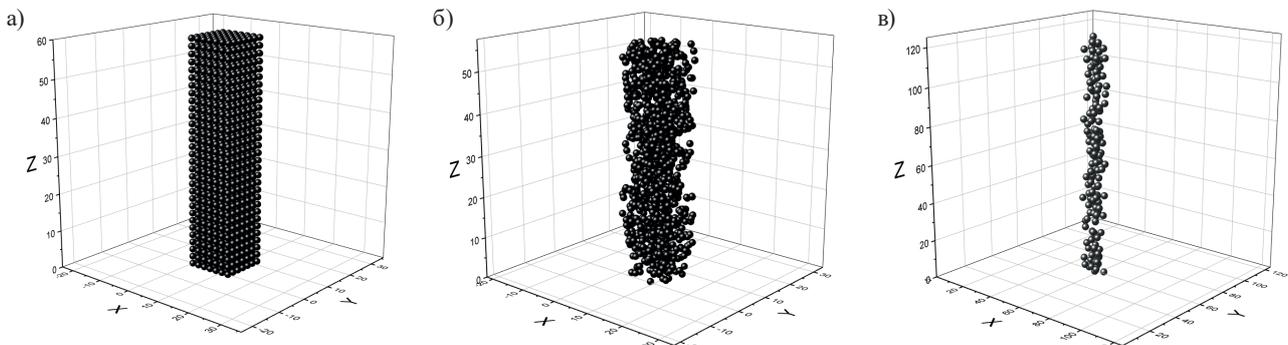


Рис. 2. Распределение центров неоднородностей: а) – простая кубическая решетка; б) – случайно распределенные центры; в) – центры с известной корреляцией

Радиальная функция распределения $w(r)$ (пространственная парная корреляционная функция) определялась в два этапа: сперва рассчитывалась плотность распределения расстояний $g(r)$ по координате r до максимального значения r_{\max} , а затем $g(r)$ домножалась на геометрический множитель, в зависимости от выбранной методики расчета. Погрешности значений $w(r)$ определялись из исходных значений $g(r)$ согласно пуассоновскому распределению.

При стандартном методе расчета радиальной функции распределения (далее – метод 1) выбирались периодические граничные условия, при которых вокруг расчетной поисковой области строятся ее «образы» с актуальным положением частиц [10, 14]. Поэтому частицы «реальной» области взаимодействуют с частицами в «образе», а если частица пересекает границу расчетной области, то она появляется с другой стороны. Схема этого процесса для двухмерной системы показана на рис. 3, где часть поискового кругового слоя (серый) в левом нижнем углу выходит за пределы системы и с помощью граничных условий продолжается от других краев системы для нахождения соответствующей пары в левом верхнем углу рисунка. Ограничения описанного метода 1 таковы, что значения функций $g(r)$ и $w(r)$ будут определены без искажений лишь до расстояний r , равных половине минимального линейного размера системы. Так, для кубической системы $2 \cdot r_{\max} = L = D$, а для бруска квадратного сечения $r_{\max} = L/2$. Искажения при $r > r_{\max}$ связаны с двойным подсчетом пар, т.е. включением более одной пары тех же двух центров при расчете $g(r)$ [10].

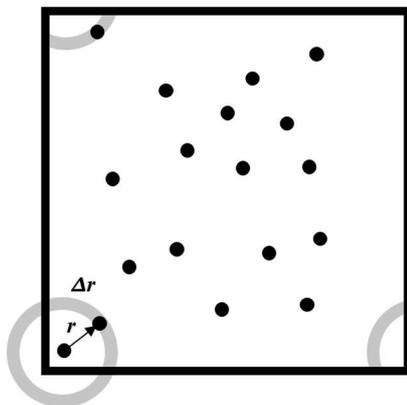


Рис. 3. Схема расчета радиальной функции распределения с учетом периодических граничных условий для двухмерной системы центров

При расчете радиальной функции распределения с учетом геометрической поправки $F(r)$ (далее – метод 2) периодические граничные условия не используются, что позволяет определять пространственную корреляцию частиц в исходном объеме и до максимальных расстояний, ограниченных объемом данной системы.

Существует продолжение методики расчета $g(r)$ для метода 1 (далее – метод 3) [14], при котором вокруг исходного объема системы периодическим продолжением выстраиваются его «образы», тем самым конечный объем системы увеличивается вместе с числом центров (для кубического образца новый объем будет в 27 раз больше исходного) и функция $g(r)$ может быть определена до $r_{\max} = D = L$. Однако такой метод сильно увеличивает вычислительное время, не оперирует исходным числом центров и в нем применяются те же граничные условия, описанные выше, приводящие к ошибке двойного подсчета пар.

Первой системой, для которой проводился расчет радиальной функции распределения, была система со случайно распределенными центрами (рис. 4). На графике видно, что расчет по методу 2 с учетом предлагаемой функции $F(r)$ показывает хорошее совпадение с теоретическим значением $w(r) \rightarrow 1$ для всего диапазона расстояний по r до значения боковой ширины бруска D . В случае расчета по методу 1 функция сперва показывает правильное значение, однако после прохождения отметки $r = D/2$, что соответствует максимальному радиусу вписанной в сечение бруска окружности, зависимость начинает спадать.

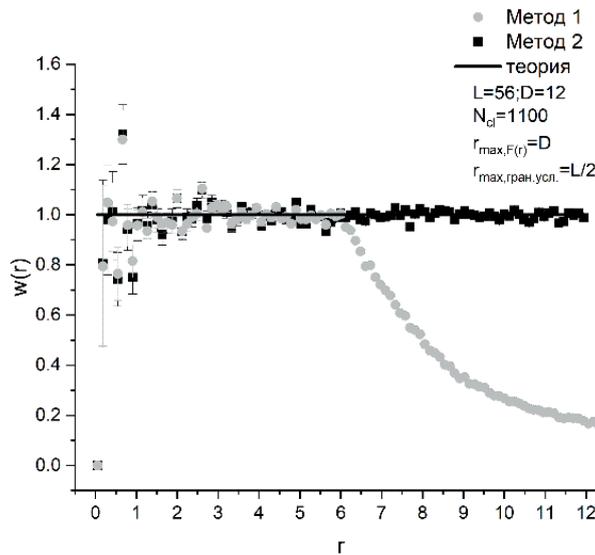


Рис. 4. Расчет радиальной функции распределения центров, случайно распределенных в бруске квадратного сечения высотой $L = 56$ и шириной $D = 12$. Черные точки соответствуют случаю учета геометрической поправки $F(r)$, серые точки – расчет с граничными условиями, прямая линия – теоретический вид для случайного распределения

Также, исходя из определения радиальной функции распределения, возможно решение обратной задачи по нахождению числа центров в отдельном сферическом слое. Так, для рассмотрения строго коррелированной системы в виде простой кубической решетки, замощенной в бруске квадратного сечения, был проведен расчет функции $w(r)$ и построено распределение числа центров, попавших в сферический слой (рис. 5). На графике наблюдается соответствие расчетных значений с известными теоретическими, соответствующими так называемым координационным числам (подробные данные

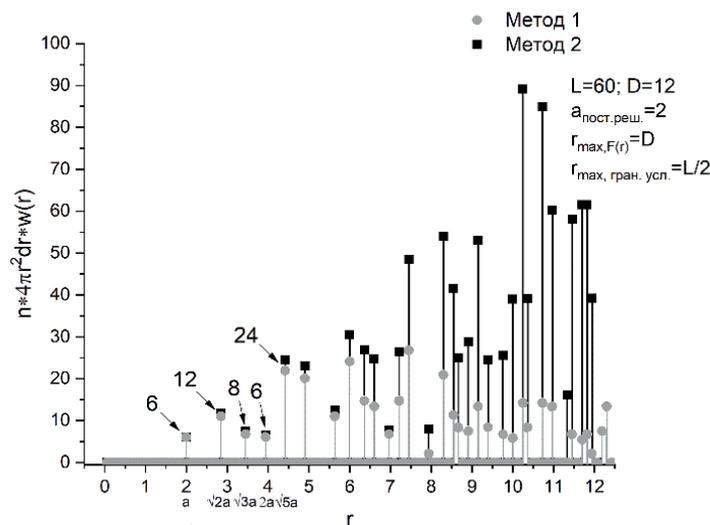


Рис. 5. Расчет числа центров в тонком сферическом слое для простой кубической решетки, замощенной в бруске квадратного сечения высотой $L = 60$ и шириной $D = 12$. Черные точки – расчет с учетом геометрической поправки $F(r)$, серые точки – расчет с граничными условиями. Числами указано теоретическое количество атомов в соответствующих координационных сферах (координационные числа)

по координационным числам для простой кубической решетки указаны в табл. 1). При достижении области расстояний r до $D/2$ расчет функции $w(r)$ методом 1 начинает спадать, в то время как расчет с учетом геометрической поправки $F(r)$ показывает близкое согласие с теоретическими координационными числами.

Таблица 1. Координационные числа K для простой кубической решетки до $n = 9$ порядка

n	r	K
0	0	1
1	a	6
2	$\sqrt{2}a$	12
3	$\sqrt{3}a$	8
4	$2a$	6
5	$\sqrt{5}a$	24
6	$\sqrt{6}a$	24
7	$2\sqrt{2}a$	12
8	$3a$	30
9	$\sqrt{10}a$	24

Ограничение на возможности определения корреляции расстояний между центрами при работе по методу 1 можно пронаблюдать при расчете радиальной функции распределения для исходного кубического образца с коррелированными центрами (рис. 6). Функция $w(r)$ в методе 1 будет определена лишь до расстояния $r = L/2$, соответствующему половине ребра куба, тогда как расчет $w(r)$ по методу 2 будет иметь продолжение вплоть до конечной границы L , т.е. для всего объемного пространства системы. В обоих случаях заметна область запрещенного объема при малых r и радиус корреляции $r_{corr} \sim 9$, основываясь на котором из исходного кубического объема были вырезаны бруски того же размера D для проверки поведения функции $w(r)$ при расстояниях корреляции r_{corr} сравнимых с r_{max} .

Возможности применения функции $F(r)$ не ограничиваются кубическими размерами рассматриваемой системы центров, а позволяют проводить расчеты радиальной функции распределения $w(r)$

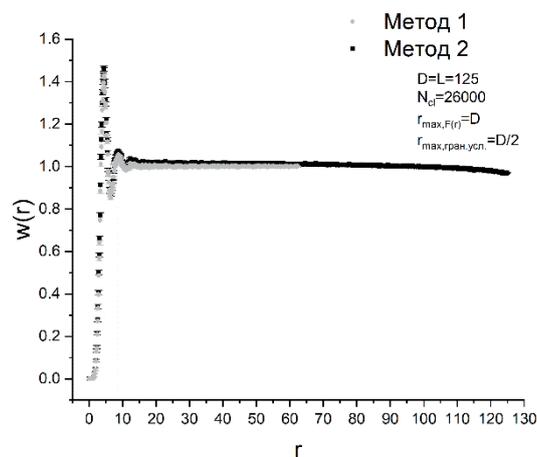


Рис. 6. Расчет радиальной функции распределения для кубического образца размерами $(125 \times 125 \times 125)$, содержащего центры с определенной пространственной корреляцией. Показан случай расчета с учетом геометрической поправки $F(r)$ (черные точки) и расчет с учетом граничных условий (серые точки)

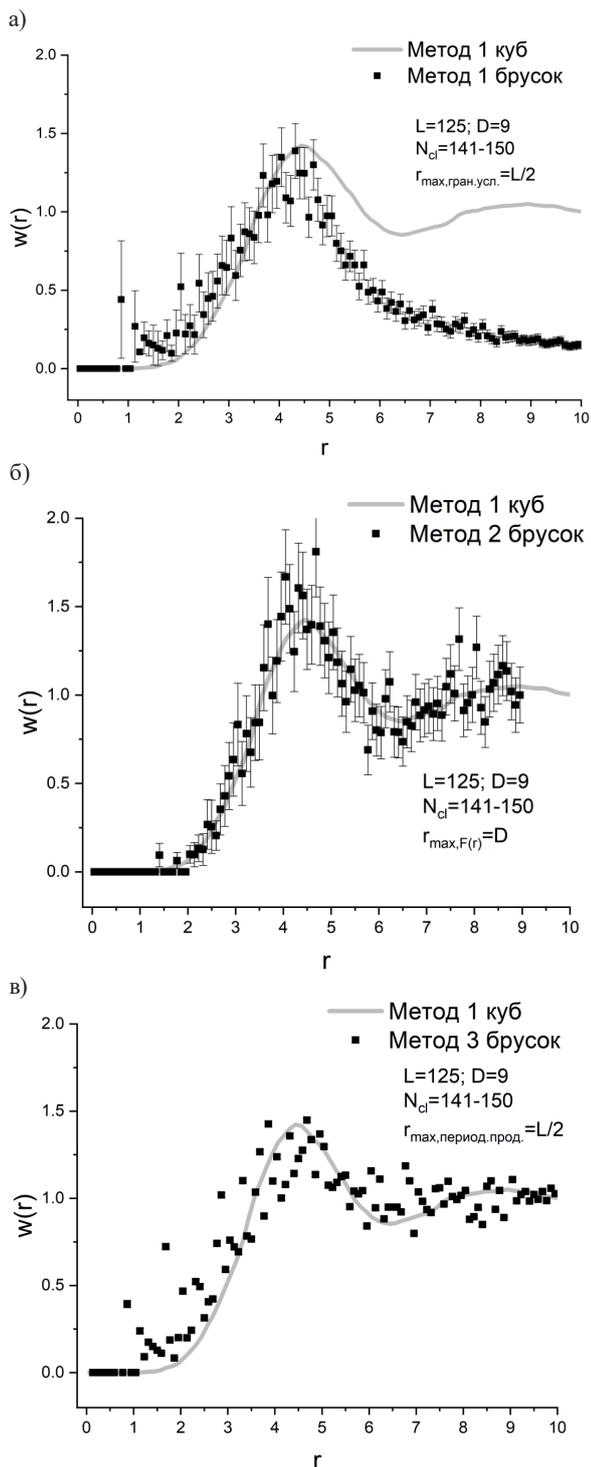


Рис. 7. Расчет усредненной радиальной функции распределения для пяти брусков квадратного сечения высотой $L = 125$ и шириной $D = 9$, выделенных из кубического образца с коррелированными центрами. Показаны случаи расчета: а) – с учетом граничных условий; б) – с учетом геометрической поправки $F(r)$; в) – для периодического продолжения. Для сравнения приведен график функции $w(r)$ исходного кубического образца (сплошная кривая)

и для образцов, геометрия которых имеет прямоугольную вытянутую форму. Так, для пяти брусков квадратного сечения, выделенных из исходного кубического образца, приведен расчет функции $w(r)$ по методам 1, 2 и 3 (рис. 7). Если в случае расчета по методу 1 (см. рис. 7а) зависимость доходит до половины меньшего линейного размера бруска $D/2$ и затем снова спадает, то расчет по методу 2 (см. рис. 7б) показывает совпадение с расчетом $w(r)$ по методу 1 для исходного кубического образца, приведенном на том же рисунке. Расчеты методами 2 и 3 дают близкие результаты и согласие с кубическим образцом. Кажущееся на первый взгляд уменьшение диапазона погрешностей для метода 3 (см. рис. 7в) связано только лишь с периодическим продолжением центров в объеме бруска до кубического объема, т.е. с «искусственным» увеличением статистики, поэтому правильнее будет сравнивать результаты расчета методов 2 и 3 с относительным разбросом точек в каждой серии.

Таким образом, методика, основанная на функции геометрического множителя $F(r)$, не требует периодических граничных условий, работает с исходным числом центров и позволяет проводить вычисления с меньшим временем, что критически важно при работе с системами большого количества частиц.

Заключение

Исследование свойств макро- и микроскопических систем методами атомно-зондовой томографии, малоуглового нейтронного и рентгеновского рассеяния потребовало нахождения пространственного распределения кластерных рассеивающих центров в изучаемых образцах. Были рассмотрены объемные системы с геометрией, близкой к реально используемой в экспериментах. Аналитически получена функция поправки для пространственной парной корреляционной функции рассеивателей (радиальной функции распределения), учитывающая конечные размеры системы. Проведено моделирование систем с различной степенью пространственной корреляции и показаны преимущества нового решения по сравнению со стандартными широко используемыми ранее методами. Предлагаемый метод поможет получить полную картину пространственного распределения центров конечной геометрии при обработке данных для широкого спектра малоугловых исследований.

Финансирование

Работа выполнена в рамках исполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

Ф.С. Джепаров – формулировка идеи и целей исследования, постановка задачи, подготовка текста статьи.

Д.В. Львов – разработка концепции исследования, подготовка текста статьи.

А.Н. Тюлюсов – участие в проведении исследования и обсуждении результатов, подготовка текста статьи.

Й. Шмайсер – выявление закономерностей, подбор литературных источников, подготовка текста статьи.

Список литературы

1. *Свергун Д.И., Фейгин Л.А.* Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние. М.: Наука, 1986. 280 с.
2. *Джепаров Ф.С., Львов Д.В.* Нейтронные исследования конденсированных сред. Учебное пособие. М.: НИЯУ МИФИ, 2012. 188 с. DOI: 10.13140/2.1.2640.1608
3. *Абов Ю.Г., Джепаров Ф.С., Елютин Н.О., Львов Д.В., Тюлюсов А.Н.* Исследования с применением тепловых нейтронов // *ЖЭТФ*, 2013. Т. 143. С. 507–517. DOI: 10.7868/S0044451013030097.
4. *Рогожкин С.В., Алеев А.А., Лукьянчук А.А., Шутов А.С., Разницын О.А., Кириллов С.Е.* Прототип атомного зонда с лазерным испарением // *Приборы и техника эксперимента*, 2017. № 3. С. 129–134. DOI: 10.7868/S0032816217020227.
5. *Лукьянчук А.А., Алеев А.А., Шутов А.С., Разницын О.А., Кириллов С.Е., Рогожкин С.В.* Реконструкция трехмерных распределений атомов в методе атомно-зондовой томографии с учетом плотности материала // *Ядерная физика и инжиниринг*, 2022. Т. 13. № 3. С. 272–279. DOI: 10.56304/S2079562922010250.
6. *Rogozhkin S.V., Klauz A.V., Ke Y., Almásy L., Nikitin A.A., Khomich A.A., Bogachev A.A., Gorshkova Y.E., Bokuchava G.D., Kopitsa G.P., et al.* Study of Precipitates in Oxide Dispersion-Strengthened Steels by SANS TEM, and APT. // *Nanomaterials*, 2024. V. 14. № 2. P. 194. DOI: 10.3390/nano14020194.
7. *Bell R.J.* Pair Distribution Function for Particles in a Box // *Nature*, 1968. № 218. P. 985–986. DOI: 10.1038/218985b0.
8. *Gavagnin E., Owen J., Yates C.* Pair correlation functions for identifying spatial correlation in discrete domains // *Physical Review E*, 2018. V. 97. Iss. 6. DOI: 062104. 10.1103/PhysRevE.97.062104.
9. *Moody M., Gault B., Stephenson L., Marceau R., Powles R., Ceguerra A., Breen A., Ringer S.* Lattice Rectification in Atom Probe Tomography: Toward True Three-Dimensional Atomic Microscopy // *Microscopy and Microanalysis*, 2011. V. 17. Iss. 2. P. 226–239. DOI: 10.1017/S1431927610094535.
10. *Larsen M.L., Shaw R.A.* A method for computing the three-dimensional radial distribution function of cloud particles from holographic images // *Atmospheric Measurement Techniques*, 2018. V. 11. Iss. 7. P. 4261–4272. DOI:10.5194/amt-11-4261-2018.
11. *Melzer A., Nunomura S., Samsonov D., Ma Z., Goree J.* Laser-excited Mach cones in a dusty plasma crystal // *Physical review. E, Statistical physics, plasmas, fluids, and related interdisciplinary topics*, 2000. V. 62. Iss. 3. P. 4162–4176. DOI: 62. 4162-76. 10.1103/PhysRevE.62.4162.
12. *Gu F., Guiselin B., Bain N. et al.* Emergence of collective oscillations in massive human crowds // *Nature*, 2025. V. 638. P. 112 – 119. DOI: 10.1038/s41586-024-08514-6.
13. *Jacquemin M., Ribeiro F., Aliane K., Broggio D., Franck D., et al.* Using radial distribution functions to calculate cellular crossabsorbed dose for β emitters: comparison with reference methods and application for ^{18}F -FDG cell labeling // *Physics in Medicine and Biology*, 2021. V. 66. Iss. 17. P. 175016. DOI: 10.1088/1361-6560/abe555.
14. *Theodorou D.N., Suter U.W.* Geometrical considerations in model systems with periodic boundaries // *Journal of Chemical Physics*, 1985. V.82. Iss.2. P.955–966. DOI:10.1063/1.448472.
15. *Gilbert B.* Finite size effects on the real-space pair distribution function of nanoparticles // *Journal of Applied Crystallography*, 2008. V.41. P.554–562. DOI: 10.1107/S0021889808007905.
16. *Kodama K., Iikubo S., Taguchi T., Shamoto S.* Finite size effects of nanoparticles on the atomic pair distribution functions // *Acta Crystallographica Section A*, 2006. V. 62. P. 444–453. DOI: 10.1107/S0108767306034635
17. *Dzheparov F.S., Lvov D.V.* Nuclear Magnetic Resonance in Gaussian Stochastic Local Field // *Applied Magnetic Resonance*, 2017. V. 48. P. 989–1007. DOI: 10.1007/s00723-017-0923-8.
18. *Абрагам А.* Ядерный магнетизм. М.: ИЛ, 1963. 612 с.

Geometric corrections for calculating the pair correlation function

F. S. Dzheparov^{1,2,✉}, D. V. Lvov^{1,2}, A. N. Tyulyusov^{1,2}, J. Schmeissner^{1,2}

¹ National Research Center “Kurchatov Institute”, Moscow, 123182, Russia

² National Research Nuclear University MEPhI, Moscow, 115409, Russia

✉ dzheparov@itep.ru

✉ nrcki@nrcki.ru

Received May 14, 2025; revised May 25, 2025; accepted June 3, 2025

The pair correlation function of inhomogeneities in samples is actively studied using small-angle scattering methods. Recently, it has become possible to determine this function from atom probe tomography (APT) data. This work examines the influence of the finite size and shape of a sample on the pair correlation function of inhomogeneities derived from APT data. In a large cubic sample whose dimensions in all directions significantly exceed the characteristic correlation radius, the number of impurities near the sample boundaries can be considered much smaller than in the bulk. If this assumption is not fulfilled, a geometric factor arises, for which a general expression has been derived. The geometric meaning of this factor is the probability of a specific interpoint distance presence within the sample. For the case in which the sample is an elongated rectangular parallelepiped, an analytical expression for the geometric factor in terms of elementary functions is obtained.

The following model systems were considered: a completely uncorrelated distribution of centers, a simple cubic lattice, and a densely packed system of polydisperse hard spheres. These systems were chosen due to their differing degrees of spatial order. It is shown that accounting for the geometric factor yields the correct pair correlation function for the selected model systems of inhomogeneities.

Keywords: pair correlation function, radial distribution function, atom probe tomography.

References

1. *Svergun D.I., Feigin L.A.* Rentgenovskoe i nejtronnoe malouglovoe rasseyanie [X-ray and neutron small-angle scattering]. Moscow, Nauka Publ., 1986. 280 p.
2. *Dzheparov F.S., Lvov D.V.* Nejtronnyye issledovaniya kondensirovannykh sred. Uchebnoe posobie. [Neutron studies of condensed matter. Tutorial]. Moscow, NIYaU MIFI Publ., 2012. 188 p. DOI: 10.13140/2.1.2640.1608 (in Russian)
3. *Abov Yu.G., Dzheparov F.S., Elyutin N.O., Lvov D.V., Tyulyusov A.N.* Issledovaniya s primeneniem teplovykh nejtronov [Thermal Neutron Research]. ZhETF, 2013. Vol. 143. Pp. 507–517. DOI: 10.7868/S0044451013030097 (in Russian).
4. *Rogozhkin S.V., Aleev A.A., Luk'yanchuk A.A., Shutov A.S., Raznicyn O.A., Kirillov S.E.* Prototip atomnogo zonda s lazernym ispareniiem [Atomic Probe Prototype with Laser Evaporation]. Pribory i tekhnika eksperimenta, 2017. No. 3. Pp. 129–134. DOI: 10.7868/S0032816217020227 (in Russian).
5. *Luk'yanchuk A.A., Aleev A.A., Shutov A.S., Raznicyn O.A., Kirillov S.E., Rogozhkin S.V.* Rekonstrukciya trekhmernykh raspredelenij atomov v metode atomno-zondovoj tomografii s uchetom plotnosti materiala [Reconstruction of three-dimensional distributions of atoms in the atom probe tomography method taking into account the material density]. Yadernaya fizika i inzhiniring, 2022. Vol. 13. No. 3. Pp. 272–279. DOI: 10.56304/S2079562922010250 (in Russian).
6. *Rogozhkin S.V., Klauz A.V., Ke Y., Almásy L., Nikitin A.A., Khomich A.A., Bogachev A.A., Gorshkova Y.E., Bokuchava G.D., Kopitsa G.P., et al.* Study of Precipitates in Oxide Dispersion-Strengthened Steels by SANS TEM, and APT. Nanomaterials, 2024. Vol. 14. No. 2. Pp. 194. DOI: 10.3390/nano14020194.
7. *Bell R.J.* Pair Distribution Function for Particles in a Box. Nature, 1968. No. 218. Pp. 985–986. DOI: 10.1038/218985b0.
8. *Gavagnin E., Owen J., Yates C.* Pair correlation functions for identifying spatial correlation in discrete domains. Physical Review E, 2018. Vol. 97. Iss. 6. DOI: 062104. 10.1103/PhysRevE.97.062104.
9. *Moody M., Gault B., Stephenson L., Marceau R., Powles R., Ceguerra A., Breen A., Ringer S.* Lattice Rectification in Atom Probe Tomography: Toward True Three-Dimensional Atomic Microscopy. Microscopy and Microanalysis, 2011. Vol. 17. Iss. 2. Pp. 226–239. DOI: 10.1017/S1431927610094535.

10. *Larsen M.L., Shaw R.A.* A method for computing the three-dimensional radial distribution function of cloud particles from holographic images. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2018. Vol. 11. Iss. 7. Pp. 4261 – 4272. DOI: 10.5194/amt-11-4261-2018.
11. *Melzer A., Nunomura S., Samsonov D., Ma Z., Goree J.* Laser-excited Mach cones in a dusty plasma crystal. *Physical review. E, Statistical physics, plasmas, fluids, and related interdisciplinary topics*, 2000. Vol. 62. Iss. 3. Pp. 4162 – 4176. DOI: 62. 4162-76. 10.1103/PhysRevE.62.4162.
12. *Gu F., Guiselin B., Bain N. et al.* Emergence of collective oscillations in massive human crowds. *Nature*, 2025. Vol. 638. Pp. 112 – 119. DOI: 10.1038/s41586-024-08514-6.
13. *Jacquemin M., Ribeiro F., Aliane K., Broggio D., Franck D., et al.* Using radial distribution functions to calculate cellular crossabsorbed dose for β emitters: comparison with reference methods and application for 18F-FDG cell labeling. *Physics in Medicine and Biology*, 2021. Vol. 66. Iss. 17. Pp. 175016. DOI: 10.1088/1361-6560/abe555.
14. *Theodorou D.N., Suter U.W.* Geometrical considerations in model systems with periodic boundaries. *Journal of Chemical Physics*, 1985. Vol. 82. Iss. 2. Pp. 955 – 966. DOI: 10.1063/1.448472.
15. *Gilbert B.* Finite size effects on the real-space pair distribution function of nanoparticles. *Journal of Applied Crystallography*, 2008. Vol. 41. Pp. 554 – 562. DOI: 10.1107/S0021889808007905.
16. *Kodama K., Iikubo S., Taguchi T., Shamoto S.* Finite size effects of nanoparticles on the atomic pair distribution functions. *Acta Crystallographica Section A*, 2006. Vol. 62. Pp. 444 – 453. DOI: 10.1107/S0108767306034635.
17. *Dzheparov F.S., Lvov D.V.* Nuclear Magnetic Resonance in Gaussian Stochastic Local Field. *Applied Magnetic Resonance*, 2017. Vol. 48. Pp. 989 – 1007. DOI: 10.1007/s00723-017-0923-8.
18. *Abraham A.* The Principles of Nuclear Magnetism. Clarendon Press, 1961, 599 p.