Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018
Zborník príspevkov

Fakulta matematiky, fyziky a informatiky
Univerzita Komenského, Bratislava
25. apríl 2018

Proceedings of the Student Science Conference 2018

Faculty of Mathematics, Physics and Informatics
Comenius University, Bratislava
April 25, 2018



Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018: Zborník príspevkov
Proceedings of the Student Science Conference 2018
Editori: Broňa Brejová, Jaroslav Guričan, Tomáš Vinař
Autor loga: Matej Novotný
Vydavateľ: Knižničné a edičné centrum FMFI UK, Bratislava
Vydanie: prvé
Rok vydania: 2018

ISBN 978-8081470882

Zborník obsahuje príspevky účastníkov Študentskej vedeckej konferencie, ktorá sa konala 25. apríla 2018 na Fakulte matematiky, fyziky a informatiky Univerzity Komenského v Bratislave. Príspevky označené v obsahu ako "recenzované" boli pred publikovaním recenzované najmenej dvoma anonymnými recenzentami. Všetky príspevky boli posudzované aspoň trojčlennou odbornou komisiou.

http://svk.fmph.uniba.sk/

Zborník © 2018 Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Univerzita Komenského, Bratislava
Články © 2018 autori jednotlivých článkov

Predhovor

Tento zborník obsahuje príspevky zo Študentskej vedeckej konferencie, ktorá sa konala 25. apríla 2018 na Fakulte matematiky, fyziky a informatiky Univerzity Komenského v Bratislave. Študentská vedecká konferencia má na fakulte dlhoročnú tradíciu a je príležitosťou pre študentov bakalárskeho, magisterského a doktorandského štúdia prezentovať vlastné vedecké a odborné práce z rozličných odborov matematiky, fyziky, informatiky a didaktiky týchto disciplín.

V roku 2018 bolo na konferenciu prihlásených 65 príspevkov v ôsmich tematických sekciách. Každý článok bol recenzovaný najmenej dvoma recenzentami a ďalej posudzovaný odbornou komisiou. Na základe tohto procesu boli do zborníka vybrané recenzované články, zvyšné príspevky sú v zborníku zastúpené formou jednostranového abstraktu. Príspevky boli prezentované 25. apríla 2018 na celodennej konferencii v priestoroch fakulty a odborné komisie udelili v rámci jednotlivých sekcií ocenenia 20 víťazom, najlepším doktorandským prácam v oblastiach matematiky, fyziky a didaktiky, ako aj 19 laureátom ŠVK. Komisie navrhli udeliť päť cien Literárneho fondu, tri ceny prof. Tillmana Märka za príspevky v oblasti fyziky plazmy, cenu prof. Petra Lukáča za vynikajúcu prácu v oblasti experimentálnej fyziky, cenu Slovenskej informatickej spoločnosti za vynikajúcu prácu v oblasti informatiky a cenu FINAMIS za najlepšiu prácu v oblasti aplikovanej matematiky.

Pre širokú verejnosť odznela plenárna prednáška doc. Pavla Bokesa na tému “Explózia v deterministických a stochastických modeloch rastu.”

Chceme poďakovať predovšetkým zúčastneným študentom a ich školiteľom, predsedom a členom jednotlivých odborných komisií, organizátorom a sponzorom. Ďakujeme za úspešný priebeh konferencie a tešíme sa na Študentskú vedeckú konferenciu 2019.

Broňa Brejová, Jaroslav Guričan, Tomáš Vinař
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky
Univerzity Komenského v Bratislave

Sponzori: Literárny fond, Slovenská informatická spoločnosť, prof. Tillman D. Märk, prof. Peter Lukáč, FINAMIS, Slovenská nukleárna spoločnosť

Zloženie komisií

Organizačný výbor: doc. Mgr. Broňa Brejová, PhD.; doc. RNDr. Jaroslav Guričan, CSc.; prof. RNDr. Ján Urban, DrSc.; doc. Mgr. Tomáš Vinař, PhD.

Predsedovia odborných komisií:

Matematika: doc. Mgr. Richard Kollár, PhD.
Informatika: RNDr. Zuzana Černeková, PhD.
Jadrová fyzika: doc. RNDr. Ivan Sýkora, PhD.
Biofyzika: prof. RNDr. Melánia Babincová, CSc.
Experimentálna fyzika: RNDr. Juraj Országh, PhD.
Teoretická fyzika: doc. RNDr. Vladimír Balek, CSc.
Didaktika matematiky a fyziky: RNDr. Monika Dillingerová, PhD.
Didaktika informatiky: doc. RNDr. Ľudmila Jašková, PhD.

Recenzenti: Boris Andel, Stanislav Antalic, Peter Babinec, Martina Babinská, Vladimír Balek, Pavol Bartoš, Martina Bátorová, Daniela Bezáková, Katarína Boďová, Bronislava Brejová, Pavel Brunovský, Jaroslav Budiš, Zuzana Černeková, Marián Danko, Monika Dillingerová, Lukáš Fajt, Igor Farkaš, Milan Ftáčnik, Štefan Gajdoš, Zuzana Garaiová, Peter Guba, Jaroslav Guričan, Mária Hajduková, Tibor Hianik, Richard Hlubina, Roman Hric, Andrea Hrušecká, Katarína Janková, Ľudmila Jašková, Miroslav Ješkovský, Pavol Jurča, Jozef Kačur, Soňa Kilianová, Eva Klimeková, Miroslav Kocifaj, Richard Kollár, Leonard Kornoš, Dušan Kováčik, Zuzana Kubincová, Soňa Kudličková, Frantisek Kundracik, Róbert Kysel, Martin Labaj, Vladimíra Laššáková, Martin Máčaj, Pavel Mach, Zdenko Machala, Ján Mačutek, Michal Málek, Peter Markoš, Karolína Mayerová, Ján Mazák, Veronika Medvecká, Igor Melicherčík, Marián Mikula, Pikna Miroslav, Júlia Miškovičová, Hana Mizerová, Marcela Morvová, Pavol Mošať, Monika Müllerová, Marek Nagy, Juraj Országh, Peter Papp, Pavel Petrovič, Alexandra Poturnayová, Peter Prešnajder, Tomáš Roch, Peter Rybár, Sebastián Ševčík, Elena Šikudová, Jiří Šilha, Fedor Šimkovic, Martin Škoviera, Ján Somorčík, Beáta Stehlíková, Ivan Štekl, Veronika Šubjaková, Dana Šuníková, Martin Šuster, Ivan Sýkora, Juraj Tekeľ, Monika Tomcsányiová, Juraj Tóth, Viera Uherčíková, Peter Vankúš, Monika Vanyová, Emil Varga, Michaela Vargová, Klára Velmovská, Michaela Veselovská, Tomáš Vinař, Michal Winczer, Anna Zahoranová, Pavol Zlatoš, Branislav Zudel, Milan Zvarík

Obsah

Matematika

Recenzované články

Zuzana Girová: Vplyv korelácie medzi faktormi na ceny dlhopisov v dvojfaktorových short rate modeloch 1
Jakub Bahyl: Vortex filament dynamics in quantum system 9
Martin Vodička: Lokálna vnoriteľnosť grúp a IP lúp do konečných IP lúp 19
Jozef Rajník: Small irreducible snarks and their generalizations 26
Patrik Mihala: Determination of Adsorption Isotherms in 3D Unsaturated-Saturated Porous Media 38

Abstrakty

Jana Žilovcová: Nové diskrétne rozdelenie pravdepodobnosti s aplikáciou v kvantitatívnej lingvistike 45
Matej Hladiš: Vyhľadávanie podozrivých firiem: metóda obálky dát 46
Barbora Strešková: Šírenie infekčného ochorenia v sieťovom modeli Slovenska s regionálnou a vekovou štruktúrou 47
Jozef Kováč: Distribučný chaos v náhodných dynamických systémoch 48

Biofyzika

Recenzované články

Paulína Halušková: Testovanie účinkov plazmou aktivovanej vody na bakteriálne biofilmy spôsobujúce parodontitídu a jej vplyv na zubné tkanivo 49
Ľudmila Dzubinová: Využitie akustickej metódy na detekciu receptorov na bunkách karcinómu prsníka 58
Natália Zacharová: Využitie atómovej silovej mikroskopie na zobrazovanie mliečnych baktérií 67
Dominika Sersenová: Vplyv plazmou aktivovaného média na viabilitu rakovinových a normálnych ľudských buniek 73
Ivan Piovarči: Vývoj biosenzora na detekciu aktivity proteáz 80

Abstrakty

Lucia Ilavská, Dominika Sersenová: Metabolizmus tryptofánu u detských pacientov s depresívnym ochorením 89

Experimentálna fyzika

Recenzované články

Ondrej Štefík: Automatická tvorba polygonálneho modelu miest z databázy VIIRS programom Polygon Maker 90
Viktor Šroba: Vplyv nízkoteplotnej atmosférickej plazmy na vlastnosti mungo fazule 101
Tomáš Fiantok: Teplom indukovaný štruktúrny vývoj Nb-Al-N tvrdých vrstiev a jeho vplyv na mechanické vlastnosti 106
Ján Blaško: Elektrónmi indukovaná fragmentácia molekuly 2,6-dichloroanizolu . . 114

Abstrakty

Patrícia Multáňová: Vplyv koncentrácie AAc vo vodnom roztoku na plazmovú polymerizáciu iniciovanú diafragmovým výbojom 121
Barbora Stachová: Electron impact excitation of H_2O in gaseous state 122
Magdaléna Poláčková: Electron induced oxygen fluorescence 123
Filip Marcell: Optimalizácia LIBS analýzy volfrámu pre aplikácie v termojadrovej fúzii124

Jadrová fyzika

Recenzované články

Adam Broniš: Conversion electron-γ spectroscopy of ^{254}Fm 125
Terézia Eckertová: Metódy kontinuálneho merania radónu vo vodách 136
Adam Sitarčík: Spoľahlivosť teoretických modelov pre polčas rozpadu atómových jadier 147
Justína Nováková: Upgrade ALICE TPC 156

Abstrakty

Miroslav Macko: Merania kvality depozície ^{207}Bi v kalibračných zdrojoch pre SuperNEMO experiment 163
Pavol Mošať: Spontaneous fission of rutherfordium isotopes—total kinetic energies 164
Lukáš Fajt: Time calibrations of the GVD neutrino telescope 165
Miloš Doktor: Možnosti stanovenia koncentrácie Al pomocou PIGE metódy 166
Dominik Babál: Monte Carlo simulácia produkcie top-kvarkových eventov na experimente CDF 167
Eliška Eckerová: Baikal GVD—Double pulse detection 168
Zuzana Bardačová: Detector BaikalTop 169
Daniel Suchý: Štúdium početností promptných neutrónov zo štiepenia ^{248}Cm . . . 170

Teoretická fyzika a fyzika Zeme a vesmíru

Recenzované články

Natália Ružičková: Temporal processes in photonic structures 171
Ján Šubjak: Výskum exoplanéty HAT-P-37 b 182
Martin Baláž: Numerical meteor simulation as a means of debiasing AMOS data . 195
Martin Šugár: Katalóg zemetrasení pre výpočet seizmického ohrozenia územia Slovenska v hodnotách makroseizmickej intenzity 208
Adam Hložný: Dirac equation and non-commutative quantum theory 216

Abstrakty

Pavol Matlovič: Na-rich meteor spectra as tracers of rare near-Earth meteoroids . 221

Informatika

Recenzované články

Paula Budzáková: Extrahovanie lokálnych príznakov z 3D mračien bodov 222
Michal Hradečný: Vyhľadávanie konkrétnej osoby vo videu podľa vizuálneho vzoru 230

Abstrakty

Miloslav Torda: Evaluation of Information-Theoretic Measures in Echo State Networks on the Edge of Stability 240
Mário Lipovský: Approximate Abundance Histograms and Their Use for Genome Size Estimation 242
Andrej Baláž: Sequence based classification of bacteriophages 243
Marek Šuppa, Ondrej Jariabka: GANmyIKEA vs. IKEAmyVAE: a journey towards the boundaries of generative landscape 244
Klára Horváthová: Kognitívna náročnosť úloh súťaže iBobor 245
Werner Krampl: Predikcia miery polymorfizmu zo sekvenačných dát 246

Didaktika matematiky a fyziky

Recenzované články

Daniela Hansmanová: Vizualizácia modelov geometrických objektov v softvéri GeoGebra 247
Vladimíra Laššáková, Mária Čujdíková: Odstraňovanie strachu z matematiky prostredníctvom skupinového vyučovania 253
Simona Vajdiarová: Možnosti využitia videosekvencií vo vyučovaní fyziky 261
Patrícia Bartschová: Rozširujúce úlohy z kockových telies 269

Abstrakty

Mária Čujdíková: Videohry ako spôsob prirodzeného učenia sa matematiky 279
Barbora Matušková: Matematická hra Statistico na hodinách matematiky strednej školy 280

Didaktika informatiky

Recenzované články

Iveta Csicsolová: Robotické stavebnice v škole a po škole 281
Jakub Krcho: Robotické súťaže z pohľadu riešiteľského tímu 286
Marek Mansell: Platforma micro:bit v nižšom sekundárnom vzdelávaní 292
Eva Klimeková: Transformácia učiteľov na vyučovanie základov programovania v jazyku Python 298

Abstrakty

Adrián Matejov: GTA Monitor: Automatické monitorovanie priebehu vyučovacích aktivít 302
Dana Šuníková: Mobilná hra na výučbu AVL stromov 303
Michal Vido, Monika Kúdelová: Edison robot 304
Patrik Furmánek: Moodle doplnok s prvkami gamifikácie na výučbu informatiky . . 305
Eva Klimeková, Marek Mansell: Case study on physical computing with NodeMCU on summer school 306
Martina Ďuricová: Najmenej ťahov 307

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 1–8
ISBN 978-8081470882, © 2018 Zuzana Girová

Vplyv korelácie medzi faktormi na ceny dlhopisov v dvojfaktorových short rate modeloch

Zuzana Girová*

Školiteľ: Beáta Stehlíková†

Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt: V príspevku sa venujeme modelovaniu okamžitej úrokovej miery. Cieľom je numericky a analyticky zistiť, aký vplyv má korelácia medzi faktormi v dvojfaktorovom short rate modeli na ceny dlhopisov a výnosové krivky. Pozornosť sme upriamili na dvojfaktorový Vašičkov model a dvojfaktorový Fong-Vašičkov model.

Kľúčové slová: okamžitá úroková miera, model okamžitej úrokovej miery, korelácia, dvojfaktorový model

1 Úvod

Počiatky úrokovej miery siahajú do hlbokej histórie. V časoch, kedy sa človek prvýkrát stretáva s pôžičkou, sa objavuje aj úrok. Úrok predstavoval akúsi istotu pre veriteľa, že sa mu vráti aspoň taká čiastka akú požičal. V dnešnej dobe môžeme na finančnom trhu pozorovať aj záporné úrokové miery, napr. referenčná úroková miera Euribor. Záporná úroková miera je fenomén, ktorý znamená, že veriteľ platí úroky za úver dlžníkovi. V reálnej ekonomike bol takýto úverový vzťah donedávna nepredstaviteľný, no v posledných rokoch čoraz viac centrálnych bank zavádza záporné úrokové miery.

Modely popisujú úrokovú mieru pomocou stochastickej diferenciálnej rovnice. Ich cieľom je okrem iného modelovať jej ďalší vývoj. Zásadným bodom pri modelovaní okamžitej úrokovej miery je zachytenie tejto miery ako teoretického začiatku výnosovej krivky. V príspevku sa zameriavame najmä na dvojfaktorové modely okamžitej úrokovej miery. V dvojfaktorových modeloch uvažujeme aj koreláciu medzi faktormi modelu, pričom pracujeme s konštantnou hodnotou korelácie. Ťažiskom príspevku je analyticky a numericky odvodiť vplyv korelácie na ceny dlhopisov vo vybraných modeloch okamžitej úrokovej miery.

*z.girova@gmail.com
†stehlikova@pc2.iam.fmph.uniba.sk

2 Dvojfaktorový Vašičkov model

Vašičkov model, publikovaný v [1] , patrí do triedy modelov s vlastnosťou *mean − reversion*. Zároveň je špeciálnym prípadom Ornstein-Uhlenbeckovho procesu s konštantnou volatilitou. Vo Vašičkovom dvojfaktorovom modeli za faktory vezmeme úrokové miery r_1, r_2. Ďalej predpokladáme, že okamžitá úroková miera r_t je súčtom týchto dvoch nezávislých faktorov. V praxi sa ukazuje, že okamžitá úroková miera r_t je pozorovateľná na trhu, ale jej časti r_1, r_2 nie. Pri odvodzovaní ceny dlhopisu budeme postupovať podľa [6].

Cena dlhopisu P závisí od faktorov r_1, $r_2 \in (-\infty,\infty)$ a od doby do splatnosti (maturity) $\tau = T - t \in (0,\infty)$. Ako vstup budeme uvažovať sústavu rovníc

$$\begin{aligned} dr_1 &= \kappa_1(\theta_1 - r_1)dt + \sigma_1 dw_1, \\ dr_2 &= \kappa_2(\theta_2 - r_2)dt + \sigma_2 dw_2, \\ Cov(dw_1, dw_2) &= \rho dt. \end{aligned}$$

Parametre modelu κ_1, κ_2, θ_1 a θ_2 sú kladné konštanty. Volatilita modelu je v rovniciach vyjadrená konštantami σ_1, σ_2.

Za predpokladu, že trhové ceny rizika λ_1, λ_2 sú konštanty, cena dlhopisu $P(r_1, r_2, \tau)$ je riešením parciálnej diferenciálnej rovnice v tvare

$$\begin{aligned} - & \frac{\partial P}{\partial \tau} + [\kappa_1(\theta_1 - r_1) - \lambda_1\sigma_1]\frac{\partial P}{\partial r_1} \\ + & [\kappa_2(\theta_2 - r_2) - \lambda_2\sigma_2]\frac{\partial P}{\partial r_2} + \frac{\sigma_1^2}{2}\frac{\partial^2 P}{\partial r_1^2} + \frac{\sigma_2^2}{2}\frac{\partial^2 P}{\partial r_2^2} \\ + & \rho\sigma_1\sigma_2\frac{\partial^2 P}{\partial r_1 \partial r_2} - (r_1 + r_2)P = 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Na dourčenie ceny dlhopisu potrebujeme ďalšiu podmienku. Počiatočná podmienka je v tvare $P(r_1, r_2, 0) = 1$ pre $\forall r_1, r_2$. Riešenie rovnice (1) hľadáme podľa [6] v separovanom tvare

$$\begin{aligned} P(r_1, r_2, \tau) &= P_1(r_1, \tau)P_2(r_2, \tau) \\ &= A_1(\tau)A_2(\tau)\mathrm{e}^{-B_1(\tau)r_1 - B_2(\tau)r_2} \end{aligned}$$

Aby počiatočné podmienky zostali zachované, platí $A_i(0)=1$, $B_i(0)=0$. Potom pre jednotlivé parciálne derivácie dostávame

$$\frac{\partial P_i}{\partial \tau} = \dot{A}_i \mathrm{e}^{-B_i r_i} - \dot{B}_i A_i r \mathrm{e}^{-B_i r_i},$$
$$\frac{\partial P_i}{\partial r_i} = -A_i B_i \mathrm{e}^{-B_i r_i},$$
$$\frac{\partial^2 P_i}{\partial r_i^2} = A_i B_i^2 \mathrm{e}^{-B_i r_i}.$$

Odvodené parciálne derivácie dosadíme do rovnice (1). Označme $A = A_1 A_2$. V ďalšom kroku združíme tie členy, ktoré obsahujú člen r_1, potom člen r_2 a tie, ktoré neobsahujú r_1, ani r_2 a po úprave dostávame

$$[-\dot{A} + (\lambda_1\sigma_1 - \kappa_1\theta_1)AB_1 + (\lambda_2\sigma_2 - \kappa_2\theta_2)AB_2$$
$$+ \frac{\sigma_1^2}{2}AB_1^2 + \frac{\sigma_2^2}{2}AB_2^2 + \rho\sigma_1\sigma_2 AB_1B_2]$$
$$+ [\dot{B}_1 A + \kappa_1 AB_1 - A]r_1 + [\dot{B}_2 A + \kappa_2 AB_2 - A]r_2 = 0.$$

Identita musí byť splnená pre $\forall r_1, r_2$, preto všetky tri výrazy v zátvorkách musia byť identický rovné nule. Dostávame teda sústavu troch obyčajných diferenciálnych rovníc

$$\dot{A} = (\lambda_1\sigma_1 - \kappa_1\theta_1)AB_1 + (\lambda_2\sigma_2 - \kappa_2\theta_2)AB_2$$
$$+ \frac{\sigma_1^2}{2}AB_1^2 + \frac{\sigma_2^2}{2}AB_2^2 + \rho\sigma_1\sigma_2 AB_1B_2,$$
$$\dot{B}_1 = 1 - \kappa_1 B_1,$$
$$\dot{B}_2 = 1 - \kappa_2 B_2,$$

s počiatočnými podmienkami $A(0)=1$, $B_i(0)=0$, $i=1,2$. Riešenie tejto sústavy obyčajných diferenciálnych rovníc je analogické riešeniu systému obyčajných diferenciálnych rovníc, ktoré je uvedené v [6]. Preto uvádzame len výsledok

$$B_1(\tau) = \frac{1}{\kappa_1}(1 - \mathrm{e}^{-\kappa_1\tau}), \tag{2}$$

$$B_2(\tau) = \frac{1}{\kappa_2}(1 - \mathrm{e}^{-\kappa_2\tau}). \tag{3}$$

$$\ln A(\tau) = \ln\tilde{A}_1 + \ln\tilde{A}_2 + \rho\frac{\sigma_1\sigma_2}{\kappa_1\kappa_2}\left[\tau - \frac{1}{\kappa_1}(1-\mathrm{e}^{-\kappa_1\tau})\right.$$
$$\left. - \frac{1}{\kappa_2}(1-\mathrm{e}^{-\kappa_2\tau}) + \frac{1-\mathrm{e}^{-(\kappa_1+\kappa_2)\tau}}{\kappa_1+\kappa_2}\right], \tag{4}$$

pričom

$$\ln\tilde{A}_i = \left[\frac{1}{\kappa_i}(1-\mathrm{e}^{-\kappa_i\tau}) - \tau\right]R_{\infty i} - \frac{\sigma_i^2}{4\kappa_i^3}(1-\mathrm{e}^{-\kappa_i\tau})^2$$
$$R_{\infty i} = \theta_i - \frac{\lambda_i\sigma_i}{\kappa_i} - \frac{\sigma_i^2}{2\kappa_i^2},, \quad i=1,2.$$

Pre cenu dlhopisu v dvojfaktorovom Vašičkovom modeli platí vzťah

$$\ln P(r_1, r_2, \tau, \rho) = \ln A(\tau) - B_1(\tau)r_1 - B_2(\tau)r_2, \tag{5}$$

kde $\ln A(\tau)$ je dané rovnicou (4) a explicitné riešenia $B_1(\tau)$, $B_2(\tau)$ sú dané výrazmi (2), (3). Časovú štruktúru úrokových mier môžeme potom vo Vašičkovom modeli vyjadriť ako

$$R(r_1, r_2, t, t+\tau) = -\frac{\ln P(r_1, r_2, \tau)}{\tau} \tag{6}$$
$$= -\frac{\ln A_1 A_2}{\tau} + \frac{B_1}{\tau} + \frac{B_2}{\tau}.$$

Pri odvodzovaní ceny dlhopisu pre dvojfaktorový Vašičkov model sme predpokladali, že korelácia medzi faktormi r_1 a r_2 je rovná konštante ρ. Ak by sme zobrali Vašičkov model s predpokladom nulovej korelácie, t.j. $\rho = 0$, postup odvodenia ceny dlhopisu by obsahoval rovnaké kroky ako pri Vašičkovom modeli s nenulovou koreláciou. položme teda $\rho = 0$. Cena dlhopisu potom spĺňa nasledovnú parciálnu diferenciálnu rovnicu

$$-\frac{\partial P}{\partial \tau} + [\kappa_1(\theta_1 - r_1) - \lambda_1\sigma_1]\frac{\partial P}{\partial r_1}$$
$$+ [\kappa_2(\theta_2 - r_2) - \lambda_2\sigma_2]\frac{\partial P}{\partial r_2}$$
$$+ \frac{\sigma_1^2}{2}\frac{\partial^2 P}{\partial r_1^2} + \frac{\sigma_2^2}{2}\frac{\partial^2 P}{\partial r_2^2} - (r_1 + r_2)P = 0. \tag{7}$$

Derivácie funkcie P nezávisia od korelácie ρ, preto ich dosadíme do rovnice (7). Dostávame sústavu obyčajných diferenciálnych rovníc

$$\dot{\tilde{A}} = (\lambda_1\sigma_1 - \kappa_1\theta_1)AB_1 + (\lambda_2\sigma_2 - \kappa_2\theta_2)AB_2$$
$$+ \frac{\sigma_1^2}{2}AB_1^2 + \frac{\sigma_2^2}{2}AB_2^2, \tag{8}$$
$$\dot{B}_1 = 1 - \kappa_1 B_1,$$
$$\dot{B}_2 = 1 - \kappa_2 B_2.$$

Funkcie B_1, B_2 majú explicitné vyjadrenie totožné s výrazmi (2), (3). Integrovaním rovnice (8) a využitím vlastnosti integrálu dostávame súčet takmer identických integrálov líšiacich sa v indexe.

Do výrazu (8) ďalej dosadíme riešenie funkcií $B_1(\tau)$, $B_2(\tau)$, vypočítame integrály a využitím počiatočnej podmienky $A(0)=1$ dostaneme konečné riešenie integrálov

$$\ln\tilde{A}_i = \left[\frac{1}{\kappa_i}(1-\mathrm{e}^{-\kappa_i\tau}) - \tau\right]R_{\infty i} - \frac{\sigma_i^2}{4\kappa_i^3}(1-\mathrm{e}^{-\kappa_i\tau})^2,$$

kde

$$R_{\infty i} = \theta_i - \frac{\lambda_i \sigma_i}{\kappa_i} - \frac{\sigma_i^2}{2\kappa_i^2}, i = 1,2$$

Za predpokladu nulovej korelácie medzi faktormi modelu, pre cenu dlhopisu v dvojfaktorovom Vašičkovom modeli platí vzťah

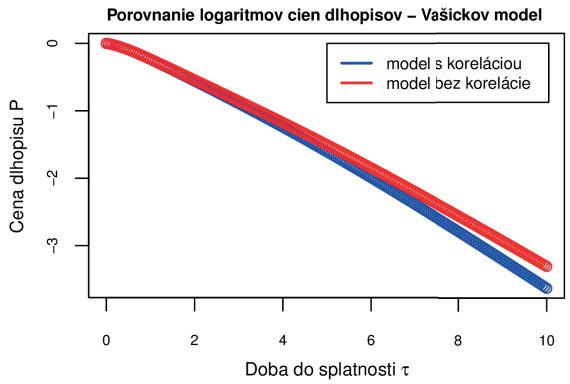
$$\ln P(r_1, r_2, \tau, 0) = \ln \tilde{A}(\tau) - B_1(\tau) r_1 - B_2(\tau) r_2, \quad (9)$$

kde $\ln \tilde{A}(\tau)$ a explicitné riešenia $B_1(\tau), B_2(\tau)$ sme odvodili vyššie.

2.1 Vplyv korelácie vo Vašičkovom modeli

Ťažiskom práce je zistiť, aký je vplyv korelácie medzi faktormi modelu na ceny dlhopisov. V tejto časti príspevku zoberieme cenu dlhopisu s koreláciou a cenu dlhopisu bez korelácie a porovnáme ich. Rozdiel cien aproximujeme a odvodíme experimentálny rád konvergencie. Na odvodenie rádu konvergencie budeme počítať Taylorov rozvoj rozdielu cien.

Na ilustráciu odvodených výsledkov zvolíme nasledujúce parametre modelu $\kappa_1 = 0.3, \theta_1 = 0.4, \sigma_1 = 0.03, \lambda_1 = 0, \kappa_2 = 0.8, \theta_2 = 0.5, \sigma_2 = 0.8, \lambda_2 = 0, \rho = -0.5$. Na Obr.1 si môžeme všimnúť, že ceny dlhopisov bez ohľadu na hodnotu korelácie majú rovnaký tvar. Líšia sa iba výškou ceny v jednotlivých časoch. Pre nízke splatnosti sú ceny pri zvolených parametroch takmer totožné. Pri vyšších splatnostiach je rozdiel signifikantnejší.



Obr. 1: Logaritmus cien dlhopisov vo Vašičkovom modeli.

V nasledujúcej sekcii analyticky vyjadríme vplyv korelácie medzi faktormi pre všeobecné hodnoty parametrov modelu. Zoberme rozdiel logaritmov cien dlhopisov

$$\ln P(r_1, r_2, \tau, \rho) - \ln P(r_1, r_2, \tau, 0),$$

pričom vychádzame zo vzorcov (5), (9). Funkcie B_1, B_2 sú pre obe ceny rovnaké, preto sa navzájom odčítajú. Funkcie $\ln A$ a $\ln \tilde{A}$ nie sú identické:

$$\ln P(r_1, r_2, \tau, \rho) - \ln P(r_1, r_2, \tau, 0) = \ln A - \ln \tilde{A}. \quad (10)$$

Funkcia $\ln A$ obsahuje naviac člen s koreláciou a teda rozdiel (10) dáva výraz

$$\rho \frac{\sigma_1 \sigma_2}{\kappa_1 \kappa_2} \left[\tau - \frac{1}{\kappa_1}(1 - e^{-\kappa_1 \tau}) - \frac{1}{\kappa_2}(1 - e^{-\kappa_2 \tau}) + \frac{1 - e^{-(\kappa_1 + \kappa_2)\tau}}{\kappa_1 + \kappa_2} \right]. \quad (11)$$

Rozdiel logaritmov cien (11) aproximujeme Taylorovým rozvojom. Keďže $\rho \frac{\sigma_1 \sigma_2}{\kappa_1 \kappa_2}$ predstavuje konštantu pri známych parametroch, aproximovať budeme len výraz v hranatej zátvorke. Hranatú zátvorku v (11) označíme ako funkciu od τ

$$f(\tau) = \tau - \frac{1}{\kappa_1}(1 - e^{-\kappa_1 \tau}) - \frac{1}{\kappa_2}(1 - e^{-\kappa_2 \tau}) + \frac{1 - e^{-(\kappa_1 + \kappa_2)\tau}}{\kappa_1 + \kappa_2}.$$

Vypočítajme jednotlivé derivácie funkcie $f(\tau)$ v bode $\tau = 0$, ktoré potrebujeme na vyjadrenie Taylorovho rozvoja

$$\begin{aligned}
f^{(1)}(\tau)|_{\tau=0} &= 1 - e^{-\kappa_1 \tau} - e^{-\kappa_2 \tau} + e^{-(\kappa_1 + \kappa_2)\tau}|_{\tau=0} = 0, \\
f^{(2)}(\tau)|_{\tau=0} &= \kappa_1 e^{-\kappa_1 \tau} + \kappa_2 e^{-\kappa_2 \tau} \\
&\quad - (\kappa_1 + \kappa_2) e^{-(\kappa_1 + \kappa_2)\tau}|_{\tau=0} = 0, \\
f^{(3)}(\tau)|_{\tau=0} &= -\kappa_1^2 e^{-\kappa_1 \tau} - \kappa_2^2 e^{-\kappa_2 \tau} \\
&\quad + (\kappa_1 + \kappa_2)^2 e^{-(\kappa_1 + \kappa_2)\tau}|_{\tau=0} = 2\kappa_1 \kappa_2, \\
f^{(4)}(\tau)|_{\tau=0} &= \kappa_1^3 e^{-\kappa_1 \tau} + \kappa_2^3 e^{-\kappa_2 \tau} \\
&\quad - (\kappa_1 + \kappa_2)^3 e^{-(\kappa_1 + \kappa_2)\tau}|_{\tau=0} \\
&\quad = -3(\kappa_1^2 \kappa_2 + \kappa_1 \kappa_2^2), \\
f^{(5)}(\tau)|_{\tau=0} &= -\kappa_1^4 e^{-\kappa_1 \tau} - \kappa_2^4 e^{-\kappa_2 \tau} \\
&\quad + (\kappa_1 + \kappa_2)^4 e^{-(\kappa_1 + \kappa_2)\tau}|_{\tau=0} \\
&\quad = 4\kappa_1^3 \kappa_2 + 6\kappa_1^2 \kappa_2^2 + 4\kappa_1 \kappa_2^3.
\end{aligned}$$

Prvé dve derivácie funkcie $f(\tau)$ sú nulové a teda vypadnú. Taylorov rozvoj zadefinovanej funkcie $f(\tau)$

rozvinieme do piateho rádu a dostávame

$$\begin{aligned} f &= f(0)+f^{(1)}(0)\tau+\frac{1}{2}f^{(2)}(0)\tau^2+\frac{1}{6}f^{(3)}(0)\tau^3 \\ &+\frac{1}{4!}f^{(4)}(0)\tau^4+\frac{1}{5!}f^{(5)}(0)\tau^5+\mathscr{O}(\tau^6) \\ &=\frac{1}{3}\kappa_1\kappa_2\tau^3-\frac{1}{8}(\kappa_1^2\kappa_2+\kappa_1\kappa_2^2)\tau^4 \\ &+\frac{1}{5!}(4\kappa_1^3\kappa_2+6\kappa_1^2\kappa_2^2+4\kappa_1\kappa_2^3)\tau^5+\mathscr{O}(\tau^6). \quad (12) \end{aligned}$$

Nakoniec výraz (12) dosadíme do výrazu (11). Rozdiel zlogaritmovaných cien dlhopisov $\ln P(r_1,r_2,\tau,\rho)-\ln P(r_1,r_2,\tau,0)$ môžeme aproximovať

$$\begin{aligned} &\rho\frac{\sigma_1\sigma_2}{\kappa_1\kappa_2}\left[\frac{1}{3}\kappa_1\kappa_2\tau^3-\frac{1}{8}(\kappa_1^2\kappa_2+\kappa_1\kappa_2^2)\tau^4\right. \\ &\left.+\frac{1}{5!}(4\kappa_1^3\kappa_2+6\kappa_1^2\kappa_2^2+4\kappa_1\kappa_2^3)\tau^5+\mathscr{O}(\tau^6)\right] \\ &\approx\rho\sigma_1\sigma_2\left(\frac{1}{3}\tau^3-\frac{1}{8}(\kappa_1+\kappa_2)\tau^4\right. \\ &\left.+\frac{2}{5!}(2\kappa_1^2+3\kappa_1\kappa_2+2\kappa_2^2)\tau^5\right). \quad (13) \end{aligned}$$

Experimentálny rád konvergencie (EOC) [3] predstavuje aproximáciu exponentu α v rovnici

$$|\ln P(.,\tau,\rho)-\ln P(.,\tau,0)|=\mathscr{O}(\tau^\alpha),\ \tau\to 0^+.$$

Hodnotu exponentu α môžeme odvodiť použitým nasledovného vzťahu

$$EOC_i=\frac{\ln(err_i)-\ln(err_{i+1})}{\ln(\tau_i)-\ln(\tau_{i+1})}, \quad (14)$$

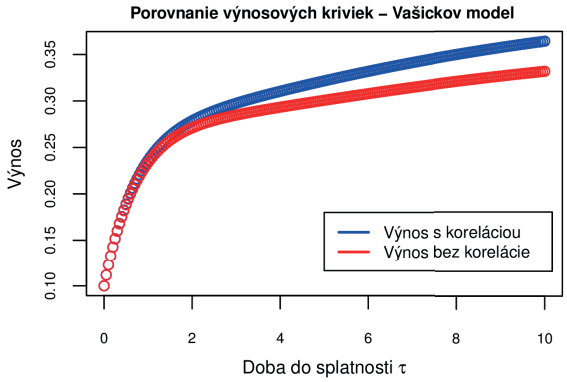
$$\text{kde}\quad err_i=|\ln P(.,\tau_i,\rho)-\ln P(.,\tau_i,0)|.$$

Vybrané hodnoty EOC pre Vašičkov model so zvolenými hodnotami parametrov uvádzame v tabuľke 1. Numericky, Tabuľka 1, aj analyticky (13) sme odvodili rád konvergencie, ktorého hodnota je 3.

Na Obr. 2 sme zobrazili výnosovú krivku Vašičkovho modelu s nenulovou koreláciou (modrá krivka) a výnosovú krivku Vašičkovho modelu s nulovou koreláciou medzi faktormi modelu (červená krivka). Môžeme si všimnúť, že pri parametroch definovaných na začiatku tejto podkapitoly, dlhopis, ktorý uvažuje nenulovú koreláciu medzi faktormi prináša vyšší výnos. Vyšší výnos značí, že výraz (11) je záporný, keďže výnos (6) má opačné znamienko ako logaritmus ceny, pre ktorý sme odvodili rozdiel (11).

τ	EOC
0.05	$2.963908 \approx 3$
0.5	2.778990
1	2.609293
2.5	2.214168
5	1.816951

Tabuľka 1: Experimentálny rád konvergencie - Vašičkov model.



Obr. 2: Porovnanie výnosových kriviek Vašičkovho modelu.

V tabuľke 2 uvádzame niekoľko hodnôt výnosov dlhopisov s rôznymi dobami splatnosti. Výnos dlhopisu pre Vašičkov model s nenulovou koreláciou označíme $\mathrm{R}(\rho\neq 0)$, výnos dlhopisu v modeli bez korelácie označíme $\mathrm{R}(\rho=0)$. Tento krátky náhľad naznačuje rast rozdielu medzi výnosmi modelov vzhľadom na zvolené parametre na začiatku tejto podkapitoly, ktorý sme vykreslili aj na Obr. 2 pre všetky hodnoty maturity. Hodnoty výnosov vychádzajú z rovnakého bodu, t.j. $R_t=0.1$. Pri takto zvolených parametroch môžeme pozorovať, že rozdiel medzi výnosmi rastie.

τ	Výnos $\mathrm{R}(\rho\neq 0)$	Výnos $\mathrm{R}(\rho=0)$
0	0.1	0.1
0.5	0.1890894	0.1882713
1	0.2364150	0.2337050
5	0.3216153	0.3007283
10	0.3640868	0.3316262

Tabuľka 2: Výnosy dlhopisov Vašičkovho modelu.

3 Fong-Vašičkov model so stochastickou volatilitou

Ďalším modelom triedy dvojfaktorových modelov je Fong-Vašičkov model so stochastickou volatilitou. Tento model bol prvýkrát publikovaný v článku [2] v roku 1991. Model je pomenovaný po autoroch článku H. Gifford Fong a Oldrich A. Vasicek. Fong-Vašičkov model je založený na pozorovaní, že volatilita úrokovej miery nie je nutne konštantná. Prvý stochastický proces patrí okamžitej úrokovej miere r_t ako prvému faktoru modelu. Tento proces, na rozdiel od Vašičkovho modelu, závisí aj od druhého faktora. Druhým faktorom je stochastická volatilita y.

Vo Fong-Vašičkovom modeli je zachytený vývoj oboch faktorov systémom stochastických diferenciálnych rovníc

$$dr = \kappa_1(\theta_1 - r)dt + \sqrt{y}dw_1,$$
$$dy = \kappa_2(\theta_2 - y)dt + v\sqrt{y}dw_2.$$

Ako v prípade Vašičkovho modelu, najprv uvažujeme model s koreláciou, t.j. naviac predpokladáme $E(dw_1, dw_2) = \rho dt$. Trhovú mieru rizika v tomto modeli definujeme ako $\lambda_1\sqrt{y}$, resp. $\lambda_2\sqrt{y}$, kde λ_1, λ_2 sú konštanty. Následne dostávame parciálnu diferenciálnu rovnicu pre cenu dlhopisu $P(r,y,\tau)$

$$-\frac{\partial P}{\partial \tau} + [\kappa_1(\theta_1 - r) - \lambda_1 y]\frac{\partial P}{\partial r} + [\kappa_2(\theta_2 - y) - \lambda_2 v y]\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{y}{2}\frac{\partial^2 P}{\partial r^2} + \frac{v^2 y}{2}\frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \rho v y \frac{\partial^2 P}{\partial r \partial y} - rP = 0. \quad (15)$$

Počiatočná podmienka je v tvare $P(r,y,0) = 1$.

V článku [2] je riešenie rovnice (15) definované v separovanom tvare

$$P(r,y,\tau) = A(\tau)\mathrm{e}^{-B_1(\tau)r - B_2(\tau)y}. \quad (16)$$

Z počiatočnej podmienky $P(r,y,0) = 1$ vyplýva, že pre funkcie A, B_1 a B_2 platí $A(0) = 1$, $B_1(0) = 0$ a $B_2(0) = 0$. Definovaná cena dlhopisu v tvare (16) je východiskom pre mnohé postupy hľadania časovej štruktúry úrokovej miery, ako napríklad [4]. V našej práci zvolíme postup uvedený v [6]. Z (16) odvodíme parciálne derivácie, ktoré vystupujú v rovnici (15). Následne spätne dosadíme odvodené parciálne derivácie do rovnice (15). V rovnici zlúčime výrazy, ktoré prislúchajú k faktoru r a prislúchajúce k faktoru y. Z platnosti identity (15) potom dostávame systém obyčajných diferenciálnych rovníc

$$\dot{A}(\tau) = -A(\tau)(\kappa_1\theta_1 B_1(\tau) + \kappa_2\theta_2 B_2(\tau)), \quad (17)$$
$$\dot{B_1}(\tau) = 1 - \kappa_1 B_1(\tau), \quad (18)$$
$$\dot{B_2}(\tau) = -\lambda_1 B_1(\tau) - \kappa_2 B_2(\tau) - \lambda_2 v B_2(\tau) - \frac{B_2^2(\tau)}{2} - \frac{v^2 B_2^2(\tau)}{2} - v\rho B_1(\tau)B_2(\tau). \quad (19)$$

V nasledujúcej časti sa bližšie pozrieme na tento systém rovníc a uvedieme jeho riešenie. Obyčajná diferenciálna rovnica (18) pre $B_1(\tau)$ je lineárna a nezávisí od ostatných dvoch funkcií $A(\tau)$, $B_2(\tau)$. Hneď dostávame explicitné riešenie

$$B_1(\tau) = \frac{1}{\kappa_1}(1 - \mathrm{e}^{-\kappa_1\tau}). \quad (20)$$

Rovnicu (19) pre funkciu $B_2(\tau)$ vieme riešiť numericky Runge-Kutta metódou. Najprv do rovnice

$$\dot{B_2}(\tau) = -\lambda_1 B_1(\tau) - \frac{B_1^2(\tau)}{2} - [\kappa_2 + \lambda_2 v + v\rho B_1(\tau)]B_2(\tau) - \frac{v^2 B_2^2(\tau)}{2} \quad (21)$$

dosadíme nájdené riešenie funkcie $B_1(\tau)$ a potom aplikujeme explicitnú Runge-Kutta metódu. Nakoniec pristúpime k integrácii rovnice (17) pre funkciu $A(\tau)$. Do tejto rovnice dosadíme riešenia funkcií $B_1(\tau)$ a $B_2(\tau)$. Riešenie rovnice (17) uvádzame v tvare

$$\ln A(\tau) = -\theta_1\tau + \theta_1 B_1(\tau) - \kappa_2\theta_2 \int_0^\tau B_2(s)\,\mathrm{d}s. \quad (22)$$

Časová štruktúra úrokovej miery je potom vyjadrená ako

$$R(r,y,t) = -\frac{\ln \mathrm{A}(\tau)}{\tau} + \frac{B_1(\tau)}{\tau}r + \frac{B_2(\tau)}{\tau}y.$$

Funkcie $\ln\mathrm{A}(\tau)$, $B_1(\tau)$, $B_2(\tau)$ sú dané vzťahmi (22), (20) a integrovaním výrazu (21).

V prípade nulovej korelácie pracujeme s nasledovnými rovnicami

$$\dot{A}(\tau) = -A(\tau)(\kappa_1\theta_1 B_1(\tau) + \kappa_2\theta_2 B_2(\tau)), \quad (23)$$
$$\dot{B_1}(\tau) = 1 - \kappa_1 B_1(\tau),$$
$$\dot{B_2}(\tau) = -\lambda_1 B_1(\tau) - [\kappa_2 + \lambda_2 v]B_2(\tau) - \frac{B_1^2(\tau)}{2} - \frac{v^2 B_2^2(\tau)}{2},$$

ktorých riešenie dostávame v tvare

$$\ln P(r,y,\tau,0) = \ln \tilde{A}(\tau) - B_1(\tau)r - \tilde{B}_2(\tau)y.$$

Funkcia B_1 je daná vzťahom (20), funkciu $\tilde{B}_2$ riešime numericky, opäť Runge-Kutta metódou. Nakoniec integrovaním rovnice (23) dostávame funkciu $\ln \tilde{A}$ v tvare

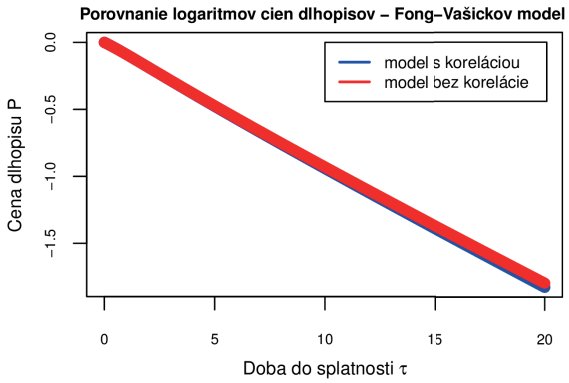
$$\ln \tilde{A}(\tau) = -\theta_1 \tau + \theta_1 B_1(\tau) - \kappa_2 \theta_2 \int_0^\tau \tilde{B}_2(s)\,\mathrm{d}s.$$

3.1 Vplyv korelácie vo Fong-Vašíčkovom modeli

V tejto časti určíte aproximáciu rozdielu logaritmov cien dvojfaktorového Fong-Vašičkovho modelu

$$\ln P(r,y,\tau,\rho) - \ln P(r,y,\tau,0). \tag{24}$$

Pre lepšiu predstavu, ako sa správajú logaritmy cien dlhopisov $\ln P(r,y,\tau,\rho)$ a $\ln P(r,y,\tau,0)$, predkladáme čitateľovi Obr.3. Na vykreslenie kriviek na Obr.3 sme zvolili nasledujúce parametre modelu $\kappa_1 = 0.109, \theta_1 = 0.0652, \lambda_1 = -12, \kappa_2 = 1.482, \theta_2 = 0.000264, \lambda_2 = -5, v = 0.01934, \rho = -0.8$, ktorými budeme ďalej ilustrovať dosiahnuté výsledky. Ako obrázok referuje, pri zvolených parametroch hodnoty logaritmu ceny dlhopisu v modeli s koreláciou sú takmer totožné s hodnotami logaritmov cien bez korelácie pre dané hodnoty maturity.



Obr. 3: Logaritmus cien dlhopisov vo Fong-Vašičkovom modeli.

Tento nepatrný rozdiel cien môže byť spôsobený aj voľbou parametrov. Preto sa ďalej zameriame na analytické vyjadrenie rozdielu (24) pre všeobecne zvolené parametre. Využijeme vzťahy, ktoré sme odvodili vyššie

$$\ln P(r,y,\tau,\rho) = \ln A(\tau) - B_1(\tau)r - B_2(\tau)y,$$
$$\ln P(r,y,\tau,0) = \ln \tilde{A}(\tau) - B_1(\tau)r - \tilde{B}_2(\tau)y.$$

Ak si dobre všimneme, funkcia $B_1(\tau)$ daná vzťahom (20) nezávisí od korelácie ρ, ale funkcia $B_2(\tau)$ ako riešenie (21) už závisí. Vo výraze (22) vystupuje výraz $B_2(\tau)$, takže funkcia $A(\tau)$ tiež závisí od korelácie ρ.

Po zjednodušení rovnice (24) dostávame výraz

$$\ln P(r,y,\tau,\rho) - \ln P(r,y,\tau,0) = \kappa_2\theta_2 \int_0^\tau (\tilde{B}_2(s) - B_2(s))\,\mathrm{d}s + y(\tilde{B}_2(\tau) - B_2(\tau)). \tag{25}$$

S výrazom (25) budeme ďalej pracovať ako s funkciou od τ, t.j.

$$g(\tau) = \kappa_2\theta_2 \int_0^\tau (\tilde{B}_2(s) - B_2(s))\,\mathrm{d}s + y(\tilde{B}_2(\tau) - B_2(\tau)). \tag{26}$$

Hodnota funkcie $g(\tau)$ v bode 0 je rovná 0, čo ľahko overíme dosadením hodnoty 0 do predpisu funkcie g (26). Ďalej si vyjadríme derivácie funkcie $g(\tau)$ v bode nula. Ako notáciu derivácie si volíme horný index, v ktorom uvádzame rad derivácie.

Funkciu $g(\tau)$ derivujeme podľa premennej τ. Táto funkcia obsahuje integrál, kde premenná τ vystupuje na jeho hranici. Takisto obsahuje dve funkcie B_1, B_2 závislé od τ. Na derivovanie integrálu podľa jednej z jeho hranice využívame identitu, ktorá je v literatúre známa ako základná veta kalkulu [5].

Jednotlivé derivácie funkcií B_1, B_2, $\tilde{B}_1$, $\tilde{B}_2$ v bode 0 uvádzame v Tabuľka 3.

Cieľom tabuľky 3 je prehľadnejšie vyjadriť derivácie funkcií B_i, $\tilde{B}_i$, $i = 1,2$, ktoré budeme ďalej dosadzovať do derivácii funkcie g. Teraz pristúpime k samotným deriváciám v bode 0.

Derivácia	0	1	2	3	4
$B_1(\tau)\|_{\tau=0}$	0	1	$-\kappa_1$	κ_1^2	$-\kappa_1^3$
$\tilde{B_1}(\tau)\|_{\tau=0}$	0	1	$-\kappa_1$	κ_1^2	$-\kappa_1^3$
$B_2(\tau)\|_{\tau=0}$	0	0	$-\lambda_1$	$\lambda_1\kappa_1+\lambda_1(\kappa_2+\lambda_2 v)-1$	$-\lambda_1\kappa_1^2-(\kappa_2+\lambda_2 v)B_2^{(3)}(0)+3\kappa_1+3\rho v\lambda_1$
$\tilde{B_2}(\tau)\|_{\tau=0}$	0	0	$-\lambda_1$	$\lambda_1\kappa_1+\lambda_1(\kappa_2+\lambda_2 v)-1$	$-\lambda_1\kappa_1^2-(\kappa_2+\lambda_2 v)B_2^{(3)}(0)+3\kappa_1$

Tabuľka 3: Derivácie funkcií B_1, B_2, $\tilde{B_1}$, $\tilde{B_2}$ do radu 4.

- Prvá derivácia funkcie $g(\tau)$

$$\begin{aligned} g^{(1)}(\tau)|_{\tau=0} &= \kappa_2\theta_2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\left[\int_0^\tau\left(\tilde{B_2}(s)-B_2(s)\,\mathrm{d}s\right)\right] \\ &\quad + y\left(\tilde{B_2}^{(1)}(\tau)-B_2^{(1)}(\tau)\right)|_{\tau=0} \\ &= \kappa_2\theta_2\left(\tilde{B_2}(\tau)-B_2(\tau)\right) \\ &\quad + y\left(\tilde{B_2}^{(1)}(\tau)-B_2^{(1)}(\tau)\right)|_{\tau=0}=0 \end{aligned}$$

- Druhá derivácia funkcie $g(\tau)$

$$\begin{aligned} g^{(2)}(\tau)|_{\tau=0} &= \kappa_2\theta_2\left(\tilde{B_2}^{(1)}(\tau)-B_2^{(1)}(\tau)\right) \\ &\quad + y\left(\tilde{B_2}^{(2)}(\tau)-B_2^{(2)}(\tau)\right)|_{\tau=0}=0 \end{aligned}$$

- Tretia derivácia funkcie $g(\tau)$

$$\begin{aligned} g^{(3)}(\tau)|_{\tau=0} &= \kappa_2\theta_2\left(\tilde{B_2}^{(2)}(\tau)-B_2^{(2)}(\tau)\right) \\ &\quad + y\left(\tilde{B_2}^{(3)}(\tau)-B_2^{(3)}(\tau)\right)|_{\tau=0}=0 \end{aligned}$$

- Štvrtá derivácia funkcie $g(\tau)$

$$\begin{aligned} g^{(4)}(\tau)|_{\tau=0} &= \kappa_2\theta_2\left(\tilde{B_2}^{(3)}(\tau)-B_2^{(3)}(\tau)\right) \\ &\quad + y\left(\tilde{B_2}^{(4)}(\tau)-B_2^{(4)}(\tau)\right)|_{\tau=0} \end{aligned}$$

Rozdiel $\left(\tilde{B_2}^{(4)}(\tau)-B_2^{(4)}(\tau)\right)$, ktorý vystupuje v 4. derivácií, je nenulový. Dostávame teda

$$g^{(4)}(\tau)|_{\tau=0} = -3\rho v\lambda_1 y.$$

- Piata derivácia funkcie $g(\tau)$

$$\begin{aligned} g^{(5)}(\tau)|_{\tau=0} &= \kappa_2\theta_2\left(\tilde{B_2}^{(4)}(\tau)-B_2^{(4)}(\tau)\right) \\ &\quad + y\left(\tilde{B_2}^{(5)}(\tau)-B_2^{(5)}(\tau)\right)|_{\tau=0} \end{aligned}$$

Pre deriváciu 5. rádu uvažujme rozdiel

$$\begin{aligned} \left(\tilde{B_2}^{(5)}(0)-B_2^{(5)}(0)\right) &= -\rho v[10\kappa_1\lambda_1 \\ &\quad +4\lambda_1(\kappa_2+\lambda_2 v)-4]. \end{aligned}$$

Dosadením výrazu do predpisu funkcie $g^{(5)}(\tau)|_{\tau=0}$ získavame

$$\begin{aligned} g^{(5)}(\tau)|_{\tau=0} &= -\rho v[3\lambda_1\kappa_2\theta_2+10\lambda_1\kappa_1 \\ &\quad +4\lambda_1(\kappa_1+\lambda_2 v)-4]y. \end{aligned}$$

Rovnakým postupom by sme sa dopracovali k deriváciám vyššieho rádu. Taylorov rozvoj rozvinieme do 5. rádu a teda funkciu $g(\tau)$ vyjadríme nasledovne

$$\begin{aligned} g(\tau) &= -\frac{3}{4!}\rho v\lambda_1 y\tau^4-\frac{1}{5!}\rho v[3\lambda_1\kappa_2\theta_2+10\lambda_1\kappa_1 \\ &\quad +4\lambda_1(\kappa_1+\lambda_2 v)-4]y+\mathcal{O}(\tau^6). \end{aligned}$$

Nakoniec dostávame aproximáciu rozdielu (24) v tvare

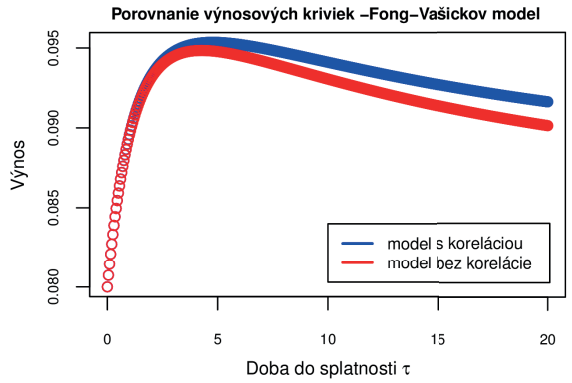
$$\begin{aligned} &\ln P(r,y,\tau,\rho)-\ln P(r,y,\tau,0) = -\frac{3\rho v\lambda_1 y}{4!}\tau^4 \\ &-\frac{\rho v(3\lambda_1\kappa_2\theta_2+10\lambda_1\kappa_1+4\lambda_1(\kappa_1+\lambda_2 v)-4)y}{5!}\tau^5 \\ &+\mathcal{O}(\tau^6) \\ &\approx -\frac{3\rho v\lambda_1 y}{4!}\tau^4 \\ &-\frac{\rho v(3\lambda_1\kappa_2\theta_2+10\lambda_1\kappa_1+4\lambda_1(\kappa_1+\lambda_2 v)-4)y}{5!}\tau^5. \end{aligned}$$

Ako v prípade dvojfaktorového Vašičkovho modelu, pre zvolené parametre uvádzame vybrané hodnoty EOC, definovaný ako (14). V nasledujúcej tabuľke si môžeme všimnúť, že pre veľmi malé maturity, t. j. $\tau\to 0^+$, dostávame hodnotu exponentu α rovnú číslu 4.

τ	EOC
0.05	$3.912510 \approx 4$
0.5	3.620817
1	3.336838
2.5	2.703289
5	2.127923

Tabuľka 4: Experimentálny rád konvergencie - Fong-Vašičkov model.

Na Obr. 4 sme zobrazili výnosovú krivku Fong-Vašičkovho modelu s nenulovou koreláciou (modrá krivka) a výnosovú krivku Fong-Vašičkovho modelu s nulovou koreláciou medzi faktormi modelu (červená krivka). Zvolili sme rovnaké parametre modelu ako pre Obr. 3. Výnosové krivky vykazujú tvar "humped". Táto krivka sa v ekonomike vyskytuje vtedy, keď dlhopisy so strednedlhou dobou splatnosti majú najvyšší výnos. Hodnoty výnosu najprv rastú a v okolí hodnoty maturity 5 nadobudnú svoju najvyššiu hodnotu a začnú pozvoľna klesať.



Obr. 4: Porovnanie výnosových kriviek vo Fong-Vašičkovom modeli.

V tabuľke 5 uvádzame vybrané hodnoty výnosov dlhopisov s rôznymi dobami splatnosti. Výnos dlhopisu pre dvojfaktorový Fong-Vašičkov model s koreláciou označíme $\mathrm{R}(\rho \neq 0)$, výnos dlhopisu v modeli bez korelácie označíme $\mathrm{R}(\rho = 0)$. Hodnoty výnosov začínajú v $\tau = 0$, kde je hodnota výnosu $R_t = 0.8$. Pri takto zvolených parametroch modelu môžeme pozorovať, že rozdiel medzi výnosmi aj v tomto prípade rastie.

τ	Výnos $\mathrm{R}(\rho \neq 0)$	Výnos $\mathrm{R}(\rho = 0)$
0	0.08	0.08
0.5	0.08593009	0.08592467
1	0.08958380	0.08955235
5	0.09534267	0.09477398
10	0.09410566	0.09305177

Tabuľka 5: Výnos dlhopisov vo Fong-Vašičkovom modeli.

4 Záver

V príspevku sme sa zaoberali modelovaním okamžitej úrokovej miery pomocou dvoch stochastických diferenciálnych rovníc, teda pracujeme s dvojfaktorovými short rate modelmi. Cieľom tejto práce bolo numericky a analyticky odvodiť vplyv korelácie medzi faktormi na ceny dlhopisov v dvojfaktorových modeloch. V celej práci sme vychádzali z predpokladu, že korelácia medzi faktormi je konštantná. Ako prvý model sme zobrali Vašičkov model, pre ktorý sme odvodili rozdiel cien dlhopisu v závislosti od uvažovaní korelácie ako rozdiel rádu 3. Druhý model, Fong-Vašičkov, vykazoval rozdiel rádu 4. Tieto malé rozdiely v radoch modelov sme odvodili analyticky, aj numericky.

Literatúra

[1] BRIGO, D., MERCURIO, F.: *Interest Rate Models - Theory and Practice: With Smile, Inflation and Credit*, Springer, 2007.

[2] FONG, H.G., VASICEK, O.A.: *Fixed-Income Volatility Management*, Journal of Portfolio Management, 1991, pp. 41-56.

[3] LEVEQUE, R. J.: *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations:Steady-State and Time-Dependent Problems*, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2007, pp. 255.

[4] SELBY, M., STRICKLAND, C.: *Computing the Fong and Vasicek Pure Discount Bond Price Formula*, Journal of Fixed Income, 1995.

[5] STRANG G.: *Calculus*, Massachusetts Institute of Technology, 1991.

[6] ŠEVČOVIČ, D., STEHLÍKOVÁ, B., MIKULA, K.: *Analytické a numerické metódy oceňovania finančných derivátov*, Slovenská technická univerzita v Bratislave, 2009.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 9–18
ISBN 978-8081470882, © 2018 Jakub Bahyl

Vortex filament dynamics in quantum system

Jakub Bahyl[1*]

Supervisor: Emil Varga[2†]

[1] FMFI UK, Mlynská Dolina 842 48 Bratislava
[2] Katedra fyziky nízkych teplot, MFF UK, V Holešovičkách 747/2 Praha 8

Abstract: We present a numerical method to compute the evolution of vortex filaments in superfluid Helium II. The method is based on a Biot-Savart law and Local Induction Approximation. We test the method and its properties for a ring-shaped vortex configuration.

Keywords: Superfluidity · Vortex filament · Quantum vortex ring

1. Introduction to superfluidity

The liquid state of ^{4}He exists in two phases:
He-I ($T > 2.17\,\mathrm{K}$) and He-II ($T < 2.17\,\mathrm{K}$). These two phases are connected with the *lambda transition*, which occurs at the critical temperature $T_\lambda = 2.17\,\mathrm{K}$. He-I is a classical fluid described by ordinary Navier-Stokes equation, whereas He-II indicates the Bose-Einstein condensate (superfluid) in much more way and therefore is described by complicated motion equations.

Hydrodynamics of He-II

A simple phenomenological model of the He-II motion was proposed by Tisza and Landau [1][2] - the *two-fluid model*. This model depicts He-II as a mixture of two interpenetrating fluid components:

- normal component - density ρ_n, velocity field $\mathbf{v}_n$, ordinary viscous N-S equation of motion, carrying entropy and thermal excitations
- superfluid component - density ρ_s, velocity field $\mathbf{v}_s$, modified Euler equation (without viscosity) of motion by quantum terms, no entropy, represented by macroscopic wave function

The total density of He-II sums up to $\rho = \rho_n + \rho_s$ and the relative proportion of normal/superfluid component is determined by the temperature. Near $T \to 0$ Helium II becomes entirely superfluid $\rho_s/\rho \to 1$.

*bahylkubo@gmail.com
†varga.emil@gmail.com

According to experimental data [3] and Landau's microsocopic theory, the dependence of fractional densities on temperature is sketched in **Figure 1**.

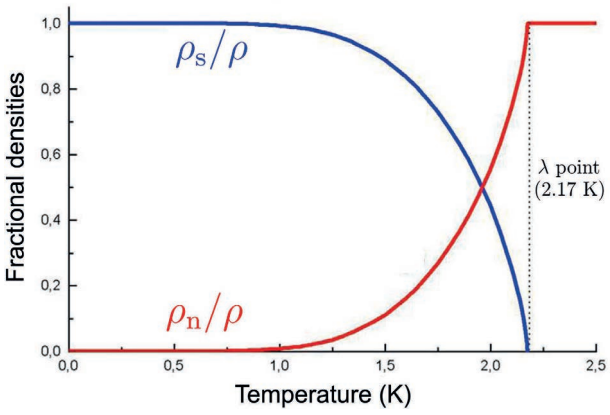


Figure 1: Temperature dependence of fractional densities of the normal (red) and superfluid (blue) components. Source: [4]

It arises from the quantum nature of superfluid, that superfluid component is *irrotational*: $\nabla \times \mathbf{v}_s = \mathbf{0}$. However, the circulation is *quantised* with the magnitude $\kappa = 9.97 \times 10^{-4}\,\mathrm{cm}^2 \cdot \mathrm{s}^{-1}$ and so-called *quantised vortices* can be created (**Figure 2**) when Helium II rotates or moves faster than a critical velocity.

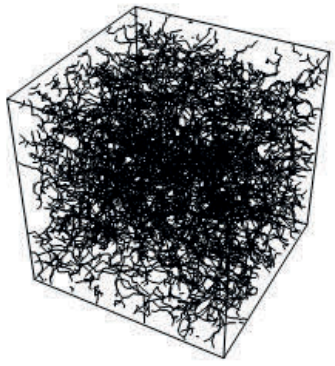


Figure 2: Cube of numerically simulated tangle of randomly distributed quantised vortices. Source: [4]

In classical fluid dynamics, one of the useful numeric tools is the *vortex filament model*. With the rapid development of computational power, large simulations have become the methods of choice for calculating the motion of fluids. Particularly in superfluids like He-II, due to the quantised circulation, vorticity can only exist within vortex filament with a certain core size, which makes the model a way simpler and applicable than in fields of classical fluids.

Quantum vortex

The key properties of Feynman's [5] quantised vortex are the quantized circulation $\varkappa$, superfluid rotational velocity field $\mathbf{v}_s(\mathbf{r})$ and the *vortex core parameter* $a_0 \approx 10^{-10}\,\mathrm{m} = 1\,\text{Å}$, which represents the characteristic distance over which superfluid density ρ_s drops from bulk value to zero. (a vortex radius)

A special case of vortex line configuration is a freely moving *vortex ring* (**Figure 3**). Such rings are usually created as a result of multi-vortex interconnection and have limited life expectancy. The exact expressions derived by classical hydrodynamics [7] for the energy E_{ring} and center velocity v_{ring}, moving in a He-II of density ρ and having a radius R much greater than its core radius $R >> a_0$, are

$$E_{\text{ring}} = \frac{1}{2}\varkappa^2 \rho R\Big(\ln(8R/a_0) - 2 + c\Big) \qquad (1)$$

$$v_{\text{ring}} = \frac{\varkappa}{4\pi R}\Big(\ln(8R/a_0) - 1 + c\Big), \qquad (2)$$

where c is a constant based on inner structure of the vortex. Since we assume a hollow core, $c = 0$. Equations (1), (2) apply only for temperature $T = 0$. In a real case $T > 0$, there are dissipation processes caused by the *mutual friction* with a fluid around and velocity (2) scales with $(1 - \alpha')$, where α' is a temperature dependent friction constant.

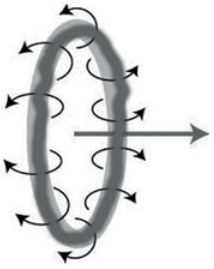


Figure 3: Depiction of quantized vortex ring motion and induced velocity field. Source: internet

2. Vortex filament model

The vortex line can be represented as a curve with positional vector $\mathbf{s} = \mathbf{s}(\xi, t)$ in a three-dimensional space. Here, ξ is an arclength along the vortex line. Next we label $\mathbf{s}' \equiv \mathrm{d}\mathbf{s}/\mathrm{d}\xi$ and $\mathbf{s}'' \equiv \mathrm{d}\mathbf{s}'/\mathrm{d}\xi$. In our context, $\mathbf{s}'$ is a tangent vector and $|\mathbf{s}''|$ is a local curvature R^{-1} at a given point. The triad of vectors $\mathbf{s}'$, $\mathbf{s}''$, $\mathbf{s}' \times \mathbf{s}''$ are perpendicular to each other (**Figure 4**) and work as tangent, normal and binormal, respectively:

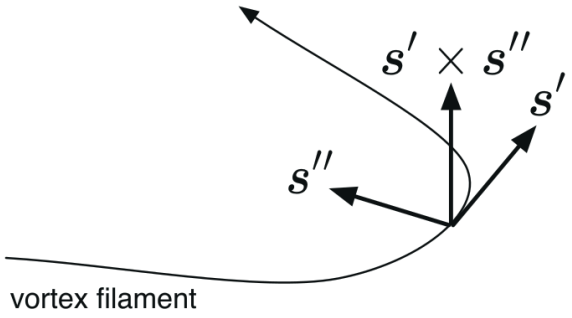


Figure 4: Schematic of the vortex filament and the triad vectors $\mathbf{s}'$, $\mathbf{s}''$, $\mathbf{s}' \times \mathbf{s}''$. Source: [6]

We suppose that the superfluid component is incompressible $\nabla \cdot \mathbf{v}_s = 0$ and the vorticity ω_s is localised and quantised $\omega_s(\mathbf{s}, t) = \nabla \times \mathbf{v}_s = \varkappa$. Combining these two properties and using a Fourier transformation, one obtains [8] the Biot-Savart law for the induced superfluid velocity in space:

$$\mathbf{v}_s(\mathbf{r}) = \frac{\varkappa}{4\pi}\int_{\mathscr{L}} \frac{(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \times \mathrm{d}\mathbf{r}'}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^3}, \qquad (3)$$

where the integral path $\mathscr{L}$ goes along the entire vortex filament. Now we define the *self-induced* velocity $\mathbf{v}_{\text{ind}}$, describing the motion which a vortex line induces onto itself ($\mathbf{r} = \mathbf{s}$) due to its own curvature.

However, this integral diverges as $\mathbf{r}' \to \mathbf{s}$ because the core structure of the quantized vortex was neglected. We avoid this divergence by splitting the integral (3) into two parts - direct neighbourhood of the point $\mathbf{s}$ (local part) and the rest $\mathscr{L}'$ (nonlocal part) $\mathbf{v}_{\text{ind}} = \mathbf{v}_{\text{ind,local}} + \mathbf{v}_{\text{ind,nonlocal}}$.

The Taylor expansion of the local part leads to a finite result:

$$\mathbf{v}_{\text{ind}} \approx \beta \mathbf{s}' \times \mathbf{s}'' + \frac{\varkappa}{4\pi}\int_{\mathscr{L}'} \frac{(\mathbf{r}' - \mathbf{s}) \times \mathrm{d}\mathbf{r}'}{|\mathbf{r}' - \mathbf{s}|^3}, \qquad (4)$$

where $\beta = (\varkappa/4\pi)\ln(R/a_0)$ and $\mathscr{L}'$ is the original vortex line without a close area of the studied vortex point. R is a *local curvature* and often is calculated as $1/|\mathbf{s}''|$.

The local part of induced velocity is called as *Local Induction Approximation* (LIA).

Vortex dynamics

To determine the equation of motion of $\mathbf{s}(t)$ we recognize the forces acting upon the line - the magnus force $\mathbf{f}_M$ and the drag force $\mathbf{f}_D$ (both are per unit length). Also we note that we expect no external sources of normal nor superfluid flow and all fllowing equations are derived assuming this premise.

The magnus force arises when a vortex line with circulation quantum $\varkappa$ rotates and moves in a flow:

$$\mathbf{f}_M = \rho_s \varkappa \mathbf{s}' \times (\dot{\mathbf{s}} - \mathbf{v}_{\text{ind}}), \tag{5}$$

where $\dot{\mathbf{s}} \equiv \mathrm{d}\mathbf{s}/\mathrm{d}t$ is the velocity of a particular point on a vortex line.

The drag force $\mathbf{f}_D$ arises from the *mutual friction*, the interaction between the normal component $\mathbf{v}_n$ and rotational superfluid component $\mathbf{v}_s$. This force was experimentally derived by Vinen and Hall [9]:

$$\mathbf{f}_D = \alpha(T)\rho_s \varkappa \mathbf{s}' \times [\mathbf{s}' \times \mathbf{v}_{\text{ind}}] \tag{6}$$
$$+\alpha'(T)\rho_s \varkappa \mathbf{s}' \times \mathbf{v}_{\text{ind}} \tag{7}$$

The temperature dependent dimensionless parameters $\alpha(T)$ and $\alpha'(T)$ are known from another experiments of Samuels and Donnelly [10].

Since the mass of vortex core is neglected, the two forces $\mathbf{f}_M$ and $\mathbf{f}_D$ sum up into zero: $\mathbf{f}_M + \mathbf{f}_D = \mathbf{0}$. Hence, solving for $\mathrm{d}\mathbf{s}/\mathrm{d}t$, we obtain the Schwarz's equation:

$$\dot{\mathbf{s}} = \mathbf{v}_{\text{ind}} - \alpha \mathbf{s}' \times \mathbf{v}_{\text{ind}} + \alpha' \mathbf{s}' \times [\mathbf{s}' \times \mathbf{v}_{\text{ind}}], \tag{8}$$

On the basis of Schwarz's equation (8), algorithms to numerically simulate vortex time evolution of an arbitrary configuration can be developed. Also, the vortex parametrisation $\mathbf{s}(\xi, t)$ and dynamics description provide the baseline of what we call as Vortex Filament model (VF).

3. Simulation

This part of work serves as a brief documentation for the `PyVort` codebase, a new platform to simulate quantum vortex rings. The code is written in well commented Python 3 and arranged in a modular structure. The aim is to highlight which module(s) are involved and how they work.

All pieces of the Python code can be found in `src/` and they are executable with `main.py`. The entire project is open-source and can be found as a public GitHub repository.

At present, we use infinite boundary conditions with no external flow sources. Therefore, only closed-loop self-induced vortices can be realized using simulation. However, the codebase is flexible and supports the future implementation of unclosed loops.

Implementation of VF model

Superfluid vortex filament is represented by a series of mesh points (segments) distributed along the centerline of the filament (**Figure 5**). The motion of the whole VF is summed up by the motion of each mesh point.

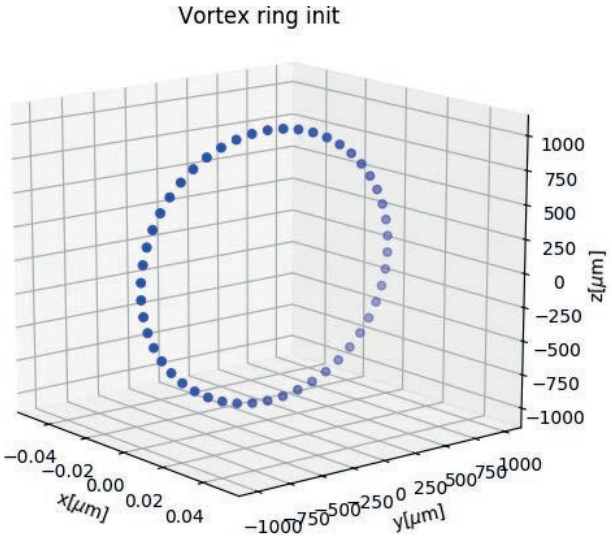


Figure 5: Visualisation of vortex ring segments right after their initialisation.

Each segment is defined by its coordinates $\mathbf{s}_i$ and its direct neighbour indices (previous $(i-1)$ and next $(i+1)$). This resolves in a directed digraph, which is used as an initial data structure.

Next we define the tangent vector $\mathbf{s}'$, normal vector $\mathbf{s}''$, and binormal vector $\mathbf{s}' \times \mathbf{s}''$ by taking numerical derivatives, achieved using Finite Differences method, a common approximative numerical method.

Finite differences

Choosing a particular segment with position $\mathbf{s}_i$, we define the distance to the particle in-front $\mathbf{s}_{i+1}$ as $l_i = |\mathbf{s}_i - \mathbf{s}_{i+1}|$ and the distance to the particle behind $\mathbf{s}_{i-1}$ as $l_{i-1} = |\mathbf{s}_{i-1} - \mathbf{s}_i|$ (**Figure 6**). Similarly, we can define the l_{i+1} and l_{i-2} for the farther segment lines.

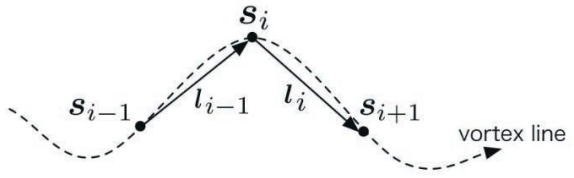


Figure 6: Depiction of i-th segment vector and its corresponding lengths. Source: [6]

We then approximate all the spatial derivatives $\mathbf{s}_i'$, $\mathbf{s}_i''$ by a fourth-order finite difference method (FD4), which can also account the varying distances along the VF. With this, the first and second derivatives can be obtained using Taylor's expansion based on coordinates of 2 closest neigbours (on each side):

$$\frac{\mathrm{d}^n \mathbf{s}_i}{\mathrm{d}\xi^n} \approx A_i \mathbf{s}_{i-2} + B_i \mathbf{s}_{i-1} + C_i \mathbf{s}_i + D_i \mathbf{s}_{i+1} + E_i \mathbf{s}_{i+2} \quad (9)$$

Calculation of coefficients A, B, C, D, E in code is done directly using the analytical solution of *Vandermonde matrix* invertion. This invertion can be done also numerically, which is a more scalable way of implementation, however, this method often meets with problems when the Vandermonde matrix becomes singular.

Biot-Savart discretisation

As showed earlier, the equation of motion for given segment is given directly by Schwarz's equation(8):

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{s}_i}{\mathrm{d}t} = \mathbf{v}_{\mathrm{ind}}^{(i)} + \mathbf{v}_{\mathrm{drive}}^{(i)} \quad (10)$$

The first difficulty in the VF model comes from the calculation of term $\mathbf{v}_{\mathrm{ind}}$. We suggested previously (4), this advection term can be split into the LIA part and a reduced Biot-Savart integral:

$$\mathbf{v}_{\mathrm{ind}}^{(i)} = \mathbf{v}_{\mathrm{LIA}}^{(i)} + \mathbf{v}_{\mathrm{BIOT}}^{(i)} \quad (11)$$

Using a geometrical approach for estimating the local curvature R, one can derive [11]:

$$\mathbf{v}_{\mathrm{ind}}^{(i)} = \frac{\varkappa}{4\pi}(\mathbf{s}_i' \times \mathbf{s}_i'') \ln\left(\frac{2\sqrt{l_{i-1} l_i}}{a}\right) \quad (12)$$

$$+ \frac{\varkappa}{4\pi} \int_{\mathscr{L}'} \frac{(\mathbf{r}' - \mathbf{s}_i) \times \mathrm{d}\mathbf{r}'}{|\mathbf{r}' - \mathbf{s}_i|^3}, \quad (13)$$

where l_{i-1} and l_i are the arc lengths of the curve between points $\mathbf{s}_{i-1}$ and $\mathbf{s}_i$ and between $\mathbf{s}_i$ and $\mathbf{s}_{i+1}$ respectively, as shown in **Figure 6**.

Filament discretisation allows the Biot-Savart integral to be rewritten into the sum of single-line contributions (**Figure 7**) between each j-th and $(j+1)$-th segment (except for the ones attached to the i-th point):

$$\mathbf{v}_{\mathrm{BIOT}}^{(i)} \approx \frac{\varkappa}{4\pi} \sum_{j \notin \{i-1, i\}} \frac{(R_j + R_{j+1})(\mathbf{R}_j \times \mathbf{R}_{j+1})}{R_j R_{j+1}(R_j R_{j+1} + \mathbf{R}_j \cdot \mathbf{R}_{j+1})}, \quad (14)$$

where $\mathbf{R}_j = \mathbf{s}_j - \mathbf{s}_i$ and $\mathbf{R}_{j+1} = \mathbf{s}_{j+1} - \mathbf{s}_i$ are the relative vectors from a given point.

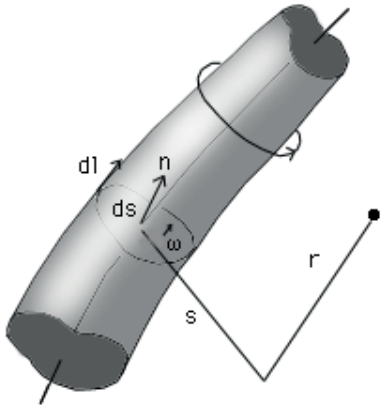


Figure 7: An infinitesimal contribution of a j-th segment line between two points $\mathbf{s}_j$ and $\mathbf{s}_{j+1}$ at a given point $\mathbf{r}$. Source: Internet

Note that the computational time of Biot-Savart part is proportional to $\mathscr{O}(N^2)$, while, if one uses just the LIA term, it is only $\mathscr{O}(N)$. Numerical simulations based on Biot-Savart are therefore far expensive and not practical.

One way to get around this difficulty is to update the LIA term (12). In code, when choosing BIOT = False in `config.py`, we neglect completely the non-local integral and keep just the local term, which is typically[11] adjusted within the log term:

$$\mathbf{v}_{\mathrm{LIA}}^{(i)} = \frac{\varkappa}{4\pi}(\mathbf{s}_i' \times \mathbf{s}_i'') \ln\left(\frac{2R_i}{a}\right), \qquad (15)$$

where R_i is a filament length scale, which may be taken as a local curvature of $i-th$ segment: $R_i = 1/|\mathbf{s}_i''|$. Updated LIA is a convenient approximation and works very well for calculating the motion of a single vortex ring, as shown in Results part.

State definition

In code, a single vortex ring object is represented as a `class` structure. This structure (*state*) is partially updated after each time step and is defined with following properties:

- shape - ring center coordinates $[x_c, y_c, z_c]$, radius R and the direction of desired motion $\{x, y, z\}$ (three possible axis)
- velocity - the actual velocity magnitude of vortex ring center $|\mathbf{v}_c|$
- segments - an array of all mesh points, each one with following attributes:
  - coordinates - an array of segment coordinates $\mathbf{s}_i = [x_i, y_i, z_i]$
  - previous/next neighbour - array localisation indices of the *previous* $(i-1)$ and the *next* $(i+1)$ segment within the context of the directed vortex
  - tangent/curvature - a tangential and normal vectors $\mathbf{s}_i'$ and $\mathbf{s}_i''$
  - LIA velocity - a self-induced velocity $\mathbf{v}_{\mathrm{LIA}}^{(i)}$ driven by the local curvature.
  - BIOT velocity - a self-induced velocity driven by the farther segment lines of the vortex ring $\mathbf{v}_{\mathrm{BIOT}}^{(i)}$
  - Drive velocity - a velocity given by the mutual friction force $\mathbf{v}_{\mathrm{drive}}^{(i)}$
  - Full velocity - the sum of LIA velocity $\mathbf{v}_{\mathrm{LIA}}^{(i)}$, BIOT velocity $\mathbf{v}_{\mathrm{BIOT}}^{(i)}$ and the drive velocity $\mathbf{v}_{\mathrm{drive}}^{(i)}$, resulting in $\mathrm{d}\mathbf{s}_i/\mathrm{d}t$

The initialisation of the *state* in the very beginning of simulation includes the following steps:

1. an input from user: *center, radius, direction* and *resolution*. Resolution parameter is the initial desired distance δ between each two neighbouring segments.
2. The number of segments N is calculated and the neigbour indices ($i-1$ and $i+1$ are assigned $i-1$ to the i-th segment) are gradually initialised
3. Calculation of all $\mathbf{s}'$ and $\mathbf{s}''$ using FD4
4. Calculation of all segment velocities using motion equations and their approximative forms
5. Calculation of the center velocity by taking the mean of all segments' full velocites in corresponding direction

Time evolution

Time evolution (**Figure 8**) is based on an explicit iterative method: the fourth-order Runge-Kutta (RK4) scheme.

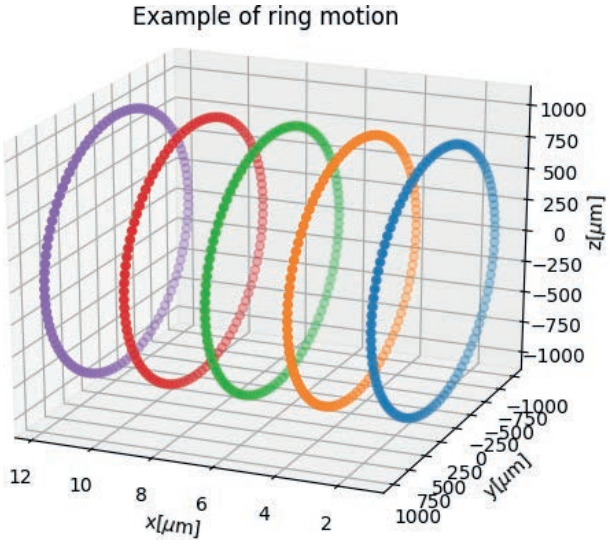


Figure 8: Example of a simulated moving vortex ring (to the left)

When we consider the Schwarz's equation $\mathrm{d}\mathbf{s}_i/\mathrm{d}t \equiv \mathbf{v}_{\mathrm{full}}^{(i)}$, the stepping algorithm is given as:

$$\mathbf{s}_i(t+\mathrm{d}t) = \mathbf{s}_i(t) + \frac{\mathrm{d}t}{6}(\mathbf{v}_1^{(i)} + 2\mathbf{v}_2^{(i)} + 2\mathbf{v}_3^{(i)} + \mathbf{v}_4^{(i)}), \qquad (16)$$

where $\mathrm{d}t$ is the time step and the velocities $\mathbf{v}_1^{(i)}, \mathbf{v}_2^{(i)}, \mathbf{v}_3^{(i)}, \mathbf{v}_4^{(i)}$ are the induced velocites of partial steps:

$$\mathbf{v}_1^{(i)} = \mathbf{v}_{\text{full}}^{(i)}(\mathbf{s}_i, t)\,, \tag{17}$$
$$\mathbf{v}_2^{(i)} = \mathbf{v}_{\text{full}}^{(i)}(\mathbf{s}_i + \mathbf{v}_1^{(i)}\mathrm{d}t/2, t + \mathrm{d}t/2)\,, \tag{18}$$
$$\mathbf{v}_3^{(i)} = \mathbf{v}_{\text{full}}^{(i)}(\mathbf{s}_i + \mathbf{v}_2^{(i)}\mathrm{d}t/2, t + \mathrm{d}t/2)\,, \tag{19}$$
$$\mathbf{v}_4^{(i)} = \mathbf{v}_{\text{full}}^{(i)}(\mathbf{s}_i + \mathbf{v}_3^{(i)}\mathrm{d}t, t + \mathrm{d}t) \tag{20}$$

Lower-order schemes such as basic Euler method is also implemented in code, however, not recommended to use due to its instability. The purpose is to use it only for stability testing.

The time step $\mathrm{d}t$ is chosen so that the vortex ring cannot move faster than a 1% of its size in a single step. Since the radius of vortex ring can vary in time, the time step $\mathrm{d}t$ is iteratively changing after each break of the above rule:

$$\mathrm{d}t \leftarrow \frac{0.01R}{|\mathbf{v}_c|} \tag{21}$$

Re-segmentation of vortex

To obtain the most realistic simulation (catch effects on any length scale), the natural tendency would be to set the *resolution* parameter δ as low as possible. However, the CPU time cost rises rapidly as the number of segments N increases, so there is need to find the best trade-off.

As the distance between neighbouring segments is compressed/enlarged with time due to physics and numerical inaccuracies, there is need to remove/add segments (*re-segment*) to conserve the vortex resolution δ. The closeness (in terms of arclength) of neighbouring segments is therefore measured after each simulation time-step.

We used the simplest re-segmenting criteria - keeping an approximately *uniform distance* between the segments. To ensure this, two boundary conditions were implemented:

1. The segment $\mathbf{s}_{j+1}$ would be removed if:

$$|\mathbf{s}_{j+1} - \mathbf{s}_j| < \delta_{\min}\,, \tag{22}$$

where $\delta_{\min}$ is the minimal distance between the neighbouring segments (example in **Figure 9**). Also, the segment $\mathbf{s}_j$ would take place somewhere between $\mathbf{s}_{j-1}$ and $\mathbf{s}_{j+2}$ so that it will not damage the local curvature of vortex. This is ensured using spline interpolation of nearest 4 points (in our context $\mathbf{s}_{j-2}$, $\mathbf{s}_{j-1}$, $\mathbf{s}_{j+1}$, $\mathbf{s}_{j+2}$).

2. In a similar manner, we add a new segment $\mathbf{s}_{\text{new}}$ between $\mathbf{s}_j$ and $\mathbf{s}_{j+1}$ if:

$$|\mathbf{s}_{j+1} - \mathbf{s}_j| > \delta_{\max}\,, \tag{23}$$

where $\delta_{\max}$ is the maximal allowed distance between two neigbouring segments.

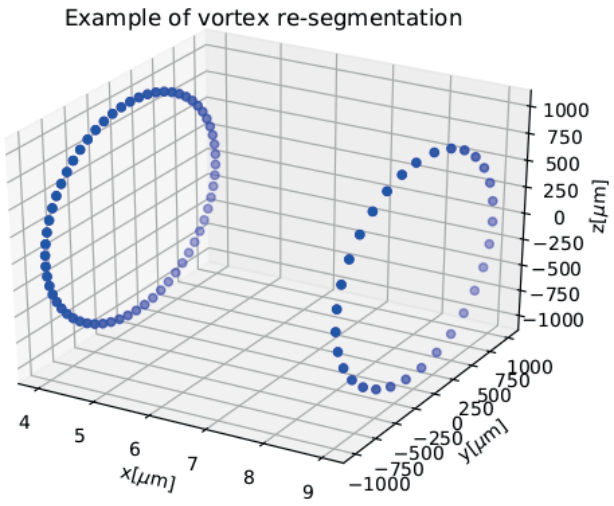


Figure 9: Example of simulated resegmentation process of vortex ring, after the 22 condition was violated

This method keeps all the distances along the vortex roughly around $\delta \in \langle \delta_{\min}, \delta_{\max} \rangle$ and also keeps the geometrical properties.

Real-time tests

After each time step is done, a few tests are performed, to ensure that vortex itself is behaving according to our expectations. The tests are following:

- Length test - This test calculates the vortex circumference as $l = \sum_j |\mathbf{s}_j - \mathbf{s}_{j+1}|$ and compare it with the theoretical one $2\pi R$. If the deviation from the theoretical value is too high $> 1\%$, the segments are noisy and the process is killed. In case of deviation below $< -1\%$, there is clearly too less segments and resegmentation is called.

- Segmentation test - Here we check the value $l_j|\mathbf{s}_j - \mathbf{s}_{j+1}|$ for each j and ask whether $l_j \in \langle \delta_{\min}, \delta_{\max} \rangle$. If not, resegmentation is called.
- Smallness test - If the vortex ring radius would decrease below $R < \delta_{\min}$, the ring is deleted from the simulation.

4. Results

All presented measurements and results were done in purpose of setup the `config` file. We performed a tests with physical motivation and tests focused on precision and stability. With presented findings, there should be ensured the correctness and stability of any further high-scale simulation.

Frictionless test

In case of zero temperature $T = 0\,\mathrm{K}$, there should be no *normal component* in superfluid He-II and therefore also no mutual friction. In such case, velocity and energy of vortex ring is conserved due to the lack of energy dissipation processes.

We plotted in **Figure 10** the ring velocity $|\mathbf{v}_c|$ and energy evoluting in time, for the case of $T = 0$ and $T = 1.5\,\mathrm{K}$. We tested the mutual friction effect during 1000 time-steps (*epochs*) with varying dt.

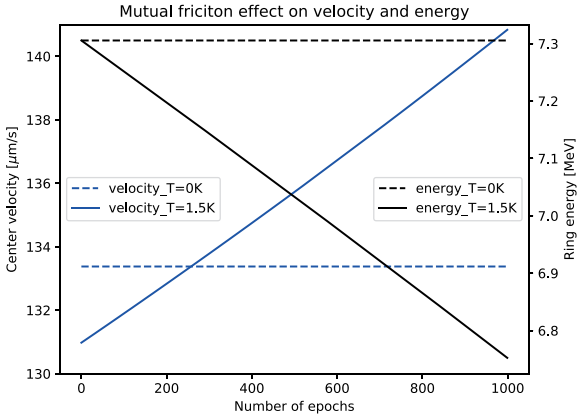


Figure 10: Dashed curves show the constant behaviour for temperature $T = 0$), full lines the dissipation process for $T = 1.5\mathrm{K}$. On `x` axis, we plot the number of epochs (time steps) the vortex ring ran over and on `y` axis the velocity of ring center $|\mathbf{v}_c|$.

As we see, at $T = 0\,\mathrm{K}$ the velocity and energy is conserved even after 1000 epochs of simulation. In case of $T > 0$, energy is falling down as expected, whereas the velocity is increasing. This increase is physically well-explained by the fact that the radius is decreasing with time (2), also due to mutual friction.

Velocity precision test

Our first velocity test compares the various approaches at $T = 1.5\mathrm{K}$ how can the ring velocity $|\mathbf{v}_c|$ be calculated. Here, we recognize between four approaches, based on its theoretical motivation, computational complexity and precision:

- LIA (12): motivated, cheap, not precise
- LIA + BIOT (12 + 13): motivated, but expensive
- updated LIA (15): not well motivated, but cheap and precise
- Theoretical (scaled 2): motivated and precise

The theoretical velocity (2) is taken as a baseline that other velocites are compared with. All velocites were measured and evoluted over a few thousands epochs (time steps), during which the radius was dissipatively decreasing, as we see in **Figure 11**.

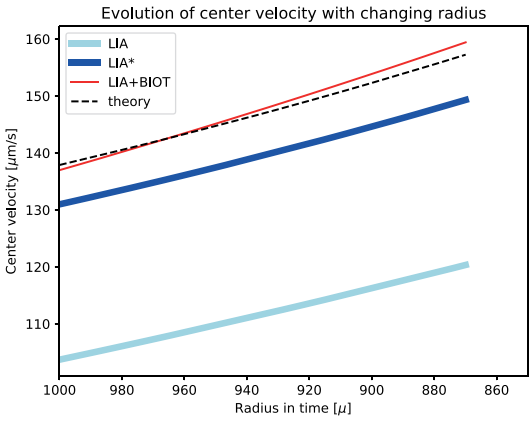


Figure 11: Comparison of all implemented velocity approaches (full lines) with the theoretical one (black dashed line). Velocities are always computed based on the increasing ring radius (`x` axis). On `y` axis, we plot the velocity of ring center $|\mathbf{v}_c|$.

As we see, (LIA + BIOT) velocity is the most precise approach as expected. However, for all further measurements we used the updated LIA velocity (LIA*) due to its speed.

Velocity convergence test

Next, we investigated the magnitude of ring velocity $|\mathbf{v}_c|$ for various resolutions $\delta \in \langle 50, 200 \rangle \mu$m, immediately after initialisation and then after 100 epochs. Ring radius was set at $R = 1000\mu$m, so the number of discretisation points was given by R and δ as $N \approx 2\pi R/\delta \in \langle 30, 120 \rangle$.

We see in **Figure 12** the expected convergent behaviour of both measured velocities in an area of good resolutions. Below $\delta < 100\mu$m, the velocites are enough convergent (corresponding to ≈ 60 number of segments), which gives us the upper boundary.

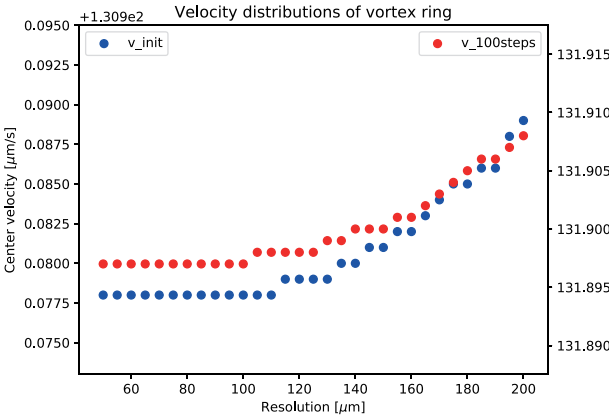


Figure 12: On x axis, we plot the resolutions δ and on y axis the velocity of ring center $|\mathbf{v}_c|$. Blue dots - initial ring velocities, Red dots - ring velocities after 100 epochs.

Even if it is intuitive that good resolutions lead to more stable velocities, the high number of vortex segments worsens the stability of simulation in time. Therefore, we propose also a lower boundary δ_{min}, ensuring the stability, in a following test.

Stability test

Stability of simulation was measured for three values of vortex radius $R \in \{500, 1000, 2000\}\mu$m using *Euler* and *RK4* stepping in various resolutions. In all cases, the stability is described by the number of reached epochs, which was determined by the violation of length condition - the vortex circumference cannot deviate more than 1% from the geometrical value $2\pi R$.

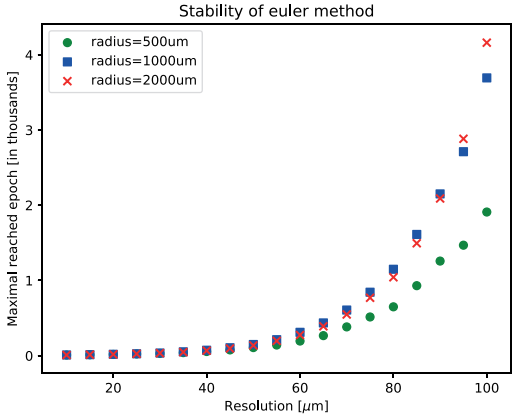


Figure 13: Maximal reached epoch (time step) with Euler method till the simulation was killed by violating the length condition, for various radii R and resolutions δ.

Euler method seems to be instable for whatever resolution (**Figure 13**). Therefore it is useful only for test purposes. We recommend to use a way more stable method RK4 in a real high-scale simulation:

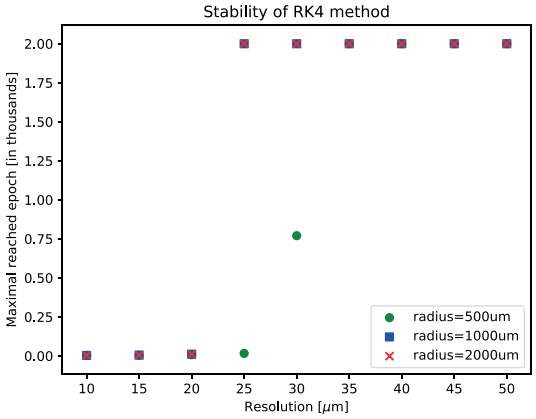


Figure 14: Maximal reached epoch (time step) with RK4 method till the simulation was killed by violating the length condition, for various radii R and resolutions δ. A threshold is set on 2000 epochs.

The plot in **Figure 14** suggests the minimal resolution to be at least $\delta > 30\mu$m. This boundary is still quite consevative, since the radius of vortex is decreasing in time (see Apendix part), so the resegmentation will happen. Resegmantation processes heavily help the simulation to be stable (deletes any forwarding numerical errors).

5. Conclusions

In this work, we proposed an effective numerical method to compute the time evolution of vortex ring in superfluid He-II. VF's performance was improved by neglegcting the Biot-Savart integral and updating the LIA calculation instead (15). Simulation well replicates the physical processes and performs sufficient stability when using testing vortex ring of radius $R \in \langle 500, 2000 \rangle \mu$m in resolution $\delta \in (60 - 100)\mu$m.

Future improvements

To make `Pyvort` a full-fledged quantum vortex simulation, there should be implemented a few improvements.

- Performance - Recent numerical research presented [12] a new numerical method to compute the evolution of vortex filament. The method is based on a *tree algorithm* which considerably speeds up the calculation of Biot-Savart integrals - computational cost scales as $\mathcal{O}(N \log(N))$ rather than N^2. Certain physical quantities are heavily dependent on ring velocity, so the improvement of the simulation performance and precision would produce even more useful results.
- Interaction of vortices - If any lines of two vortices (or even the single one) become very close, the filaments can reconnect, changing the topology of the system. Many researchers experimentally reported this is happening and also found analogies with vortex dynamics in the Navier–Stokes equation. The VF model itself cannot describe the reconnection process because the vortex core structure is generally neglected. Hence, an artificial procedures must be introduced, for instance, when two vortices approach within a critical distance δ_{min}, we will reconnect the vortices in the way based on energy minimalisation.
- High-order tests - Once the code of interacting VFs is developed, the analysis of all that data has to be improved. The simplest measurable quantity is the total lenght of all vortex lines. In a finite volume this would be $L = (1/V) \int \mathrm{d}\xi$ for the vortex line per unit volume. Of course, there can be defined more complicated metrics, measuring the isotropy of the vortex tangle. [11]

Appendix

Here we briefly present a few visualisations of observed instabilities and physical processes.

Instability in good resolution

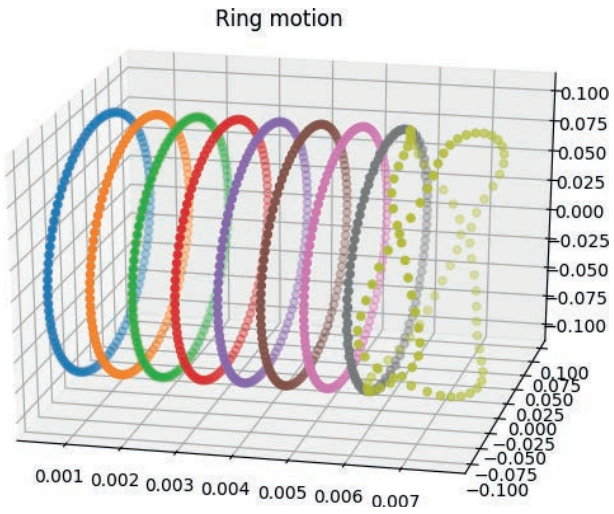


Figure 15: A graphical example of ring instability when Euler stepping was used with good resolution (small δ). Ring is moving from the left side to the right with exponentially forwarding error.

Noisy instability in worse resolution

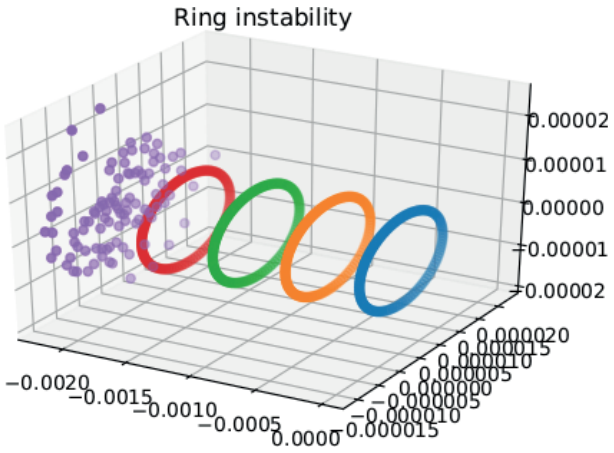


Figure 16: Another example of ring instability due to forwarded numerical error using Euler stepping. In this case, resolution δ is higher (worse resolution), so the instability itself is much more noisy.

Mutual frtiction effects

Also, we present one of the bigger simulations (**Figure 17**) we tested. After we set the ring radius $R = 1000\mu$m, resolution $\delta = 60\mu$m (resulting in around ≈ 100 mesh points), re-segmentation boundaries $\delta_{\text{min}} = \delta/2 = 30\mu$m, $\delta_{\text{max}} = 2\delta = 120\mu$m, the updated LIA calculation, RK4 stepping method and a temperature $T = 1.5$K, we obtained a stable simulation of vortex ring with a decreasing radius. More on particular physical processes can be found in [8].

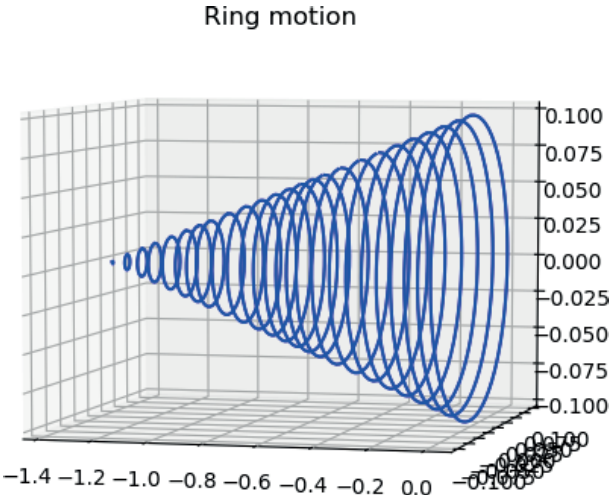


Figure 17: Here, a vortex ring is moving to the left, its energy is dissipating due to the mutual friction and therefore, the radius is decreasing in time. The ring re-segmented itself a few times (due to the violation of δ_{min} condition and died (the simulation was stopped) when the length error was too high.

References

[1] LANDAU, L.D. *The theory of superfluidity of helium II* J. Phys. USSR, Vol. 11, 91 (1947)

[2] LANDAU, L.D. and LIFSHITZ, E.M. *Fluid Mechanics*. Second English Edition. Pergamon Books Ltd., 1987. ISBN 0-08-033933-6.

[3] ANDRONIKASHVILI, E.L. J. Phys. USSR, **10**, 201 (1946)

[4] BAHYL, J. *Measurement of quantum turbulence in superfluid He-4*. Student conference, FMPH UK, Bratislava (2016)

[5] FEYNMAN, R. *Application of quantum mechanics to liquid helium*.
Progress in Low Temp Phys, **1**, 17-53 (1957)

[6] TSUBOTA, M., FUJIMOTO, K., YUI S. *Numerical Studies of Quantum Turbulence*.
Journal of Low Temp Phys, 188 (2017)

[7] ROBERTS, P.H. Phys. Rev. A, 55, 1971

[8] BAGGALEY, A.W. *Superfluid vortices and Turbulence*. Quantized Vortex Dynamics and Superfluid Turbulence, Chap.1, Barenghi C.F. (2001)

[9] VINEN, W.F. and HALL, H.E. *The theory of mutual friction in uniformly rotating helium II*. Proc. Royal Soc. London 238 (1957) 204

[10] DONNELLY, R.J., BARENGHI, C.F *The Observed Properties of Liquid Helium at the Saturated Vapor Pressure*. American Ins. of Phys. and Chem. Soc. (1998)

[11] SAMUELS, D.C. *Vortex Filament Methods for Superfluids*. Quantized Vortex Dynamics and Superfluid Turbulence, Chap.9, Barenghi C.F. (2001)

[12] BAGGALEY, A.W., BARENGHI, C.F. *Tree Method for Quantum Vortex Dynamics*. Journal of Low Temp Phys, 166 (2012)

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 19–25
ISBN 978-8081470882, © 2018 Martin Vodička

Lokálna vnoriteľnosť grúp a IP lúp do konečných IP lúp

Martin Vodička*

Školiteľ: Pavol Zlatoš†

Katedra algebry, geometrie a didaktiky matematiky, FMFI UK, Mlynská Dolina 842 48 Bratislava

Abstrakt: V r. 1998 A.M.Veršik a E.I. Gordon zaviedli vo svojom článku pojem grupy lokálne vnoriteľnej do konečných grúp. Dokázalo sa, že nie každá grupa má túto vlastnosť, a preto bolo prirodzeným krokom zoslabiť štruktúru, do ktorej sa snažíme grupu vnoriť. Bolo dokázané, že každá grupa sa dá lokálne vnoriť do konečných kvázigrúp a aj konečných lúp. Tento výsledok zlepšil M. Ziman v r. 2005, keď dokázal, že každá grupa je lokálne vnoriteľná do konečných tzv. IAA lúp. My sme sa od IAA lúp posunuli ešte bližšie ku grupám, a to k IP lupám, čo sú lupy, ktoré spĺňajú identitu $(xy)y^{-1} = y^{-1}(yx) = x$. Ukážeme všeobecnejší výsledok, a to, že každá IP lupa, a teda aj každá grupa, je lokálne vnoriteľná do konečných IP lúp. Dôkaz je konštruktívny, využíva Steinerove systémy trojíc a nakoniec sa problém prevedie na nie ťažký problém z teórie grafov, kde využijeme aj Diracovu vetu o tom, kedy má graf Hamiltonovskú kružnicu.

1 Úvod

V tejto práci sa budeme zaoberať lokálnou vnoriteľnosťou grúp, prípadne iných algebier do konečných algebier. Čo znamená, že grupa je lokálne vnoriteľná do konečných algebier, zaviedli A.M.Veršik a E.I.Gordon v [3]. Grupa je lokálne vnoriteľná do konečných grúp (skrátene LEF grupa), ak ľubovoľnú štvorcovú podtabuľku jej multiplikatívnej tabuľky možno doplniť na multiplikatívnu tabuľku nejakej konečnej grupy. Ukázalo sa, že LEF grupy majú význam v rôznych oblastiach matematiky.

Ešte všeobecnejší pojem, a to pojem aproximácie lokálne kompaktných topologických grúp zaviedol E. I. Gordon v [4], kde skúmal operátory na priestoroch funkcií na topologických grupách. Ukázalo sa, že aj tieto aproximácie majú široké uplatnenie. Avšak ukázalo sa, že nie všetky lokálne topologické grupy sú aproximovateľné pomocou konečných grúp, a dokonca ani nie všetky diskrétne grupy sú LEF.

Glebsky, Gordon v [2] dokázali, že aproximácia pomocou koečných semigrúp je ekvivalentná s aproximáciou pomocu grúp. Preto na to, aby sme mohli aproximovať viac grúp, bolo potrebné obetovať asociatívnosť. Preto bolo zaujímavé pozrieť sa na aproximáciu pomocou konečných kvázigrúp.

Dokázalo, že každá grupa je lokálne vnoriteľná do konečných kvázigrúp a aj konečných lúp. Tieto majú však ku grupám „ďaleko“ a bolo by vhodné skúsiť použiť nejakú inú štruktúru, ktorá bude mať ku grupám bližšie. V [8] dokázal M. Ziman, že každú grupu možno vnoriť do konečných IAA lúp. To sú lupy s obojstrannými inverzami, ktoré spĺňajú identitu $(xy)^{-1} = y^{-1}x^{-1}$. Dokonca dokázal, že každá IAA lupa je lokálne vnoriteľná do konečných IAA lúp, z čoho samozrejme plynie lokálna vnoriteľnosť grúp.

My sme sa posunuli ešte ďalej a pridali sme týmto lupám silnejšiu podmienku, a to podmienku $(xy)y^{-1} = y^{-1}(yx) = x$. Tým sme sa dostali k tzv. IP lupám. A tak isto dokážeme, že keždá IP lupa je lokálne vnoriteľná do konečných IP lúp, z čoho vyplýva lokálna vnoriteľnosť grúp.

IP lupy sú zovšeobecnením Steinerových lúp, ktoré vznikli zo Steinerových systémov trojíc. Steinerove lupy sú vlastne IP lupy, kde pre každý prvok platí $xx = 1$. V dôkaze sa však silno využívajú, pretože až na nejaké technické záležitosti, pridáme do lupy len také prvky, pre ktoré platí $xx = 1$. Pôvodnú konečnú časť IP lupy vyriešime a v hlavnej časti dôkazu už v podstate pracujeme iba so Steinerovými lupami, resp. korešpondujúcimi Steinerovými systémami trojíc. Na konci si tieto trojice reprezentujeme ako trojuholníky v grafe a pridávanie prvkov do lupy tiež reprezentujeme ako istú operáciu na grafe. Cieľom bude pomocou tejto operácie odstrániť všetky hrany grafu, čo sa napokon podarí.

2 Lupy

Na začiatok sa oboznámime s tým, čo sú lupy. Tiež si ukážeme rôzne druhy lúp, ktoré budeme využívať.

Definícia 1. *$(L,\cdot)$, kde $\cdot$ je binárna operácia na L, je lupa, ak sú splnené nasledujúce dve podmienky:*

*mato.vodicka@gmail.com
†pavol.zlatos@fmph.uniba.sk

1. *Pre všetky $a,b \in L$ existuje práve jedno x také, že $a \cdot x = b$ a práve jedno y také, že $y \cdot a = b$.*

2. *v L sa nachádza prvok 1 s vlastnoťou $1 \cdot a = a \cdot 1 = a$ pre všetky $a \in L$.*

Inými slovami v lupe má každá „lineárna“ rovnica práve jedno riešenie a lupa obsahuje jednotku.

Ďalej už budem väčšinou znak operácie $\cdot$ vynechávať, a teda pod ab budem myslieť $a \cdot b$. Budem ho písať len vtedy, keď bude operácii viac.

Ak L je lupa, tak pre každý prvok $x \in L$ existuje práve jedno y také, že $xy = 1$. Teda každý prvok má ľavý a analogický aj pravý inverz. My budeme však ďalej pracovať s lupami s obojstrannými inverzami. Tento inverzný prvok označujeme normálne x^{-1}.

Definícia 2. *$(L,\cdot)$ je IP lupa, ak $(L,\cdot)$ je lupa s obojstrannými inverzami a navyše pre všetky $x,y \in L$ platí $(xy)y^{-1} = x = y^{-1}(yx)$.*

Môžeme sa teraz pozrieť na to, aká silná je podmienka na IP lupu. Dobrý náhľad na to môže dať, čo všetko vieme vyvodiť z toho, že $ab = c$. O tom hovorí nasledujúca lema:

Lema 1. *Nech L je IP lupa a $a,b,c \in L$ sú také, že $ab = c$. Potom platí aj*

$$a^{-1}c = b,\ bc^{-1} = a^{-1},\ b^{-1}a^{-1} = c^{-1},$$

$$c^{-1}a = b^{-1},\ cb^{-1} = a.$$

Dôkaz. Len priamočiaro aplikujeme rovnosť, ktorá platí v *IP* lupe. Napr. máme $b = a^{-1}(ab) = a^{-1}c$. Analogicky odvodíme všetky ostatné vzťahy. □

Navyše si môžeme všimnúť, že každý z týchto 6 vzťahov implikuje týchto istých 6 vzťahov. Okrem toho si môžeme všimnúť, že ak $a,b,c \neq 1$, tak toto je vždy 6-tica rôznych vzťahov, okrem prípadu, že $a = b = c^{-1}$. Vtedy sú to len 2 rôzne vzťahy, a to $aa = a^{-1}$ a $a^{-1}a^{-1} = a$.

Taktiež budeme pracovať so Steinerovými lupami, ktoré súvisia so Steinerovými systémami trojíc. Znova si ukážeme, čo to je.

Definícia 3. *Nech N je konečná množina. Hovoríme, že $S \subseteq \binom{N}{3}$ je Steinerov systém trojíc, ak pre ľubovoľnú dvojprvkovú množinu $\{x,y\} \subseteq N\}$ existuje práve jedna množina $M \in S$ taká, že $\{x,y\} \subset M$.*

Definícia 4. *Nech S je Steinerov systém trojíc na množine N a nech $1 \notin N$. Potom ak definujeme $a \cdot b = c$, pre všetky $\{a,b,c\} \in S$ a navyše definujeme $1 \cdot a = a \cdot 1 = a$, $a \cdot a = 1$, pre všetky $a \in N$, tak $(\{1\} \cup N, \cdot\})$ tvorí Steinerovu lupu.*

Ľahko môžeme overiť, že každá Steinerova lupa je aj IP lupa. V Steinerovej lupe pre každý prvok a platí $aa = 1$. Táto podmienka je nutná aj postačujúca na Steinerovu lupu - t.j. IP lupa L je Steinerova práve vtedy, keď pre všetky $a \in L$ platí $aa = 1$.

Tiež budeme potrebovať existenciu Steinerových systémov trojíc na nejakých množinách. O tom hovorí nasledujúca veta, dôkaz je napr. v [5]:

Veta 1. *Steinerov systém trojíc na množine N existuje práve vtedy, keď $N \equiv 1$ alebo $N \equiv 3 \pmod 6$.*

3 Čiastočné IP lupy

Teraz sa dostanem k hlavnému pojmu - čiastočnej IP lupe. V podstate čiastočná IP lupa, je IP lupa, kde nemusí byť každý súčin definovaný. Budem potrebovať iba konečné čiastočné IP lupy, preto ich tak rovno zadefinujem - čiastočná IP lupa bude vždy konečná.

Definícia 5. *Nech P je konečná množina a $1 \in P$. Nech $^{-1} : P \to P$ a nech $\cdot : K \to P$, kde $K \subseteq P \times P$. Budeme hovoriť, že P je čiastočná IP lupa, ak sú splnené nasledujúce podmienky:*

1. $\forall a \in P:\ a1 = 1a = a$.

2. $\forall a \in P:\ aa^{-1} = a^{-1}a = 1$

3. $ab = c \Rightarrow cb^{-1} = a, a^{-1}c = b$

Ďalej definujeme počet dier v čiastočnej IP lupe ako počet dvojíc $(a,b) \in P \times P$, pre ktoré $a \cdot b$ nie je definované. Označme množinu dier ako $D(P)$.

Všimnime si, že každú konečnú IP lupu môžeme chápať ako čiastočnú lupu. Naopak pre čiastočnú lupu platí, že rovnica $ax = b$ má najviac jedno riešenie. Ak by mala dve x_1, x_2, tak po aplikovaní tretej podmienky by sme zistili, že $a^{-1}c = x_1 = x_2$, čo samozrejme nie je možné. Z tohto a prvých dvoch vlastností vyplýva, že ak $D(P)$ je prázdna, tak P je IP lupa.

Môžeme si všimnúť, že v čiastočnej IP lupe tak isto ako v IP lupe platí že $ab = c \Rightarrow cb^{-1} = a$, $a^{-1}c = b$, $bc^{-1} = a^{-1}$, $b^{-1}a^{-1} = c^{-1}$, $c^{-1}a = b^{-1}$. Dôkaz je analogický ako pri leme 1.

Teraz si prirodzeným spôsobom definujeme rozšírenie čiastočnej IP lupy.

Definícia 6. *Budeme hovoriť, že čiastočná IP lupa $(Q,\circ)$ je rozšírením čiastočnej IP lupy $(P,\cdot)$, ak platí, že $P \subseteq Q$ a $a\cdot b = c \Rightarrow a\circ b = c$.*
Označujeme $(P,\cdot) \leq (Q,\circ)$.

Zrejme v rozšírení lupy sa nutne zachovávajú inverzy a jednotka.

Najjednoduchší spôsob ako rozšíriť lupu je nezmeniť množinu prvkov a definovať jeden nový vzťah.

Lema 2. *(Jednoduché rozšírenie lupy.) Nech $(P,\cdot)$ je čiastočná IP lupa, $(a,b) \in D(P)$ a nech rovnice $xb = c$ a $ax = c$ nemajú v P riešenie. Ďalej na P definujme operáciu $\circ$ ako rozšírenie operácie $\cdot$ (t.j., že ak $x\cdot y = z$ tak aj $x\circ y = z$) a navyše definujme*

$$a\circ b = c,\ c\circ b^{-1} = a,\ a^{-1}\circ c = b,$$

$$b\circ c^{-1} = a^{-1},\ b^{-1}\circ a^{-1} = c^{-1},\ c^{-1}\circ a = b^{-1}.$$

Potom $(P,\circ)$ je čiastočná IP lupa a je to rozšírenie $(P,\cdot)$. Budeme mu hovoriť jednoduché rozšírenie pomocou vzťahu $ab = c$.

Dôkaz. Jediné, čo si treba uvedomiť je to, že tú operáciu $\circ$ tak môžeme definovať, t.j., že sa nemôže stať, že by napr. $cb^{-1} = x$ už bolo definované. Ale keby bolo tak použitím lemy 1 zistíme, že potom $xb = c$, čo je spor s predpokladom. Analogicky ostatné. □

Iná podmienka, ktorá stačí na to, aby sme mohli urobiť jednoduché rozšírenie pomocou vzťahu $ab = c$ je, aby $(a,b),(b,c^{-1}),(c^{-1},a)$ boli diery. Zase sa to dá ľahko overiť.

V čiastočnej IP lupe P budem označovať

$$r_2(P) = \{a \in P\setminus\{1\};\ aa = 1\},$$

$$r_3(P) = \{a \in P\setminus\{1\};\ aa = a^{-1}\}.$$

Ide teda o prvky „rádu“ 2, resp. 3.

4 Veta o rozšírení čiastočných lúp

Teraz už mám zadefinované všetko a môžem prejsť k hlavnej vete. Dokážeme, že každá čiastočná IP lupa sa dá rozšíriť na IP lupu (formálne čiastočnú IP lupu s prázdnou množinou dier). Dokážem to tak, že príslušnú IP lupu proste skonštruujem. Budem postupovať v troch krokoch. Podstatný je posledný, v ktorom stále strojnásobím svoju čiastočnú IP lupu, pričom nové pridané prvky budú „rádu“ 2. Nové pridané kópie budú tvoriť s jednotkou Steinerove lupy a budem v podstate manipulovať len s nimi. Preto v druhom kroku „vyriešim“ prvky, ktoré nie sú „rádu“ 2. A prvý krok je čisto technický, keďže Steinerove lupy existujú len istých veľkostí a veľkosť IP lupy závisí aj od počtu prvkov „rádu“ 3. Preto ich tam na začiatku pridám tak, aby mi to vyšlo.

Takže poďme na to.

Veta 2. *Nech $(P,\cdot)$ je čiastočná lupa. Potom existuje rozšírenie tejto lupy $(Q,\circ)$ s vlastnosťou $3 \mid |r_3(Q)|$.*

Dôkaz. Do lupy P vieme jednoducho pridať 2 prvky a, a^{-1} a definovať $\circ$ ako rozšírenie operácie $\cdot$, tak, že definujeme $a\circ a = a^{-1}$ a tým pádom vynútene aj $a^{-1}\circ a^{-1} = a$. Zrejme sme dostali čiastočnú lupu, ktorej počet prvkov rádu 3 sa zdvihol o 2. Takže ak P nemá vlastnosť, že $3 \mid |r_3(P)|$, tak toto urobíme raz alebo dvakrát a dostaneme požadovanú čiastočnú IP lupu Q. □

Veta 3. *Nech P je čiastočná lupa s vlastnosťou $3 \mid |r_3(P)|$. Potom existuje čiastočná lupa $Q \geq P$ taká, že $10 \leq |Q| \equiv 4 \pmod 6$, $3 \mid |r_3(Q)|$ a $D(Q) \subseteq r_2(Q)^2$.*

Dôkaz. Zoberme si ľubovoľnú konečnú množinu K, ktorá je disjunktná s P a platí $|K| \geq 5|P|+1$, $|K| \geq D(P)/2$ a $10 \leq |K|+|P| \equiv 4 \pmod 6$. Definujme teraz čiastočnú lupu na množine $Q = P\cup K$. Všetky prvky z K budú rádu 2, t.j. pre všetky $k \in K$ definujeme $k = k^{-1}$. Okrem toho definujeme pre $(a,b) \in D(P)$, že $ab = k_{(a,b)}$, pre vhodné $k_{(a,b)} \in K$. Tým vyriešim diery (a,b) a (b^{-1},a^{-1}). Formálne urobíme postupnosť niekoľkých jednoduchých rozšírení. Použijeme pre každú dieru iný prvok z K ($k_{(a,b)} = k_{(b^{-1},a^{-1})}$, ale inak sú rôzne) a je ich tam dosť, lebo $|K| \geq D(P)/2$. A môžeme urobiť príslušné jednoduché rozšírenia, lebo jediný súčin, ktorý pred tým dával prvky z K bol súčin prvov z K a 1.

Teraz sme dostali čiastočnú IP lupu Q, kde $P\times P \cap D(Q) = \emptyset$. A tak isto Q má správny počet prvkov aj správny počet prvkov rádu 3. Ešte musíme zariadiť, aby $(a,k) \notin D(Q)$ pre všetky $a \in P\setminus r_2(P)$, $k \in K$. Na to urobím len veľa jednoduchých rozšírení tejto čiastočnej lupy.

Zoberme si preto prvok $a \in P\setminus r_2(P)$. Pozrime sa, že pre ktoré $k \in K$ rovnica $kx = a$ nemá riešenie. Označme si množinu týchto k ako $K_a = \{k_1,k_2,\ldots,k_m\}$. Obdobne označme $L_a = \{l_1,l_2,\ldots,l_m\}$ množinu tých $l \in K$, pre ktoré rovnica $xl = a$ nemá riešenie. Nutne platí $|K_a| = |L_a|$, lebo vždy ak $bc = a$, tak máme riešenia rovníc $bx = a$ aj $xc = a$ - uberie sa z oboch množín rovnako. Navyše

označme prvky v množinách K_a, L_a tak, aby platilo, $k_i = l_j \Rightarrow i = j$.

Uvažujem graf na množine $\{1,2,\dots m\}$, v ktorom sú i, j spojené hranou práve vtedy, keď $k_i l_j$ ani $k_j l_i$ nie je definované. Vieme, že $|K_a| \geq |K| - |P| \geq 4|P| + 1 \geq 3$, pretože $kx = a \equiv ax^{-1} = k$. A doteraz prvky z K vznikli len ako súčiny dvoch prvkov z P. Preto je najviac P takých k, že spomínaná rovnica má riešenie.

Tento graf má podľa Diracovej vety Hamiltonovskú kružnicu, lebo každý vrchol má veľký stupeň (presnejšie sa k tomu vrátim neskôr). A môžeme bez ujmy na všeobecnosti predpokladať, že to je $1,\dots,m$. Nie je teraz nič ľahšie ako urobiť postupnosť jednoduchých rozšírení pre vzťahy $k_i l_{i+1} = a$ pre všetky $1 \leq i \leq m$ (indexy berieme modulo m). Tým dosiahneme, že už každá rovnica $kx = a$ má riešenie. Tieto jednoduché rozšírenia môžeme urobiť, lebo rovnice $k_i x = a, x l_{i+1} = a$ nemajú riešenie. A navzájom si to nepokazia, lebo ak vyplníme $k_i l_{i+1} = a$, tak akurát ešte sa definuje aj $l_{i+1} k_i = a^{-1}$. Avšak to nemôžeme v našich dvojiciach chcieť definovať, kvôli podmienke o indexoch. Ak $(k_i, l_{i+1}) = (l_{j+1}, k_j)$, tak nutne $i = j+1$ a $i+1 = j$, čo zjavne nie je možné, lebo $m > 2$.

Keď sme takto definovali našu operáciu na ďalších dvojiciach, tak už všetky rovnice $kx = a, xk = a$ majú riešenie, a vďaka leme 1 aj všetky rovnice pre a^{-1}. Tento postup zopakujem zo všetkými $a \in P \setminus r_2(P)$, až dostanem čiastočnú lupu, kde $D(Q) \subseteq r_2(Q)^2$.

Všetko funguje rovnako, jedine treba overiť podmienky Diracovej vety - či každý vrchol má stupeň aspoň $|K|/2$. Ak si zoberieme pevný vrhol i, tak nie nie je spojený s j, práve vtedy, keď $k_i l_j$ je definované alebo $k_j l_i$ je definované. Avšak každý z týchto výrazov sa môže rovnať len prvku z P (iné sme ešte nestihli definovať). A samozrejme každý môže byť použitý len raz. To znamená, že máme max. $2(|P|-1)$ (v prípade, že už riešime posledný prvok z $P \setminus r_2(P)$ a neboli v P žiadne prvky rádu 2, inak to je ešte menej) vrcholov, ktoré nie sú spojené s i hranou. Ale $2(|P|-1) < (4|P|-1)/2 \leq (|K|-|P|)/2$, čo dokazuje, že podmienky vety budú vždy splnené. Preto tak naozaj môžeme pokračovať, až kým $D(Q) \subseteq r_2(Q)^2$. □

Teraz uvediem postup, akým viem z čiastočnej lupy, ktorá má diery iba medzi prvkami rádu 2, skonštruovať 3-krát väčšiu lupu s rovnakým počtom dier. Potom ukážem, ako malou modifikáciu tohto postupu môžem počet dier znižovať. Začneme s čiastočnou lupou $|P| = n+1$. Budem navyše požadovať, aby $n \equiv 1$ alebo $n \equiv 3 \pmod 6$.

Definujme $Q = P \cup X \cup Y$, kde $|X| = |Y| = |P| - 1 = n$ a $Q,\ S,\ T$ sú po dvoch disjunktné. Teraz budem postupne definovať operáciu $\circ$ ako rozšírenie $\cdot$. Na množinách X, Y zostrojme Steinerove systémy trojíc a potom definujme operáciu $\circ$ na množinách $\{1\} \cup X$ a $\{1\} \cup Y$, aby to boli príslušné Steinerove lupy. Teda všetky prvky z $X \cup Y$ si budú sami sebe inverzné. Označme si

$$L \setminus \{1\} = \{a_0, \dots, a_{n-1}\}$$

$$X = \{x_0, \dots, x_{n-1}\}$$

$$Y = \{y_0, \dots, y_{n-1}\}.$$

Teraz definujme operáciu $\circ$ nasledovne: Pre všetky $0 \leq i,k < n$ bude $x_i y_{i+k} = a_{i+2k}$, kde indexy berieme modulo n. A samozrejme dodefinujeme aj zvyšné vzťahy, kvôli tretej podmienke na čiastočnú IP lupu, t.j.

$$a_{i+2k} y_{i+k} = x_i,\ x_i a_{i+2k} = y_{i+k},\ (a_{i+2k})^{-1} x_i = y_{i+k},$$

$$y_{i+k} (a_{i+2k})^{-1} = x_i,\ y_{i+k} x_i = (a_{i+2k})^{-1}.$$

Pri prepisovaní som využil, že platí $x_i = x_i^{-1}$ a $y_{i+k} = y_{i+k}^{-1}$. Ľahko môžeme overiť, že všetky operácie s prvkami X, Y sú definované, a preto ostali len diery pôvodnej čiastočnej IP lupy P. A taktiež nie je ťažké si uvedomiť, že naozaj máme čiastočnú lupu $(Q, \circ)$.

Ako môžeme túto konštrukciu modifikovať? Nasledovne: Označme prvky v X tak, aby x_0, x_1, x_3 bola trojica zo Steinerovho systému a tiež nech $a_0, a_2, a_1, a_5, a_3, a_{n-3} \in r_2(P)$. Potrebujeme $n \geq 9$, aby toto boli rôzne prvky. Pozriem sa na tieto prvky a ešte aj na y_0, y_1, y_3.

Keďže sú to všetko prvky rádu 2, tak operácia $\circ$ ich delí do trojíc. Konkrétne vytvára nasledovné trojice

$$S = \{\{x_0, y_0, a_0\}, \{x_0, y_1, a_2\}, \{x_1, y_1, a_1\},$$

$$\{x_1, y_3, a_5\}, \{x_3, y_3, a_3\}, \{x_3, y_0, a_{n-3}\}, \{x_0, x_1, x_3\}\}.$$

Pod tým delením do trojíc myslím, že ak $\{x,y,z\} \in S$, tak nutne $xy = z, xz = y, yx = z, zy = x, yz = x, zx = y$.

Tieto trojice zrušíme - operáciu $\circ$ na nich zatiaľ nedefinujeme, napr. $a_0 x_0$ bude zatiaľ nedefinované. Tým sme akoby v Q vytvorili 42 nových dier (6 dier

za každú trojicu). Namiesto toho vytvoríme nové trojice a pomocou nich zadefinujeme operáciu $\circ$ ako pri Steinerovej lupe.

A to tieto:

$$\{a_0,a_2,x_0\},\{a_1,a_2,y_1\},\{a_1,a_5,x_1\},$$
$$\{a_5,a_3,y_3\},\{a_3,a_{n-3},x_3\},\{a_{n-3},a_0,y_3\},$$
$$\{x_0,x_1,y_1\},\{x_1,x_3,y_3\},\{x_3,x_0,y_0\}.$$

Posledné tri trojice vieme vytvoriť vždy. Prvých 6 sa nemusí podariť - závisí to od toho, či $(a_0,a_2),(a_2,a_1),(a_1,a_5),(a_5,a_3),(a_3,a_{n-3}),(a_{n-3},a_0)$ sú diery v P. Ak totiž napr. nie je (a_0,a_2) diera, tak už je a_0a_2 definované a nemôžeme položiť $a_0a_2 = x_0$.

Príslušnú trojicu vytvoríme len, ak je príslušná dvojica diera v P. Všimnime si, že ak sme vytvorili aspoň 5 z týchto 6 trojíc, tak počet dier v P klesol, pretože sme najprv vytvorili 42 dier, no potom sme zaplnili 48. Znova za každú trojicu zaplníme 6 dier. Ak sme vytvorili 4 trojice, tak sa počet zachoval.

Veta 4. *Nech P je čiastočná lupa, pre ktorú $|L| \equiv 4 \pmod 6$, $|L| \geq 10$, $3 \mid |r_3(P)|$, $D(P) \subseteq r_2(P)^2$, $|D(P)| > 0$. Potom existuje čiastočná lupa Q s tými istými vlastnosťami, ktorá je rozšírením lupy P a $|D(Q)| < |D(P)|$.*

Dôkaz. Vidíme, že ak $(a,b) \in D(P)$, tak nutne $a = a^{-1}$ a $b = b^{-1}$ a tým pádom $a \neq b$, lebo $aa = 1$ je definované. Zoberme si taký graf G_P, ktorého vrcholy sú prvky množiny P a hrany sú dvojice z $D(P)$. To môžeme urobiť preto, lebo ak $(a,b) \in D(P)$, tak nutne aj $(b,a) \in D(P)$, lebo vieme, že $ba = c$ implikuje $ab = c^{-1}$. A odignorujem z tohto grafu vrcholy stupňa 0.

Vieme, že stupeň každého vrchola je párny. To preto, lebo ak si zoberieme $a \in P$, $aa = 1$, tak vieme, že ak $ab = c$, tak aj $ac = b$. Z toho vyplýva, že prvky z P, pre ktoré je ab definované vieme popárovať. A keďže $|P|$ je párne, tak ostal aj párny počet prvkov, pre ktoré súčin nie je definovaný.

Tiež vieme, že počet hrán G_P je deliteľný 3. Okrem vzťahov s jednotkou ($1a = a1 = a, aa^{-1} = 1$), máme $(|P|-1)(|P|-2)$ dvojíc, ktoré môžu byť dierami. To je deliteľné 6. Všetky vzťahy definované operáciou $\cdot$, resp. všetky dvojice, ktoré nie sú diery môžeme rozdeliť do šestíc. Každému vzťahu $ab = c$ priradíme šesticu vzťahov z lemy 1. Jediná výnimka sú prvky rádu 3 - vzťahu $aa = a^{-1}$ priradíme len dva. Avšak počet týchto je deliteľný 3, čo znamená, že počet týchto dvojíc, ktoré nie sú diery je deliteľný 6. Potom nutne počet dier je násobkom 6. A počet hrán v G_P je polovica počtu dier, čo znamená, že počet hrán v G_P je deliteľný 3.

Samozrejme, ak v grafe G_P existuje trojuholník s vrcholmi a,b,c, tak môžeme jednoducho definovať $ab = c$ (a všetkých ostatných 6 vzťahov), zoberieme $Q = P$ a tvrdenie je dokázané.

Urobme teraz konštrukciu strojnásobenia načiastočnej lupe P, kde $a_0,a_2,a_1,a_5,a_3,a_{n-3} \in r_2(P)$ sú vrcholy G_P. Pre jednoduchosť nech $a_0 = A_0, a_2 = A_1, a_1 = A_2, a_5 = A_3, a_3 = A_4, a_{n-3} = A_5$. Totiž tie predošlé indexy sme potrebovali na to, aby sme mohli lepšie popísať konštrukciu celej lupy, teraz sa nám však bude lepšie pracovať, ak budú mať indexy normálne v poradí. Dostaneme tak čiastočnú lupu Q a pozrime sa na to, ako vyzerá jej graf G_Q. Vyzerá tak isto ako graf G_P, až na nasledujúce zmeny:

- Ak A_iA_{i+1} bola hrana v G_P, tak už to nie je hrana v G_Q.
- Ak A_iA_{i+1} nebola hrana v G_P, tak sa do G_Q pridá jeden vrchol X_i, a hrany A_iX_i a $A_{i+1}X_i$.

Naším cieľom je, aby G_Q mal menej hrán ako G_P, lebo počet hrán v G_P, resp. G_Q je zjavne dvojnásobok počtu dier v príslušnej čiastočnej lupe. A dôležité je, že vrcholy $A_0,\ldots,A_5$ môžeme zvoliť ľubovoľne. Vidno, že ak je v G_P cesta dĺžky 5, tak môžeme zvoliť za $A_0,\ldots,A_5$ vrcholy tejto cesty a G_Q bude mať menej hrán (o 3 alebo 6 v závislosti od toho, či A_0A_5 je hrana alebo nie). Konštrukcii takejto lupy Q (resp. grafu G_Q) budem hovoriť modifikovaná konštrukcia strojnásobenia pomocou $(A_0,\ldots,A_5)$ alebo skrátene $MK3-(A_0,\ldots,A_5)$.

To znamená, že nám ostal prípad, keď v G_P nie je ani trojuholník, ani cesta dĺžky 5. Pozrime sa na ľubovoľnú komponentu súvislosti C grafu G_P a zistime, ako môže vyzerať.

Keďže každý vrchol má párny stupeň, čiže stupeň aspoň 2, tak v C existuje kružnica. Vieme, že nie je dĺžky 3, a tak isto je kratšia ako 6, lebo inak by sme v G_P mali aj cestu dĺžky 5. Máme preto 2 možnosti:

- V C je kružnica dĺžky 5. Potom zo žiadneho jej vrcholu už nevychádza žiadna iná hrana - inak by sme mali cestu dĺžky 5. To znamená, že v tomto prípade je C len kružnica dĺžky 5.
- V C je kružnica dĺžky 4 - nech je z vrcholov v_0,v_1,v_2,v_3. Potom v_0v_2 a v_1v_3 nie sú hrany, lebo by v G_P bol trojuholník. Buď v C nie sú žiadne

ďalšie vrcholy - a vtedy je C kružnica na 4 vrcholoch, alebo je tam nejaký vrchol u_0, ktorý je spojený s v_0 (bez ujmy na všeobecnosti), lebo C je súvislý. Vrchol u_0 má však tiež párny stupeň, preto je spojený aj s nejakým iným vrcholom. Nie je však spojený s nejakým ďalším vrcholom u_1 lebo by $v_3, v_2, v_1, v_0, u_0, u_1$ bola cesta dĺžky 5 a ani s v_1, v_3, lebo by sme mali trojuholník. Preto u_0v_2 je hrana v C a u má stupeň 2.

Postupujeme ďalej. Ak by boli v C ďalšie vrcholy, tak by sme mali zase nejaký vrchol u_1, ktorý je spojený s jedným z vrcholov v_0, v_1, v_2, v_3. A analogicky ako pri u_0 dostávame, že u_1 má stupeň 2 a je spojený hranou s v_0, v_2 alebo s v_1, v_3. Avšak tá druhá možnoť nemôže nastať, lebo by $u_0, v_0, v_1, u_1, v_3, v_2$ bola cesta dĺžky 5.

Takto môžeme postupovať ďalej a dostávame, že všetky ďalšie vrcholy sú stupňa 2 a sú spojené len s v_0 a v_2. Celkovo je teda $C \cong K_{(2,m)}$ - kompletnému bipartitnému grafu, kde jedna partícii je v_0, v_2 a druhá je zvyšok. Aby bola zachovaná podmienka o párnom stupni, tak nutne m je párne.

Z tohto vyplýva, že každá komponenta súvislosti G_P je C_5 alebo $K_{(2,m)}$, kde m je párne. To druhé rozdelíme ešte na 2 prípady - buď je to C_4, alebo $m \geq 4$.

Je jasné, že nám stačí nájsť takú čiastočnú lupu Q, ktorá je rozšírením P, že G_P má rovnaký počet hrán ako G_Q, ale v G_Q je cesta dĺžky 5. Pretože potom Q už vieme rozšíriť na čiastočnú lupu s menším počtom dier.

A to urobíme, pričom rozlíšime niekoľko prípadov:

- V G_P je komponenta súvislosti $K_{(2,m)}$, kde $m \geq 4$.

  Nech u_0, u_1 sú vrcholy jednej komponenty a v_0, v_1, v_2, v_3 nejaké vrcholy druhej. Potom urobíme $MK3-(v_0, u_0, v_1, v_2, u_2, v_3)$ a dostaneme G_Q. Keďže len v_1v_2 a v_3v_0 neboli hrany, tak G_Q má rovnaký počet hrán ako G_P a vznikli nám dva nové vrcholy X_2 a X_5. Ľahko overíme, že v G_Q je $v_0, u_1, v_1, X_2, v_2, u_0$ cesta dĺžky 5.

- V G_P sú dve komponenty súvislosti C_m a C_l, ktoré sú obe kružnice dĺžky 4 alebo 5.

  Nech $u_0, u_1, \ldots, u_m$ sú vrcholy prvej kružnice a $v_0, v_1, \ldots, v_l$ sú vrcholy druhej. Urobíme G_Q ako $MK3-(u_0, u_1, u_2, v_0, v_1, v_2)$. Opäť u_2v_0 a v_2u_0 nie sú hrany v G_P, a preto má G_Q rovnaký počet hrán ako G_P. Znova ak X_2, X_5 sú nové vrcholy prislúchajúce týmto nehranám, tak v G_Q je $u_3, u_2, X_2, v_0, v_l, v_{l-1}$ cesta dĺžky 5.

- Ostal nám prípad, keď G_P má len jednu komponentu súvislosti, ktorá je buď C_4 alebo C_5. Tento prípad však nemôže nastať, pretože G_P má počet hrán deliteľný 3.

Teda vo všetkých prípadoch sme napokon zostrojili graf, a teda aj príslušnú čiastočnú lupu s menším počtom dier. Tým je dôkaz ukončený.

□

Veta 5. *Každá čiastočná IP lupa P sa dá rozšíriť na IP lupu L.*

Dôkaz. Vyplýva z viet 2,3,4, keďže postupným aplikovaním vety 4 znižujeme počet dier, až raz skončíme na hodnote 0. □

5 Lokálna vnoriteľnosť

Na záver sa dostávame k pojmu spomínanom v úvode, k lokálnej vnoriteľnosti.

Definícia 7. *Grupa $(G, \cdot)$ je lokálne vnoriteľná do konečných IP lúp, ak pre ľubovoľnú konečnú množinu $K \subset G$ existuje IP lupa $(L, \circ)$ taká, že $K \subseteq L$ a $x, y, x \cdot y \in K \Rightarrow x \circ y = x \cdot y$.*

Analogicky môžeme definovať lokálnu vnoriteľnosť pre ľubovoľnú inú grupoidnú štruktúru (t.j. s binárnou operáciou), do systému iných grupoidov. Potrebujem len, aby obe štruktúry mali binárnu operáciu.

Veta 6. *Každá IP lupa je lokálne vnoriteľná do konečných IP lúp.*

Dôkaz. Môžeme bez ujmy na všeobecnosti predpokladať, že $1 \in K$ a $K = K^{-1}$. Ak to totiž neplatí jednoducho pridáme do K tieto prvky. A zjavne ak dokážeme, že pre nejakú konečnú množinu K platí, že jej zodpovedajúcu mulitplikatívnu podtabuľku vieme rozšíriť na IP lupu, tak to platí automaticky aj pre jej podmnožiny.

Ak sa pozrieme na $(K, \cdot|_K)$, tak je to zjavne čiastočná IP lupa. A tú možno podľa vety 5 rozšíriť na IP lupu L. Keďže je to rozšírenie čiastočnej IP lupy K, tak spĺňa všetky podmienky. □

Dôsledok 1. *Každá grupa je lokálne vnoriteľná do konečných IP lúp.*

6 Komentár

Podarilo sa nám zosilniť výsledok M. Zimana z [8] a ukázali sme, že každá IP lupa je lokálne vnoriteľná do konečných IP lúp. Tým sme sa posunuli bližšie ku grupám, i keď podmienka $(xy)y^{-1} = y^{-1}(yx) = x$ má k asociatívnosti stále ďaleko. Avšak až k asociatívnosti dôjsť nemôžeme, keďže, ako bolo spomínané v úvode, niektoré grupy sa nedajú lokálne vnoriť ani do konečných semigrúp.

Či z toho výsledku plynú nejaké všeobecnejšie dôsledky nevieme, ale dáva nám to lepšiu pozíciu pre ďalšie ýsledky v tejto oblasti, napríklad aj k všeobecnejšiemu problému aproximácie topologických grúp.

Čo by sa dalo zlepšiť na našom výsledku je možno veľkosť výslednej IP lupy. V dôkaze pre IAA lupy mala totiž výsledná lupa dvojnásobný počet prvkov. Naša konštruckia vytvára obrovskú lupu, a počet jej prvkov by sa dal odhadnúť iba exponenciálne (vždy keď odstránime 6 dier, tak ztrojnásobíme veľkosť).

Preto by sa dalo zamyslieť nad nejakou lepšou konštrukciou, my sme sa zatiaľ uspokojili s tým, že máme nejakú, ktorá funguje.

Literatúra

[1] A. Ali, J. Slaney: Counting loops with the inverse property, Quasigroups and Related Systems 16 (2008), 13-16

[2] L. Yu. Glebsky, E. I. Gordon: On approximations of topological groups by finite algebraic systems, preprint on http://arxiv.org/list/math.FA/0201, math.GR/0201101 v1 11 Jan 2002.

[3] E. I. Gordon, A. M. Vershik: The groups, locally embeddable into the class of finite groups, St. Petersburg Math. J. 9 (1998), No. 1, 49–67.

[4] E. I. Gordon: On approximation of topological groups and their representations, (Russian), Doklady RAN 345 (5) (1995), 593–595.

[5] F. K. Hwang S. Lin: A Direct Method to Construct Triple Systems, Journal of combinatorial theory (A) 17, 84-94 (1974)

[6] J. Slaney, A. Ali: Generating Loops with the Inverse Property

[7] K. Strambacha, I. Stuhl: Translation groups of Steiner loops, Discrete Mathematics 309 (2009) 4225–4227

[8] M. Ziman: Extensions of Latin subsquares and local embeddability of groups and group algebras, Quasigroups Related Systems 11 (2004), 115-125. MR 2064165

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 26–37
ISBN 978-8081470882, © 2018 Jozef Rajník

Small irreducible snarks and their generalizations

Jozef Rajník[1*]

Supervisor: Ján Mazák[2†]

Katedra informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstract: We analyse the structure of all irreducible cyclically 5-connected snarks with up to 36 vertices. Based on this analysis, we generalise certain individual snarks to infinite families and construct a rather rich infinite class of cyclically 5-connected irreducible snarks.

Keywords: snark, irreducible, bicritical, infinite family

1 Introduction

In 1880, P. G. Tait proved that the four colour theorem is equivalent to the statement that every bridgeless cubic planar graph is 3-edge-colourable [17]. Since then, the cubic graphs gained importance in graph theory. Although, the four colour theorem is proven at present, there are several other open problems which are reduced to cubic graphs such as 5-flow conjecture or cycle double cover conjecture. We know from the Vizing's theorem that each cubic graph is either 3- or 4-edge-colourable. Most conjectures are easy to prove for 3-edge-colourable cubic graphs. Therefore, the study of bridgeless cubic graphs that are not 3-edge-colourable is of great importance. Such graphs are called *snarks*.

Despite that snarks were rather rare in the early studies, at present, there is a plethora of infinite families of snarks. In 2013, G. Brinkmann et al. generated all snarks up to order 36 using a computer [2]. Most of these snarks were not thoroughly analysed and although we know they are not 3-edge colourable, we do not really understand why.

In our work, we analyse the list of small irreducible cyclically 5-connected snarks and explain why they are uncolourable. We summarize several constructions and infinite families of snarks and introduce some new ones. Then, we describe all studied snarks using introduced methods.

Knowing the structure of small snarks is important for further research. Principles observed in small snarks can be generalized to construct infinite families of snarks with specific properties and move us closer to a characterization of all snarks. We demonstrate it by constructing an infinite family of irreducible snarks.

*rajnik1@uniba.sk
†mazak@fmph.uniba.sk

2 Multipoles

Constructions of snarks are often described in terms of multipoles which are graphs allowed to contain dangling edges (see e. g. [5, 11, 13]). A *multipole* is a pair $M = (V(M), E(M))$, where $V(M)$ is a finite set of vertices and $E(M)$ a finite set od edges. Every edge $e \in E(M)$ has two *ends* and every end of e may or may not be incident with a vertex. An edge whose ends are incident with two distinct vertices is called a *link*, if its ends are incident with the same vertex, it is called a *loop*. A *dangling edge* is an edge which has only one end incident with a vertex and finally, an *isolated edge* is an edge whose both ends are incident with no vertex. A *semiedge* is an end of an edge that is incident with no vertex. We suppose that the set of semiedges is endowed with a linear order.

Usually, it is convenient to divide the set of the semiedges into pairwise disjoint ordered sets $S_1, S_2, \ldots, S_n$, called *connectors*. A semiedge which is contained in none of the connectors is called a *residual semiedge*. A multipole M with n connectors $S_1, S_2, \ldots, S_n$ and the set of residual semiedges R is denoted by $M(S_1, S_2, \ldots, S_n; R)$ and called a $(|S_1|, |S_2|, \ldots, |S_n|; |R|)$-*pole* (if R is empty, it is left out of this notation). If a connector S contains only one semiedge s, we will write instead of the set $\{s\}$ only the semiedge s alone.

For a multipole M, a *junction* of the semiedges e and f is an operation giving a rise to a new multipole by joining the semiedges e, f. Process where we connect all semiedges of two multipoles M, N in their order is called the *junction* of the multipoles M, N. Similarly, we define the *junction* of thwo connectors S, T. More precise definitions are given in [11].

3 Snarks and its reducibility

Firstly, recall that a connected graph G is *cyclically k-edge-connected* if there is no edge-cut S containing less than k edges such that each component of $G-S$ contains a cycle. A *cyclical edge-connectivity* of a graph G is the smallest number k such that G is cyclically k-edge-connected. As cyclical edge-connectivity and cyclical vertex-connectivity (which is defined similarly) of a cubic graph coincide [12], we shall write only "cyclically connected" and "cyclical connectivity". The *girth* of a graph is the length of its shortest cycle.

The definition of snark vary across the literature. After simple observations, we can see that a snark with cyclical connectivity less than 4 or girth less than 5 is a trivial modification of another snark [13]. Therefore, such snarks are often excluded from the definition. However, many other snarks are modifications – more or less trivial – of other snarks. Questions of triviality of snarks were studied by Nedela and Škoviera. In 1996, they proved the following theorem [13].

Theorem 1. *Let G be a snark and let $k \geq 1$ be an integer. Then there exists an integer function $\kappa(k)$ such that if $G = M * N$ is a k-junction of two k-poles, then one of the following statements holds.*

(a) One of M and N is not colourable.

(b) Both M and N can be extended to snarks $\bar{M}$ and $\bar{N}$ by applying the junction with k-poles M' and N', each having at most $\kappa(k)$ vertices. Moreover, $|\bar{M}| \leq |G|$ and $|\bar{N}| \leq |G|$.

Theorem 1 describes two cases which we can observe in edge-cuts of snarks. The part (b) says that the snark G arose from two smaller snarks. If $k = 4$, we know the exact principle how G is constructed from two smaller snarks which is known as a dot-product [7]. In other words, every cyclically 4-connected snark can be obtained as a dot product of two smaller snarks. Therefore, we omit these snarks from our analysis. For $k = 5$, we know at least the the upper bound of added vertices $\kappa(5) = 5$ [14]. However, for $k \geq 6$, $\kappa(k)$ remains unknown.

Now, we look at the part (a) of Theorem 1. Let us consider a snark $G = M * N$ satisfying the condition (a), so let M be uncolourable, then M can be extended to a snark $\bar{M} \supseteq M$ of order not greater than $|G|$. In this case, we have reduced snark G to the snark $\bar{M}$ which is called a *k-reduction* of G. If additionally $|\bar{M}| < |G|$, then we call such k-reduction *proper*.

If the snark G has any proper k-reduction, the essence of its uncolourability can be found in the smaller snark $\bar{M}$. Thus for the purpose of our work, we shall aim at snarks which have no proper k-reduction – those snarks are called *irreducible* [13].

Nedela and Škoviera characterized that a snark S is irreducible if and only if it is *bicritical*, i. e. after removing arbitrary two vertices from the snark S, we get a colourable graph [13]. A pair of vertices $\{u,v\}$ such that the graph $S-\{u,v\}$ is colourable is called a *removable pair of vertices*. Similarly, a *removable pair of edges* $\{e,f\}$ is such a pair that the graph $G-\{e,f\}$ is colourable.

4 Tait colourings of multipoles

In proofs of the uncolourability, we will often need to colour multipoles, including their dangling edges. As described by Tait, a convenient colour set $\mathbb{K}$ is provided by the set of non-zero elements of the Klein group $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$. A 3-edge-colouring of a multipole M is an assignment $\varphi : E(M) \to \mathbb{K}$ of colours from $\mathbb{K}$ to its edges, which naturally assigns colours also to edge ends of M. Such a 3-edge-colouring is *proper* if all the three ends incident with each vertex of M have pairwise distinct colours. We will usually abbreviate "proper 3-edge-colouring" to just "colouring" in this paper. If there exists a colouring for a multipole M, we say that M is *colourable*, otherwise it is *uncolourable*.

Using the colours from the set $\mathbb{K}$, we can use addition in the group $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ to analyse properties of the mapping $\varphi : E(M) \to \mathbb{K}$. If we denote $\delta(v)$ the set of edge ends incident with the vertex v, then obviously φ is a colouring if and only if $\sum_{e \in \delta(v)} \varphi(e) = 0$ for each vertex v. This equation is the Kirchhoff's law for flows. Thus a colouring of a multipole induces a nowhere-zero $(\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2)$-flow and vice-versa. Considering that each element in $\mathbb{K}$ is its inverse, we do not have to distinguish the orientation of the flow. When we view a colouring φ of a multipole M as a flow, then we can easily observe from the properties of a flow that $\sum_{e \in S(M)} \varphi(e) = 0$. This has a useful consequence known as Parity Lemma .

Lemma 1 (Parity Lemma, [1, 4])**.** *Let M be a k-pole and k_1, k_2 and k_3 the numbers of dangling edges coloured by colour $(0,1)$, $(1,0)$ and $(1,1)$, respec-*

tively. Then

$$k_1 \equiv k_2 \equiv k_3 \equiv k \pmod 2.$$

To describe the colouring properties of multipoles, we shall use following notions.

Definition 1. *Let $M(e_1, e_2, \ldots, e_k)$ be an ordered k-pole. The* colouring set *of the multipole M is the set*

$$col(M) = \{(\varphi(e_1), \varphi(e_2), \ldots, \varphi(e_k)) \mid \varphi \text{ is a Tait colouring of } M\}.$$

Definition 2. *Let $S = (e_1, e_2, \ldots, e_k)$ be a connector of a multipole M. The* flow through S *it the value $\varphi_*(S) = \sum_{i=1}^{k} \varphi(e_i)$. The k-tuple $(\varphi(e_1), \varphi(e_2), \ldots, \varphi(e_k))$ is denoted by $\varphi(S)$.*

A connector S is called *proper* if $\varphi_*(S) \neq 0$ for each colouring φ of the multipole M. If $\varphi_*(S) = 0$ for each colouring φ of S, such connector is called *improper*. A multipole is called *proper* if all of its connectors are proper and similarly an *improper* multipole has all of its connectors improper. Two k-poles M and N are called *colour-disjoint* if $\mathrm{Col}(M) \cap \mathrm{Col}(N) = \emptyset$.

Extensions and reductions of snarks

There are several known operations allowing us to construct a new snark from some given snarks. E.g. replacing a vertex in a graph S with a triangle gives rise to a graph T which is a snark if and only if S is a snark. Some of these operation are only one-way. Replace a quadrilateral in a snark S with two parallel edges and denote the new graph by T. If S is a snark, then so is T, but T can be a snark while S is colourable. There are also less trivial operation like some types of superposition introduced by Kochol [9] where we replace some multipole contained in a given snark with larger one retaining the uncolourability.

The operations of this type can be generalized. We will look at them as at replacing a k-pole M_1 in a graph G_1 with a k-pole M_2 giving rise to a graph G_2. The relation between the colourability of G_1 and G_2 can be derived from the relation between the colouring sets of M_1 and M_2 as shown by Fiol [5].

The k-poles M_1 and M_2 are called *colour-equivalent* if $\mathrm{Col}(M_1) = \mathrm{Col}(M_2)$. The k-pole M_1 is said to be *colour-contained* in M_2 if $\mathrm{Col}(M_1) \subseteq \mathrm{Col}(M_2)$.

Consider two graphs $G_1 = N * M_1$ and $G_2 = N * M_2$ with k-poles N, M_1 and M_2. Let M_1 be colour-contained in M_2. We can easily obtain a colouring of G_2 from a colouring of G_1. So if G_2 is a snark, then G_1 is also a snark. If $|M_1| < |M_2|$ (which imply $|G_1| < |G_2|$), then we say that the multipole M_2 is *colour-reducible to* M_1 and that the graph G_1 arose by a *colour-reduction of M_2 to M_1*. If $|M_1| > |M_2|$, we say that the multipole M_2 is *colour-expansible to* M_1 and that the graph G_1 arose from G_2 by a *colour-expansion of M_2 to M_1*.

The colour-expansion is a general method allowing us to construct new snarks from given ones. On the other hand, the colour-reduction allow us to move the case of uncolourability to a smaller snark. This general statement alone is useless in constructions of snarks. In order to use it, we need specified pairs of colour-contained multipoles. In following section, we introduce such pairs which we have observed in irreducible cyclically 5-connected snarks.

5 Commonly used multipoles

There are lots of ingenious constructions of snarks with various properties described in the literature (e. g. [10, 11]). Typically, bigger snarks are composed of smaller construction blocks, represented by multipoles. This section describes multipoles that are relevant for the decomposition of small snarks. If M is a multipole contained in a snark, it is also useful to look at the complementary multipole M' and examine its colouring set.

5.1 Negator

Let S be a snark and uwv a path of length two in S. A *negator* is a $(2,2;1)$-pole $M(I,O;r)$ constructed from the snark S by removing the uwv path. The connectors I, O contain the dangling edges formerly incident with u, v respectively and the residual edge r was formerly incident with w. We denote a negator constructed in this way by $\mathrm{Neg}(S,u,v)$. Since we work with at least cyclically 4-connected snarks, the vertex w is unique determined and therefore omitted.

For each colouring of a negator $N = \mathrm{Neg}(S,u,v)$, the flow through exactly one of its connector I, O is zero. Otherwise, we could extend such colouring of N to a colouring of the snark S. [11] The flow through the other connector is from the Parity Lemma the same as through the residual semiedge.

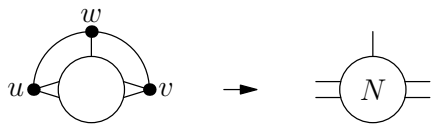


Figure 1: The snark S and a symbolic representation of the negator $N = \mathrm{Neg}(S,u,v)$.

A negator which admits all such colourings is called *perfect*. Máčajová and Škoviera proved that a negator $\mathrm{Neg}(S,u,v)$ is perfect if and only if both graphs $S-\{u,w\}$ and $S-\{v,w\}$ are colourable [11]. Thus negators constructed form irreducible snarks are colourable.

Since we study small snarks, we will mostly use negators obtained from the Petersen graph or Petersen negators, which we denote by N_P. Because of the high symmetry of the Petersen graph, there is up to isomorphism only one way to remove a path of length two from the Petersen graph.

A $(2,2;1)$-pole colour-disjoint with a negator is obviously a path of length two. It consists of two end vertices u, v and their common neighbour w. We denote it by $P_2(I,O;r)$, where the connectors I, I contains the two semiedges incident with u, v respectively and the residual semiedge r is incident with the vertex w.

5.2 Proper (2,3)-pole

Let S be a snark, v be a vertex in S and e be an edge in S not incident with v. A *proper* $(2,3)$*-pole* is a $(2,3)$-pole $T(D,E)$ obtained from the snark S by removing the vertex v and subdividing the edge e. The connector D contains the semiedges arisen from subdividing e and the connector E contains the semiedges formerly incident with v. It is easy to see that both the connectors D, E are proper and so is the $(2,3)$ pole T.



Figure 2: The snark G and a symbolic representation of a proper $(2,3)$-pole T.

If a proper $(2,3)$-pole T admits all colourings such that flows through both of its connector is non-zero, it is called *perfect*.

Mostly, we will use proper $(2,3)$-poles from the Petersen graph. Again, due to the high symmetry of the Petersen graph, there is up to isomorphism only one way to remove one vertex v and subdivide an edge not incident with v in the Petersen graph. We denote such proper $(2,3)$-pole constructed from the Petersen graph by T_P. Finding all colourings of T_P using a computer, we validated that T_P is a perfect proper $(2,3)$-pole.

Take a look on the multipole which we removed from the snark S when constructing a proper $(2,3)$-pole. It is a $(2,3)$-pole $M_{ev}(D,E)$ with connectors $D=(d_1,d_2)$, $E=(e_1,e_2,e_3)$, where d_1, d_2 are two ends of an isolated edge and the semiedges e_1, e_2, e_3 are all incident with one common vertex. Both of its connectors are improper.

5.3 Odd (2,2,2)-pole

An *odd* $(2,2,2)$*-pole* is a $(2,2,2,)$-pole $H(S_1,S_2,S_3)$ obtained from a snark S by removing one vertex with its three neighbours. The dangling edges are paired into the connectors in a natural way.

The name of this multipole is derived from its colouring properties and similar name was used by Goldberg [7]. For each colouring φ of H the number of connectors of H having zero flow is odd.

The simplest example of an odd $(2,2,2)$-pole is a hexagon — a cycle of length six. It arises from the Petersen graph by removing an arbitrary vertex with its neighbours.

Denote the $(2,2,2)$-pole removed from the snark G as $V_4(S_1,S_2,S_3)$. Each of its connectors is proper.

5.4 The Isaacs 6-poles

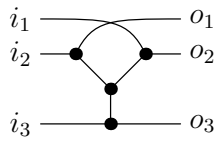


Figure 3: $(3,3)$-pole Y used in the construction of the Isaacs flower snarks.

Let $Y(I,O)$ with connectors $I=(i_1,i_2,i_3)$ and $O=(o_1,o_2,o_3)$ denotes the $(3,3)$-pole shown in Figure 3 used in the construction of the Isaacs Flower snarks. Let $Y_k(I_1,O_k)$ denote the $(3,3)$-pole arising from the union of k disjoint copies $Y_i(I_i,O_i)$ of the $(3,3)$-pole Y and performing junctions of the connectors O_i and I_{i+1} for $i\in\{1,2,\ldots,k-1\}$. Then $\mathrm{Col}(Y_{2m})=$

$\mathrm{Col}(Y_2)$. This have been observed by Nedela and Škoviera [13].

In following subsections, we shall give examples of colour-contained and colour-equivalent multipoles. We give proof only for one pair. Other proofs are similar and can be found in [15].

5.5 The NN 5-pole

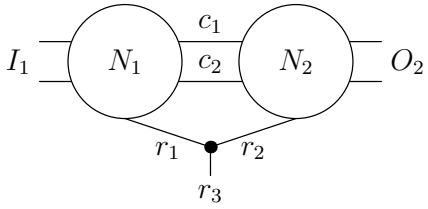


Figure 4: A NN $(2,2;1)$-pole

Let $\mathrm{NN}(N_1,N_2) = M(I_1,O_2;r_3)$ be a $(2,2;1)$-pole constructed from negators $N_1(I_1,O_1,r_1)$, $N_2(I_2,O_2,r_2)$ as shown in Figure 4. We show that $\mathrm{Col}(\mathrm{NN}(N_1,N_2)) \subseteq \mathrm{Col}(P_2)$. Moreover, if N_1 and N_2 are perfect negators, then $\mathrm{Col}(\mathrm{NN}(N_1,N_2)) = \mathrm{Col}(P_2)$.

Proof. Let φ be a colouring of M. Firstly, we observe that flow through the connectors O_1 and I_2 (see Definition 2) has to be zero. Otherwise, we would get from the properties of negators that $\varphi(r_1) = \varphi_*(O_1) = \varphi_*(I_2) = \varphi(r_2)$ for adjacent edges r_1, r_2. Then the flows through the others connectors I_1 and O_2 have to be nonzero. This observation with the Parity lemma is sufficient to say that $\varphi(S(M)) \in \mathrm{Col}(P_2)$ (see Definition 1).

Suppose that N_1 and N_2 are perfect negators. Let φ be a colouring of dangling edges of M such that $\varphi(S(M)) \in \mathrm{Col}(P_2)$, i. e. $\varphi_*(I_1) = a \neq 0$, $\varphi_*(O_2) = b \neq 0$ and $\varphi(r_3) = a + b \neq 0$. We extend φ to a colouring of the multipole M. We set $\varphi(r_1) = a$, $\varphi(r_2) = b$ getting a zero sum in their common vertex. Furthermore, we set $\varphi(c_1) = \varphi(c_2) = a$ for the edges c_1, c_2 connecting the connectors O_1 and I_2. Both negators N_1, N_2 have admissible colours on their semiedges. As they are perfect, they admit such colouring φ and so does the multipole M which means $\varphi(S(M)) \in \mathrm{Col}(M)$. □

5.6 The TT 5-pole

We denote a $(2,2,1)$-pole $M(D_1,D_2,r)$ constructed from two proper $(2,3)$-poles $T_1(D_1,E_1)$, $T_2(D_2,E_2)$ as depicted in Figure 5 by $\mathrm{TT}(T_1,T_2)$.

We claim that $\mathrm{Col}(\mathrm{TT}(T_1,T_2)) \subseteq \mathrm{Col}(P_2)$. Moreover, if the proper $(2,3)$-poles T_1 and T_2 are perfect, then $\mathrm{Col}(\mathrm{TT}(T_1,T_2)) = \mathrm{Col}(P_2)$.

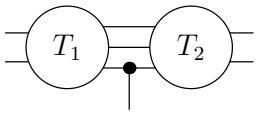


Figure 5: A TT 5-pole

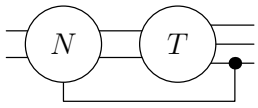


Figure 6: A NT 5-pole

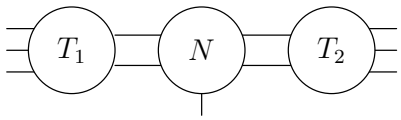


Figure 7: A scheme of an uncolourable 7-pole observed in several snarks.

5.7 The NT 5-pole

For a given negator $N(I,O;r)$ and a proper $(2,3)$-pole $T(D,E)$, we construct a $(2,3)$-pole $M(I,J)$ as shown in Figure 6 and denote it by $\mathrm{NT}(N,T)$. We conclude that $\mathrm{Col}(\mathrm{NT}(N,T)) \subseteq \mathrm{Col}(M_{ev})$ and if N is a perfect negator and T a perfect proper $(2,3)$-pole, then also $\mathrm{Col}(\mathrm{NT}(N,T)) = \mathrm{Col}(M_{ev})$.

Note that the snarks constructed by a colour-expansion of M_{ev} to a NT 5-pole of P_2 to TT 5-pole contains an uncolourable 7-pole depicted in Figure 7.

5.8 The TTT 6-pole

The $(2,2,2)$-pole $\mathrm{TTT}(T_1,T_2,T_3)$ is constructed from three proper $(2,3)$-poles T_1, T_2, T_3 as in Figure 8. It is colour-contained in V_4 (see Section 5.3). Additionally, if all three proper $(2,3)$-poles are perfect, multipoles $\mathrm{TTT}(T_1,T_2,T_3)$ and V_4 are colour-equivalent.

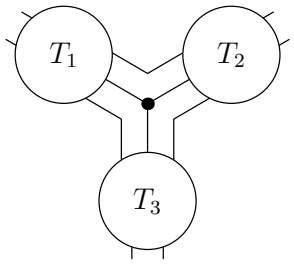


Figure 8: A TTT $(2,2,2)$-pole

Note that after removing the $(2,2,2)$-pole V_4 from a snark S, we get an odd $(2,2,2)$-pole. Thus snark

obtained by a colour-expansion of V_4 to M consists of an odd $(2,2,2)$-pole connected to the 6-pole $\mathrm{TTT}(T_1,T_2,T_3)$.

5.9 Superpentagon

Take two proper $(2,3)$-poles, T_1, T_2, two arbitrary $(3,3;1)$-poles B_1, B_2 and a proper $(3,3)$-pole E, i. e. a $(3,3)$-pole with both connectors proper, it can be constructed by removing two vertices from a snark. We connect them as shown in Figure 9 resulting in a 5-pole M. We claim that $\mathrm{Col}(M) \subseteq \mathrm{Col}(C_5)$ where C_5 is a 5-cycle. Replacing a 5-cycle by the 5-pole M can be seen as a form of superposition [9].

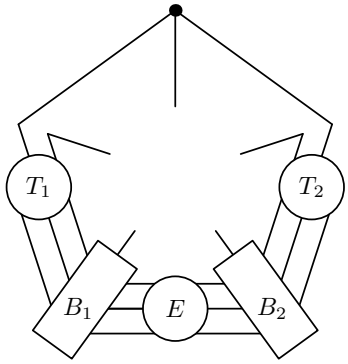


Figure 9: A superpentagon used to replace a pentagon in a superposition

6 Decomposition methods

A maximal connected subgraph C of a graph G such that each edge of C is contained in some cycle of length 5 is called a *five-cycle cluster*. As we study small cyclically 5-connected snarks, we shall focus on five-cycle clusters that can be constructed from the Petersen graph by removing some vertices or subdividing edges and having at least 5 dangling edges.

The smallest five-cycle cluster is a *pentagon*, the cycle of length five itself. The Petersen negator is a five-cycle cluster called a *dyad* (see Figure 10), the proper $(2,3)$-pole obtained from the Petersen graph is called a *triad* (see Figure 11). If we remove two adjacent vertices along with their common edge in the Petersen graph and then additionally subdivide one link, we get a five-cycle cluster called a *double pentagon* (see Figure 12).

The key of our analysis is to identify multipoles mentioned in Section 5. As we study small snarks,

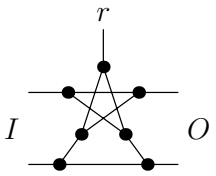


Figure 10: A dyad

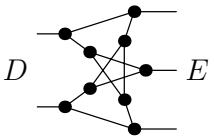


Figure 11: A triad

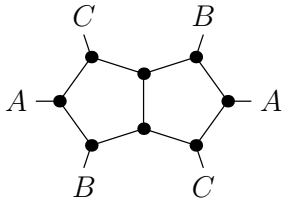


Figure 12: The double pentagon with marked connectors

most of those multipoles consists of five-cycle clusters of the Petersen graph. To identify them, we used the computer program implemented by Simeunovič [16]. The output of this program contains for each graph G a list of five-cycle clusters contained in G and for each such cluster C, there is the type of C (dyad, triad, etc.) and list of vertices contained in C.

Subsequently, we identified connectors of each cluster, that is, we identified the vertices which are incident with dangling edges in the connectors of each cluster. We done it by looking at distances from the other vertices incident with dangling edges.

After identifying five-cycle clusters in a given snark S, we can check whether the snark S contains some of the 5-poles described in Section 5. We denote the multipoles which we will identify in a following way: $P_{NN} = \mathrm{NN}(N_P, N_P)$, $P_{NT} = \mathrm{NT}(N_P, T_P)$, $P_{TT} = \mathrm{TT}(T_P, T_P)$ and $P_{TTT} = \mathrm{TTT}(T_P, T_P, T_P)$. All mentioned multipoles consist of Petersen negators N_P and Petersen proper $(2,3)$-poles T_P. We can replace found multipoles with colour-equivalent smaller one and deduce that analysed snarks arose from smaller snarks by appropriate colour-expansion.

After identifying such snarks, there are some snarks left. They can be divided in several classes. Each class can be characterized by a specific connection of some multipoles. For many classes, small snark contained in them consist of the Petersen five-cycle clusters. Thus for these classes, it is simple to check using a computer if a given snark S belongs to a considered class. For classes consisting of a small number of snarks, we made the analysis by hand.

Although, there is only one Petersen negator N_P and only one Petersen proper $(2,3)$-pole up to isomorphism, the order of their semiedges may vary. This can lead to several nonisomporphic variations of the multipoles P_{NN}, P_{NT}, P_{TT} and P_{TTT}. Since the order of semiedges plays no significant role in explaining the uncolourability of snarks, we allow this minor formal impreciseness.

7 Results of Analysis

We analyzed all cyclically 5-connected irreducible snarks with at most 36 vertices available at [6]. Summary results are given in Table 1. Note that several snarks can be constructed in multiple ways, so the sum of numbers in one column of Table 1 can be greater than the number of analysed snarks of corresponding order.

Isaacs' flower snarks

Isaacs snarks are the only cyclically 6-connected snarks between those that we analysed.

We can describe this family in terms of colour-expansion, starting from the Petersen graph. The flower snark J_3 arose from the Petersen graph by a colour-expansion of a vertex to a triangle. For each $k \geq 2$, the Flower snark J_{2k+1} can be constructed from the snark J_{2k-1} by replacing a copy of Y_2 contained in it with Y_4 which has the same colouring set (for the definition od Y_k see Section 5.4).

The snark J_5 on 20 vertices contains a cycle-separating 5-cut; J_7 on 28 vertices is the smallest cyclically 6-connected snark.

Order 22

The only irreducible cyclically 5-connected snarks of order 22 are the two Goldberg-Loupekine snarks (see Figure 24). Both of them contain the 5-pole P_{NN}, so they can be constructed from the Petersen graph by a colour-expansion of P_2 to P_{NN}.

Order 26

There are 8 irreducible cyclically 5-connected snarks with order 26. All of them contain the 5-pole P_{NT} and also P_{TT} and hence they are colour-reducible, in this case to the Petersen graph. All of them contain the uncolourable 7-pole from Figure 7 consisting of one dyad connected to two triads.

Order 30

On 30 vertices, there is one snark of the girth 6, the double-star snark described by Isaacs [8]. All the remaining snarks of order 30 arose from the Blanuša snarks by a colour-expansion of P_2 to P_{NN} (6 snarks from type 1 and 4 snarks from type 2). Note that this operation increased the cyclic connectivity of the expanded snarks.

Order 32

From 13 studied snarks of order 32, 11 snarks contain the 5-pole P_{NN}. All of them can be constructed by a colour-expansion from the Flower snark J_5. The remaining two, forming Class 32-1, are described in more detail below.

Class 32-1

The remaining two snarks consist of three Petersen negators $N_i(I_i, O_i; r_i)$ for $i \in \{1,2,3\}$ and one 7-pole M_{11} which are connected as shown in Figure 13 while we performed junctions of connector O_2 and I_1, O_1 and I_3. In general, the negators N_1, N_2, N_3 can be taken from arbitrary snarks. We explain that the graph G shown in Figure 13 is a snark.

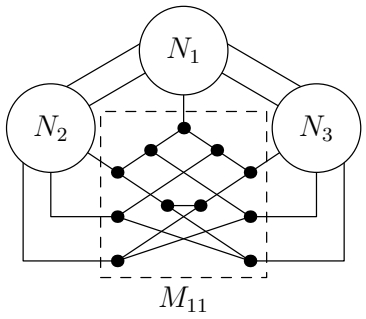


Figure 13: The structure of class 32-1 snarks

Suppose that φ is a colouring of G. Let $a = \varphi(r_1)$. One of the connectors of N_1 has to have zero flow through it, without loss on generality, let it be the connector I_1. Then $0 \neq a = \varphi_*(O_1) = \varphi_*(I_3)$. From the negator N_3, we get that $\varphi_*(O_3) = 0$ and $\varphi(r_3) = a$. Now, take a look on the 7-pole M_{11}. The semiedges e_1, e_2 connected to the connector O_3 have the same colour and so have the semiedges e_3 and e_4 connected to r_3 and r_1, respectively. From the Parity Lemma, the sum of the flows through the remaining three semiedges e_5, e_6, e_7 is zero. Therefore, after

Order	10	20	22	24	26	28	30	32	34	36	38
NN expansion	0	0	2	0	0	0	10	11	26	10	≥ 39
TT expansion	0	0	0	0	8	0	0	0	84	69	≥ 3
NT expansion	0	0	0	0	8	0	0	0	1084	396	≥ 17
TTT expansion	0	0	0	0	0	0	0	0	22	0	≥ 0
Superpentagon	0	0	0	0	0	0	0	0	72	0	≥ 0
Other	1	1	0	0	0	1	1	2	215	9	≥ 4
TOTAL	1	1	2	0	8	1	11	13	1503	484	≥ 56

Table 1

cutting off the multipole M_{11} from the negators, we can perform junctions of e_1 and e_2, e_3 and e_4 and add one new vertex incident with e_5, e_6, e_7 giving a rise to a graph H which can be coloured by a extension of φ. However, the graph H is isomorphic to the uncolourable flower snark J_3, so we have a contradiction.

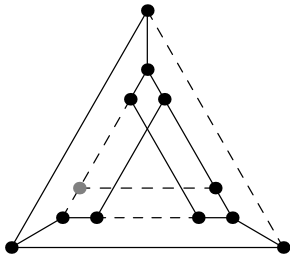


Figure 14: The 7-pole M_{11} constructed from J_3

Actually, the 7-pole M_{11} contained in the snark G is the flower snark J_3 with one removed vertex and two subdivided links (see Figure 14). Moreover, the construction of the snark G uses the symmetry of the 7-pole M_{11} as this 7-pole can be completed to J_3 in two symmetric ways. Thus the 7-pole M_{11} cannot be replaced with a 7-pole constructed from arbitrary snark by subdividing two edges and removing one vertex.

Order 34

Among the studied snarks of order 34, 26 of them contain the 5-pole P_{NN} and they can be constructed from the Goldberg-Loupekine snark (both types) by a colour-expansion of P_2. The 5-pole P_{NT} is contained in 1084 snarks which arose from the Blanuša snark (both types) by a colour-expansion of one vertex and one edge. Other 84 snarks contain the 5-pole P_{TT} and can be constructed from the Blanuša snark (both types) using the colour-expansion of P_2. Other 72 snarks arose from the Petersen graph by replacing a pentagon with superpentgon from the Subsection 5.9.

Analysing the structure of remaining snarks, we observed 6 classes of snarks covering them. Snarks of order 34 contained mostly triads and dyads, but the description of the specific classes given below uses general terms: the used multipoles can be taken from arbitrary snarks. The classification for order 34 is summarized in Table 2.

The structure of snarks of classes 34-1, 34-2, 34-3, 34-4, 34-5 and 34-6 is shown in Figures 15 to 20, where N_1, N_2, N_3, N_4 are negators, T_1, T_2 are proper $(2,3)$-poles and H_1, H_2 are odd $(2,2,2)$-poles. The $(2,2,2)$-pole $R(A,B,C)$ is constructed from arbitrary snark by removing two adjacent vertices along with their common edge which leaves connectors A and B and by subdividing an edge leaving the connector C afterwards. Within the snarks of order 34, all of aforementioned multipoles are constructed from the Petersnen graph, the multipole R is the double pentagon.

More details and proves of uncolourability of these classes can be found in [15].

Type of a snark	Number of snarks
Containing P_{NN}	26
Containing P_{NT}	1084
Containing P_{TT}	84
Containing P_{TTT}	22
Superposition	72
Class 34-1	21
Class 34-2	$18+18\ (P_{TT})+54\ (P_{NT})=90$
Class 34-3	$162+18\ (P_{NT})=180$
Class 34-4	5
Class 34-5	7
Class 34-6	2
TOTAL	1503

Table 2: Structure of the irreducible cyclically 5-connected snarks of order 34.

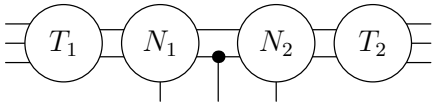


Figure 15: An uncolourable 9-pole M_1 contained in Class 34-1 snarks.

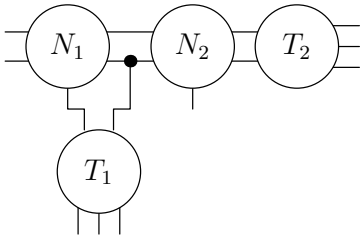


Figure 16: An uncolourable 9-pole M_1 contained in Class 34-2 snarks.

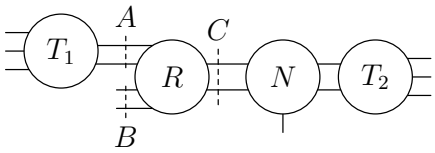


Figure 17: A uncolourable 9-pole M_3 contained in class 34-3 snarks.

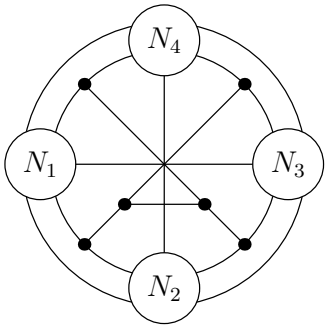


Figure 18: Structure of class 36-4 snarks

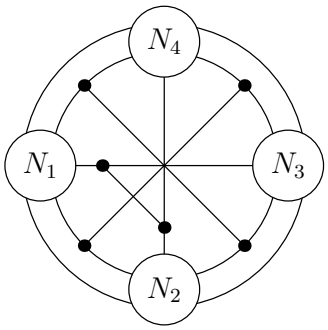


Figure 19: Structure of class 36-5 snarks

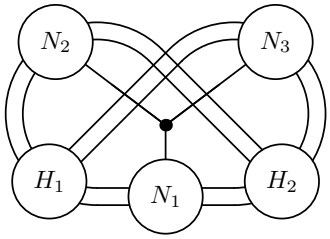


Figure 20: Structure of class 36-6 snarks

Order 36

From the 484 studied snarks of order 36, 396 snarks contain the 5-pole P_{NT} and all of them arose from the flower snark J_5 by a colour-expansion. In 69 snarks, we identified the 5-pole P_{TT} and all of them arose from the J_5 by a colour-expansion.

The 5-pole P_{NN} is contained in 10 snarks. They are constructed by colour-expansions from two smaller snarks of order 24 whose structure can be seen in Figure 21. Their structure is similar to Loupekine snarks, they only contain two additional vertices u, v. These two vertices are removable, so these snarks are reducible, although after a colour-expansion of P_2 to P_{NN} they become irreducible. In all 10 cases, the colour-expanded P_2 contained one of the vertices u, v.

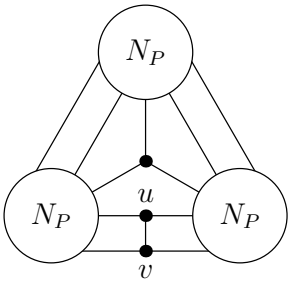


Figure 21: A scheme of two cyclically 5-connected reducible snarks of order 24.

After leaving out J_9, there are 8 snarks left, which we classified into two classes.

Class 36-1

Let $N_i(I_i, O_i, r_i)$ for $i \in \{1,2,3\}$ be three negators and v_1, v_2 and v_3 be three vertices. Connect them as shown in Figure 22. Let e_1, e_2 and e_3 be dangling edges incident with v_1, v_2 and v_3, respectively. Set $I = (r_1, r_2, r_3)$ and $O = (e_2, e_3, e_1)$ and denote the constructed $(3,3)$-pole as $M_{24}(I,O)$. Take the $(3,3)$-pole $Y_3(I_Y, O_Y)$ consisting of three copies of the Isaacs

$(3,3)$-pole Y (see Section 5.4).

The $(3,3)$-poles M_{24} and Y_3 are colour-disjoint, in other words that $M_{24} * Y_3$ is a snark.

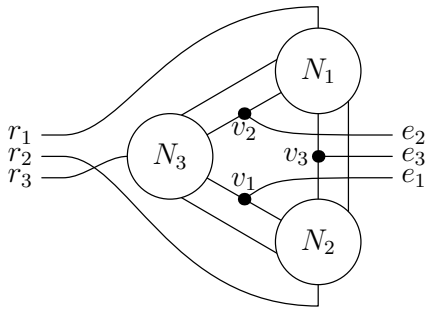


Figure 22: A $(3,3)$-pole M_{24} contained in class 36-1 snarks

We identified 6 snarks of order 36 belonging to the class 36-1.

Class 36-2

Snarks in this class consist of five negators connected as in Figure 23. There are 2 snarks of order 36 having this structure.

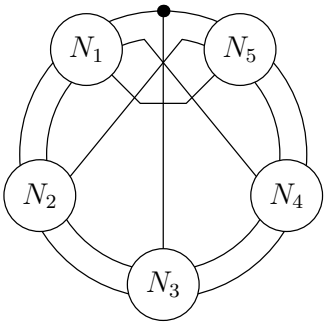


Figure 23: Structure of class 36-2 snarks

8 An infinite family of irreducible snarks

Although the infinite classes described in Section 7 do contain irreducible snarks, it is unclear how the irreducibility of the resulting snark depends on the used construction blocks.

The purpose of this section is to illustrate that imposing certain additional requirements on the multipoles can assure irreducibility of the resulting snark. These requirements are not overly restrictive and it is even possible that most irreducible snarks satisfy them.

We shall study the most simple infinite class of snarks. These snarks are constructed by a NN-expansion. If we have a snark $S = P_2 * N$, then the 5-pole N is a negator. So after the colour-expansion of P_2 by $\mathrm{NN}(N_1,N_2)$, we get a snark consiting of three negators. For the purpose of proving irreducibility, we use this point of view on the structure of snarks of this type.

Definition 3. *Let $N_i(I_i,O_i,r_i) = \mathrm{Neg}(S_i,u_i,v_i)$ for $i \in \{1,2,3\}$ be three negators. We connect them as in Figure 24 and denote the graph constructed in this way by* $\mathrm{NNN}(N_1,N_2,N_3)$.

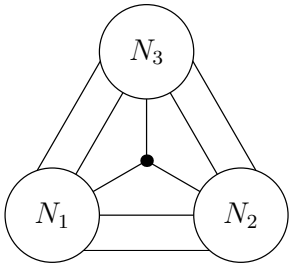


Figure 24: Scheme of a snark $\mathrm{NNN}(N_1,N_2,N_3)$.

As we have mentioned in order 36, snarks used in the constructions need not to be irreducible — by appropriate choice of replaced vertices, we can remove all removable pairs of vertices in used snarks. However, this is the only case when we can construct irreducible snarks from non-irreducible. Therefore, it is natural to soften the property of bicriticality to only those vertices which are contained in used negators.

Definition 4. *A negator $N = \mathrm{Neg}(S;u,v)$ is called bicritical if for every two distinct vertices $x, y \in V(N)$ the multipole $S - \{x,y\}$ is colourable.*

Now, we show that this soften property is a necessary condition for a snark of the class NNN to be bicritical. This property can be in a similar way defined on other multipoles.

Theorem 2. *Let $N_i = \mathrm{Neg}(S_i,u_i,v_i)$ for $i \in \{1,2,3\}$ be three negators such that $S = \mathrm{NNN}(N_1,N_2,N_3)$ is a bicritical snark. Then all the negators N_1, N_2, N_3 are bicritical.*

Proof. Let $x, y \in V(N_i)$. Since S is a bicritical snark, the multipole $S - \{x,y\}$ is colourable. Replacing the 5-pole $\mathrm{NN}(N_j,N_k)$ containing the remaining

two negators by the path of length two P_2, we get the multipole $S_i - \{x,y\}$ which is colourable since $\mathrm{Col}(\mathrm{NN}(N_j,N_k)) \subseteq \mathrm{Col}(P_2)$. Therefore, the negator N_i is bicritical for each $i \in \{1,2,3\}$ □

However, we can see that even irreducible snark are not sufficient for constructing irreducible snarks by other type of expansion. Let us take the Goldberg-Loupekine snark $GL = \mathrm{NNN}(N_P,N_P,N_P)$. We know that the snark GL is irreducible and that it has three pairs of removable edges, let e, $f = uv$ be such pair.

We replace the vertex v and the edge e by the colour-equivalent $(2,3)$-pole $\mathrm{NT}(P,P)$ consisting of the negator and the proper $(2,3)$-pole constructed from the irreducible Petersen graph. We obtain a snark of order 38. Using a computer, we verified that this snark is not irreducible although all three used snarks were irreducible.

To find some sufficient condition, we define following "technical" property of negators which enables us to better characterize colourings of negators with some vertex removed. We shall use the notion of "essential edge" introduced in [3] from similar reasons. For a graph G and its 2-valent vertex v, we replace the vertex v with an edge and the resulted graph denote by $G \sim v$. This process is called *smoothing* a vertex.

Definition 5. *A pair of distinct edges $\{e,f\}$ of a snark G is essential if it is nonremovable and for every 2-valent vertex v of the graph $G-\{e,f\}$ the graph $(G-\{e,f\}) \sim v$ is colourable.*

Definition 6. *Let $N = \mathrm{Neg}(S;u,v)$ be a negator. The negator N is called good if for every edge e of the removed u–v–path and every vertex $y \in V(N)$ there exists an edge f incident with y such that the pair od edges $\{e,f\}$ is essential in S.*

Theorem 3. *Let $N_i = \mathrm{Neg}(S_i,u_i,v_i)$ for $i \in \{1,2,3\}$ be three good bicritical perfect negators. Then $S = \mathrm{NNN}(N_1,N_2,N_3)$ is a bicritical snark.*

Proof. For $i \in \{1,2,3\}$, let the negator N_i was constructed from a snark S_i by removing a u_i–w_i–v_i path. We denote the two connectors of the negator N_i by I_i and O_i and its residual edge by r_i. Let x, y are arbitrary vertices of the snark S. We show that the multipole $S-\{x,y\}$ is colourable and hence S is bicritical.

Case 1. If both vertices x, y belong to the same negator N_i, we can replace the other two negators by the colour-equivalent P_2 (path of length two) completing the negator N_i to snark S_i. Since $S_i - \{x,y\}$ is colourable, so is $S-\{x,y\}$.

Case 2. Let the vertices x, y belong to two different negators, let us say $x \in V(N_1)$ and $y \in V(N_2)$. As the negator N_1 is good, we can take an edge e incident with x such that $\{e,u_1w_1\}$ is a essential pair of edges. Then the 3-pole $S_1 - \{e,u_1w_1\} \sim u_1$ is colourable. Let φ_1 be some colouring of it. We denote the colour assigned to the semiedge incident with w_1 by a. From the Parity lemma, the sum of the colours of remaining two semiedges is a (see Figure 25).

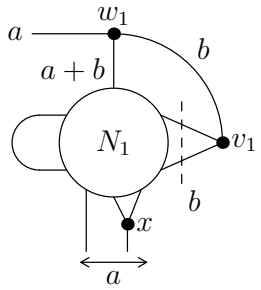


Figure 25: The colouring φ_1 of the negator N_1

We subdivide edge created by smoothing the vertex u_1. Then in the colouring φ_1 both new semiedges have the same colour. Further, we remove the vertices w_1, v_1 and x and get the 8-pole $N_1 - x$ coloured by the colouring φ_1 such that $\varphi_*(I_1) = 0$, $\varphi_*(O_1) = b$ and $\varphi_1(r_1) = a+b$ for some $b \neq a$.

Similarly, we remove some essential pair of edges u_2w_2, f from the snark S_2 where the edge f is incident with y. Both pairs of arisen semiedges have to have different colours otherwise we could join them and get a colouring of the snark S_2. Therefore, the colours of the semiedges of arisen 4-pole can be labelled as in Figure 26 where $p \in \{a,b\}$ for some colouring φ_2.

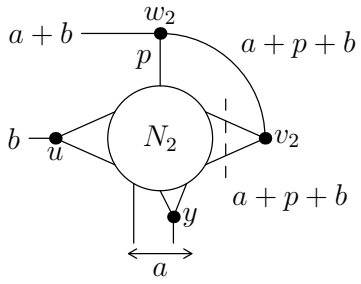


Figure 26: The colouring φ_2 of the negator N_2

Then, we remove the vertices u_2, w_2, v_2 and y and get the 8-pole $N_2 - y$ coloured by the colouring

φ_2. Now, we can join the 8-poles $N_1 - x$ and $N_2 - y$ into a 11-pole $M = \mathrm{NN}(N_1, N_2) - \{x, y\}$ which can be coloured using the colourings φ_1 and φ_2 (see Figure 27).

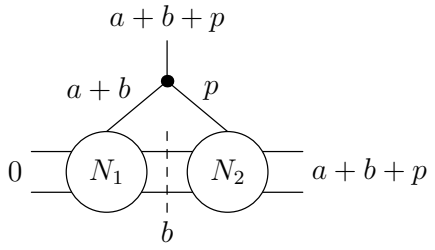


Figure 27: Colouring of the NN pole

Finnaly, we take the negator $N_3(I_3, O_3; r_3)$ and perform junctions of connectors I_3 and O, O_3 and I, r_3 and the residual edge r of the multipole M. Observe that $\varphi(I) = 0$, $\varphi(O) = \varphi(r) = a + b + p \neq 0$. Since the negator N_3 is perfect, it admits flows 0, $a+b+p$ and $a+b+p$ through its connectors, so the obtained 6-pole $S - \{x, y\}$ is colourable.

Case 3. Let the vertex x belongs to none of the negators, so it is the vertex connecting the residual semiedges from negators N_1, N_2, N_3. Let $y \in V(N_2)$. We take the colouring φ_2 of $N_2 - y$ same as in the previous case, i. e. $\varphi_2(I_2) = b$, $\varphi_2(r_2) = p \in \{a, b\}$ and $\varphi_2(O_2) = p + a + b$.

Since N_1 is a perfect negator, it admits a colouring φ_1 such that $\varphi_1(O_1) = \varphi_2(I_2) = b$ and $\varphi_1(I_1) = 0$. In similar way as in the case 2, we construct the multipole $S - \{x, y\}$ which is colourable. □

To employ this construction, we need to know negators which are good. As one can expect, negators from the Isaacs snarks are good since every pair of its edges is essential [3].

Acknowledgments

The author thanks to his supervisor Ján Mazák and Martin Škoviera for consultations and insight in theory of snarks.

References

[1] D. Blanuša. Problem četiriju boja [the four-color problem]. *Glasnik Mat. Fiz. Astr Ser: ZI (Hrvatsko Prirodoslovno DruStvo)*, 1:31–42, 1946.

[2] G. Brinkmann, J. Goedgebeur, J. Hägglund, and K. Markström. Generation and properties of snarks. *Journal of Combinatorial Theory, Series B*, 103(Issue 4):468–488, 2013.

[3] M. Chladný and M. Škoviera. Factorisation of snarks. *The Electronic Journal of Combinatorics*, 71:Research Paper R32, 53 p.–Research Paper R32, 53 p., 2010.

[4] B. Descartes. Network-colourings. *The Mathematical Gazette*, 32:67–69, 1948.

[5] M. A. Fiol. A boolean algebra approach to the construction of snarks. *Graph Theory, Combinatorics and Applications*, 1:493–524, 1991.

[6] J. G. H. M. G. Brinkmann, K. Coolsaet. House of graphs: a database of interesting graphs. *Discrete Applied Mathematics*, 10:311–314, 2013. Available at `http://hog.grinvin.org`.

[7] M. K. Goldberg. Construction of class 2 graphs with maximum vertex degree 3. *Journal of Combinatorial Theory, Series B*, 31(Issue 3):282–291, 1981.

[8] R. Isaacs. Infinite families of nontrivial trivalent graphs which are not tait colorable. *The American Mathematical Monthly*, 82(Issue 3):221–239, 1975.

[9] M. Kochol. Snarks without small cycles. *Journal of Combinatorial Theory, Series B*, 67:779–791, 2006.

[10] R. Lukoťka, E. Máčajová, J. Mazák, and M. Škoviera. Small snarks with large oddness. *Journal of Graph Theory*, 22(Issue 1):1–51, 2015.

[11] E. Máčajová and M. Škoviera. Irreducible snarks of given order and cyclic connectivity. *Discrete Mathematics*, 306(Issue 1):34–47, 1996.

[12] R. Nedela and M. Škoviera. Atoms of cyclic connectivity in cubic graphs. *Mathematica Slovaca*, 45(5):481–499, 1995.

[13] R. Nedela and M. Škoviera. Decompositions and reductions of snarks. *Journal of Graph Theory*, 22(Issue 3):253–279, 1996.

[14] A. G. C. Peter J. Cameron and J. J. Watkins. Decomposition of snarks. *Journal of Graph Theory*, 1(Issue 1):13–19, 1987.

[15] J. Rajník. Decomposition of small snarks. Bachelor thesis, Comenius university in Bratislava, 2017.

[16] R. Simeunovič. Analýza štrukturálnych vlastností snarkov. Bakalárska práca, Univerzita Komenského v Bratislave, 2016.

[17] P. G. Tait. Remarks on the colourings of maps. *Proc. R. Soc. Edinburgh*, 10:729, 1880.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 38–44
ISBN 978-8081470882, © 2018 Patrik Mihala

Determination of adsorption isotherms in 3D unsaturated-saturated porous media

Patrik Mihala[1*]

Supervisor: Jozef Kačur[1†]

Katedra matematickej analyzy a numerickej matematiky, FMFI UK, Mlynska dolina, 842 48 Bratislava

Abstract: We are focused to the numerical modelling of contaminant transport in unsaturated porous media in 3D. The mathematical model represents the conservation of contaminant and water mass balance. It is expressed by coupled non-linear system of parabolic-elliptic equations. Mathematical model for water transport in unsaturated porous media is represented by Richard's type equation. Also diffusion of contaminant in matrix could be included.

The adsorption isotherms are generally non-linear, containing the tuning parameters underlying to determination. We determine these parameters by the methods of inverse problems. A successful experiment scenario is suggested to determine the required parameters. Used complex model in 3D requires also determination of dispersion coefficients. This problem together with suitable experiment scenario is discussed too. The obtained experiments support our method.

We have discussed the adsorption problem in 1D model before, but preferential streamlines in 1D thin tubes shadow accurate results in determination of required parameters.

Keywords: unsaturated flow, contaminant transport, adsorption isotherms, inverse problems

1 Introduction

We discuss the numerical modelling of infiltration of contaminated water into unsaturated porous media and determination of adsorption isotherms. A coupled system with contaminant transport, dispersion and adsorption is considered.

The main contribution is focused to the determination of adsorption isotherms parameters. The developed numerical method is a good candidate to solve corresponding inverse problems. Numerical experiments support our method.

The mathematical model for unsaturated flow is based on the Richard's non-linear and degenerate equation. The model of contaminant transport is based on the Fick's law and the mass balance equation. Non-linear adsorption is represented by adsorption isotherms and kinetic rates. A correct numerical method is constructed in 3D which can be a good candidate for the solution of inverse problems to determine model parameters in the adsorption part of the model. Our numerical method is based on flexible time stepping and operator splitting by means of which we decompose the complex strongly nonlinear system to its natural parts: flow in unsaturated porous media, transport with diffusion and dispersion of contaminant and its adsorption.

Our previously developed numerical model for 1D suffers in practical laboratory experiments from preferential streamlines appearing, specially, when applying centrifugation. Experiments with 3D (cylindrical samples) yield much more of scenarios by means of which we reduce the creation of preferential streamlines.

In series of numerical experiments we demonstrate the effectiveness of our method and suitable experimental scenarios enabling relatively simple measurements used in solution of inverse problems.

2 Mathematical model

2.1 Water flow

Our sample is a cylinder with radius R and height Z. We will consider radial symmetrical boundary conditions, therefore we transform the mathematical model using cylindrical coordinates (r,z). Then the governing partial differential equation for infiltration (in gravitational mode) reads as follows

$$\partial_t \theta(h) = \frac{1}{r}\partial_r(rK(h)\partial_r h) + \partial_z(K(h)(\partial_z h - 1)) \quad (1)$$

where the saturation θ, depending on pressure head h, is of the form

$$\theta(h) = \theta_r + (\theta_s - \theta_r)\theta_{ef}(h), \quad (2)$$

*pmihala@gmail.com
†Jozef.Kacur@fmph.uniba.sk

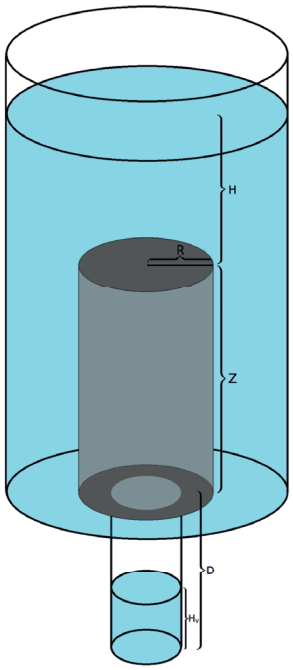


Figure 1: Sample

with irreducible saturation θ_r, porosity θ_s and effective saturation $\theta_{ef}(h)$.

We consider the fundamental saturation-pressure law in terms of van Genuchten-Mualem empirical model $h \leq 0$ in unsaturated zone

$$\theta_{ef}(h) = \frac{1}{(1+(\alpha h)^n)^{\frac{1}{m}}}, \tag{3}$$

where α, n, $m = 1 - \frac{1}{n}$ are soil parameters. In saturated zone we have $\theta_{ef} = 1$, $h > 0$.

The hydraulic permeability $K = K(h)$ is in van Genuchten-Mualem model

$$K(h) = K_s(\theta_{ef}(h))^{\frac{1}{2}} \cdot \left(1-(1-(\theta_{ef}(h))^m)^{\frac{1}{m}}\right)^2, \tag{4}$$

where K_s (also soil parameter) is a hydraulic permeability for saturated porous media, i.e., $K_s = K(0)$.

The flux in cylindrical coordinates is of the form

$$\mathbf{q} = -(q^r, q^z)^T, \tag{5}$$

$$q^r = K(h)\partial_r h,\ q^z = K(h)(\partial_z h - \beta).$$

The flow model is expressed in the form of Richard's equation

$$\partial_t \theta(h) = \frac{1}{r}\partial_r(rK(h)\partial_r h) + \partial_z(K(h)(\partial_z h - 1)). \tag{6}$$

We note that our model includes both saturated (elliptic partial differential equation) and unsaturated (parabolic partial differential equation) zones. We consider initially (at $t = 0$) the dry sample $h = -\infty$), but in the numerical experiments we use $h = -200$.

The top of our sample $\Gamma_{top} = \{r \in (0,R), z = Z\}$ is isolated, i.e., we consider $q_z = 0$ and the same condition we consider on the part $\{r \in (R1,R), z = 0\}$ of the bottom. Through the part $\Gamma_{out} = \{r \in (0,R1), z = 0\}$ the infiltrated water can outflow to the collection chamber, i.e. we consider $\partial_z h = 0$ on Γ_{out} in q^z (see (5)). The boundary condition on the sample mantel $\Gamma_{mant} = \{r = R, z \in (0,Z)\}$ reflects the hydrostatic pressure generated by water level $H(t) \geq 0$ (measured from the top of the sample) at the coordinate $0 \leq z \leq Z$. Then our boundary condition on Γ_{mant} is

$$h(t,R,z) = H(t) + (Z - z). \tag{7}$$

Due to the mass balance argument, the change in $H(t)$ reflects the infiltration flux through Γ_{mant} for $t > 0$. Thus, our system is closed by ODE

$$\dot{H}(t) = -Q\int_{\Gamma_{mant}} q^z \, d\Gamma_{mant}, \tag{8}$$

where Q is the ratio of the areas of Γ_{top} and the cross-section of inflow chamber. The amount of outflow water in the collection chamber is given by

$$M_{out}(t) = \int_0^t \int_{\Gamma_{out}} q^z \, d\Gamma_{out}) dt,$$

which could be expressed in terms of water level

$$H_{out}(t) = Q_1 M_{out}(t),$$

where Q_1 is the ratio of areas Γ_{out} of the cross-section area and collection area of the collection chamber.

Conservation of contamination in water is expressed (in Cartesian coordinates) in partial differential equation.

2.2 Contaminant transport in the water

Denote by w the concentration of a contaminant dissolved in the water. Its transportation in porous media is governed by water flux $\mathbf{q}$, molecular diffusion D_o and dispersion characterized in cylindrical coordinates by the matrix

$$\bar{D} = \begin{pmatrix} D_{1,1} & D_{1,2} \\ D_{2,1} & D_{2,2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_L(q^r)^2 + \alpha_T((q^z)^2 & (\alpha_L - \alpha_T)(q^r q^z) \\ (\alpha_L - \alpha_T)(q^r q^z) & \alpha_L(q^z)^2 + \alpha_T(q^r)^2 \end{pmatrix} \frac{1}{|\vec{q}|}, \tag{9}$$

where α_L is longitudinal coefficient and α_T is transversal coefficient.

Denote by Qw contaminant flux,

$$Qw^r = -q_r w + \theta(D_{1,1}\partial_r w + D_{1,2}\partial_z w + D_o\theta \quad (10)$$

$$Qw^z = -q_z T w + \theta(D_{2,1}\partial_r w + D_{2,2}\partial_z w + D_o\theta. \quad (11)$$

Then, our mathematical model for contaminant transport with adsorption (in cylindrical coordinates) reads

$$\partial_t(\theta w) - \left(\frac{1}{r}\partial_r(rQw^r) + \partial_z(Qw^z\right) = -\rho\partial_t S. \quad (12)$$

2.3 Adsorption

The adsorption kinetic is governed by the ODE

$$\partial_t S = \kappa(\Psi(w) - S), \quad (13)$$

where S represents the adsorbed contaminant by a unit mass of porous media. Here, κ is the adsorption rate coefficient and describes the velocity of adsorption. The mathematical model (13) is a very special one and all the results obtained here can be easily extended to other models. The most common isotherms are $\Psi(s) = as$ (linear); $\Psi(s) = as^b$ (Freundlich); $\Psi(s) = \frac{as}{1+bs}$ (Langmuir); $\Psi(s) = \frac{as^r}{1+bs^r}$ (Mixed Freundlich-Langmuir).

2.4 Boundary and initial conditions

The governing equations are completed by a corresponding boundary and initial conditions. For simplicity we assume that on the boundary the contaminant concentration is constant W_0 and the contaminant is transported by water flow through the mantel $\Gamma_{mant} = \{r = R, z \in (0,Z)\}$ only. On the sample bottom part $\Gamma_{out} = \{r \in (0,R1), z = 0\}$ is a cumulated water outflow

$$M_{out}(t) = \int_0^t \int_{\Gamma_{out}} q^z \, d\Gamma_{out})dt$$

with the cumulated contaminant outflow

$$MW_{out}(t) = \int_0^t \int_{\Gamma_{out}} q^z w d\Gamma_{out})dt.$$

In solving inverse problems we shall assume the measurements of the time evolution of concentration of cumulated water outflow OM,

$$OM(t) = \frac{MW_{out}(t)}{M_{out}(t)}.$$

In our numerical experiments we assume the following model data:
$\theta_0 = 0.38$, $\theta_r = 0$, $K_s = 2.4\ 10^{-4}$, $\alpha = 0.0189$, $n = 2.81$, $g = 981$, $\alpha_L = 1$, $\alpha_T = \frac{1}{8}$, $\rho = 1$ and $\kappa = 0.05$, $h = -200$, $W_0 = 1, S_0 = 0$.

We consider the Langmuir adsorption isotherm with the coefficients $a = 2, b = 1$. We present the solution in the following three experiments scenarios, where the flow boundary conditions are presented before and the initial conditions will be specified in experiments.

In experiment 1 the infiltrated water concentration is $w = 1$. The initial sample saturation is almost zero, $h = -200$ and $S_0 = 0$, $t \in (0, 1500)$.

In experiment 2 the boundary and initial conditions are the same in $t \in (0,200)$. For $t \in (200,1500)$ the infiltrating water has concentration $w = 0$.

In experiment 3 we assume $S_0 = 0,5$ and the concentration of infiltrated water $w = 0$ for $t \in (0,1500)$.

3 Numerical realization

We apply in our approximation scheme a flexible time stepping and a finite volume method in space variables.

We consider uniform partition of the domain in numerical experiments with $(N_x, N_y) = (31,31)$ grid points $(r_i, z_j) = (i\Delta r, j\Delta z)$, $i, j = 0, 1, ..., 30$, $\Delta r = \frac{X}{N_r - 1}, \Delta z = \frac{Y}{N_z - 1}$.

We approximate the time derivative by backwards difference and then we integrate our system over the angular control volume $V_{i,j}$ with the corners $r_{i\pm1/2}, z_{j\pm1/2}$ and with the length $(\Delta r, \Delta z)$ of the edges. Then, our approximation linked with the inner grid point (r_i, z_j) at the time $t = t_k$ is followed.

$$\begin{aligned}
&\frac{\theta(h) - \theta(h^{k-1})}{\tau}\Delta r\Delta z \\
&- \Delta z \frac{r_{i+1/2}}{r_i}\left[\frac{K(h_{i+1}) + K(h)}{2}\left(\frac{h_{i+1} - h}{\Delta r}\right)\right] \\
&+ \Delta z \frac{r_{i-1/2}}{r_i}\left[\frac{K(h) + K(h_{i-1})}{2}\left(\frac{h - h_{i-1}}{\Delta r}\right)\right] \\
&- \Delta r\left[\frac{K(h_{j+1}) + K(h)}{2}\left(\frac{h_{j+1} - h}{\Delta z} - 1\right)\right] \\
&+ \Delta r\left[\frac{K(h) + K(h_{j-1})}{2}\left(\frac{h - h_{j-1}}{\Delta z} - 1\right)\right] = 0
\end{aligned} \quad (14)$$

3.1 Quasi-Newton linearisation

In each (r_i, z_j) we linearise θ in terms of h iteratively (with iteration parameter l) following [Celia et al.,] in the following way

$$\frac{\theta(h^{k,l+1}) - \theta(h^{k-1})}{\tau} = C^{k,l}\frac{h^{k,l+1} - h^{k,l}}{\tau} + \frac{\theta^{k,l} - \theta^{k-1}}{\tau},$$

where

$$C^{k,l} = \frac{\partial \theta^{k,l}}{\partial h^{k,l}} = \\ (\theta_s - \theta_r)(1-n)\alpha(\alpha h^{k,l})^{n-1}(1+(\alpha h^{k,l})^n)^{-(m+1)}$$

for $h^{k,l} < 0$, else $C^{k,l} = 0$. We stop iterations for $l = l^*$, when $h^{k,l^{*+1}} - h^{k,l^*} < \varepsilon$ and then we put $h^k := h^{k,l^*+1}$. Finally we replace the non-linear term $K(h^k)$ by $K(h^{k,l})$, and our approximation scheme became linear in terms of $h^{k,l+1}$.

Generally, we speed the iteration by a special construction of starting point $h^{k,0} \approx h^{k-1}$ and using suitable damping parameter in solving corresponding linearised system. Solution of complex system by operator splitting method. To obtain approximate solution for contaminant in water and matrix at the time section $t = t_k$ when starting from $t = t_{k-1}$ we use the obtained flow characteristics from $t = t_k$ for θ^k, h^k and $\vec{q}^k$ and for matrix $\bar{D}^k$.

3.2 Approximation scheme for contaminant

For w at (r_i, z_j) for $t = t_k$ we obtain by finite volume

$$\begin{aligned} &\theta\frac{w - w^{k-1}}{\tau}\Delta r\Delta z \\ &- \Delta z\left[\frac{1}{r_i}(r_{i+1/2}Qw^r_{i+1/2} - r_{i-1/2}Qw^r_{i-1/2})\right] \\ &+ \Delta r\left[Qw^z_{j+1/2} - Qw^z_{j-1/2})\right] \\ &= -\Delta r\Delta z\rho\,\psi(w^{k-1}) - S^{k-1}), \end{aligned}$$

where $\partial_z w$ in Qw^r in the point $\{r_{i+1/2}, z_j\}$ is approximated by

$$\frac{w_{i+1,j+1} + w_{i,j+1} - w_{i+1,j-1} - w_{i,j-1}}{4\Delta z}$$

and in the point $\{r_{i-1/2}, z_j\}$ we shift i by $i-1$. Analogously we approximate $\partial_r w$ in Qw^z, where the role of indexes i and j is interchanged. Finally, we have to approximate the items in the dispersion matrix D arising in Qw^r, Qw^z.

We approximate K, $\vec{q}$ and D in middle points by

$$\begin{aligned} K_{i\pm\frac{1}{2}} &= \frac{K(h_{i\pm1}) + K(h_i)}{2} \\ K_{j\pm\frac{1}{2}} &= \frac{K(h_{j\pm1}) + K(h_j)}{2} \\ q^r_{i\pm\frac{1}{2}} &= -K_{i\pm\frac{1}{2}}\left(\frac{\pm h_{i\pm1} \mp h_i}{\Delta r}\right) \\ q^z_{j\pm\frac{1}{2}} &= -K_{j\pm\frac{1}{2}}\left(\frac{\pm h_{j\pm1} \mp h_j}{\Delta z} - 1\right) \\ q^z_{i\pm\frac{1}{2}} &= -K_{i\pm\frac{1}{2}}\left(\frac{h_{i\pm1,j+1} + h_{i,j+1} - h_{i\pm1,j-1} - h_{i,j-1}}{4\Delta z} - 1\right) \\ q^r_{j\pm\frac{1}{2}} &= -K_{j\pm\frac{1}{2}}\left(\frac{h_{i+1,j\pm1} + h_{i+1,j} - h_{i-1,j\pm1} - h_{i-1,j}}{4\Delta r}\right) \\ D_{1,1,i\pm\frac{1}{2}} &= \frac{\alpha_L(q^r_{i\pm\frac{1}{2}})^2 + \alpha_T(q^z_{i\pm\frac{1}{2}})^2}{\sqrt{(q^r_{i\pm\frac{1}{2}})^2 + (q^z_{i\pm\frac{1}{2}})^2}} + \lambda\,\theta_{i\pm\frac{1}{2}} \\ D_{1,2,i\pm\frac{1}{2}} &= \frac{(\alpha_L - \alpha_T)q^r_{i\pm\frac{1}{2}}q^z_{i\pm\frac{1}{2}}}{\sqrt{(q^r_{i\pm\frac{1}{2}})^2 + (q^z_{i\pm\frac{1}{2}})^2}} \end{aligned}$$

$$D_{2,2,j\pm\frac{1}{2}} = D_{1,1,i\pm\frac{1}{2}}\ (i \leftrightarrow j; \alpha_L \leftrightarrow \alpha_T)$$

$$D_{2,1,j\pm\frac{1}{2}} = D_{1,2,i\pm\frac{1}{2}}\ (i \leftrightarrow j).$$

3.3 Approximation scheme for adsorption

We apply the same finite volume method and in the point (r_i, z_j) at $t = t_k$ we obtain

$$\frac{S^k - S^{k-1}}{\tau}\Delta r\Delta z = \Delta r\Delta z\kappa(\psi(w^k) - S^{k-1}).$$

To obtain approximation linked with the boundary points we apply the same strategy of finite volume method where the control volume $V_{i,j}$ is only half or quoter of the $\Delta r\Delta z$ corresponding to the inner grid points.

4 Numerical experiments

4.1 Inverse problem: determination of κ, ψ

Measuring the concentration of cumulated outflow water $OM(t)$ will be the main information source of adsorption mechanism. We propose the infiltration scenarios, described by boundary and initial conditions before, which enable us to measure (κ, ψ).

We will focus to Langmuir adsorption isotherm, where except of κ we have to determine the coefficients $\{a, b\}$. We assume the time interval $(0, 1500)$

with 31 uniformly distributed time moments $\{t_i\}_1^{31}$, where we expect measurements of $OM(t_i)$. On the other hand, we solve our system with some given parameters $p = \{a, b, \kappa\}$ and obtain $OM_c(t_i)$. Solution of our inverse problem consists in determination of p which minimizes the $||\{OM(t_i) - OM_c(t_i)\}_1^{31}||$. This could be realized iteratively using some minimization software. We use "fminsearch" from Matlab toolbox.

We test the practical applicability of our suggested experiment scenario with efficiency of our numerical method in the following way. We compute OM_c using same "standard" model parameter p_s, e.g., $p_s = \{2, 1, 0.05\}$. Then we "forget " p_s and instead we use a starting parameter p_o in minimization procedure. The optimal solution p_{opt} (with respect to some "tolerance") we compare with our model parameter p_s. Stability and reliability of our method we verify in series of experiments, where dependence on the choice of starting parameters and the level of noise applied to OM_c is taken into account.

The convergence of minimization procedure is strongly linked with expected local minima, which we test with the change of starting parameters. To increase the reliability of p_{opt} we can extend the measurements vector $OM_c \equiv OM_c^{(I)}$ to $\{OM_c^{(I)}, OM_c^{(II)}, OM_c^{(III)}\}$ linked with the solution of Experiments I-III described before.

4.2 Results in experiment 1

In the experiment 1 we can see, that contaminant in water is infiltrating together with water very quickly, because of negative pressure h. Therefore the concentration of the outflow water is increasing fast. After 350 seconds the cylinder is fully saturated, so water flow slows down rapidly and contaminant is adsorbed into the sample. Because of that, concentration of the water in the collection chamber is increased slower as we can see in figure 3.

Determination of adsorption coefficients is relatively stable. We obtain error up to 8% with different noises up to 0.01 and with various starting points as we can see in table 1.

4.3 Results in experiment 2

In this experiment, contaminated water is infiltrating 180 seconds. Part of the cylinder is still almost dry, when we change the boundary condition, where water with zero concentration is infiltrated. We can see,

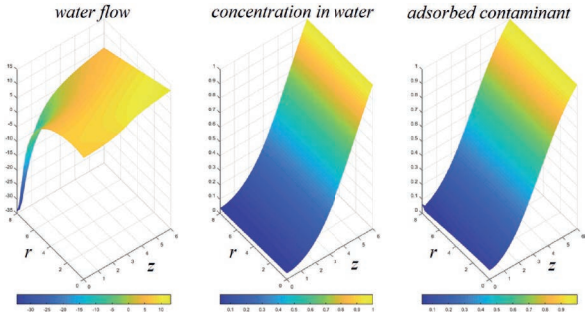


Figure 2: Water pressure h, concentration in water w and adsorbed contaminant S in time $t = 330$ in experiment 1

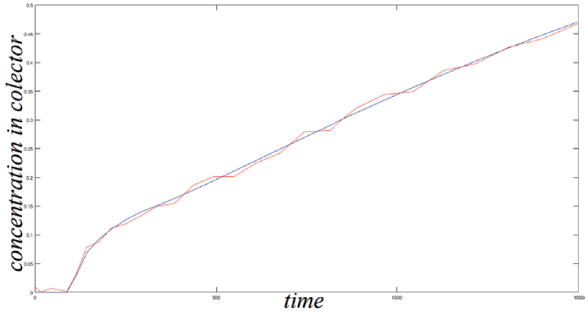


Figure 3: Time evolution of concentration of cumulated outflow water in experiment 1

Table 1: Optimal values of a, b, κ for $p_s = [2, 1, 0.05]$ with noise 0.01 in experiment 1

p_{start}	p_{opt}
$[1, 0.5, 0.01]$	$[1.9901, 0.9484, 0.04934]$
$[1, 0.5, 0.01]$	$[1.9319, 0.9398, 0.05069]$
$[3, 0.5, 0.01]$	$[2.0059, 1.0529, 0.05099]$
$[3, 0.5, 0.01]$	$[2.0774, 1.0515, 0.04929]$
$[1, 2, 0.01]$	$[1.9904, 1.0384, 0.05024]$
$[1, 2, 0.01]$	$[1.9943, 0.9523, 0.04971]$
$[3, 2, 0.01]$	$[2.0555, 1.0427, 0.04930]$
$[3, 2, 0.01]$	$[1.9226, 1.0558, 0.04976]$
$[1, 0.5, 0.1]$	$[1.9303, 1.0381, 0.05010]$
$[1, 0.5, 0.1]$	$[1.9190, 1.0596, 0.04943]$
$[3, 0.5, 0.1]$	$[1.9801, 0.9355, 0.04907]$
$[3, 0.5, 0.1]$	$[1.9697, 1.0707, 0.04982]$
$[1, 2, 0.1]$	$[1.9493, 1.0306, 0.05079]$
$[1, 2, 0.1]$	$[1.9372, 1.0650, 0.05028]$
$[3, 2, 0.1]$	$[1.9214, 0.9552, 0.04981]$
$[3, 2, 0.1]$	$[2.0414, 1.0373, 0.04969]$

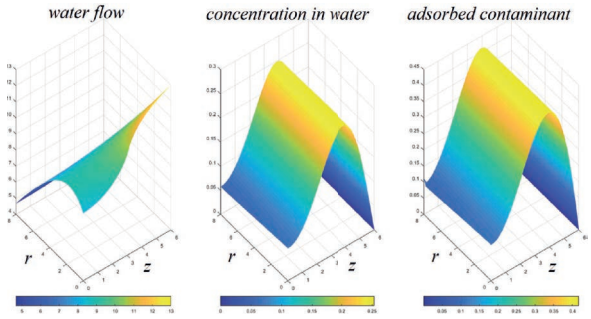


Figure 4: Water pressure h, concentration in water w and adsorbed contaminant S in time $t = 350$ in experiment 2

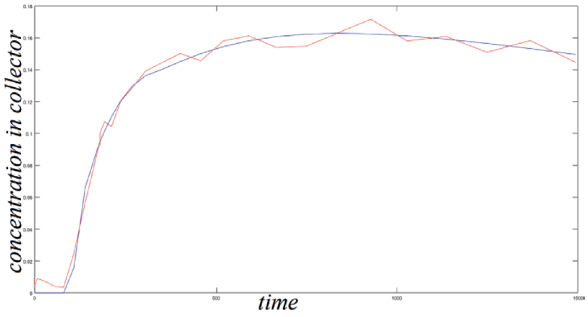


Figure 5: Time evolution of concentration of cumulated outflow water in experiment 2

that contaminant is adsorbed into the sample and concentration in outflow chamber is increasing, but after that, uncontaminated water causes desorption in the sample. It causes decreasing of concentration in outflow chamber as we can see in figure 5.

This method is very stable. As we can see in table 2, error of the adsorption coefficients is up to 5% with different noises up to 0.01 and with various starting points.

4.4 Results in experiment 3

In experiment 3 we assume $S_0 = 0,5$ and infiltrated water has concentration $w = 0$. Therefore desorption happens. When the sharp front of infiltrated water reaches Γ_{out}, concentration of the water in the collection chamber increases rapidly, because of the desorption. The adsorbed contaminant in sample is decreasing and therefore concentration of the water in outflow chamber is decreasing too as we can see in figure 7.

This experiment is not very stable for determination of adsorption coefficients, because it is very sensitive for measured data. We obtained error up to 15% with different noises up to $0,01$ as we can see in table 3.

Table 2: Optimal values of a, b, κ for $p_s = [2,1,0.05]$ with noise 0.01 in experiment 2

p_{start}	p_{opt}
$[1,0.5,0.01]$	$[1.9604,0.9852,0.04912]$
$[1,0.5,0.01]$	$[2.0242,0.9655,0.05033]$
$[3,0.5,0.01]$	$[2.0790,1.0039,0.05058]$
$[3,0.5,0.01]$	$[2.0533,1.0242,0.04961]$
$[1,2,0.01]$	$[2.0313,1.0339,0.05042]$
$[1,2,0.01]$	$[1.9407,1.0353,0.05039]$
$[3,2,0.01]$	$[2.0444,0.9768,0.04936]$
$[3,2,0.01]$	$[1.9124,1.0131,0.05055]$
$[1,0.5,0.1]$	$[2.0227,1.0328,0.05040]$
$[1,0.5,0.1]$	$[1.9208,1.0081,0.05056]$
$[3,0.5,0.1]$	$[1.9076,1.0047,0.05011]$
$[3,0.5,0.1]$	$[2.0311,0.9689,0.04935]$
$[1,2,0.1]$	$[1.9283,0.9673,0.04965]$
$[1,2,0.1]$	$[2.0323,1.0222,0.04950]$
$[3,2,0.1]$	$[1.9331,1.0388,0.05038]$
$[3,2,0.1]$	$[1.9073,0.9531,0.04962]$

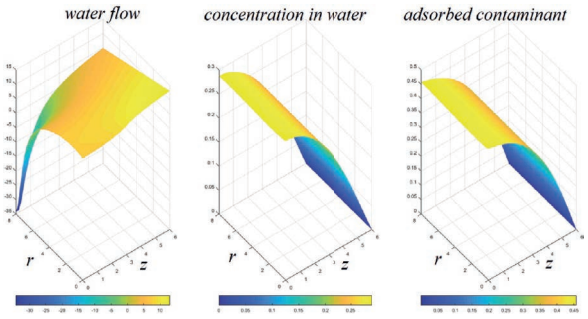


Figure 6: Water pressure h, concentration in water w and adsorbed contaminant S in time $t = 330$ in experiment 3

5 Conclusion

Numerical experiments demonstrate efficiency of our numerical method also in more dimensional case using only non-invasive measurements. The $0,01$ noise in our measurements effects the $5-8\%$ defect with three adsorption coefficients in experiments 1 and 2. In the experiment 3 the defect reaches up to 15%. During series of experiments we have remarked

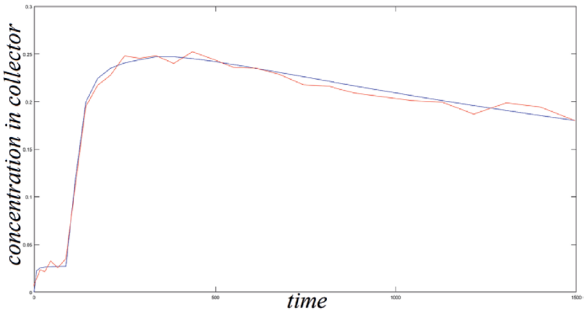


Figure 7: Time evolution of concentration of cumulated outflow water in experiment 3

Table 3: Optimal values of a, b, κ for $p_s = [2, 1, 0.05]$ with noise 0.01 in experiment 3

p_{start}	p_{opt}
$[1, 0.5, 0.01]$	$[1.8492, 1.1096, 0.05065]$
$[1, 0.5, 0.01]$	$[2.1265, 0.8877, 0.05052]$
$[3, 0.5, 0.01]$	$[2.2637, 0.9220, 0.04833]$
$[3, 0.5, 0.01]$	$[2.2856, 0.9014, 0.04709]$
$[1, 2, 0.01]$	$[2.0028, 1.0397, 0.05193]$
$[1, 2, 0.01]$	$[2.2791, 0.9812, 0.05074]$
$[3, 2, 0.01]$	$[1.7800, 0.9144, 0.04766]$
$[3, 2, 0.01]$	$[1.7770, 1.0251, 0.05200]$
$[1, 0.5, 0.1]$	$[1.9064, 1.1218, 0.04914]$
$[1, 0.5, 0.1]$	$[1.8867, 1.0865, 0.04929]$
$[3, 0.5, 0.1]$	$[1.9636, 1.1481, 0.05132]$
$[3, 0.5, 0.1]$	$[1.7279, 0.9413, 0.04992]$
$[1, 2, 0.1]$	$[1.8213, 1.0419, 0.05116]$
$[1, 2, 0.1]$	$[1.9776, 1.0960, 0.04753]$
$[3, 2, 0.1]$	$[2.1859, 1.0165, 0.04844]$
$[3, 2, 0.1]$	$[1.7631, 0.9642, 0.05070]$

very low dependence of optimal solution on starting points. Greater dependence is linked to the type of generated noise.

We developed efficient numerical method for determination of adsorption coefficients on the base of finite volume method. Operator splitting method is used to solve an complex system for water infiltration, contaminant transport by water including the adsorption with the matrix.

The 3D experimental scenario significantly decrease the influence of preferential streamlines appearing in 1D laboratory experiments (with thin tubes).

Acknowledgements

The author confirm a support by the Slovak Research and Development Agency APVV-15-0681 and VEGA 1/0565/16.

References

[Bear and Cheng, 2010] Bear, J. and Cheng, A. H.-D. (2010). Modeling groundwater flow and contaminant transport. *Springer*, 23.

[Bergman et al., 2011] Bergman, T. L., Lavine, A. S., Incropera, F. P., and DeWitt, D. P. (2011). *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. John Wiley and Sons, 7th edition.

[Celia et al.,] Celia, M. A., Bouloutas, E. T., and Zarba, R. L. A general mass conservative numerical solution for the unsaturated flow equation. *Water Resources Research*, 26(7):1483–1496.

[Constales and Kačur, 2001] Constales, D. and Kačur, J. (2001). Determination of soil parameters via the solution of inverse problems in infiltration. *Computational Geosciences*, 5(1):25–46.

[Kačur et al., 2016] Kačur, J., Mihala, P., and Tóth, M. (2016). Determination of soil parameters under gravitation and centrifugal forces in 3d infiltration. *WSEAS TRANSACTIONS on HEAT and MASS TRANSFER*, 11:115–120.

[Kačur and Minar, 2013] Kačur, J. and Minar, J. (2013). A benchmark solution for infiltration and adsorption of polluted water into unsaturated–saturated porous media, a solution for infiltration and adsorption. *Transport in porous media*, 97.

[Simunek et al., 2008] Simunek, Jiri, J., Saito, H., Sakai, M., and Van Genuchten, M. (2008). *The HYDRUS-1D Software Package for Simulating the One-Dimensional Movement of Water, Heat, and Multiple Solutes in Variably-Saturated Media*.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 45
ISBN 978-8081470882, © 2018 Jana Žilovcová

Nové diskrétne rozdelenie pravdepodobnosti s aplikáciou v kvantitatívnej lingvistike (rozšírený abstrakt)

Jana Žilovcová[1]*
Školiteľ: Ján Mačutek[1]‡

[1] Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

V práci [Mačutek a Wimmer, 2014] bola analyzovaná tzv. lexikálna kompaktnosť textu. Dve vety v texte dĺžky *n* sú spojené linkom, ak obsahujú rovnaké plnovýznamové slovo. Predpokladáme, že pre všetky dvojice viet link existuje s pravdepodobnosťou *p*. Náhodná premenná *LTC* je definovaná ako podiel počtu linkov, ktoré existujú v texte, k maximálnemu možnému počtu linkov.

Náhodná premenná *LTC* nerozlišuje poradie viet v texte, preto kompaktnosť textu môže byť lepšie opísaná premennou *X*, ktorá je definovaná ako vážený súčet všetkých linkov, teda

$$X = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=i}^{n}(j-i)L_{ij}, \qquad (1)$$

pričom L_{ij} nadobúda hodnotu 1, ak sú *i*-ta a *j*-ta veta spojené linkom; inak má hodnotu 0.

Náhodná premenná *X* má strednú hodnotu

$$E(X) = \frac{n(n^2-1)}{6}p$$

a disperziu

$$D(X) = \frac{n^4-n^2}{12}p(1-p).$$

Odhad parametra *p* momentovou metódou je

$$\hat{p} = \frac{6\bar{X}}{n(n^2-1)}.$$

Tento odhad je nevychýlený.

V texte s *n* vetami sa môže nachádzať *n*-1 linkov dĺžky 1, *n*-2 linkov dĺžky dva, a tak ďalej až po 1 link dĺžky *n*-1. Tým pádom vieme premennú *X* zapísať aj ako

$$X = \sum_{i=1}^{n-1} iX_i,$$

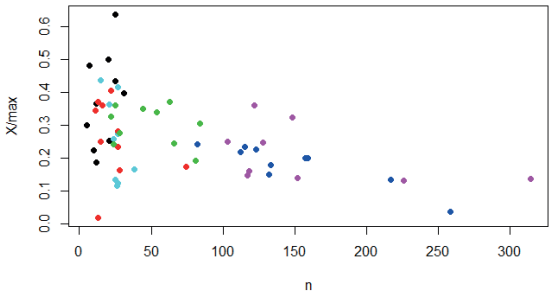
pričom *i* sú dĺžky linkov a náhodné premenné X_i sú počty linkov dĺžky *i*, ktoré sa v texte nachádzajú. Premenné X_i majú binomické rozdelenie s parametrami *n-i* a *p*. Dá sa ukázať, že pravdepodobnosť, že náhodná premenná *X* nadobudne hodnotu *k*, je

$$\mathrm{P}(X = k) = \sum_{x_i:\sum_{i=1}^{n-1} i\cdot x_i = k}\ \prod_{i=1}^{n-1}\binom{n-i}{x_i}p^{x_i}(1-p)^{n-i-x_i}.$$

Pre rôzne hodnoty parametra *p* a *n* sme vypočítali pravdepodobnosti hodnôt premennej *X*. Zaujímavý je špeciálny prípad pre $p = ½$, kedy dostávame vytvárajúcu funkciu

$$G_X(z) = \left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{(n-1)\cdot n}{2}}\prod_{k=1}^{n-1}(1+z^k)^{n-k}.$$

Skúmali sme hodnoty náhodnej premennej *X* v 59 českých textoch rôznych žánrov od Karla Čapka. Texty mali od 5 do 314 viet, išlo o deväť rozprávok, 10 žurnalistických článkov, 10 súkromných listov, 10 vedeckých textov, 10 krátkych poviedok a 10 cestopisov. Pozorované hodnoty náhodnej premennej *X* z (1) vydelené teoretickým maximom *X* pre danú dĺžku textu sú na Obr. 1. Zdá sa, že krátke texty sú oveľa heterogénnejšie ako dlhé texty.



Obr. 1: Závislosť podielu $\frac{X}{max}$ od počtu viet *n*.

Literatúra

[Mačutek a Wimmer, 2014] Mačutek, J., Wimmer, G. (2014). A Measure of Lexical Text Compactness. *Empirical Approaches to Language and Text Analysis*, Lüdenscheid, RAM-Verlag, str. 132-139.

* zilovcova.j@gmail.com
‡ jmacutek@yahoo.com

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 46
ISBN 978-8081470882, © 2018 Matej Hladiš

Vyhľadávanie podozrivých firiem: metóda obálky dát (rozšírený abstrakt)

Matej Hladiš[1*]

Školiteľ: Pavel Brunovský[1†]

[1] Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Práca ponúka novú metódu na ex-post odhaľovanie nekalých praktík pri verejných zákazkách. Metóda používa analýzu obálky dát (DEA) a verejne dostupné informácie z účtovných závierok a z verejných obstarávaní na klasifikáciu firiem na nepodozrivé a podozrivé, u ktorých je vysoká pravdepodobnosť podieľania sa na rozkrádaní v porovnaní s ostatnými analyzovanými firmami. Za podozrivú je považovaná firma, ktorá je efektívna podľa váženého aditívneho modelu s variabilnými výnosmi z rozsahu [Halická, 2015], pričom váhy pre i-ty vstup a r-tý výstup sú volené ako prevrátená hodnota rozdielu najväčšej pozorovanej hodnoty daného atribútu (vstupu, resp. výstupu) a jeho najmenšej pozorovanej hodnoty.

DEA je citlivá na voľbu vstupov a výstupov a preto sme v práci navrhli pre vážený aditívny model úlohu celočíselného programovania na výber vstupov a výstupov z danej množiny M potenciálnych vstupov a S potenciálnych výstupov.

Predpokladom úlohy je apriórna znalosť $P \geq 1$ podozrivých a $N \geq 1$ nepodozrivých firiem z analyzovanej množiny firiem. Nech $d^x \in \{0,1\}^M$ a $d^y \in \{0,1\}^S$, pričom $d^x_i = 1$, $i \in \{1,...,M\}$ zodpovedá voľbe i-teho vstupu a $d^y_j = 1$, $j \in \{1,...,S\}$ voľbe j-teho výstupu do DEA. Nech efektivity apriórne známych podozrivých firiem v závislosti od d^x a d^y sú $\theta_o(d^x,d^y)$, $o \in \{1,...,P\}$, a nepodozrivých firiem sú $\eta_l(d^x,d^y)$, $l \in \{1,...,N\}$. Potom sa na základe týchto firiem volí kombinácia vstupov a výstupov, ktorá maximalizuje dané kritérium $U(d^x,d^y)$ definujúce vzdialenosť podozrivých a nepodozrivých firiem. V práci bolo kritérium zvolené ako rozdiel efektivít apriórne známych podozrivých a nepodozrivých firiem, čiže

$$U(d^x,d^y) = \sum_{o=1}^{P} \frac{\theta_o(d^x,d^y)}{P} - \sum_{l=1}^{N} \frac{\eta_l(d^x,d^y)}{N} \qquad (1)$$

a úloha sa riešila genetickými algoritmami. Analogicky sme definovali aj úlohu pre prípad, že je k dispozícii iba množina potenciálnych atribútov a nie je známe, ktoré z nich sú vstupy a ktoré výstupy.

*matej.hladis@gmail.com
†brunovsky@fmph.uniba.sk

Iterácia	Počet podozrivých firiem	Priemerný koeficient
1.	7	2,4286
2.	12	1,0000
3.	17	0,8235
ostatné	152	0,2303

Tabuľka 1: Výsledné počty podozrivých firiem a priemerný koeficient podozrenia pre postupné odstraňovanie podozrivých firiem. Spolu bolo 11 iterácií a 188 firiem s priemerným KP pre všetky firmy 0,4149.

Na vyhodnotenie výsledkov sme zaviedli *Koeficient podozrenia (KP)*, ktorý nadobúda hodnoty od 0 do 4 s krokom 0,5 a vyjadruje, ako veľmi je firma podozrivá pri subjektívnom hodnotení jej finančného stavu, obstarávaní a prepojení štatutárov na iné osoby a firmy. Vyššia hodnota KP indikuje podozrivejšiu firmu a vážne podozrenia sú pre hodnoty $KP > 2$.

Klasifikačné schopnosti DEA sme vyhodnotili tak, že pre daný výber vstupov a výstupov sme našli podozrivé firmy, tie sme následne odstránili z dát a analýzu sme zopakovali. V takto vytvorenej postupnosti množín podozrivých firiem sme pozorovali pokles priemerného KP a už v prvej iterácii bolo zachytených 4 z 8 všetkých firiem s $KP > 2$.

Výsledky pre jednotlivé spôsoby výberu vstupov a výstupov sme porovali s expertným výberom a výberom cez group lasso [Qin and Song, 2014]. Z hľadiska koeficientu podozrenia bola najúspešnejšia nami navrhnutá metóda rozdielu efektivít v prípade neznámeho rozdelenia atribútov na vstupy a výstupy.

Literatúra

[Halická, 2015] Halická, M. (2015). DEA modely, lecture notes. http://www.iam.fmph.uniba.sk/institute/halicka/teach/DEAskripta.pdf. [Online; accessed 5-April-2018].

[Qin and Song, 2014] Qin, Z. and Song, I. (2014). Joint Variable Selection for Data Envelopment Analysis via Group Sparsity. https://ssrn.com/abstract=2406690. [Online; accessed 5-April-2018].

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 47
ISBN 978-8081470882, © 2018 Barbora Strešková

Šírenie infekčného ochorenia v sieťovom modeli Slovenska s regionálnou a vekovou štruktúrou, očkovaním a ubúdaním imunity (rozšírený abstrakt)

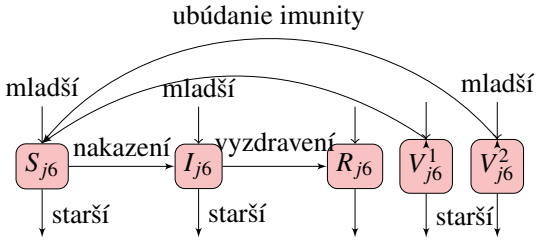
Barbora Strešková[1]*

Školiteľ: Soňa Kilianová[1]†

[1] Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

V našej práci sa zaoberáme modelovaním šírenia infekčného ochorenia osýpky pomocou epidemiologického modelu SIR (suspectible-infectious-recovered) [1]. Tento model rozdeľuje populáciu do tzv. kompartmentov na základe skúseností osoby s danou chorobou: S-vnímavé osoby, ktoré sa môžu nakaziť chorobou, I-infekčné osoby, ktoré šíria nákazu, R-odolné osoby. Imunitu môže osoba získať prirodzene, t.j. prekoná ochorenie, alebo prostredníctvom očkovania. Na Slovensku je povinné očkovanie proti osýpkam v dvoch dávkach, v 15. mesiaci (vakcína MCV1) a v 11. roku (vakcína MCV2) života.

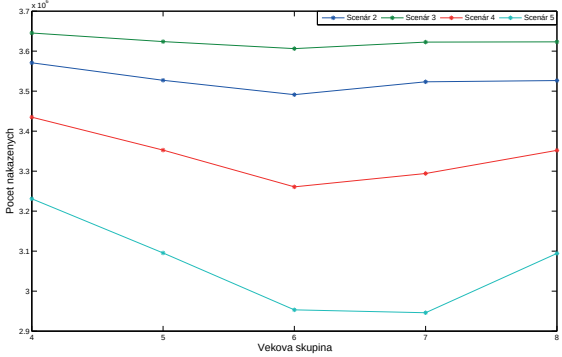
V našej práci uvažujeme heterogénnu populáciu, t.j. delíme populáciu Slovenska podľa veku (do ôsmich vekových skupín) a podľa miesta trvalého bydliska (do ôsmich krajov). Do modelu ďalej zahrnieme ubúdanie imunity [2]. Uvažujeme, že osoby, ktoré ochorenie prekonali prirodzenou cestou, majú doživotnú imunitu a osoby, ktoré získali protilátky očkovaním, majú obmedzenú imunitu. Osobám v závislosti od času ubúda imunita v závislosti od niekoľkých parametrov. Sledovali sme päť rôznych scenárov ubúdania imunity.



Obr. 1: Schéma heterogénneho SIR modelu s očkovaním a ubúdaním imunity, kraj j, 6. veková skupina.

Na Obr. 1 vidíme, že oproti základnému SIR modelu sú v našom modeli ku kompartmentom S, I a R pridané skupiny V^1 a V^2, kde sú osoby zaočkované vakcínou MCV1 a MCV2. Jednotlivé zmeny v kompartmentoch sú matematicky vyjadrené pomocou systému diferenciálnych rovníc, ktorých je päť pre každú vekovú skupinu v každom kraji, t.j. spolu ich je $5*8*8=320$.

Po spustení naprogramovaného modelu v prostredí Matlab sme prišli k záveru, že ak osobám ubúda imunita, najviac nakazených bude v siedmej vekovej kategórii, ktorá predstavuje osoby vo veku $25-64$ rokov. Experimentovali sme preto s načasovaním druhého očkovania. V súčasnosti je očkovanie nastavené na začiatku piatej vekovej skupiny (11 rokov). Na Obr. 2 vidíme, že najmenší počet nakazených osôb pre nami (v istej miere subjektívne) zvolené parametre bude, ak sa preočkovávať bude v šiestej vekovej skupine, čo predstavuje vek 16 rokov.



Obr. 2: Počet nakazených osôb pri rôznej vekovej skupine preočkovania vakcínou MCV2, pre scenáre 2, 3, 4 a 5

Literatúra

[1] Kermack W.O., McKendrick A.G.: A Contribution to the Mathematical Theory of Epidemics, Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character 772, 700-721 , 1927

[2] Mossong J., et al.: Modeling the Impact of Subclinical Measles Transmission in Vaccinated Populations with Waning Immunity, American Journal of Epidemiology 150.11, 1999

*streskova6@uniba.sk

†sona.kilianova@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 48
ISBN 978-8081470882, © 2018 Jozef Kováč

Distribučný chaos v náhodných dynamických systémoch (rozšírený abstrakt)

Jozef Kováč[1]*

Školiteľ: Katarína Janková[1]†

[1]Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

„Matematický" chaos možno voľne definovať ako „náhodné správanie v deterministickom systéme". V práci študujeme chaos v náhodnom dynamickom systéme

$$x_{n+1} = \begin{cases} f(x_n) \text{ s pravdepodobnosťou } p \\ g(x_n) \text{ s pravdepodobnosťou } 1-p, \end{cases} \quad (1)$$

kde f a g sú funkcie definované na uzavretom intervale I, $x_0 \in I$ a $p \in [0,1]$. Má však vôbec zmysel uvažovať o nejakom chaose v takýchto systémoch - ktoré sú principiálne náhodné? Ukazuje sa, že áno - niektoré aspekty takéhoto systému sa totižto niekedy správajú v istom zmysle „usporiadane" alebo dokonca deterministicky.

V prípade deterministických systémov

$$x_{n+1} = f(x_n) \quad (2)$$

existuje veľké množstvo pojmov, ktoré sa snažia chaotické správanie opísať (viď napr. [Ruette, 2017]). V práci sa zameriavame na takzvaný distribučný chaos - jeho výhodou je, že má aj pravdepodobnostnú interpretáciu, takže jeho definícia sa dá ľahko preniesť aj do náhodného dynamického systému.

Definícia tohto typu chaosu v deterministickom dynamickom systéme je založená na funkcii

$$F_{xy}^{(n)}(t) = \frac{1}{n}\#\{i \in \{0,1,\ldots,n-1\} : |x_i - y_i| < t\}, \quad (3)$$

kde $x_0 \equiv x$ a $y_0 \equiv y$ sú z intervalu I a x_n (resp. y_n) sa určí podľa (2) [Schweizer et al., 1999]. Túto funkciu môžeme interpretovať ako pravdepodobnosť toho, že pre (rovnomerne) náhodne zvolené J z množiny $\{0,1,\ldots,n-1\}$ je vzdialenosť medzi bodmi x_J a y_J menšia ako t. Pri takejto interpretácii môžeme funkciu $F_{xy}^{(n)}(t)$ v systéme (1) definovať ako

$$\begin{aligned} F_{xy}^{(n)}(t) &= P(|x_J - y_J| < t) = \\ &= \frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1} P(|x_i - y_i| < t). \end{aligned}$$

Systém je potom distribučne chaotický, ak sa pre nejaké $x, y \in I$ táto pravdepodobnosť neustáli, t.j. ak pre funkcie

$$F_{xy}^{\star}(t) = \limsup_{n\to\infty} F_{xy}^{(n)}(t) \quad (4)$$

$$F_{xy}(t) = \liminf_{n\to\infty} F_{xy}^{(n)}(t) \quad (5)$$

platí $F_{xy}(t) < F_{xy}^{\star}(t)$ pre t na nejakom otvorenom intervale $(a,b) \subset \mathbb{R}$. Špecifikom tohto typu chaosu je, že sa dá aj kvantifikovať - napríklad pomocou miery chaosu μ definovanej ako

$$\mu(f,g) = \sup_{x,y\in I} \frac{1}{|I|} \int_0^{\infty} \left(F_{xy}^{\star}(t) - F_{xy}(t)\right) \mathrm{d}t. \quad (6)$$

Táto miera je vždy nezáporná a kladná je práve vtedy, ak je systém distribučne chaotický.

Ukazuje sa, že chaotickosť (resp. nechaotickosť) funkcií f a g nezaručuje chaotickosť (resp. nechaotickosť) systému (1), na čo uvádzame príklady.

Dokázali sme niekoľko podmienok zaručujúcich, že systém (1) bude nechaotický - napríklad ak systém generovaný spojitými funkciami konverguje podľa pravdepodobnosti k nejakej konečnej množine, potom má nulovú mieru chaosu.

Okrem toho platí, že miera chaosu (6) je v istom zmysle nespojitá - pre každý (aj chaotický) systém generovaný spojitými funkciami totižto vieme nájsť spojité funkcie $f^{\star}$ a $g^{\star}$, ktoré sú ľubovoľne blízko k funkciam f a g a pre ktoré platí, že $\mu(f^{\star}, g^{\star}) = 0$. Tento výsledok je prekvapivý, pretože v deterministických systémoch niečo také neplatí - ak je v systéme (2) spojitá funkcia f distribučne chaotická, potom sú distribučne chaotické aj všetky spojité funkcie v nejakom jej okolí.

Literatúra

[Ruette, 2017] Ruette, S. (2017). *Chaos on the Interval*. American Mathematical Society.

[Schweizer et al., 1999] Schweizer, B., Sklar, A., and Smítal, J. (1999). Distributional (and other) chaos and its measurement. *Real Analysis Exchange*, pages 495–524.

*jozef.kovac@fmph.uniba.sk

†Katarina.Jankova@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 49–57
ISBN 978-8081470882, © 2018 Paulína Halušková

Testovanie účinkov plazmou aktivovanej vody na bakteriálne biofilmy spôsobujúce parodontitídu a jej vplyv na zubné tkanivo

Paulína Halušková [1]*
Školiteľ: Zdenko Machala[1‡]
Konzultant: Katarína Sobolíková[2]
[1] Univerzita Komenského v Bratislave, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava;
[2] Klinika stomatológie a maxilofaciálnej chirurgie LF UK a OÚSA, Heydukova 10, 812 50 Bratislava

Abstrakt

V tejto práci sme sa zaoberali testovaním účinkov vody aktivovanej plazmou iskrového výboja vo vzduchu (plasma activated water, PAW) na inaktiváciu baktérií z biofilmov spôsobujúcich parodontitídu a vplyvu PAW na tkanivo zuba. Na sledovanie potenciálnych chemických zmien zubného cementu sme použili FTIR analýzu a na sledovanie potenciálnych morfologických zmien povrchu zuba rastrovací elektrónový mikroskop (SEM).

Bežný spôsob liečby parodontitídy - mechanické rozrušovanie biofilmu, sme porovnávali s pôsobením PAW a s kombináciou oboch metód na extrahovaných zuboch s biofilmom pacientov s parodontitídou. Ďalšie experimenty pre dva rôzne časy inkubácie biofilmu v PAW- 10 min a 30 min sme realizovali na biofilmoch odobratých z parodontálnych vačkov pacientov.

Výsledky ukázali, že PAW nespôsobuje kvalitatívne zmeny v chemickom zložení zubného cementu ani morfológie zubného povrchu, má vyššiu účinnosť ako mechanické rozrušovanie biofilmu a na 95% účinnosť inaktivácie je postačujúca aj 10 min inkubácia v PAW.

Kľúčové slová: plazmou aktivovaná voda (PAW), parodontálny biofilm, prechodová iskra, FTIR, SEM

1 Úvod

Vedecké pracoviská po celom svete sa zaoberajú skúmaním vlastností a rôznych aplikácií plazmy. Mnohé z ich výskumov preukázali baktericídne účinky nízkoteplotnej plazmy a plazmou aktivovanej vody (PAW). Baktérie však často tvoria vysoko odolnú štruktúru nazývanú biofilm, ktorá je kvôli vysokej organizovanosti náročná na odstránenie. Priama aplikácia studenej plazmy sa ukazuje ako účinný spôsob likvidácie biofilmu, avšak na dentálne aplikácie je PAW praktickejšia. PAW zvyčajne nemá nepriaznivý vplyv na eukaryotické bunky ľudského organizmu a pomerne jednoducho sa vyrába. Aplikácia dezinfekcie vo forme tekutiny do ústnej dutiny je tiež najjednoduchším spôsobom dezinfekcie parodontu pacienta, preto by sa PAW mohla stať ideálnym spôsobom dezinfekcie v bežnej praxi zubných lekárov.

Parodontitída je druhým najčastejším dôvodom straty zubov u slovenských pacientov, preto sa v našom výskume budeme zaoberať inaktiváciou baktérií, ktoré ju spôsobujú. Sú to hlavne anaeróbne baktérie žijúce vo forme vysoko odolného biofilmu adherovaného na povrch. Z tohto dôvodu majú zubní lekári obmedzené možnosti jej liečby. Spôsobuje odkrývanie zubných krčkov, deštrukciu alveolárnej kosti a môže vyvolať problémy aj v iných častiach organizmu.

1.1 Plazma

Plazma vzniká polarizáciou ionizovaného plynu. V pozemských podmienkach sa plazma v prírode samostatne vyskytuje len vo forme polárnej žiary, blesku alebo plameňa, preto ju v laboratórnych podmienkach musíme generovať, typicky elektrickými výbojmi.

Najčastejšie sa v praxi stretávame s využívaním nerovnovážnej plazmy, kde je kinetická energia (t.j. teplota) elektrónov omnoho vyššia ako iónov a ostatných častíc.

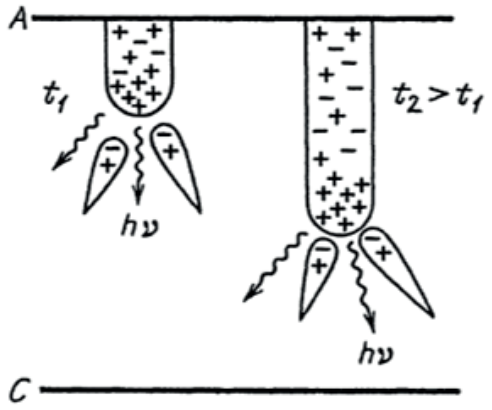
Pri prechode elektrického prúdu plazmou vzniká elektrické pole. Elektróny v elektrickom poli nadobúdajú kinetickú energiu, ktorou sú schopné ionizovať molekuly plynu a tak kompenzovať úbytok nabitých častíc na povrchoch a v objeme plazmy. Elektróny, ktoré v plyne vzniknú pôsobením vonkajších vplyvov, ako je kozmické žiarenie, rádioaktívne žiarenie materiálov použitých

* haluskova28@uniba.sk
‡ machala@fmph.sk

pri konštrukcii výbojky a pod., nazývame primárne elektróny a ich význam je kľúčový pri zapaľovaní výboja.

Primárny elektrón nadobúda v elektrickom poli energiu. Ak je pole dostatočne silné, elektrón je schopný ionizovať molekulu plynu, pričom vznikne ďalší voľný elektrón. To sa opakuje, počet voľných elektrónov sa pri ionizačných zrážkach postupne zdvojnásobuje a v plyne sa vytvára elektrónová lavína. Takto vzniká medzi elektródami ionizovaný plyn, čo sa prejaví aj navonok nárastom jeho elektrickej vodivosti.

Po príchode elektrónovej lavíny k anóde elektróny na nej zaniknú a pred anódou ostane veľký kladný priestorový náboj. V týchto miestach sa naruší homogenita pôvodného poľa pochádzajúceho od rovinných elektród a pole sa zdvojnásobí. V silnom elektrickom poli sa prudko zvýši ionizácia plynu. Vďaka vysokej koncentrácii elektrónov sa v čele pôvodnej lavíny intenzívne tvoria okrem nabitých častíc aj excitované atómy a ióny. Tieto pri deexcitácii emitujú fotóny s vysokou energiou, ktoré fotoionizáciou vytvárajú v okolí sekundárne lavíny. Tie sa potom šíria smerom ku kladnému priestorovému náboju. Elektróny sekundárnych lavín tak kompenzujú kladný náboj od primárnej lavíny, čím sa vytvára plazma a elektrické pole sa lokálne zoslabí pri súčasnom presune oblasti silného poľa smerom ku katóde. Takto sa smerom ku katóde šíri po pôvodnej dráhe primárnej lavíny nový útvar obsahujúci plazmu, ktorý nazývame streamer (Obrázok 1).



Obr. 1.: Šírenie streamera od anódy ku katóde

V tejto práci sme na aktiváciu vody používali typ výboja nazývaný prechodová iskra. Je to pomerne nový typ výboja, ktorý začína streamerom, no po prekročení prierazného napätia vzniká iskra. Transformácia streamera na prechodovú iskru je spôsobená vybíjaním vnútornej kapacity výbojky a kapacity elektrického obvodu (C). Vplyvom vonkajšieho odporu po vybití C dosiahne prúd maximum (niekoľko A) a napätie klesne na nulu. Rastúcim potenciálom na vysokonapäťovej elektróde sa C znova nabije a pulz sa opakuje s typickou frekvenciou 0,5-10 kHz. Frekvencie stúpajú so stúpajúcim napätím a teda ich môžeme kontrolovať zmenou napätia generátora striedavého prúdu. Pulzy sú veľmi krátke (<100 ns) a s vysokou amplitúdou. [Machala et al., 2008]

1.2 Plazmou aktivovaná voda (PAW)

PAW má veľmi dobrý potenciál využitia pri dekontaminácii a v plazmovej medicíne, pretože obsahuje veľa voľných radikálov, reaktívnych foriem kyslíka (ROS) a reaktívnych foriem dusíka (RNS), ktoré indukujú chemické zmeny vo vodných roztokoch a majú baktericídny efekt.

Najväčšie zastúpenie z RNS vo vode majú dusičnany NO_3^- a dusitany NO_2^-. Sú výsledkom ionizácie oxidov dusíka formovaných plazmou vo vzduchu pri reakciách disociácie N_2 a O_2 a voda sa pri ich vzniku okysľuje (uvoľňujú sa ióny H^+):

$$NO_2 + NO_2 + H_2O \rightarrow NO_2^- + NO_3^- + 2H^+ \quad (1)$$

$$NO + NO_2 + H_2O \rightarrow 2NO_2^- + 2H^+ \quad (2)$$

Vzniknuté dusitany ďalej môžu reagovať s peroxidom vodíka H_2O_2, ktorý sa v PAW vyskytuje tiež v značných koncentráciách. V kyslých podmienkach tak vzniká kyselina peroxydusitá O=NOOH:

$$NO_2^- + H_2O_2 + H^+ \rightarrow O = NOOH + H_2O \quad (3)$$

Táto kyselina je silný oxidant a má baktericídny efekt, pretože môže peroxidovať bunkovú membránu. Z dusitanov sa môže tiež za kyslých podmienok formovať kyselina dusitá HNO_2, nestabilná zlúčenina, ktorá sa veľmi rýchlo rozpadá na voľné radikály: [Tarabová, 2015]

$$2HNO_2 \rightarrow NO^{\cdot} + NO_2^{\cdot} + H_2O \quad (4)$$

Hodnota pH PAW sa väčšinou pohybuje v rozmedzí od 2,5 do 4,8, čo je spôsobené rozpúšťaním NO_x vznikajúcich v plazme. Aj keď kyslé prostredie v kombinácii s plazmou zvyšuje baktericídnosť, ukázalo sa, že kyslé pH nie je rozhodujúce pri inaktivácii baktérií.

PAW pôsobí súčasne na viacero častí bakteriálnej bunky. Prvým a najdôležitejším biologickým objektom pri interakcii PAW s bunkami je bunková membrána. Bunková membrána je zložená z fosfolipidovej dvojvrstvy. Chemicky aktivované prvky tvorené v médiu, najmä ROS môžu peroxidovať tieto lipidy. Dôsledkom je zníženie fluidity, membránového potenciálu a zvýšenie permeability membrány pre

H^+ a iné ióny. Následne vedľajšie produkty peroxidácie lipidov, ako napríklad aldehydy, úplne poškodia bunku. Bunková membrána je tiež zložená zo štruktúrnych proteínov. ROS a RNS dokážu modifikovať aminokyseliny týchto proteínov, čo vedie k zmene ich funkcií a narušeniu bunkového metabolizmu. Avšak interakcia PAW s bunkou nekončí pri bunkovej membráne. Membrána rôznymi mechanizmami prenáša tieto efekty na vnútrobunkové štruktúry, čo v bunke vyvoláva oxidačný stres. ROS a RNS môžu navyše modifikovať DNA, lámať ho, odštepovať purínové bázy alebo pôsobiť na reparačný systém DNA. Nepriamo tiež spôsobujú modifikáciu purínových a pyrimidínových báz. [Fridman et al., 2013]

1.3 Bakteriálne biofilmy spôsobujúce parodontitídu

V zubnom povlaku môžeme nájsť viac ako 500 bakteriálnych druhov. Aby tieto baktérie prežili na zubnom povrchu a epiteli ďasien, tvoria biofilm.

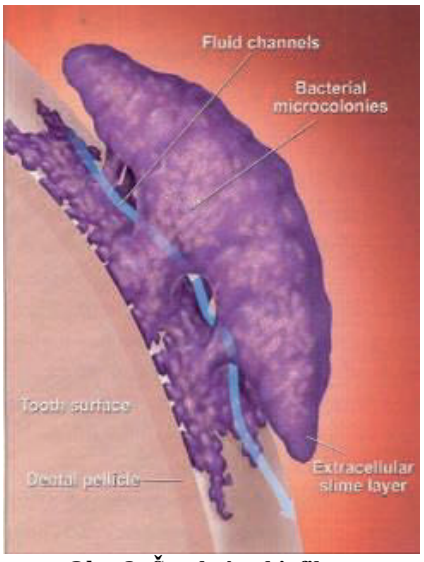
Bakteriálny biofilm (Obrázok 2) pozostáva okrem adherovaných bakteriálnych mikrokolónií a extracelulárnej vrstvy slizu z kanálikov pre kvapaliny a z jednoduchého komunikačného medzibunkového systému (tzv. quorum sensing). Každá bakteriálna mikrokolónia používa chemické signály ako jednoduchý komunikačný systém pre komunikáciu s ďalšími mikrokolóniami. Komplex kanálikov slúži na dopravu výživy a kyslíka pre baktérie, no taktiež umožňuje odplavovanie odpadových látok metabolizmu baktérií.

Štruktúra biofilmu ponúka v rôznych miestach jednej štruktúry rôzne životné podmienky ako rozdielne pH, výživové možnosti a prístup kyslíka. Preto v ňom prežívajú baktérie s rozdielnymi fyziologickými potrebami. Baktérie v strede kolónie žijú v anaeróbnych podmienkach a baktérie po okraji kanálov pre kvapaliny zas v aeróbnych. Ochrannú bariéru tvorí vrstva slizu, ktorá chráni baktérie pred zmenami pH, antibiotikami a ochrannými mechanizmami hostiteľa. [Nield-Gehrig, 2003]

Podľa nárokov na kyslík môžeme baktérie parodontu rozdeliť na striktné anaeróby, žijúce v prostredí bez kyslíka, mikroaerofilné druhy, žijúce v prostredí s minimálnym obsahom kyslíka a fakultatívne anaeróby, ktoré dokážu žiť i v prostredí bez kyslíka, i v prostredí s obsahom kyslíka. V povrchových častiach parodontu žijú i bežné aeróbne druhy mikróbov. [Statelová, 2007]

Z biofilmu sa bunky môžu oddeliť a prechádzať do planktonického stavu. Odplávajú a kolonizujú ďalšie časti povrchu. Biofilm sa rozširuje aj do subgingiválneho priestoru, čo vedie k vzniku maturovaného subgingiválneho biofilmu. Subgingiválny biofilm je zložený okrem gram pozitívnych baktérií aj z gram negatívnych anaeróbnych baktérií, ktoré sú najčastejšími pôvodcami parodontitíd.

Súčasným najefektívnejším spôsobom odstraňovania biofilmu je mechanické odstránenie. Zubní lekári najprv zistia prítomnosť a hĺbku parodontálnych vačkov (t.j. o koľko ustúpila kosť), následne ich hĺbkovo vyčistia kyretami a vyhladia koreň kvôli opätovnému prichyteniu ďasna. Lokálnu terapiu podporujú aj celkovo- podávaním antibiotík. [Straka, 2014]



Obr. 2: Štruktúra biofilmu

2 Materiál a metódy

Pred samotným testovaním účinkov PAW na bakteriálne biofilmy sme najprv zisťovali či PAW nespôsobuje zmeny chemického zloženia tkaniva zuba a morfológie povrchu zuba. Použili sme pri tom extrahované zuby, ktoré nám poskytol prof. MUDr. Peter Stanko, PhD. (Stomatologická klinika LF UK a OUSA) zo svojej stomatologickej praxe. Operačne extrahované zuby so zachovaným biofilmom sme použili pri porovnávaní účinnosti PAW, mechanického rozrušovania biofilmu a kombinácie oboch metód. Pre porovnanie účinnosti PAW pri 10 min. a 30 min. inkubácii sme používali samotný biofilm odobratý z parodontu dvoch pacientov s parodontitídou pomocou sterilného stomatologického náčinia stomatologičkou a konzultantkou tejto práce MDDr. Katarínou Sobolíkovou.

2.1 FTIR analýza zubného cementu

Na odhalenie možných chemických zmien v zložení zubného cementu spôsobených PAW sme použili

FTIR (Fourier transform infrared) spektrometer Shimadzu IRAffinity s príslušenstvom MIRacle™ (PIKE Technologies).

Prvý črenový zub sme ponorili do PAW, ktorú sme vyrobili opracovaním deionizovanej vody a po 15 minútach opláchli. Druhý črenový zub, ktorý slúžil ako kontrola sme na rovnaký čas ponorili do deionizovanej vody a následne opláchli. Pilníkom sme oškriabali zubný cement z povrchu vzoriek, zmiešali so substrátom, ktorý nereaguje so vzorkou a je priepustný v infračervenej oblasti – 30 mg KBr prášku a vytvorili tablety, ktorých absorbanciu sme merali FTIR spektrometrom.

2.2 Analýza povrchu zubov použitím rastrovacieho elektrónového mikroskopu (SEM)

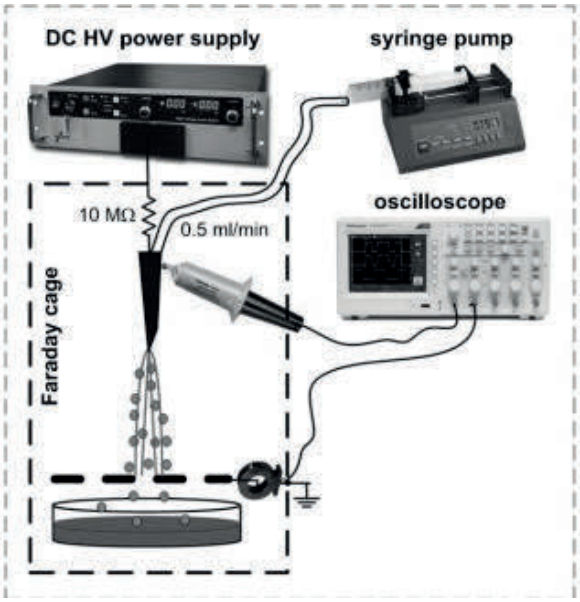
Pri analýze povrchu zuba, kvôli sledovaniu možných morfologických zmien vplyvom PAW, sme použili Scanning electron microscope VEGA TS 5136 MM (TESCAN, Brno Czech republic) so zväčšením 500 000x a rozlíšením 3 nm. Na pokovenie sme použili príslušenstvo BIO-RAD, SEM coating system- magnetrónovú naprašovačku.

Zub sme ponorili na 15 min. do PAW. Následne sme ho opláchli deionizovanou vodou, aby sme zabránili ďalšiemu pôsobeniu PAW a osušili. V magnetrónovej naprašovačke s argónom, pri tlaku 8 Pa, za čas 180 s, pri napätí 1400 V a jednosmernom prúde s hodnotou 20 mA sme nanášali na povrch zuba približne 10 nm vrstvu zlata/min. Pozlátený zub sme následne položili na podložku, s ktorou sme ho vodivo spojili páskou a pomocou SEM mikroskopu pozorovali zmeny na povrchu. Rovnaký postup sme zvolili pri sledovaní povrchu referenčného zuba, ktorý sme na 15 minút ponorili do fyziologického roztoku.

2.3 Výroba PAW

Na výrobu plazmou aktivovanej vody sme používali experimentálne zariadenie (Obrázok 4) s výbojom nazývaným prechodová iskra, ktoré pozostáva z viacerých súčastí:

1. Vysokonapäťový zdroj jednosmerného napätia charakterizovaný parametrami:
Umax = 25 kV, Imax = 30 mA, Pmax = 700 W.
2. Vysokonapäťová sonda Tektronix P6015A (parametre: R = 100 MΩ, C = 3 pF, 1000x) na meranie vysokého napätia výboja.
3. Elektrický prúd výboja je meraný ako spád napäria na 1 Ω rezistore, ktorý je napojený na koaxiálny kábel s charakteristickou impedanciou 50 Ω.
4. Osciloskop Tektronix TDS 2024 (parametre: 200 MHz; 2,5 Gs/s, 4-kanálový) na zobrazovanie časového vývoja elektrických parametrov výboja (elektrické napätie a prúd).
5. Pumpa s injekčnou striekačkou NE-300 umožňuje kvapalnej vzorke prechod výbojom s konštantným prietokom.
6. Výbojová komora pozostáva z dvoch elektród vo vzájomnej geometrii nazývanej hrot-rovina. Vysokonapäťová elektróda je reprezentovaná hypodermickou dutou ihlou, ktorá je priamo spojená plastovou hadičkou so striekačkou s kvapalnou vzorkou. Výboj je generovaný v okolitom vzduchu pri atmosférickom tlaku medzi hrotom ihly a mriežkou z nehrdzavejúcej ocele. Ihla napojená na vysoké napätie nám umožňuje vstrekovať kvapalnú vzorku cez aktívnu zónu výboja s konštantným prietokom 0,5 ml/min. Hrot ihly je špeciálne zrezaný pre lepší kontakt vody s výbojom. Vzdialenosť vnútornej elektródy od hrotu ihly k uzemnenej mriežkovej elektróde nastavujeme na 10 mm. Efekt elektrospreja (elektrostatického rozprašovania) použitého kvapalného roztoku rozprašovaného priamo cez vysoko napäťovú ihlovú elektródu nastáva v okamihu, keď na ihlu privedieme vysoké napätie.
7. Celé zariadenie je vložené do Faradayovej klietky kvôli silnej radiácii elektromagnetického poľa. [Tarabová, 2015]



Obr.3: Zariadenie na výrobu PAW prevzaté z [Machala, 2013]

Fyziologický roztok (0,85% roztok NaCl) sme opracovávali výboja typu prechodová iskra generovaného v okolitom vzduchu pri atmosférickom tlaku v opísanom zariadení. Vzorka prechádzala výbojom s prietokom Q = 0,5 ml/min. Počas opracovávania sme kládli dôraz na udržiavanie konštantných elektrických parametrov, hlavne frekvencie. Priemerné elektrické parametre boli: U_{max} ~ 12,1 kV, I_{max} ~ 22,2 A a frekvenciu sme udržiavali na hodnote f ~ 1 kHz.

2.4 Porovnanie účinkov mechanického rozrušovania biofilmov s PAW a kombináciou oboch metód

Osem jednokoreňových zubov, operačne extrahovaných prof. MUDr. Petrom Stankom, PhD. v celkovej anestéze, sme opláchli pod tečúcou vodou, aby vzorky neboli kontaminované krvou. Následne sme zuby- 2 od prvého pacienta a 6 od druhého pacienta, vložili do eppendorf skúmavky s fyziologickým roztokom, ktorý bol pred zákrokom nasýtený oxidom uhličitým (CO_2) počas 10 min, aby sa odstránil rozpustený kyslík a zabezpečili anaeróbne podmienky. Keďže parodontálne biofilmy sú tvorené najmä anaeróbnymi baktériami, celý postup odobratia, transportu a manipulácie so vzorkami, ako aj kultivácie sme robili v atmosfére nasýtenej CO_2. Po prenose vzoriek do mikrobiologického laboratória sme ich vložili do ultrazvukovej čističky Ultrasound Cleaner LEO 600, aby sa jednotlivé baktérie biofilmu odlúčili. Vo Faradayovej klietke sme pomocou výboja prechodová iskra a elektrostatickým rozprašovaním fyziologického roztoku vyrobili PAW a štyri vzorky sme do nej ponorili na 10 min. Navyše na dvoch z týchto opracovaných vzoriek sme mechanicky pomocou sterilnej ihly 3 min. rozrušovali biofilm, čím sme testovali účinnosť PAW v kombinácii s konvenčnou metódou liečby parodontitídy. Rovnako sme na dvoch neopracovaných vzorkách mechanicky rozrušovali biofilm 3 minúty.

Po 10 min. inkubácie opracovaných vzoriek v PAW sme vzorky vortexovali a riedili fyziologickým roztokom s CO_2 10 a 100-krát. Objem 100 µl z každej takto zriedenej vzorky a neriedenej vzorky sme rozotreli pomocou sklených guľôčok na misky s agarom. Kvôli možnej kontaminácii biologických vzoriek sme na každé riedenie použili 2 Petriho misky.

Kontrolné vzorky a vzorky, ktoré boli iba mechanicky rozrušované sme vybrali po 16 minútach z ultrazvukovej čističky, rovnakým spôsobom riedili a vysievali na Petriho misky s agarom. Do misiek sme napustili CO_2 a anaeróbne ich kultivovali v termostate pri 35°C 2 dni, spočítali kolóniotvorné jednotky (colony forming units, CFU) a vyhodnotili účinnosť PAW na inaktiváciu baktérií. Následne sme znovu kultivovali baktérie v CO_2 atmosfére a opakovali počítanie a vyhodnocovanie účinnosti PAW 4. a 6. deň kultivácie. Z počtu CFU opracovanej vzorky a referenčnej vzorky sme vypočítali účinnosť danej metódy:

$$\eta_{\%} = 100 - \frac{CFU_{vz}}{CFU_{ref}} 100 \quad (5)$$

Zo vzoriek s rovnakým opracovaním sme vypočítali aritmetický priemer a smerodajnú odchýlku.

2.5 Porovnanie účinnosti 10 min. a 30 min. inkubácie biofilmu v PAW

Biofilm odobratý z dvoch rôznych miest pacientovho parodontu sme vložili do eppendorf skúmavky s fyziologickým roztokom v objeme 1,5 ml, ktorý bol pred zákrokom nasýtený CO_2. Anaeróbne podmienky sme dodržiavali počas celého experimentu.

Vzorku sme najprv dobre premiešali na prístroji Vortex, rozdelili na tretiny a vložili do centrifúgy s rýchlosťou 10 000 otáčok/min. Medzitým sme vo Faradayovej klietke pomocou výboja prechodová iskra a metódou elektrospreja fyziologického roztoku vyrobili PAW. Po 10 minútach centrifugácie sme zo vzoriek odobrali 0,4 ml supernatantu, do dvoch vzoriek sme pipetou pridali PAW v objeme 1 ml a do tretej vzorky 1 ml fyziologického roztoku. Následne sme všetky 3 vzorky vložili do ultrazvukovej čističky Ultrasound Cleaner LEO 600, aby sa jednotlivé baktérie biofilmu odlúčili. Prvú vzorku s pridanou PAW sme vybrali po 10 minútach, premiešali na prístroji Vortex a riedili fyziologickým roztokom s CO_2 10 a 100-krát. Objem 100 µl z každej takto zriedenej vzorky a nezriedenej vzorky sme rozotreli pomocou sklených guľôčok na Petriho misky s agarom. Rovnako sme postupovali s druhou vzorkou, ktorá bola v PAW inkubovaná 30 minút. Ako referenčnú vzorku sme použili tretiu vzorku s fyziologickým roztokom, ktorú sme rovnako zriedili a rozotreli na misky s agarom. Keďže biologický materiál je náchylný na kontamináciu, z každého riedenia sme vzorku rozotreli na 2 Petriho misky s agarom, čiže sme získali 6 Petriho misiek z každej vzorky v 3 rôznych riedeniach. Do misiek sme napustili CO_2 a anaeróbne ich kultivovali v termostate pri 35°C 48 hodín, spočítali kolóniotvorné jednotky CFU a misky vyhodnotili účinnosť PAW na inaktiváciu baktérií podľa vzorca (5). Následne sme baktérie ďalej kultivovali a opakovali počítanie a vyhodnocovanie účinnosti PAW 4. a 7. deň kultivácie.

Pre väčšiu presnosť výsledkov sme tento postup opakovali na biofilme iného pacienta.

3 Výsledky

3.1 FTIR analýza

Analýza bola realizovaná na vzorke zo zubného cementu kontrolného zuba a zuba 10 min. inkubovaného v PAW, ktoré ale nepochádzali od jedného pacienta. Výsledné FTIR spektrá s korekciou pozadia sú zobrazené na Grafe 1.

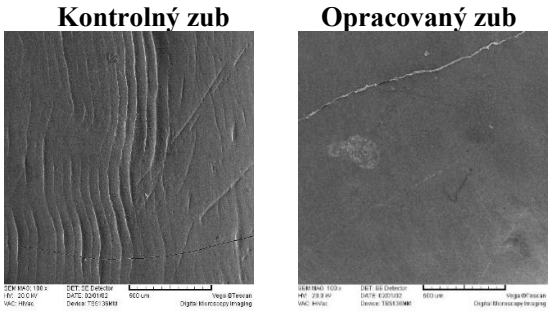


Graf 1 Výsledné spektrá FTIR analýzy zubného cementu neopracovaného a PAW opracovaného zuba s korekciou pozadia

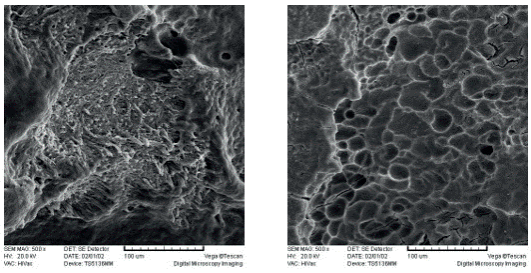
Najsignifikantnejšie pásy spektier môžeme vidieť okolo 1000 cm^{-1}, ktoré prisudzujeme skupinám fosfátového iónu s maximom 960 cm^{-1}. Ďalšie intenzívne absorpčné pásy sú viditeľné od 1400 do 1655 cm^{-1}. Maximá 1410 a 1450 cm^{-1} sú charakteristické pre skupiny uhlíkových C-C väzieb. Enamel a dentín obsahujú okrem anorganického hydroxyapatítu $Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2$ (tvorí 70-75% dentínu a 95% enamelu) aj organické štruktúry, predovšetkým kolagén. Preto môžeme rozoznať pás s maximom 1550 cm^{-1}. Široká skupina pásov spektier v oblasti od 2500 do 3700 cm^{-1} je charakteristická pre medzimolekulové vodíkové väzby v polyméroch a pre skupiny CO, C-H, NO_2. [Cavalu et al., 2010], [Hedzelek et al., 2008]

3.2 SEM analýza

Pri našich technických možnostiach nebolo možné porovnávať vzorky toho istého zuba a teda opracovaný a kontrolný zub pochádzajú od rôznych pacientov, preto sa morfologicky pomerne líšia. Fotografie boli zhotovené na sklovine a koreni zubov.



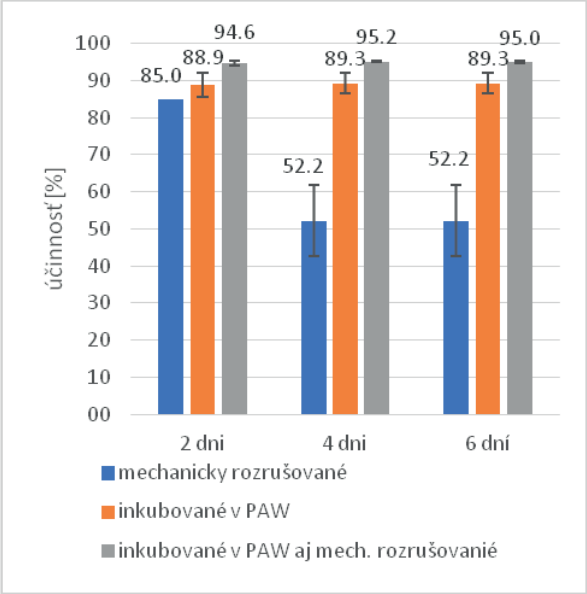
Obr.4: Sklovina, zväčšené 100x



Obr. 5: Koreň zuba, zväčšené 500x

3.3 Výsledky porovnania účinkov mechanického rozrušovania biofilmov s PAW a s kombináciou oboch metód

Na ôsmych operačne extrahovaných zuboch so zachovaným parodontálnym biofilmom sme porovnávali účinnosť 10 min. pôsobenia PAW, mechanického rozrušovania biofilmu po dobu 3 min. a kombinácie oboch metód. Účinnosť danej metódy sme určili podľa vzorca (5) a výsledky po 2, 4 a 6 dňoch kultivácie sme vyniesli do Grafu 2.



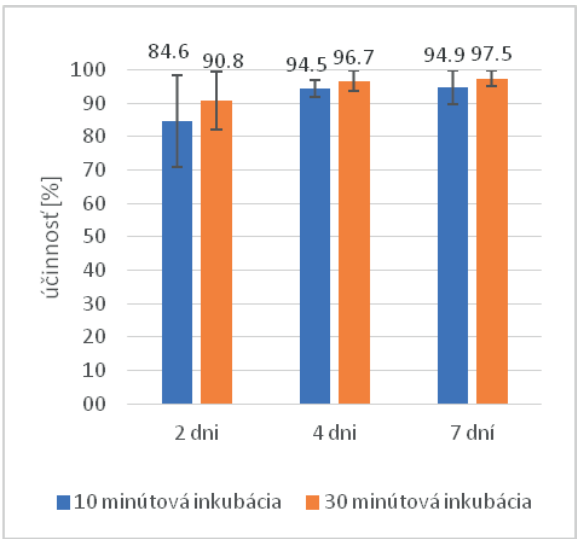
Graf 2. Účinnosť inaktivácie baktérií so smerodajnou odchýlkou (σ) po 2, 4 a 6 dňoch kultivácie mechanicky rozrušovaných vzoriek po dobu 3 min, vzoriek inkubovaných 10 min v PAW a vzoriek mechanicky rozrušovaných aj inkubovaných v PAW

Na Grafe 2 vidieť, že PAW má oveľa vyššiu účinnosť pri inaktivácii baktérií parodontálneho biofilmu ako jeho mechanické rozrušovanie. Metóda mechanického rozrušovania biofilmu sa najprv javila, že má porovnateľnú účinnosť s pôsobením PAW, ale už po 4 dňoch kultivácie vzoriek na Petriho miskách sa ukázalo, že táto metóda neinaktivuje druhy baktérií, ktoré potrebujú

dlhší čas kultivácie. Najvyššiu účinnosť (95%) mala kombinácia oboch metód.

3.4 Výsledky porovnania účinnosti 10 min. a 30 min. inkubácie biofilmu v PAW

Dvom pacientom boli odobraté 2 rôzne vzorky parodontálneho biofilmu. Každú z nich sme po vortexovaní rozdelili na 3 časti. 1. časť sme inkubovali 10 min v PAW, druhú 30 min a 3. vzorka bola kontrolnou vzorkou. Všetky vzorky sme následne riedili, vysiali na misky a kultivovali. CFU na miskách sme počítali po 2, 4 a 7 dňoch kultivácie. Výsledky sme vyniesli do Grafu 3.



Graf 3 Účinnosť inaktivácie baktérií v biofilmoch pacientov 10 a 30 min inkubovaných v PAW po 2, 4 a 7 dňoch kultivácie so smerodajnou odchýlkou (σ)

Na Grafe 3 vidieť, že účinnosť 10 min a 30 min inkubácie sa líši len minimálne a už 10 min pôsobenie PAW (95%) je vysoko účinné.

4 Diskusia

Motiváciou tejto práce bol fakt, že plazmou aktivovaná voda preukazuje silné baktericídne účinky, čo by mohlo byť využité pri liečbe porodontitíd, pretože parodontálny biofilm je odolná bakteriálna štruktúra a zubní lekári majú obmedzené možnosti na jeho úplné odstránenie.

FTIR analýza

Keďže kyslé pH PAW by mohlo mať nepriaznivý vplyv na zubný cement, touto analýzou sme chceli zistiť potenciálne zmeny na tkanive zubného cementu spôsobené PAW. Na výsledných FTIR spektrách vidieť rozdiel v intenzite absorbancie opracovaného a neopracovaného zuba, ktorý je spôsobený tým, že zuby nepochádzali od rovnakého pacienta.

Avšak FTIR analýza nepotvrdila kvalitatívne zmeny v chemickom zložení zubného tkaniva, preto usudzujeme, že 10 minútové pôsobenie PAW nemá nepriaznivý vplyv na zubný cement. Analýzu by bolo vhodné opakovať najlepšie so zubami jedného pacienta.

SEM analýza

Kvôli našim obmedzeným technickým možnostiam bola analýza použitím rastrovacieho elektrónového mikroskopu realizovaná na 2 zuboch od rôznych pacientov. Narušenú morfológiu zuba vidieť na kontrolných aj opracovaných zuboch, sklovine aj koreni. Práve pre narušenú morfológiu kontrolného zuba nemôžeme morfologické zmeny opracovaného zuba pripísať pôsobeniu PAW. Zmeny mohli byť spôsobené vekom pacienta alebo jeho stravou a je potrebné ďalšiu analýzu realizovať s lepším technickým vybavením, aby bolo možné jeden zub rozdeliť na polovice, jednu inkubovať v PAW a druhú použiť ako kontrolnú. Iba takýmto spôsobom bude možné s istotou zistiť, či PAW spôsobuje zmeny v zubnom tkanive. V našej analýze môžeme porovnať len morfológiu skloviny a koreňa zuba, pretože na fotografiách zo SEM mikroskopu jasne vidieť, že sklovina je hladšia ako koreň zuba a z toho vyvodzujeme, že sklovina je celkovo odolnejšia voči rôznym nepriaznivým vplyvom, ktorými sú napríklad tvrdá strava, vek alebo mechanické opotrebovanie.

Vplyv PAW na inaktiváciu baktérií z biofilmov spôsobujúcich parodontitídu

Účinok PAW na inaktiváciu baktérií spôsobujúcich parodontitídu sme určovali pomocou percentuálnej účinnosti inaktivácie baktérii podľa rovnice č.5. Účinok PAW sme porovnávali s mechanickým rozrušovaním biofilmu, čo je bežný spôsob liečby parodontitídy a nakoniec sme testovali účinok kombinácie pôsobenia PAW s mechanickým rozrušovaním biofilmu.

V zubnom biofilme človeka sa nachádza okolo 500 druhov baktérií, ktoré majú rôzny čas rastu, čo bolo vidieť v priebehu kultivácie sledovanej po 2, 4 a 6 dňoch. Na Grafe 2 vidieť vývoj rastu baktérií počas 6 dní. Už po prvých 2 dňoch inkubácie vidieť, že najúčinnejší spôsob inaktivácie baktérií je kombinácia mechanického rozrušovania biofilmu a PAW. Po 4 dňoch inkubácie na miskách s agarom vyrástli aj baktérie, ktoré potrebujú dlhší čas kultivácie a ukázalo sa, že len samotné mechanické rozrušovanie biofilmu na inaktiváciu týchto baktérií nepostačuje a PAW je oproti tomuto bežnému spôsobu účinnejšia v priemere o 37,1%. Po 6 dňoch kultivácie nenastali žiadne veľké zmeny. Účinnosť PAW na inaktiváciu baktérií bola 89,3%, v kombinácii s mechanickým rozrušovaním biofilmu

sa priemerná účinnosť zvýšila o 5,7%. Z experimentu vidieť, že samotné mechanické rozrušovanie biofilmu nie je dostatočná metóda inaktivácie baktérií. Pre veľkú smerodajnú odchýlku a častú kontamináciu vzoriek, ktorá znížila počet spočítateľných Petriho misiek, to však zatiaľ nemôžeme jednoznačne potvrdiť. Výsledky bude potrebné overiť ďalšími experimentami.

V experimentoch s extrahovanými zubami s biofilmom však nie je jednoznačné, že na zube boli len baktérie spôsobujúce parodontitídu. Pacienti, ktorým boli zuby extrahované, mali vyšší vek a okrem parodontitídy aj iné dentálne problémy ako napríklad zubné kazy. Preto tieto výsledky nehovoria výlučne o inaktivácii baktérií spôsobujúcich parodontitídu a preto sme v ďalších experimentoch zvolili aplikáciu PAW na biofilm odobratý priamo z parodontálnych vačkov pacientov. Na týchto vzorkách sme porovnávali 10 min. a 30 min. inkubáciu biofilmu v PAW. Po 2 dňoch kultivácie bol rozdiel priemerných účinností 6,2%, po 4 dňoch už len 2,2% a po 7 dňoch kultivácie 2,6%. Nízky rozdiel priemerných kultivácií však nie je smerodajný, pretože obidve inkubácie boli vysoko účinné. Po 7 dňoch inkubácie vidieť, že už pri 10 min. inkubácii PAW mala účinnosť 95% a pri 30 min. inkubácii v priemere až 97,5%.

Veľké smerodajné odchýlky boli v meraniach po 2 dňoch spôsobené rôznym časom rastu baktérií. Veľké hodnoty smerodajných odchýliek sa však vyskytli aj po 7 dňovej inkubácii, preto je potrebné opakovanie experimentu s väčším počtom vzoriek. Napriek týmto odchýlkam môžeme konštatovať výrazný pozitívny efekt PAW na inaktiváciu biofilmov z parodontálnych vačkov, pričom už 10 minútová inkubácia je postačujúca.

5 Záver

Cieľom našej práce bolo testovanie účinkov plazmou aktivovanej vody (PAW) na inaktiváciu baktérií biofilmov spôsobujúcich parodontitídu, najprv sme však museli zistiť, či PAW nespôsobuje chemické zmeny v zubnom tkanive alebo zmeny morfológie povrchu zuba.

FTIR analýza neodhalila kvalitatívne zmeny v chemickom zložení zubného cementu a teda usudzujeme, že 10 minútové pôsobenie PAW nemá nepriaznivý vplyv na zubný cement.

Pre naše obmedzené technické vybavenie sme analýzu pomocou rastrovacieho elektrónového mikroskopu (SEM) vykonávali na 2 zuboch od rôznych pacientov, preto z našich výsledkov nie je možné jednoznačne zistiť, či zmeny v morfológii opracovaného zuba boli spôsobené PAW. Metódu treba opakovať na dvoch častiach rovnakého zuba.

Použitím PAW na inaktiváciu baktérií extrahovaných zubov s biofilmom sme dosiahli v priemere o 37,1% väčší účinok ako bežný spôsob mechanického rozrušovania biofilmu extrahovaných zubov. Najviac účinná však bola kombinácia oboch metód, ktorá mala účinnosť až 95%.

Ďalšími opakovanými experimentami s biofilmom odobratým z parodontálnych vačkov pacientov sme zistili, že už pri 10-min. inkubácii PAW zredukovala populácie baktérií v priemere o 95% a pri 30 min. inkubácii v priemere o 97,5%. 10 minútová inkubácia biofilmov z parodontálnych vačkov pacientov je postačujúca, pretože sa od 30 minútovej inkubácie líšila len minimálne.

Na základe týchto výsledkov môžeme povedať, že PAW má veľký potenciál stať sa novou metódou liečby parodontitíd, pretože má vysokú účinnosť pri inaktivácii baktérií v parodontálnych biofilmoch a nespôsobuje zmeny v zubnom tkanive.

Poďakovanie

Chcela by som sa poďakovať najmä vedúcemu mojej práce Doc. Zdenkovi Machalovi, PhD. za jeho odborné rady pri práci, ochotu a trpezlivosť. Taktiež by som sa chcela poďakovať MDDr. Kataríne Sobolíkovej, prof. MUDr. Petrovi Stankovi, PhD., doc. RNDr. Miroslavovi Zahoranovi, CSc. za pomoc s realizáciou experimentálnej časti tejto práce.

Literatúra

[Martišovitš, 2004] Martišovitš, V. (2004). Základy fyziky plazmy. pages 9-96.

[Machala et al., 2008] Machala, Z., Jedlovský, I. and Martišovitš, V. (2008). DC Discharges in Atmospheric Air and Their Transitions. *Transactions on plasma science*, vol. 36, No. 4, pages 919-920.

[Tarabová, 2015] Tarabová, B. (2015). Detection of chemical changes and reactive oxygen and nitrogen species in plasma activated water, Písomná práca k dizertačnej skúške. Bratislava, FMFI UK, pages 4-7, 21-22.

[Machala, 2013] Machala, Z., Tarabová, B., Hensel, K., Spetilková, E., Šikurová, L. and Lukeš, P. (2013). Formation of ROS and RNS in Water Electro-Sprayed through Transient Spark Discharge in Air and their Bactericidal Effects. *Plasma Processes and Polymers*, vol. 10, pages 654-657.

[Fridman et al., 2013] Fridman, A. and Friedman, G. (2013). Plasma Medicine. pages 276-289.

[Nield-Gehrig, 2003] Nield-Gehrig, J.S. (2003). Dental plaque biofilms. pages 1-6.

[Straka, 2014] Straka, M. (2014). Etiopatogenéza parodontitíd a ich vzťah k systémovým ochoreniam. pages 3-13.

[Statelová, 2007] Statelová, D. (2007). Periodontálne ochorenia. pages 1–3.

[Cavalu et al., 2010] Cavalu, S. and Pirte, A. (2010) Microscopic and spectroscopic analysis of interface formation in dental restoration using zr/si composite. *Journal of Optoelectronics and Biomedical Materials*, vol. 1, pages. 5-11.

[Hedzelek et al., 2008] Hedzelek, W., Wachowiak, R., Marcinkowska, A. and Domka L. *(2008)* Infrared spectroscopic identification of chosen dental materials and natural teeth. *ACTA Physica Polonica A*, vol. 114, pages 471-484.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 58–66
ISBN 978-8081470882, © 2018 Ľudmila Dzubinová

Využitie akustickej metódy na detekciu receptorov na bunkách karcinómu prsníka

Ľudmila Dzubinová*
Školiteľ: Alexandra Poturnayová [2*†]
Konzultant: Tibor Hianik [3*]
*Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská dolina F1, 842 48 Bratislava
[†]Ústav biochémie a genetiky živočíchov, Centrum biovied SAV, Dúbravská cesta 9, 845 11 Bratislava 45

Abstrakt

Karcinóm prsníka je jedným z najčastejších druhov rakoviny a druhá hlavná príčina úmrtia u žien spojená s rakovinou. V súčasnosti predstavuje karcinóm prsníka 26% všetkých prípadov rakoviny u žien. Molekulárna klasifikácia tohto ochorenia má významnú prognostickú hodnotu a pôsobí ako prediktívny sprievodca chemoterapeutickej odpovede. Z tohto dôvodu je potrebná skorá diagnostika a klasifikácia expresie receptorov, ktoré sú nadmerne exprimované alebo mutované v nádorových bunkách. Receptor HER2 sa považuje za významný biomarker, pretože zohráva kľúčovú úlohu v rozvoji a progresii agresívneho typu karcinómu prsníka.

Cieľom predkladanej práce je detekcia HER2 receptorov na povrchu buniek karcinómu prsníka pomocou DNA aptaméra HB5 v prietokovom systéme akustickej metódy TSM (*Thickness shear mode method*). Metóda TSM pracuje v hrúbkovo-strižnom móde, je založená na aplikácii vysokofrekvenčného napätia na kremenný kryštál, ktoré indukuje vznik strižných kmitov s určitou frekvenciou a následnej detekcii zmeny frekvencie a dynamického odporu piezokryštálu v dôsledku afinitných interakcií nádorových buniek s aptamérom.

Po pridaní buniek karcinómu prsníka na povrch aptasenzora s imobilizovanou vrstvou HB5 aptamérov nastalo zníženie frekvencie a rast dynamického odporu kryštálu. Tieto zmeny svedčia o špecifickej interakcii HER2 receptorov na bunkách karcinómu prsníka s HB5 aptamérmi. Rýchlosť naväzovania bola odlišná pre rôzne koncentrácie nádorových buniek.

Kľúčové slová: karcinóm prsníka, HER2 receptor, DNA aptamér, TSM, bunkový biosenzor.

1 Úvod

Karcinóm prsníka je jedným z troch najčastejších typov rakoviny na celom svete. U žien v Slovenskej republike je najčastejším zhubným nádorom a každoročne je registrovaných viac ako 2500 nových prípadov [Kuzma, 2015]. HER2 pozitívny karcinóm prsníka sa vyznačuje veľmi agresívnymi biologickými aj klinickými znakmi s nízkym percentom prežitia. Dramatický pokrok v oblasti včasnej detekcie a prelomové liečebné stratégie výrazne zlepšili prežívanie u pacientov s karcinómom prsníka. Napriek tomu je diagnostikovanie karcinómu prsníka náročné, pretože v prvých štádiách zvyčajne býva bez príznakov. Väčšina pacientov je vo všeobecnosti diagnostikovaná v pokročilom štádiu kvôli nedostatku testov včasnej detekcie a neprítomnosti rozpoznateľných znakov alebo symptómov v lokalizovanom ochorení. Za týchto okolností je naliehavá potreba vyvinúť nové, jednoduché a rýchle nástroje na diagnostiku HER2 pozitívneho karcinómu prsníka.

Nanomedicína ponúka v tomto smere možné zlepšenie. Aptaméry majú veľký význam v terapii a diagnostike nádorových ochorení. Receptory, ktoré sú mutované alebo nadmerne exprimované v nádoroch, sú hlavnými cieľmi. Z literatúry je známych mnoho aptamérov vyvinutých proti nádorovým bunkám. V posledných rokoch sa mnohé štúdie venujú vývojom účinného aptaméra pre HER2. V práci sa venujeme vývoju a optimalizácii účinného aptasenzora na detekciu HER2 receptora na nádorových bunkách karcinómu prsníka pomocou akustickej metódy TSM (*Thickness shear mode*).

2 Karcinóm prsníka

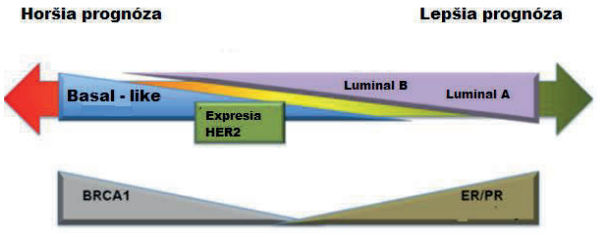
Karcinóm prsníka je veľmi heterogénna choroba. Rozlišujeme viaceré podtypy na molekulárnej, histopatologickej a klinickej úrovni. Každý podtyp

1 ludmila.valigurska@gmail.com
2 alexandra.poturnayova@savba.sk
3 Tibor.Hianik@fmph.uniba.sk

má svoje prognózy a terapeutické dôsledky. Tradičná klasifikácia sa týka biologických charakteristík ako veľkosť nádoru, postihnutie lymfatických uzlín, histologický stupeň, vek pacienta [Wu a kol., 2017].

2.1 Klasifikácia nádorov podľa expresie receptorov

V súlade s prácou Sørlie a kol. boli nádory prsníka klasifikované podľa expresie receptorov: estrogénový receptor (ER), progesterónový receptor (PR) a receptor ľudského epidermálneho faktora 2 (HER2), do piatich skupín s odlišnými klinickými výsledkami (Obrázok 1), [Sorlie a kol., 2003].



Obrázok 1: Výsledky pacientov na základe molekulárnych podtypov karcinómu prsníka (upravené podľa: Xiaofeng a kol., 2015).

2.1.1 Luminal A

Najčastejšie sa vyskytujúci podtyp, reprezentuje 50-60%. Tumory, ktoré patria do tejto skupiny majú väčšinou nízky stupeň diferencovanosti nádoru, nízky stupeň pleomorfizmu ako aj nízku mitotickú aktivitu. Tento typ rakoviny prsníka má dobrú prognózu, miera recidívy je výraznejšie nižšia ako pri iných typoch. Liečba je založená hlavne na hormonálnej terapii, keďže nereaguje na konvenčnú chemoterapiu [Yersal a Barutca, 2014].

2.1.2 Luminal B

Luminal B sa vyskytuje v 15-20% prípadov rakoviny prsníka. Tento podtyp je agresívnejší a má vyšší stupeň diferencovanosti. V porovnaní s luminal A je v tomto prípade vyššia miera rekurencie a nižšie percento prežívania po relapse [Yersal a Barutca, 2014].

2.1.3 HER2 pozitívny

Predstavuje 15-30%. Tento podtyp sa vyznačuje veľmi agresívnymi biologickými aj klinickými znakmi. HER2 pozitívne nádory sú charakterizované vysokou expresiou génu HER2 a iných génov spojených s aktiváciou HER2 receptora. Z morfologického hľadiska sú tieto nádory vysoko proliferatívne a v 75% prípadov sú vysoko diferencované [Yersal a Barutca, 2014]. Aj keď nadmerná expresia HER2 je spojená so zlou prognózou, tieto tumory sú citlivé na chemoterapiu na báze antracyklínu a taxánu [Xiaofeng a kol., 2015].

2.1.4 Basal like

Tento podtyp predstavuje 8-37% zo všetkých výskytov karcinómu prsníka. Je spojený s vysokým stupňom diferencie, slabou tvorbou tubulov v žľazovom tkanive a prítomnosťou centrálnych nekrotických alebo fibróznych zón. Nádory patriace do tejto skupiny nevykazujú expresiu ER, PR a HER. Preto sa nazývajú aj triple-negatívne (*triple-negative*). Mikroskopické a imunochemické analýzy ukazujú, že tumory basal-like subtypu v skoro 75% prípadoch potvrdzujú expresiu génu BRCA1 [Yersal a Barutca, 2014].

2.1.5 Normal breast-like

Normal breast like predstavuje výskyt okolo 5-10%. Sú slabo charakterizované. Neexprimujú ER, PR ani HER2 receptory, a teda môžu byť tiež klasifikované ako triple-negatívne, ale nepatria do skupiny basal-like. Existuje málo štúdií o tom podtype a jeho klinický význam ostáva neurčitý [Yersal a Barutca, 2014].

2.2 HER2 receptory

Receptor ľudského epidermálneho rastového faktora (EGFR - *epidermal growth factor receptor*, HER - *human epidermal growth factor receptor*) sa nachádza na čele komplexnej signalizačnej kaskády, ktorá moduluje proliferáciu, migráciu, diferenciáciu a prežívanie buniek (Obrázok 2). Zatiaľ čo signalizácia indukovaná HER je nevyhnutná pre mnohé normálne morfologické procesy, abnormálna aktivita týchto receptorov hrá kľúčovú úlohu vo vývoji a raste nádorových buniek [Yarden, 2001]. HER2 patrí spolu s HER1, HER3 a HER4 do rodiny epidermálnych rastových faktorov HER, ktoré majú tyrozínkinázovú aktivitu.

HER2 receptor je transmembránový glykoproteín s veľkosťou 185 kD, tvorený z 1255 aminokyselín a jeho onkogén je lokalizovaný na dlhom ramienku 17. chromozómu (17q12).

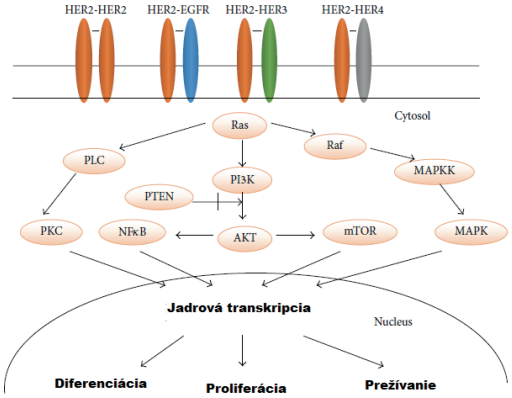
Monomérny transmembránový proteín HER2 sa skladá z 3 hlavných častí:

- extracelulárna oblasť pozostáva zo štyroch domén (I – IV),
- transmembránový lipofilný segment,
- intracelulárna doména s katalytickou aktivitou tyrozínkinázy.

Táto štruktúra umožňuje prenos signálov cez plazmatickú membránu, kde aktivujú génovú expresiu a indukujú bunkové odpovede [Iqbal a Iqbal, 2014].

HER2 receptor sa využíva ako biomarker pri rozhodovaní o liečbe pacienta, ale aj ako terapeutický cieľ. Pacienti s rakovinou prsníka majú zvýšenú koncentráciu HER2 v krvi 15-75 ng/mL,

v porovnaní so zdravými jedincami 2-15 ng/mL [Chun a kol., 2013]. HER2 pozitívny karcinóm prsníka sa vyznačuje rapídnym nárastom tumoru, nízkym percentom prežitia a lepšou odpoveďou na adjuvantnú terapiu [Wang a kol., 2015]. Zvýšená expresia HER2 bola tiež pozorovaná pri rakovine žalúdka, vaječníkov, endometria, močového mechúra a pľúc [Wu a kol., 2017].



Obrázok 2: Signalizačné dráhy HER2 receptora (upravené podľa: Iqbal a Iqbal, 2014).

2.2.1 Diagnostika HER2 pozitívneho karcinómu prsníka

Aj keď boli vyvinuté viaceré metódy na testovanie HER2, približne 20% výsledkov testovania HER2 môže byť nepresné. Preto Americká spoločnosť pre klinickú onkológiu (ASCO) a Vysoká škola amerických patológov (CAP) odporučili usmernenia pri testovaní HER2 s cieľom zabezpečiť presnosť. V súčasnosti sú schválené dve metódy na testovanie HER2 receptora: imunohistochemická metóda (IHC) a fluorescenčná in situ hybridizácia (FISH). IHC deteguje proteín a vykazuje zvýšenú expresiu receptorov HER2, zatiaľ čo FISH deteguje amplifikáciu génov [Iqbal a Iqbal, 2014].

Avšak, tieto diagnostické metódy majú niekoľko nevýhod. Schopnosť presne stanoviť stav expresie proteínu pomocou IHC metódy je významne ovplyvnená mnohými faktormi (dĺžka ischemického času, trvanie fixácie, použité fixačné činidlo). Komerčne dostupné protilátky vykazujú odlišnú špecifickosť a senzitivitu. Preto je veľmi dôležitá interpretácia výsledkov. Pre zníženie variability pri vyhodnocovaní výsledkov vydali ASCO a CAP odporúčania na interpretáciu nadmernej expresie HER2 receptora [Furrer a kol., 2015].

Aj keď metóda FISH je považovaná za objektívnejšiu a kvantitatívnejšiu ako imunohistochemické hodnotenie, na druhej strane je časovo náročnejšia (trvá deväťkrát dlhšie) a takmer trikrát drahšia ako metóda IHC. Okrem toho testovanie FISH vyžaduje nákladné zariadenie na detekciu a rozpoznávanie signálov čo sťažuje integráciu testu FISH do každého diagnostického laboratória [Furrer a kol., 2015].

Tieto skutočnosti poukazujú na naliehavú potrebu vyvinúť nové, jednoduché a rýchle nástroje na diagnostiku HER2 pozitívneho karcinómu prsníka. V posledných rokoch sa mnohé štúdie venujú vývojom účinného aptaméra pre HER2 na liečebné a diagnostické účely [Wu a kol., 2017].

3 Aptaméry

Aptaméry sú jednovláknové oligonukleotidy nukleových kyselín alebo peptidové molekuly, definované aj ako „chemické protilátky“. Vďaka dobre definovaným trojrozmerným konformáciám a silnej tvarovej komplementarite medzi aptamérmi a ich cieľovými molekulami, je známe, že aptaméry sa viažu na cieľ s vysokou afinitou a špecificitou. Aptaméry sú relatívne malé molekuly, ktoré je možné chemicky modifikovať. V porovnaní s protilátkami majú aptaméry niekoľko výhod. Sú teplotne stabilnejšie, denaturujú sa až pri 95°C. Zatiaľ nebola zistená toxicita ani žiadna imunogénna reakcia pri terapeutických aplikáciách. Vzhľadom na ich molekulárnu hmotnosť, 10 – 30 kDa, sú aptaméry rýchlejšie a účinnejšie ako protilátky s veľkosťou 150 kDa. Na rozdiel od protilátok sa príprava aptamérov uskutočňuje *in vitro* metódou nazývanou SELEX (*Systematic Evolution of Ligands by EXponential enrichment*), [Mercier a kol, 2017].

3.1 SELEX

Aptaméry môžeme syntetizovať prostredníctvom *in vitro* iteračného procesu, ktorý je známy ako SELEX. Tento proces sa skladá z troch krokov: selekcia, separácia a amplifikácia. Na prípravu aptamérov potrebujeme knižnicu 10^{13} až 10^{15} rozličných sekvencií ssDNA (jednovláknové DNA). Knižnica DNA sekvencií sa v procese selekcie inkubuje s cieľovým proteínom. V tomto procese sa na proteín naviažu vhodné aptaméry. V ďalšom kroku sú premývaním odseparované sekvencie ssDNA, ktoré sa nenaviazali na cieľový proteín, alebo sú naviazané slabo. Následne sú cieľové sekvencie ssDNA naviazané na proteínoch uvoľnené zmenou podmienok v roztoku (zvýšením teploty, zmenou pH) a amplifikované prostredníctvom polymerázovej reťazovej reakcie PCR (Polymerase Chain Reaction). Tento proces sa opakuje viackrát, aby boli vyselektované aptaméry s vysokou afinitou k cieľovému proteínu [Mercier a kol, 2017].

3.2 Aptaméry v diagnostike karcinómu prsníka

Aptaméry majú veľký význam v diagnostike nádorových ochorení. Receptor HER2 sa považuje za významný biomarker, pretože zohráva kľúčovú úlohu v rozvoji a progresii agresíveho typu karcinómu prsníka. V posledných rokoch sa mnohé štúdie venujú vývojom účinného aptaméra pre HER2 na liečebné a diagnostické účely [Wu a kol., 2017].

V práci Gijs a kol. (2016) sa zaoberajú dvoma aptamérmi HeA2_1 a HeA2_3, ktorých cieľový objekt je adherentná bunka. Oba tieto apraméry sa s vysokou špecifickosťou viažu na bunkové línie SKOV3 a SKBR3, ktoré nadmerne exprimujú receptor HER2. Fluorescenčné in vivo štúdie farbenia nádorového tkaniva preukázali jasné fluorescenčné sfarbenie aptamérov HeA2_1 a HeA2_2 na bunkách SKOV3. Na bunkách MDA-MB-231, ktoré neexprimujú HER2 receptor, nebola pozorovaná fluorescencia.

Liu a kol. (2012) syntetizovali aptamér HB5, ktorého cieľom je HER2 peptid. Tento aptamér rozpoznáva extracelulárnu doménu (ECD) proteínu HER2. Liu a kol v svojej práci testovali špecificitu HB5, teda schopnosť aptaméra naviazať sa na iné proteíny prítomné v krvi človeka (albumín, trypsín). Špecificita HB5 na HER2 proteín bola veľmi vysoká. Taktiež porovnávali schopnosť HB5 naviazať sa na HER2 pozitívne bunkové línie SKBR3 a HER2 negatívne bunky (MDA-MB-231, MCF7). HB5 sa relatívne silno viaže na bunky SKBR3 a veľmi slabo na HER2 negatívne bunkové línie.

DNA apatamér ERaptD4 izolovali Ahirwar a kol. (2016). ERaptD4 aptamér sa špecificky viaže na ER (estrogénový receptor) a vďaka svojim biofyzikálnym vlastnostiam je vyhovujúcim kandidátom na vývoj analytických metód biosenzorov na detekciu ER. Je vhodný aj na použitie in vivo, keďže nebol preukázaný žiaden vplyv na replikačné alebo transkripčné procesy buniek.

4 Materiál a metódy

4.1 Použité chemikálie

Rastové kultivačné médium DMEM (PAN Biotech, Nemecko), fetálne teľacie sérum FBS (PAN Biotech, Nemecko), antibiotiká Streptomycín/Penicilín (PAN Biotech, Nemecko), 10 mM fosfátový tlmivý roztok PBS s pH = 7,4, ktorý obsahuje 137 mM NaCl, 2,7 mM KCl (Sigma-Aldrich, Nemecko), trypsín (PAN Biotech, Nemecko), 0,4% roztok trypánovej modrej pre mikroskopiu (Sigma-Adrich, Nemecko), 90% etanol (Slavus, Slovensko), amoniak (NH_3, Slavus, Slovensko), peroxid vodíka (H_2O_2, Slavus, Slovensko), DNA aptamér HB5 modifikovaný na 5´ konci biotínom so sekvenciou: 5'AACCGCCCAAATCCCTAAGAGTCTGCACT TGTCATTTTGTATGTATTTGGTTTTGGCTCTC ACAGACACACTACACACGCACA-3', (Eurogenetec, Belgicko), neutrAvidín (NA, Mh = 60 kDa, ThermoFisher Scientific, Nemecko).

Na prípravu roztokov bola použitá destilovaná voda (Purelab Classic, Elga Anglicko), ktorú sme sterilizovali pomocou autoklávu (Icanclave).

4.2 Bunkové línie

V experimentálnej časti boli použité ľudské adherentné bunky karcinómu prsníka. Bunkové línie karcinómu prsníka boli poskytnuté Ústavom experimentálnej onkológie BMC, SAV.

- SKBR3 - adenokarcinóm prsníka – zhubný nádor v bunkách žľazového epitelu; značne invazívna HER2+; odobraté od 43 ročnej ženy.
- MDA-MB-231 - adenokarcinóm prsníka – HER2; odobraté od 51 ročnej ženy.

Bunky karcinómu prsníka boli kultivované v rastovom médiu DMEM s prídavkom 10% fetálneho teľacieho séra FBS a 1% antibiotík streptomycín/penicilín. Bunky boli kultivované v kultivačných fľašiach pre adherentné bunky (TPP, Švajčiarsko) v inkubátore pri 37°C a 5% CO2 a pasážované každé 2-4 dni [Sigma-Aldrich, 2016].

Príprava buniek pred experimentmi

V prvom kroku sme odstránili z kultivačnej fľaše staré médium. Následne sme monovrstvu buniek trikrát premyli sterilným fosfátovým tlmivým roztokom PBS. Na uvoľnenie buniek z kultivačnej fľaše sme použili 1 mL trypsínu po dobu 5-10 min. Po uvoľnení buniek z dna kultivačnej nádoby sme pridaním kultivačného média s obsahom FBS inaktivovali trypsín. Následne sme celý objem buniek centrifugovali po dobu 5 min pri zrýchlení 161 g. V ďalšom kroku sme z centrifugačnej nádoby odsali supernatant a peletku sme rozsuspendovali v PBS [Sigma-Aldrich, 2016].

Pred samotným meraním bolo potrebné pripraviť vzorku so známou koncentráciou buniek v 1 mL. Na stanovenie množstva buniek sme použili jednu z najjednoduchších metód priameho počítania buniek v Bürkerovej komôrke (Marienfeld-Superior, Nemecko). Na odlíšenie živých buniek sme použili farbivo - 0,4% roztok trypánovej modrej pre mikroskopiu. Trypánová modrá neprechádza intaktnou bunkovou membránou, preto ostanú živé bunky bezfarebné, zatiaľ čo mŕtve bunky sa zafarbia na modro [Mascotti a Mccullough, 2000]. Odobrali sme 25 µl bunkovej suspenzie a pridali sme 25 µl trypánovej modrej.

Túto suspenziu sme dôkladne rozsuspendovali a naplnili Bürkerovu komôrku. Pod svetelným mikroskopom sme spočítali živé bunky pri zväčšení 100x. Následne sme suspenziu buniek zriedili na požadovaný počet buniek v 1 mL [Sigma-Aldrich, 2016].

4.3 Prístrojové vybavenie

- Inkubátor ESCO CelCulture® CO_2 (ESCO, Česko) .
- Laminárny box Airstream (BSC-ESCO, USA).
- Centrifúga (Caboratory, Lotyšsko).
- Mikroskop (PZO, Poľsko).
- Vektorový analyzátor Agilent 8712ES (Agilent Technologies, USA).

4.4 Testovanie životaschopnosti buniek

Bunky karcinómu prsníka sme naočkovali do 24 jamkovej platničky pri hustote 50 000 buniek na jamku a kultivovali v inkubátore. Po 72 hodinách sme odobrali rastové médium a bunky dvakrát premyli tlmivým roztokom. Do každej jamky sme pridali 1 mL tlmivého roztoku PBS. Po uplynutí časového intervalu sme bunky z jamiek uvoľnili podobne ako pri príprave vzoriek. Na určenie počtu buniek a odlíšenie mŕtvych od živých buniek sme použili farbenie trypánovou modrou. Bunky sme počítali po 1, 2, 4, 6, 8 a 10 hodinách, pričom boli vystavené rôznym teplotám – pri 37°C v inkubátore, pri laboratórnej teplote 20°C a pri 4°C v chladničke [Avelar-Freitas a kol., 2014].

4.5 Akustické biosenzory

Termín biosenzor môžeme definovať ako analytický nástroj, ktorý sa používa na detekciu fyzikálno-chemických veličín v biologickom prostredí. Biosenzory využívajú špecifické biochemické reakcie sprostredkované izolovanými enzýmami, imunosystémami, organelami alebo celými bunkami prebiehajúce na molekulárnej úrovni na detegovanie, zaznamenanie a odovzdávanie kvantitatívnej informácie o cieľovej látke, analyte. Informáciu o koncentráciu analytu je potrebné previesť na elektrický, optický alebo tepelný signál [Marks a kol., 2007].

Biosenzor sa skladá z receptora (rozpoznávací element biologického pôvodu), ktorý je súčasťou alebo je napojený na fyzikálno-chemický prevodník. Po špecifickej interakcii analytu s rozpoznávacím elementom sa v prevodníku generuje fyzikálny signál, ktorý sa ďalej spracováva analyzátorom [Skládal, 2002].

Biologický rozpoznávací element môže byť:

- Bioanalytický (organela, enzým, bunka) – analyt je substrátom v prebiehajúcej chemickej reakcii.
- Bioafinitný (lektín, protilátka, receptor, nukleová kyselina) – analyt je špecificky viazaný, vzniká afinitný komplex.

Akustické vlny sa v tuhom prostredí šíria ako deformácia kryštalickej štruktúry. Ak sú tieto akustické vlny aplikované v časovo závislom strihu môže viesť k vlnovému pohybu s každým atómom oscilujúcim okolo svojej rovnovážnej polohy [Marks a kol., 2007].

Akustické rovinné vlny rozdeľujeme:

- longitudinálna – osciluje v smere šírenia vlny,
- strižná vlna – častice oscilujú v pravom uhle k smeru šírenia vlny.

V akustických biosenzoroch sa využívajú piezoelektické materiály. Tieto materiály dokážu pri mechanickom namáhaní generovať orientované dipóly, čím vznikne elektrické napätie. A naopak, konvertujú elektrický signál na akustické vlny [Skládal, 2002]. Medzi piezoelektrické látky patrí: kremenný kryštál (SiO_2), sulfid kadmia (CdS), oxid zinočnatý (ZnO), arzenid gallia (GaAs) a mnohé ďalšie. Aj napriek slabým piezoelektrickým vlastnostiam je jedným z najpoužívanejších materiálov kremenný kryštál, pretože je ľahko dostupný a rôzne rezy kremenného kryštálu ovplyvňujú vlastnosti akustických biosenzorov [Marks a kol., 2007].

4.5.1 TSM (*thickness shear mode*)

Metóda TSM je jedna z najpoužívanejších akustických metód vďaka svojej jednoduchosti a dostatočnej citlivosti. TSM rezonátor sa skladá z paralelného disku kremenného kryštálu s ovládacími elektródami na oboch stranách. Kremenný kryštál je zrezaný AT rezom (35°15´ zo Z optickej osi) pre jeho minimálnu závislosť od teploty. V elektrickom obvode môžeme TSM rezonátor opísať ako jednoduchý RLC obvod. Pri použití vysokofrekvenčného striedavého napätia s frekvenciou, ktorá zodpovedá rezonančnej frekvencii kryštálu, vznikne stojatá akustická objemová vlna. Vzniknutá stojatá vlna má maximum na povrchu kryštálu, vďaka čomu je kremenný kryštál citlivý na zmeny hmotnosti na povrchu alebo zmeny viskoelastických vlastností na rozhraní povrch-tekutina. Frekvencia stojatej vlny závisí od hrúbky kryštálu d:

$$f_0 = \frac{v}{2d}$$

$$v = \sqrt{\frac{\mu_q}{\rho_q}},$$

kde v je rýchlosť šírenia vlny v kremennom, ρ_q je hustota substrátu a μ_q je modul pružnosti kremeňa

[Marks a kol., 2007]. Táto rezonančná frekvencia môže byť až do 50 MHz. Vyššie frekvencie môžu byť problematické kvôli krehkosti kremenného kryštálu. Zvyčajne sa využívajú kryštály s frekvenciou od 3 do 30 MHz. Adsorpcia vrstvy na povrch kryštálu spôsobí zmenu v rezonančnej frekvencii. Túto zmenu rezonančnej frekvencie spôsobenú zmenou hmotnosti popisuje Sauerbreyova rovnica:

$$\Delta f = -2f_0^2 \frac{\Delta m}{A\sqrt{\mu_q \rho_q}},$$

kde f_0 je rezonančná frekvencia, Δm je zmena hmotnosť vrstvy adsorbovanej na povrchu kryštálu a A je efektívna plocha kryštálu. Pre malé Δm je táto závislosť lineárna. Tieto vzťahy platia len vo vákuu [Marks a kol., 2007].

V prípade, že sa oscilujúci kryštál nachádza v tekutom prostredí dochádza k zmene rezonančnej frekvencie v dôsledku viskóznych síl. Kanazawa a Gordon v roku 1985 odvodili vzťah pre zmenu frekvencie v tekutom prostredí:

$$\Delta f = -f_0^{32} \sqrt{\frac{\rho_l \eta_l}{\pi \mu_q \rho_q}}$$

η_l je dynamická viskozita kvapaliny a ρ_l je hustota kvapaliny [Marks a kol., 2007].

4.6 Príprava aptasenzora na detekciu buniek karcinómu prsníka

4.6.1 Meracia zostava TSM

Pre správne fungovanie TSM metódy je potrebné zostaviť prietokový systém, ktorý by umožnil kontinuálnu aplikáciu vzoriek. Základnou súčasťou meracej zostavy TSM rezonátor - leštený kremenný kryštál AT cut (Total Frequency Control Ltd., UK) pokrytý zlatými elektródami na obidvoch stranách. Priemer kryštálu je 13,6 mm, priemer elektródy je 5 mm a pracovná plocha kryštálu je 0,196 cm^2. Základná rezonančná frekvencia kryštálu je 8 MHz. Pred meraním bolo potrebné kremenné kryštály vyčistili. V našom prípade sme použili chemické čistenie v roztoku *base piranha* (bázická piraňa). Kryštál sme vložili do horúcej zmesi (70°C) bázickej pirane – amoniak (NH_3), voda (H_2O) a peroxid vodíka (H_2O_2) v pomere 1:5:1 po dobu 25 min. Tento proces sme opakovali trikrát. Následne sme kryštál premyli dostatočným množstvom destilovanej vody, 90% etanolu a vysušili prúdom dusíka. Takto očistený kryštál bol pripravený na imobilizáciu vzoriek.

Pred samotným experimentom bol kremenný kryštál vložený do prietokovej cely (Poskytnutá prof. M. Thompsonom, Univerzita Toronto, Kanada [Tassew a Thompson, 2003]), ktorá pozostávala z dvoch častí. Stabilitu rýchlosti prietoku počas meraní zabezpečovala digitálna pumpa Genius Plus (Kent Scientific, USA), do ktorej bola vložená 20 mL injekčná striekačka (Chirana, Slovensko). Rýchlosť prietoku počas meraní bola konštantná 50 µl·min $^{-1}$.

Na rozkmitanie kryštálu vysokofrekvenčným napätím a následné snímanie signálu sme použili vektorový analyzátor Agilent 8712ES (Agilent Technologies, USA), ktorý bol ovládaný pomocou softvéru Sens (Rybár a Grman, 2006). Program Sens umožňoval sledovať zmeny rezonančnej frekvencie f_s. a dynamického odporu R_m vzorky v reálnom čase. Grafické znázornenie časového priebehu f_s. a R_m sme spracovali v programe OriginPro9.1.

4.6.2 Modifikácia zlatého povrchu elektródy NeutrAvidínom

NeutrAvidín (NA) je proteín (homo-tetramér), deglykolyzovaný avidín, ktorý preukazuje podobnú afinitu k biotínu ako avidín. Je veľmi vhodný pre imobilizáciu biotinylovaných nukleových kyselín v prietoku, pretože silne adsorbuje na zlatých povrchoch prostredníctvom tiolovej (SH) skupiny a vytvára výslednú monovrstvu, čo má za následok výraznú zmenu frekvencie [Hianík a kol. 2009]. Interakcia NA s biotínom je veľmi silná a stabilná ($K_d = 10^{-15}$), [Tassew a Thompson, 2003]. Vysokú afinita k biotínu k NA zabezpečujú vodíkové väzby a van der Waalsové sily.

Imobilizáciu NA s koncentráciou 125 µg/mL na zlatý povrch elektródy sme uskutočnili v prietoku. Imobilizácia NA trvala 35 min, čo bol dostatočný čas na ustálenie f_s a dynamického odporu R_m. Následne sme povrch znova premyli destilovanou vodou.

4.6.3 Proces merania TSM

Do prietokovej cely sme vložili čistý kremenný kryštál, ktorý sme premývali destilovanou vodou do ustálenia hodnôt rezonančnej frekvencie f_s. a dynamického odporu R_m. Po ustálení sme na kryštál imobilizovali NeutrAvidín (NA) podľa postupu v kap. 4.6.2. Keďže aptamér HB5 sme riedili v tlmivom roztoku PBS, v ďalšom kroku sme povrch senzora premyli týmto tlmivým roztokom. Následne sme do systému pridali 0,25 µM aptaméra HB5 a nechali inkubovať 15 min. Po inkubácii aptaméra sme povrch znova premyli PBS a potom PBS s pridaním alikvotného množstva kultivačného média DMEM. Po ustálení hodnôt f_s. a R_m sme do prietoku pridali rôzne koncentrácie buniek karcinómu prsníka rozsuspendované v tlmivom roztoku PBS.

Na overenie špecifickosti biosenzora sme postup zopakovali s HER2 negatívnymi bunkami (MDA-MD-231). Nešpecifické interakcie medzi NA a nádorovými bunkami sme aj overovali meraním na vrstvách bez pridania aptamérov.

5 Výsledky a diskusia

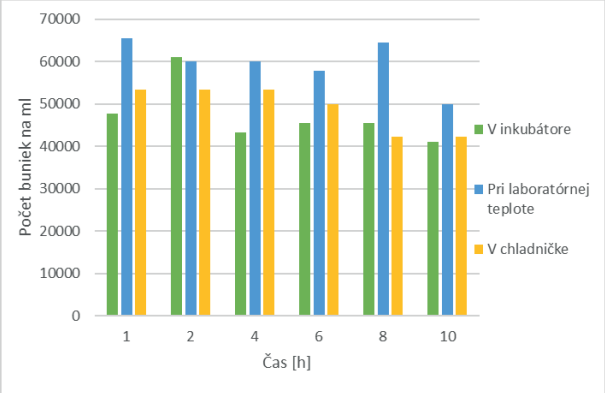
V experimentálnej časti sme pomocou akustickej metódy TSM (*Thickness shear mode*) vyvíjali a optimalizovali biosenzor na detekciu onkomarkerov na bunkách karcinómu prsníka. V našej práci sme sa zamerali na HER2 receptor. Samotnému štúdiu afinitných interakcií aptamérov s HER2 receptormi predchádzalo overenie životaschopnosti buniek v laboratórnych podmienkach.

5.1 Sledovanie životaschopnosti buniek karcinómu prsníka

Viabilita patrí medzi základné parametre pri práci s bunkovými kultúrami. Počas meraní sú bunky vystavené nepriaznivým podmienkam (zmena teploty, nedostatok kultivačného média). Z tohto dôvodu bolo potrebné overiť prežívanie buniek v týchto podmienkach.

Testovali sme vplyv tlmivého roztoku PBS na životaschopnosť buniek. Na porovnanie vplyvu teploty a obsahu CO_2 sme viabilitu buniek testovali v rozličných podmienkach – v inkubátore s teplotou 37°C a 5% CO_2, pri laboratórnej teplote 20°C a v chladničke pri teplote 4°C a obsahu CO_2 približne 0,04% [Cai a kol., 2010].

Obrázok 3 znázorňuje výsledky viability bunkovej línie SKBR3. Keďže bunky neboli v rastovom kultivačnom médiu, nemohli sa ďalej rozmnožovať a pozorujeme mierny pokles v počte buniek. Najmenší pokles pozorujeme práve pri laboratórnej teplote, ale ani pri teplotách 37°C a 4°C sa nepreukázalo výrazne zníženie počtu buniek v čase. Pri testovaní viability buniek SKBR3 v PBS pri teplote 4°C sme zaznamenali pokles počtu buniek po 8 hodinách približne o 15%.

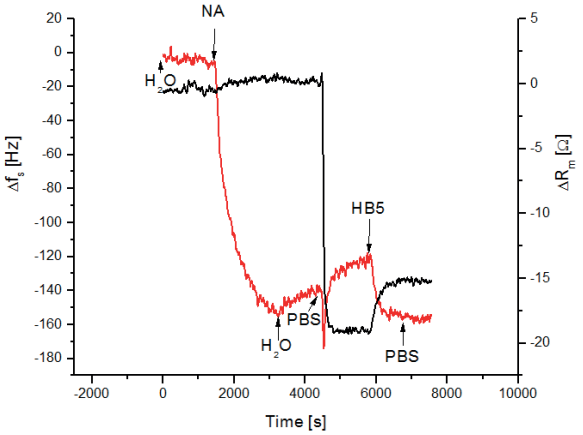


Obrázok 3: Životaschopnosť buniek SKBR3 v tlmivom roztoku PBS v inkubátore (37°C), pri laboratórnej teplote (20°C) a v chladničke (4°C).

Z našich výsledkov stanovenia viability buniek v PBS usudzujeme, že bunková línia SKBR3 je pri laboratórnych podmienkach stabilná.

5.2 Aptasenzor na detekciu HER2 receptorov

Na detekciu afintných interakcií aptamérov s HER2 receptormi je potrebné vytvoriť chemicky citlivé rozhranie. V našej práci sme si zvolili nasledovný systém imobilizácie aptamérov. Povrch kryštálu bol modifikovaný sendvičovým spôsobom. Chemicky citlivé rozhranie sme pripravili formovaním povrchu NeutrAvidínom (NA) na zlatej elektróde kremenného kryštálu. Receptorom na detekciu HER2 proteínu bol biotinylovaný aptamér HB5. Imobilizačný postup biotinylovaného aptaméru na NA bol založený na interakcii medzi biotínom a NA.

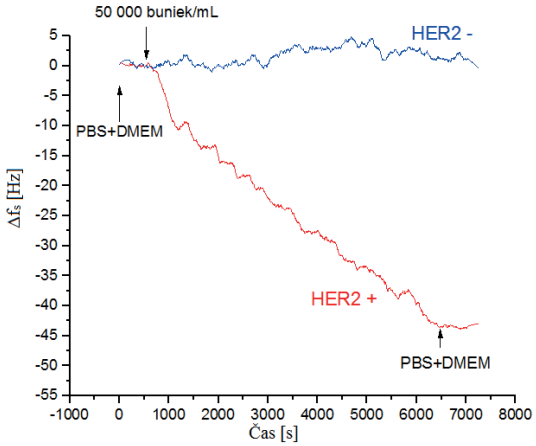


Obrázok 4: Kinetika zmien *Δfs* (červená) a *ΔRm* (čierna) TSM kryštálu po modifikácii jeho povrchu: NA (125 µg/mL) a aptamérom HB5 (0,25 µM).

NA s koncentráciou 125 µg/mL sme imobilizovali po dobu 35 min. Imobilizácia NA na kryštál vyvolala pokles rezonančnej frekvencie f_s priemerne o 157,8 ± 27,3 Hz, ale zmena dynamického odporu R_m bola minimálna (Obrázok 4). Pokles f_s spôsobila silná adsorpcia NA na zlatý povrch kryštálu a minimálne zmeny v R_m sú dôkazom vytvorenia pevnej proteínovej vrstvy [Tassew a Thompson, 2003]. Po ustálení hodnôt f_s a R_m bol povrch premytý destilovanou vodou. Premytie povrchu spôsobilo zvýšenie frekvencie, čo má súvis s odstránením nenaviazaných molekúl NA. Keďže aptamér HB5 sme riedili v tlmivom roztoku PBS, v ďalšom kroku sme povrch senzora premyli týmto tlmivým roztokom na získanie základnej línie. Zmena tlmivého roztoku spôsobila prudký pokles f_s a najmä R_m. Tieto zmeny boli vyvolané zmenou iónovej sily, ktorá má vplyv na interakciu medzi vrstvou na kryštáli a tlmivým roztokom [Ellis a Thompson, 2004].

Následne sme do systému pridali 0,25 µM aptamérov HB5 a nechali inkubovať 15 min. Tento čas bol dostačujúci na dosiahnutie saturácie povrchu (Obrázok 4). Imobilizácia aptaméra spôsobila pokles f_s priemerne o 57,1 ± 16,03 Hz a zvýšenie

R_m o 4,8 ± 0,76 Ω. Zníženie rezonančnej frekvencie je spôsobené naviazaním biotinylovaných aptamérov HB5 na NA vrstvu. Nárast R_m môže byť spôsobený zvýšením povrchovej viskozity, kvôli usporiadaniu aptamérov na povrchu a ich interakciám medzi nimi ako aj okolitým pufrom [Hianik a kol., 2009].



Obrázok 5: Zmena rezonančnej frekvencie *Δfs* TSM kryštálu po interakcii buniek HER2 pozitívnej bunkovej línie SKBR3 (červená krivka) a HER2 negatívnej bunkovej línie MDA-MB-231 (modrá krivka) s aptasenzorom.

Po inkubácii aptamérom HB5 sme povrch premyli PBS. Následne aj PBS s pridaním alikvotného množstva kultivačného média DMEM, aby sme eliminovali nešpecifické interakcie buniek s vytvorenou vrstvou. Po ustálení hodnôt f_s a R_m sme do prietoku pridali bunky karcinómu prsníka rozsuspendované v tlmivom roztoku PBS. Po pridaní buniek na vytvorený aptasenzor sledujeme špecifickú a nešpecifickú interakciu medzi HER2 receptormi nádorových buniek SKBR3 a MDA-MB-231 a DNA aptamérmi HB5 (Obrázok 5).

Tabuľka 1: Zmena rezonančnej frekvencie (Δf_s) a dynamického odporu (ΔR_m) pre rôzne koncentrácie (c) buniek karcinómu prsníka SKBR3.

c (počet buniek/mL)	Δf_s ± SD (Hz)	ΔR_m ± SD (Ω)
$1{\cdot}10^5$	-45,0 ± 7,07	0,63 ± 0,18
$5{\cdot}10^4$	-46,7 ± 11,54	1,42 ± 0,90
$5{\cdot}10^3$	-17,5 ± 3,54	1,76 ± 0,85

V Tabuľke 1 sú uvedené zmeny f_s a R_m pre tri rôzne koncentrácie buniek. Môžeme vidieť, že pre $5{\cdot}10^4$ a $1{\cdot}10^5$ buniek/mL je rozdiel v zmene rezonančnej frekvencie iba 1,7 Hz, pretože ide o podobné koncentrácie buniek. Zmena dynamického odporu klesá so stúpajúcou hustotou buniek. Keďže ΔR_m je spôsobená zmenou viskoelastických vlastností vrstvy vytvorenej na kryštáli, táto nepriama úmera medzi ΔR_m a koncentráciou buniek môže byť spôsobená usporiadaním buniek prichytených na povrchu aptasenzora. Pri najnižšej koncentrácii buniek je menšia pravdepodobnosť interakcie HER2 receptorov nádorových buniek s aptamérmi HB5. Predpokladáme, že pri nízkej koncentrácii bunky vytvárajú na aptasenzore nepravidelnú vrstvu, čo spôsobí zvýšenie viskozity. So zvyšujúcou sa hustotou sa zvyšuje celistvosť vytvorenej vrstvy buniek na povrchu aptasenzora a viskoelasticita vrstvy klesá.

Na vylúčenie možných nešpecifických interakcií sme testovali aj pridanie buniek SKBR3 na NA bez imobilizácie aptamérov HB5. Interakcia buniek SKBR3 s koncentráciou $5{\cdot}10^4$ buniek/mL s NA spôsobila pokles f_s o 15 ± 7,07 Hz a nárast R_m o 2,2 ± 0,56 Ω. Zmena f_s pri nešpecifickej interakcii predstavuje 32% z celkovej špecifickej odozvy.

Testovali sme aj špecifickosť aptasenzora pridaním HER2 negatívnej bunkovej línie MDA-MB-231. Ako môžeme vidieť na Obrázku 5, táto bunková línia nemala žiadnu odozvu vo frekvencii, a teda nami vytvorený aptasezor reaguje len na bunkovú líniu so zvýšenou expresiou HER2 receptorov.

6 Záver

Akustické biosenzory v oblasti bunkovej biológie poskytujú v reálnom čase informácie o procesoch ako sú adhézia, morfologické zmeny, apoptóza a umožňujú testovanie fyziologických účinkov nových liekov, testov toxicity a biokompatibility. Rýchle a ľahké monitorovanie afinitných interakcií a získavanie charakteristík väzbovej reakcie môže v budúcnosti predstavovať alternatívu doteraz zaužívaných systémov [Skládal, 2016]. Z tohto dôvodu je veľmi dôležitý vývoj a optimalizácia bunkových aptasenzorov.

V tejto práci sme sa venovali vývoju aptasenzora na detekciu HER2 receptora na nádorových bunkách karcinómu prsníka. V prietokovom systéme TSM (*Thickness shear mode*) sme vytvorili citlivú vrstvu NA-HB5, ktorá je schopná špecificky rozpoznať a viazať bunky s nadmernou expresiou HER2 receptora.

Poďakovanie

Táto práca bola realizovaná s podporou agentúry APVV (číslo projektu APVV-14-0267) ako aj realizáciou projektu "Rozvoj Centra excelentnosti pre využitie informačných biomakromolekúl na zlepšenie kvality života", na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja (ITMS 26240120027).

Literatúra

[Ahirwar a kol., 2016] Ahirwar, R. (2016). Aptamer-Assisted Detection of the Altered Expression of Estrogen Receptor in Human Breast Cancer. *PLoS ONE* 2016, vol. 11, e0153001.

[Avelar-Freitas a kol., 2014] Avelar-Freitas, B.A a kol. (2014). Trypan blue exclusion assay by flow cytometry. *Brazilian J. Med. Biol*. 2014, vol. 47, pp. 307-315.

[Cai a kol., 2010] Cai, W.-J a kol. (2010). Decrease in the CO2 Uptake Capacity in an Ice-Free Arctic Ocean Basin. *Science*, 2010, vol. 329 (5991), pp. 556–559.

[Ellis a Thompson, 2004] Ellis J.S., Thompson M. (2004) Acoustic coupling atmultiple interfaces and the liquid phase response of the thickness shear-mode acoustic wave sensor. *Chem.Commun*., 11: s. 1310–1311.

[Furrer a kol., 2015] Furrer, D. a kol. (2015). Advantages and Disadvantages of Technologies for HER2 Testing in Breast Cancer Specimens. *Am J Clin Pathol*, 2015. vol. 144, pp. 686-703.

[Gijs a kol. 2016] Gijs, M. a kol. (2016). Improved Aptamers for the Diagnosis and Potential Treatment of HER2-Positive. *Cancer. Pharmaceuticals* 2016, vol. 9, pp. 29.

[Hianík a kol. 2009] Hianik T. (2009) Detection of protein-aptamer interactions by means of electrochemical indicators and transverse shear mode method. Aptamer in Bioanalysis. Hoboken (NJ, USA): John Wiley & Sons, Inc., ISBN: 9780470148303.313 pp. 313.

[Hudis, 2007] Hudis, C. A. (2007). Trastuzumab – mechanism of action and use in clinical practice. *N Eng J Med*, 2007 vol. 357, pp. 39-51.

[Chun a kol., 2013] Chun, L. a kol. (2013). Electrochemical detection of HER2 using single stranded DNAaptamer modified gold nanoparticles electrode. *Sensors and Actuators B: Chemical*. 2013, vol. 186, pp. 446– 450.

[Iqbal a Iqbal, 2014] Iqbal, N. a Iqbal N. (2014). Human Epidermal Growth Factor Receptor 2 (HER2) in Cancers: Overexpression and Therapeutic Implications. *Molecular Biology International*, 2014, vol, 2014, pp. 1-9.

[Kuzma, 2015] Kuzma, I. (2015). Rakovina prsníka. Bratislava, Liga proti rakovine SR. ISBN 978-80-89201-32-7.

[Liu a kol., 2012] Liu, Z. a kol. (2012). Novel HER2 aptamer selectively delivers cytotoxic drug to HER2-positive breast cancer cells in vitro. *J. Transl. Med*. 2012, vol. 10, pp. 148.

[Marks a kol., 2007] Marks R. S. a kol. (2007). Handbook of biosensirs and biochips. Chichester: John Wiley & Sons, Ltd. ISBN: 9780470019054, vol. 1.

[Mascotti a Mccullough, 2000] Mascotti K., Mccullough J. (2000). HPC viability measurement: trypan blue vs acridine orange and propidium iodide, *Transfusion*, 2000; vol. 40 (6), pp. 693-696.

[Mercier a kol., 2017] Mercier, M.C., M. Dontenwill, L. Choulier. (2017). Selection of Nucleic Acid Aptamers Targeting Tumor Cell-Surface Protein Biomarkers. *Journal Cancer*, 2017, vol. 69, pp. 1-33.

[Sigma-Aldrich, 2016]. SIGMA-ALDRICH. Fundamentaltechniques in cell culture. In sigmaaldrich.com. [online]. 2016. [cit. 2018-03-28]. Dostupné na internete: < https://www.sigmaaldrich.com/content/dam/sigma-aldrich/docs/Sigma-Aldrich/General_Information/1/fundamental-techniques-in-cell-culture.pdf>.

[Skládal, 2002] Skládal P. (2002). Biosenzory. Brno: Masarykova Univerzita, 2002, 149s.

[Skládal, 2016] Skládal P. (2016). Piezoelectric biosensors. *Trends in Analytical Chemistry*, 2016, vol. 79, pp. 127-133.

[Sorlie a kol 2003] Sorlie, T. a kol. (2003). Repeated observation of breast tumor subtypes in independent gene expression data sets. *PNAS*, 2003, vol. 100, pp. 8418-8423.

[Tassew a Thompson, 2003] Tassew N., Thompson M. (2003) Kinetic characterization of TAR RNA-Tat peptide and neomycin interactions by acoustic wave biosensor. *Biophys Chem.*, 2003, vol. 106 (3), pp. 241-252.

[Wang a kol., 2015] Wang, K. a kol. (2015). Specific aptamer-conjugated mesoporous silica–carbon nanoparticles for HER2-targeted chemo-photothermal combined therapy. *Acta Biomaterialia*, 2015, vol. 16, pp. 196-205.

[Wu a kol., 2017] Wu, S. a kol. (2017). Potential Diagnostic and Therapeutic Applications of Oligonucleotide Aptamers in Breast Cancer. *International Journal of Molecular Sciences*, 2017. ISSN:1422-0067, vol. 18, pp. 1851-1883.

[Xiaofeng a kol., 2015] Xiaofeng, D. a kol. (2015). Breast cancer intrinsic subtype classification, clinical use and future trends. *Am J Cancer Res*, 2003. ISSN: 2156-6976/ajcr0014158, vol. 5(10), pp. 2929-2943.

[Yarden, 2001] Yarden, Y. (2001). The EGFR family and its ligands in human cancer: signalling mechanisms and therapeutic opportunities. *European Journal of Cancer*, 2001. ISSN: 0959-8049/01, vol. 37, pp. S3–S8.

[Yersal a Barutca, 2014] Yersal, O. a Barutca S. (2014). Biological subtypes of breast cancer: Prognostic and therapeutic implications. *World J Clin Oncol*, 2014. ISSN 2218-4333, vol. 10, pp. 412-424.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 67–72
ISBN 978-8081470882, © 2018 Natália Zacharová

Využitie atómovej silovej mikroskopie na zobrazovanie mliečnych baktérií

Natália Zacharová[1]*
Školiteľ: Alexandra Poturnayová[1,2†]

[1] Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská dolina F1, 842 48 Bratislava
[1,2] Ústav biochémie a genetiky živočíchov, Centrum biovied SAV, Dúbravská cesta 9, 845 11 Bratislava 45

Abstrakt

Atómová silová mikroskopia (AFM) je osvedčenou metódou na štúdium biologických vzoriek *in situ*. Táto metóda poskytuje trojrozmerné obrazy ultraštruktúry povrchu s molekulárnym rozlíšením v reálnom čase. Fyzikálne vlastnosti živých buniek môžeme študovať za fyziologicky relevantných podmienok len s minimálnymi nárokmi na prípravu vzoriek a bez ich poškodenia. Odhalenie štruktúry mikrobiálnych buniek je hlavnou výzvou súčasnej mikrobiológie a ponúka zaujímavé vyhliadky v biomedicíne.

V predkladanej práci sa zameriavame na využitie AFM na vizualizáciu mliečnych baktérií. Sústredili sme sa na ich charakterizáciu a na optimalizáciu prípravy vzoriek pre AFM merania s baktériami *Lactobacillus acidophilus* imobilizovaných na povrch krycieho sklíčka.

Kľúčové slová: AFM, mliečne baktérie, vizualizácia

1 Úvod

Mliečne baktérie sa čoraz častejšie stávajú predmetom výskumov, nakoľko preukazujú zdraviu prospešný efekt. Radia sa medzi Gram-pozitívne (G^+) baktérie. Fermentujú cukry obsiahnuté v potravinách predovšetkým na kyselinu mliečnu. Podstatnú úlohu hrajú pri konzervácii, štruktúre a vôni potravín. Sú prítomné v črevnej mikroflóre ľudského tráviaceho traktu. Niektoré reťazce laktobacilov sa komerčne predávajú ako probiotiká. Využívajú sa aj pri prenose antigénov na povrchy slizníc [1].

Kontrola mikroogranizmov v potravinárskych produktoch je ústredným záujmom výskumov, nakoľko príjem zdravotne nezávadných potravín je životne dôležitý. Detekciou mikroorganizmov v potravinách môžeme taktiež odhaliť množstvo mikróbov s pozitívnym vplyvom na človeka a ďalším štúdiom objaviť ich uplatnenia v iných sférach na zlepšenie kvality ľudského života. Vhodným nástrojom na detekciu mikroorganizmov je AFM.

Cieľom práce bolo spracovanie prehľadu o mliečnych baktériách, ich využití v potravinárskom priemysle so zameraním na baktériu *L. acidophilus* a optimalizovať prípravu vzorky baktérií *L. acidophilus* pre AFM merania, aby sme boli schopní pozorovať izolované bunky. Vhodne pripravenú vzorku možno ďalej využiť na pozorovanie rôznych zaujímavých dejov a získavať tak nové vedomosti v oblasti životných procesov mikroorganizmov.

1.1 Lactobacillus acidophilus

Baktérie *L. acidophilus* (obr. 1) sú známe vďaka ich veľmi priaznivým účinkom v črevnej mikroflóre. Sú všeobecne považované za baktérie zodpovedné za prosperujúci stav čriev, a ich prítomnosť v mikroflóre považujú za prevenciu voči starnutiu a degradácii dolného tráviaceho traktu [2]. V tráviacom trakte znižujú pH. Vďaka tomu, že sú adherentné na steny epitelu, zabraňujú rastu patogénov v čreve [3].

Ide o G^+ tyčinky vyskytujúce sa v pároch alebo krátkych reťazcoch. V súčasnosti sa za baktérie *L. acidophilus* považuje heterogénna skupina šiestich druhov: *L. acidophilus, L. amylovorus, L. crispatus, L. gallinarum, L. gasseri* a *L. johnsonii*.

Radia sa medzi homofermentatívne baktérie. Hexózu fermentujú predovšetkým na kyselinu mliečnu.

Arihara a kol. [4] publikovali výskum, v ktorom ukázali, že skupinu *L. acidophilus* možno využiť nielen na fermentáciu mlieka, ale aj mäsa na produkciu zdravých mäsových výrobkov.

Trend súčasného stravovania inšpiroval vedcov [5] na využitie baktérie pri biokonzervácii. Čoraz väčší dopyt po chemicky neošetrovaných bioproduktoch podnietil výskum vplyvu baktérií na čerstvosť ovocia a zeleniny. Jedným z testovaných produktov bolo mango. Výsledok štúdie poukazoval

* natalia.zacharova28@gmail.com
† alexandrapoturnayova@gmail.com

na podstatné zvýšenie trvanlivosti vzorky. V prirodzených podmienkach vydržalo mango čerstvé 48 h a nákaza nežiaducimi mikroorganizmami sa objavila po 96 h, zatiaľ čo na vzorke s baktériami nebola pozorovaná zmena štruktúry po dobu 96 h a mango nebolo zasiahnuté nežiaducimi mikróbmi 6 dní. Ukázalo sa, že baktérie *L. acidophilus* majú konkurenčný vzťah vzhľadom na výživu voči nežiadúcim mikróbom a produkciou bakteriocínu, antimikrobiálnej látky, vytvárajú nevhodné prostredie pre rast a život baktérií a húb znehodnocujúcich stav potravín.

Kultúry preferujú rast v anaeróbnom prostredí so zložením 5% oxidu uhličitého, 10% vodíka a 85% dusíka. Kultúry rastú na MRS (de Man, Rogosa a Sharpe) médiu, ktoré je bohaté na amino kyseliny a vitamíny a bežne sa doň pridáva na podporu rastu octan sodný a soli horčíka [6].

Candida albicans je obávaný druh kvasinky, nakoľko je častou príčinou choroby a smrti osôb trpiacimi zníženou imunitou. Bežne zaužívané metódy liečby infekcie sa ukazovali byť nevhodné, nakoľko spôsobovali množstvo vedľajších efektov. V nedávnom výskume Vilela a kol. [7] študovali vplyv baktérie *L. acidophilus* na *C. albicans* a ukázali, že baktéria môže byť využitá aj v medicíne. Demonštrovali, že baktérie produkciou butyrátu sodného pôsobia ako inhibítory pri tvorbe biofilmov kvasinky a tak priamo potláčajú jej patogénnosť.



Obr. 1: bunky baktérie *L. acidophilus* zobrazené pomocou elektrónového mikroskopu [8]

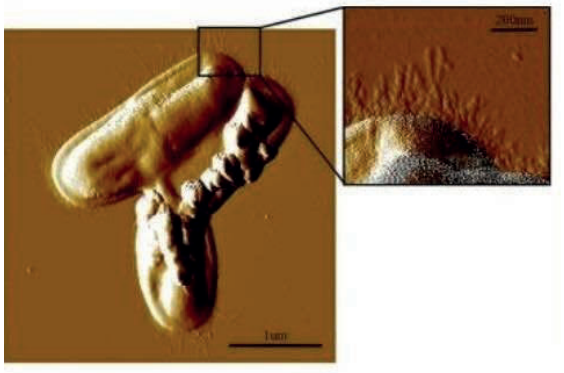
1.2 Atómová silová mikroskopia

AFM je významný nástroj pre získavanie vedomostí vo výskume povrchových vlastností vzoriek. Pôvodne bola vyvinutá na skúmanie morfológie vzorky, v súčasnosti je to multifunkčná technika na získavanie lokálnych vlastností vzorky takých ako lokálna magnetizácia, elektrická či tepelná vodivosť. AFM je vhodná aj na štúdium interakcií molekúl na úrovni nanometrov. Výhodou AFM je možnosť merať morfológiu povrchu ako na vodivých tak aj na nevodivých vzorkách. Okrem získavania statických topografických obrazov, je AFM vhodná aj na zachytenie dynamických konformačných zmien molekuly. Patrí medzi skenovacie sondové mikroskopy. Na rozdiel od optických alebo elektrónových mikroskopov, AFM nie je limitovaná vlnovou dĺžkou svetla alebo elektrónov. Okrem vysokého rozlíšenia jej ďalšou výhodou oproti iným mikroskopom s vysokým rozlíšením je možnosť skúmania vzoriek v kvapalinách, teda v prirodzenom prostredí buniek [9].

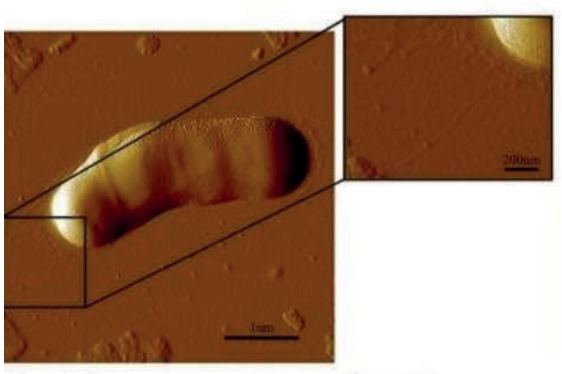
Pri tvorbe topografií pomocou AFM po povrchu vzorky rastruje ostrý hrot vytvarovaný na voľnom konci nosníka. Počas skenovania pôsobia medzi povrchom vzorky a hrotom sily, ktoré spôsobujú ohyb nosníka. Nosník je deformovaný podľa Hookovho zákona F=k.z, kde k je tuhosť a z je výchylka nosníka. Ohyb nosníka je následne detegovaný fotodiódou. Vyhodnocovaním ohybu možno získať topografiu s vysokou presnosťou [10].

1.3 Využitie AFM na detekciu mliečnych baktérií

Bifidobaktérie sú jedným z početne zastúpených druhov baktérií v ľudskom tráviacom trakte. Pomáhajú udržiavať zdravý tráviaci trakt novorodencov a podielajú sa na tvorbe vhodných fyziologických podmienok v čreve. Aby baktérie kolonizovali tráviaci trakt, musia vyvinúť dostatočne veľkú adhéznu silu na steny sliznice. Milani a kol. [11] využili AFM na vizualizáciu niekoľkých druhov bifidobatérií (obr. 2 a 3) a skúmali, ako vláknité štruktúry na povrchu bakteriálnych buniek ovplyvňujú schopnosť baktérií priľnúť na rôzne substráty. Ukázalo sa, že pili poskytujú možnosť adhézie buniek na glykány a proteíny extracelulárnej hmoty a tak podporujú schopnosť baktérií kolonizovať tráviaci trakt.



Obr. 2: AFM topografia *Bifidobacterium minimum* [11]



Obr. 3: AFM topografia *Bifidobacterium pseudolongum* [11]

2 Materiály a metódy

2.1 Materiály

Pri práci boli použité nasledujúce chemikálie: destilovaná voda (H_20) [Purelab Classic, Elga, Anglicko], fosfátové pufrové tablety PBS [Sigma-Aldrich, Nemecko] (rozpustením jednej tablety v 200 ml deionizovanej vody sme získali 0,01 M fosfátový pufor (PBS) obsahujúci 2,7 mM chloridu draselného a 0,137 M chloridu sodného, pH 7,4). Acetón a etanol bol zakúpený od firmy Slavus, Slovensko.

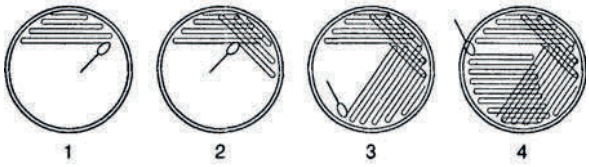
Ďalej sme využívali spotrebný sterilný materiál: jednorázové pipety 5 a 10 ml (TPD), špičky na pipety, krycie sklíčka, mikroskopické hokejky a očká (Sarstedt, Slovensko).

Na imobilizáciu sme využívali bunkové línie *Lactobacillus acidophilus*. Baktérie boli kultivované v sterilných podmienkach na MPA agare (mäsopeptónovom agare) (kazeínový peptón, kvasinkový extrakt, D(+)-glukóza, fosforečnan monodraselný, citrát amónny, octan sodný, síran horečnatý, síran železnatý, síran mangánatý, agar) v termostate pri 37°C a boli poskytnuté spolupracujúcou inštitúciou Hungarian Diary Research Institute (Mosonmagyarovar, Maďarsko).

2.2 Kultivácia baktérií

Pre rast baktérií v laboratórnych podmienkach je potrebné simulovať podmienky prostredí, v ktorých sa prirodzene vyskytujú. So znalosťou faktorov ovplyvňujúcich rast baktérií možno vybrať vhodné zloženie rastového média a získať tak čistú kultúru [12].

Jeden zo spôsobov ako mechanicky získať čistú líniu je použitie pásovej metódy na Petriho miske (obr. 4). Vzorka miešanej kultúry je rozotretá sterilizovaným mikroskopickým očkom pozdĺž okraja misky so živným médiom. Tento proces sa opakuje 4 krát. Použitím sterilizovaného očka sa odoberajú baktérie z Petriho misky a rozotierajú sa pod uhlom 90°, až kým nedostaneme čistú líniu [13].



Obr.4: spôsob izolácie čistej línie [14]

2.3 Imobilizácia baktérií na AFM substrát

V experimentoch sme imobilizovali čisté línie na vyčistený povrch krycieho sklíčka. Čistenie sme vykonávali premývaním sklíčka v acetóne (15 min), etanole (15 min), destilovanej vode (15 min) a v ultrazvuku. Tesne pred imobilizáciou buniek bolo sklíčko v sterilných podmienkach premyté etanolom a následne bolo sterilizované plameňom.

Bakteriálne bunky sme imobilizovali na krycie sklíčko dvomi spôsobmi:

- Priamou imobilizáciou z vyrastenej kultúry na agare v Petriho miske. Mikroskopickým očkom sme odobrali bunky a rozotierali ich po povrchu sklíčka. Vzorku sme potom nechali v sterilných podmienkach vyschnúť.
- Druhá metóda spočívala v tom, že sme bunky prečistili metódou centrifugácie. Bunky po odobratí z agaru mikroskopickým očkom sme nariedili do 1 ml sterilnej destilovanej vody alebo PBS. Pripravený roztok sme dôkladne premiešali a centrifugovali (3000 rpm, 15 min), čím sme dostali bunky usadené na dne skúmavky. Supernatant s nečistotami a poškodenými bunkami sme odsali a nahradili ho čistým rozpúšťadlom. Tento postup sme opakovali 3-krát. Prečistené baktérie sme imobilizovali na substrát, 1 µl suspenzie sme mikroskopickým očkom rozotreli po sterilnom sklíčku a nechali vyschnúť.

Porovnávali sme tieto 3 postupy prípravy vzorky s baktériami *L. acidophilus*:

- Priamu imobilizáciu buniek na sklíčko priamo z agaru pomocou mikroskopického očka
- Prečistenie buniek nariedením do PBS
- Prečistenie buniek nariedením do sterilnej destilovanej vody

Pre každý spôsob prípravy buniek sme použili vždy rovnakú koncentráciu buniek stanovenú postupným riedením buniek odobratých z agaru. Výsledná suspenzia buniek (1 µl) bola imobilizovaná rozotretím na sterilné sklíčko.

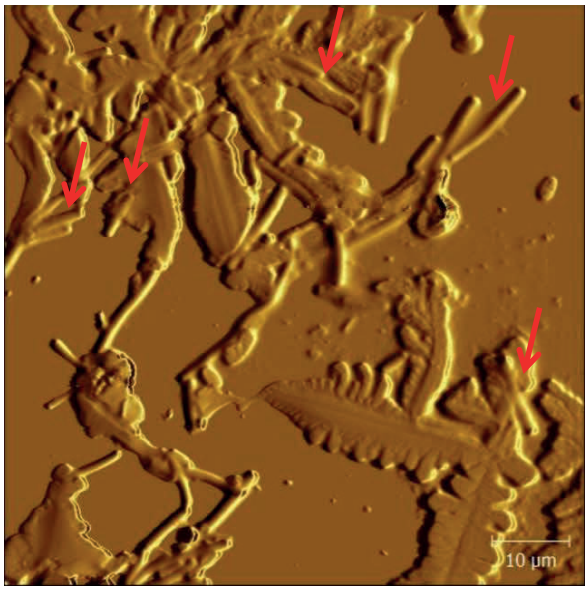
2.4 Merania pomocou AFM

V experimentoch sme merali topografiu buniek mliečnych baktérií. Všetky vzorky boli imobilizované na sterilné sklíčko. Merania boli uskutočnené v kontaktnom režime využitím mikroskopu Atomic Force Microscope, Series 5500 (Agilent Technologies, USA). Používali sme AFM hroty DNP-10 a MCST (Bruker, Nemecko). Každú vzorku sme zobrazili na viacerých miestach (minimálne 5). Namerané topografie sme vyhodnocovali v programe Gwyddion 2.49.

3 Výsledky a diskusia

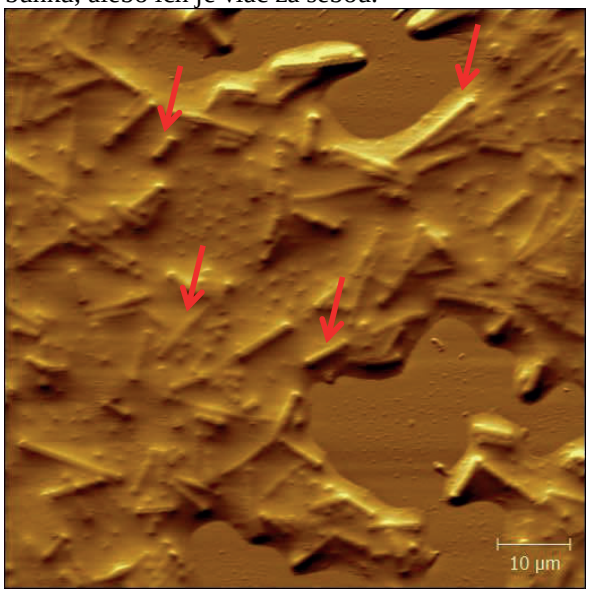
Výsledky optimalizácie prípravy vzoriek pre AFM merania ukážeme na baktérii *L. acidophilus*. Baktérie boli imobilizované na sterilnom krycom sklíčku „in air" technikou. Sledovaná plocha AFM topografie bola 80x80 µm, z-škála 1 µm. Vzorka 1 (obr. 5) bola pripravená priamou imobilizáciou buniek na sklíčko priamo z agaru pomocou mikroskopického očka. Vidíme že takáto príprava vzoriek nie je najvhodnejšia, nakoľko obsahuje veľa nečistôt zo živného média, ktoré skresľujú informácie o veľkosti buniek. Nepozorovali sme izolované bunky, preto bolo nevyhnutné optimalizovať spôsob prípravy AFM vzoriek.

Šípky na jednotlivých topografiách poukazujú na viditeľnosť buniek medzi nečistotami z agaru.



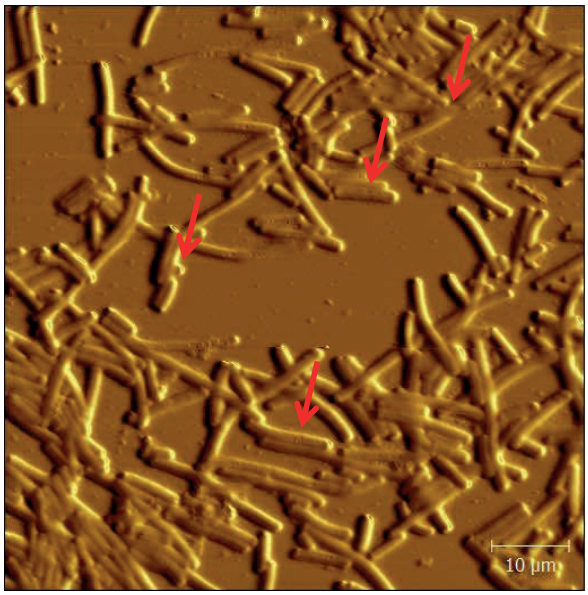
Obr. 5: AFM topografia *L. acidophilus* imobilizovaný priamo z agaru

Vzorka 2 (obr. 6) bola 3x premývaná PBS a po prečistení aj nariedená do PBS. Z topografie je vidieť, že bunky sú viac viditeľné ale stále vzorka obsahuje veľké množstvo proteínov a polysacharidov z média, ktoré nám neumožnili pozorovať izolované bunky. Informácie o veľkosti sú stále skreslené a nie je jasné, kedy je vidieť jednu bunku, alebo ich je viac za sebou.

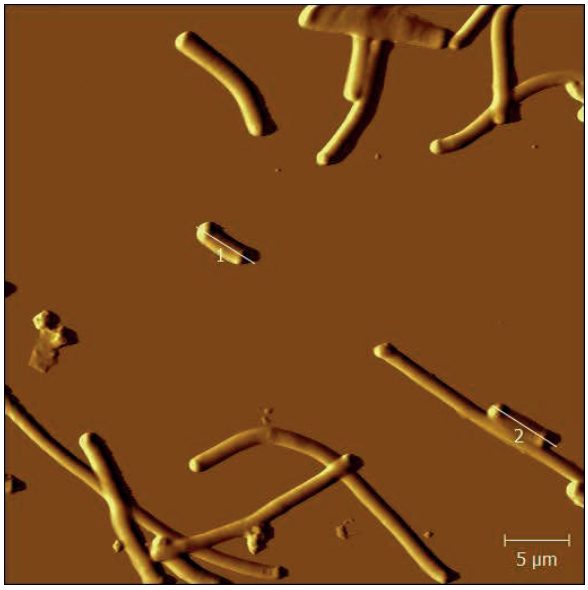


Obr. 6: AFM topografia *L. acidophilus* pripravený v PBS

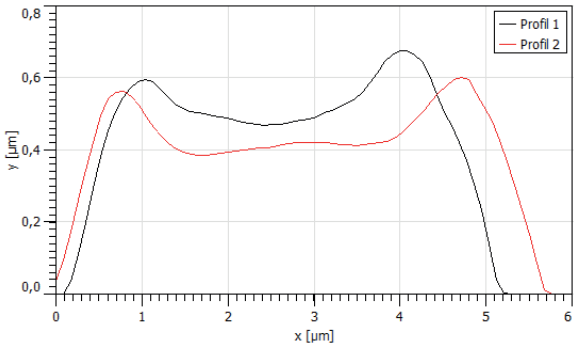
Vzorku 3 (obr. 7) sme premyli a imobilizovali bunky v sterilnej destilovanej vode. Očividne sa táto metóda ukázala ako najvhodnejšia. Podarilo sa nám pozorovať izolované bunky s minimálnym obsahom nečistôt Z detailného obrázku na obr. 8 s rozmermi 45x45 µm sme určili priemernú veľkosť baktérií na vyznačených miestach. Meranie výškového profilu (obr.9) ukázalo, že bunky majú priemernú dĺžku 5-6 µm a výšku 0,6 µm. Nameranú dĺžku sme porovnali s literatúrou, kde sa dĺžka baktérií uvádzala ako 2-10 µm, čo je v súlade s našim meraním [15].



Obr. 7: AFM topografia *L. acidophilus*. Vzorka bola pripravená v sterilnej destilovanej vode



Obr. 8: Detailnejší obraz AFM topografie baktérií nariedených do sterilnej destilovanej vody



Obr. 9: výškový profil baktérií na obr. 8

4 Záver

Cieľom našej práce bolo spracovanie literárneho prehľadu o mliečnych baktériách a poukázanie na ich dôležitosť v živote človeka. Ďalej sme sa zamerali na využitie AFM v mikrobiológii. Ukázali sme, že táto metóda je užitočným nástrojom pri zobrazovaní bakteriálnych buniek. V praktickej časti práce sme pracovali na optimalizácii prípravy vzoriek baktérií *L. acidophilus* pre AFM merania. Našim cieľom bolo nájsť metódu prípravy takú, aby sme boli schopní pozorovať izolované bunky. Na základe jednotlivých topografií sme za optimálny spôsob prípravy vzoriek zvolili prečistenie buniek nariedením do sterilnej destilovanej vody, nakoľko topografie pripravené touto metódou obsahovali minimum artefaktov.

Poďakovanie

Práca bola podporená projektom Európskej únie Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Sklodowska-Curie grant agreement No 690898 a bola uskutočnená aj vďaka projektu "Rozvoj Centra excelentnosti pre využitie informačných biomakromolekúl na zlepšenie kvality života", na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja (ITMS 26240120027).

Literatúra

[1] Chapot- Chartier M.P. and Kulakauskas S. (2014). Cell wall structure and function in lactic acid bacteria. *Microb Cell Fact*, 13:9.

[2] Havenaar R. and Huis In´t Veld J.H.J. (1992). Probiotics, a general view. *The Lactic Acid Bacteria in Health and Disease*, 1:151-170.

[3] Sun B., Hu C., Fang H., Zhu L., Gao N., Zhu J. (2015). The Effects of *Lactobacillus acidophilus* on the Intestinal Smooth Muscle Contraction through PKC/MLCK/MLC Signaling Pathway in TBI Mouse Model. *PLoS One*, 10:e0128214.

[4] Arihara K., Ota H., Itoh M., Kondo Y., Sameshima T., Yamanaka H., Akimoto M., Kanai S., Miki T. (1998). Lactobacillus acidophilus Group Lactic Acid Bacteria Applied to Meat Fermentation. *Food Science*, 63(3):544-547.

[5] Garcha, S., and Natt, N.K. (2012). In situ control of food spoilage fungus using Lactobacillus acidophilus NCDC 291. *Journal of Food Science and Technology*, 49(5): 643–648.

[6] Selle K.M., Klaenhammer T.R. and Russel W.M. (2014). LACTOBACILLUS: Lactobacillus acidophilus. *Encyclopedia of Food Microbiology*, 412-417.

[7] Vilela, S.F., Barbosa, J.O., Rossoni, R. D., Santos, J. D., Prata, M.C., Anbinder, A.L., Jorge A.O., Junqueira, J.C. (2015). *Lactobacillus acidophilus* ATCC 4356 inhibits biofilm formation by *C. albicans* and attenuates the experimental candidiasis in *Galleria mellonella*. *Virulence*, 6(1): 29–39.

[8] Das Murtey M. and Ramasamy P. (2016). Sample preparations for Scanning Electron Microscopy- Life Sciences. *Modern Electron Microscopy in Physical and Life Sciences*, 161-186.

[9] Zhou L., Cai M., Tong T. and Wang H. (2007) Progress in Correlative Atomic Force Microscopy and Optical Microscopy. *Sensors (Basel)*, 17(4): 938.

[10] Li M., Dang D., Liu L., Xi N. and Wang Y. (2017). Imaging and Force Recognition of

Single Molecular Behaviors Using Atomic Force Microscopy. *Sensors (Basel)*, 17(1): 200.

[11] Milani C., Mangifesta M., Mancabelli L., Lugli G.A., Mancino W., Viappiani A.,Faccini A., Sinderen D., Ventura M. and Turroni, F. (2017). The Sortase-Dependent Fimbriome of the Genus *Bifidobacterium*: Extracellular Structures with Potential To Modulate Microbe-Host Dialogue. *Applied and Environmental Microbiology*, 83: e01295–17.

[12] Tanner R. (2007) Cultivation of Bacteria and Fungi. *Manual of Environmental Microbiology*, 69-78.

[13] Sanders E.R. (2012) Aseptic Laboratory Techniques: Plating Methods. *J Vis Exp*., (63): e3064.

[14] CliffsNotes. Microbial Cultivation. Citované [2018-4-5]. Dostupné na : https://www.cliffsnotes.com/study-guides/biology/microbiology/microbial-cultivation-and-growth/microbial-cultivation

[15] Suranová M. (2011) Probiotické bakterie ve farmaceutických přípravcích. Citované [2018-4-5]. Dostupné na https://www.vutbr.cz/www_base/zav_prace_soubor_verejne.php?file_id=36516

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 73–79
ISBN 978-8081470882, © 2018 Dominika Sersenová

Vplyv plazmou aktivovaného média na viabilitu rakovinových a normálnych ľudských buniek

Dominika Sersenová[1*]
Školiteľ: Zdenko Machala[1‡] Školiteľ-špecialista: Helena Gbelcová[2#]

[1] Katedra astronómie, fyziky Zeme a meteorológie, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2] Ústav lekárskej biológie, genetiky a klinickej genetiky, LF UK, Špitálska 24, 813 72 Bratislava

Abstrakt

Netermická plazma môže byť aplikovaná na živé tkanivá a bunky priamo aj nepriamo a jej protirakovinový efekt a potenciálna selektivita sú predmetom mnohých súčasných štúdií. Cieľom našej práce bolo aktivovať bunkové médium pomocou plazmy generovanej v bežnom vzduchu a *in vitro* sledovať jeho vplyv na rakovinové bunky ľudského epitelového melanómu A375 a normálne ľudské embryonálne obličkové bunky HEK923T. Na aktiváciu média sme použili dva druhy plazmových výbojov – streamerovú korónu a prechodovú iskru a dva aktivačné časy (0,5 min/ml a 2 min/ml). Efekt plazmou aktivovaného média (PAM) na bunky sme po 24 hodinách a 72 hodinách inkubácie s PAM vyhodnotili mikroskopicky a metabolickým MTT testom bunkovej viability. PAM aktivované korónovým výbojom nemalo preukázateľný účinok na viabilitu rakovinových buniek, médium aktivované iskrovým výbojom signifikantne znížilo viabilitu buniek a tento efekt sme pozorovali po 24- aj 72-hodinovej inkubácii. PAM aktivované oboma výbojmi signifikantne znížilo viabilitu zdravých buniek po 24 hodinách, ale na rozdiel od rakovinových buniek, zdravé bunky boli schopné regenerácie, preto po 72 hodinovej inkubácii s PAM bola ich viabilita porovnateľná s kontrolnými bunkami. Pri kratších časoch aktivácie malo PAM stimulačný účinok na zdravé bunky. PAM aktivované iskrovým výbojom s časom 2 min/ml bolo pre zdravé bunky letálne.
Kľúčové slová: plazma, rakovinové bunky, plazmová medicína, liečba rakoviny

1 Úvod

Plazma je ionizovaný plyn tvorený pozitívne a negatívne nabitými iónmi, elektrónmi, radikálmi, neutrálnymi atómami a molekulami a UV fotónmi [Kalghatgi et al., 2011]. Hoci plazma dokáže existovať v širokom rozmedzí teplôt, môžeme ju podľa teploty rozdeliť na termickú a netermickú (studenú) plazmu. Termická plazma sa kvôli vysokej teplote nepoužíva na biomedicínske aplikácie. Naopak, medicína využívajúca netermickú plazmu je rýchlo sa rozvíjajúce nové odvetvie interdisciplinárneho výskumu, ktorý kombinuje fyziku, chémiu, biológiu a medicínu [Adachi et al., 2015]. Studená plazma s teplotou do 40°C za podmienok atmosférického tlaku môže byť aplikovaná na teplocitlivé materiály aj na živé bunky a tkanivá a je prezentovaná ako nová technológia pre viaceré medicínske aplikácie akými sú hojenie rán, zrážanie krvi, sterilizácia materiálov aj tkanív, liečba ústnej dutiny vrátane zubných kanálikov a liečba rakoviny [Berekzi, Laroussi, 2012]. V týchto štúdiách bolo pozorované, že malé dávky plazmy sú schopné indukovať proliferáciu buniek, zatiaľ čo vysoké dávky indukovali apoptózu až nekrózu buniek.

Podľa doposiaľ realizovaných výskumov sa studená plazma javí ako možný prostriedok pri liečbe rakoviny [Zirnheld et al., 2010]. Ukazuje sa, že pri správnom nastavení technických parametrov indukuje apoptózu rakovinových buniek *in vitro* aj *in vivo* [Hirst et al., 2016] a niektoré štúdie naznačujú jej potenciálne selektívny účinok [Tanaka, 2014]. Apoptóza je ideálna pri ničení rakovinových buniek, lebo v organizme nevyvoláva zápalovú reakciu [Tanaka et al., 2011].

Hlavným mechanizmom účinku plazmy je generácia niektorých krátko a dlho žijúcich molekúl medzi ktoré patria reaktívne kyslíkové a dusíkové formy (RONS), ktoré vznikajú hlavne z molekúl dusíka a kyslíka prítomných vo vzduchu a roztoku [Panngom et al., 2013]. RONS pravdepodobne dokážu indukovať apoptózu skrz niekoľko signálnych kaskád, ale presný mechanizmus efektu plazmy na bunky ešte nebol detailne objasnený. Plazma ovplyvňuje bunky pri pôsobení priamo aj nepriamo – napríklad pomocou

* domi.sersenova@gmail.com
‡ machala@fmph.uniba.sk
# helena.gbelcova@fmed.uniba.sk

plazmou vopred aktivovaného bunkového rastového média (PAM), ktoré sa následne aplikuje na bunky. PAM môže byť biologicky, dokonca až terapeuticky aktívne vďaka obsahu RONS vytvorených plazmou [Bauer, Graves, 2016]. Účinok PAM závisí od plazmových parametrov a času aktivácie a odpoveď rôznych bunkových línií sa čiastočne líši.

2 Materiál a metódy

2.1 Kultivácia buniek

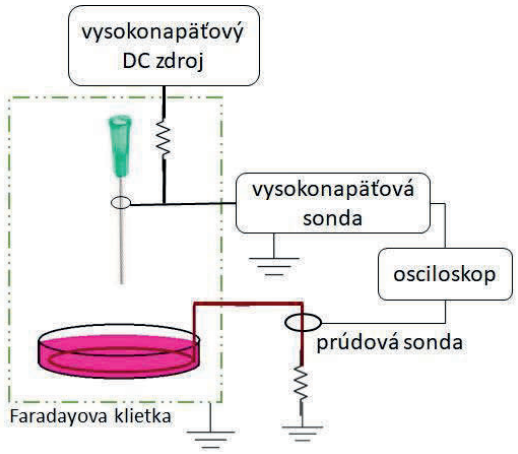
Ľudské rakovinové bunky A375 (epitelové bunky izolované z malígneho melanómu) a normálne bunky HEK293T (primárne embryonálne obličkové bunky transformované adenovírusom) sme nasadili do 96-jamkovej platničky v počte 2.10^4 buniek na jednu jamku s objemom 200 µl a kultivovali v Dubleccovom modifikovanom Eaglovom médiu (DMEM, D5796, Sigma Aldrich, USA) doplnenom 10 % fetálnym hovädzím sérom (FBS, Sigma Aldrich, USA) bez antibiotík pri 37°C a atmosfére s 5% CO_2.

Po nasadení buniek do platní sme bunky kultivovali 24 hodín a následne odobrali celé médium a nahradili ho PAM. Kontrolným bunkám sme vymenili médium za nové, neaktivované plazmou. Po 24 a 72 hodinách kultivácie buniek s PAM sme svetelným mikroskopom hodnotili konfluenciu, tvar a počet buniek a stanovili viabilitu buniek metabolickým MTT testom.

Prácu s bunkami (kultivácia a analýza viability) sme realizovali v spolupráci s Ústavom lekárskej biológie, genetiky a klinickej genetiky LF UK.

2.2 Príprava plazmou aktivovaného média

Na prípravu PAM sme použili rovnaké médium ako na kultiváciu buniek - DMEM s 10% FBS. Testovali sme účinok dvoch plazmových výbojov a dvoch rôznych časov aktivácie. Médium sme preto aktivovali streamerovou korónou (SC) alebo prechodovou iskrou (TS) po dobu 0,5 min/ml alebo 2 min/ml. Základné experimentálne zapojenie pre oba typy výbojov bolo rovnaké (Obr. 1). Plazmový výboj horel medzi hrotom ihly, na ktorú bolo cez predradený odpor privedené jednosmerné vysoké napätie a uzemneným medeným drôtikom ponoreným na dne média. Vzdialenosť medzi hrotom ihly a hladinou média bola 1 cm, objem média v sklenej miske 5 ml a hĺbka média 1 cm. Pri generovaní SC bol predradený odpor 20 MΩ, odpor na meranie prúdu, cez ktorý bol uzemnený medený drôtik, 50 Ω a frekvencia výbojov 10 kHz. Pri generovaní TS bol predradený odpor nastavený na 10 MΩ, uzemňovací odpor na 1,2 Ω a frekvencia



Obr. 1: Schéma elektrického zapojenia na aktiváciu média plazmou

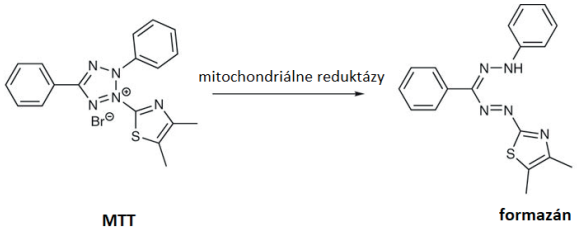
výbojov na 1 kHz. Osciloskopicky sme zaznamenávali priebeh prúdu a napätia a následne určili výkon a energiu plazmových výbojov pri aktivácii média.

Teplota média vplyvom aktivácie neprekročila 37°C, hodnota pH a vodivosť média sa výrazne nemenili.

PAM bolo na bunky aplikované po 1 hodine od aktivácie.

2.3 MTT test

MTT test je kolorimetrická metóda, ktorá sa používa na stanovenie viability buniek. Princípom je premena žltého 3-[4,5-dimethylthiazol-2-yl]-2,5-difenyltetrazolium bromidu (MTT) na fialovomodrý formazán (Obr. 2). Reakcia prebieha účinkom mitochondriálnych reduktáz na mitochondriálnej membráne živých buniek a formazán sa ukladá v bunke vo forme fialových kryštálikov. Po pridaní rozpúšťadla je možné spektrofotometricky stanoviť absorbanciu roztoku s bunkami, ktorá je priamo úmerná viabilite buniek.



Obr. 2: Schéma redukcie MTT na formazán

Po 24 (resp. po 72) hodinách sme odobrali médium z jamiek a pridali 100 µl roztoku s MTT (Sigma Aldrich, USA) pripraveného rozpustením 5 mg MTT v 1 ml fosfátového tlmivého roztoku a následným nariedením s DMEM v pomere 1:10. Po 3 hodinách kultivácie v termostate pri 37°C sme odstránili roztok s MTT a pridali 100 µl

dimetylsulfoxidu (DMSO, Merck, Česká republika) a za stáleho miešania kultivovali 10 minút pri izbovej teplote. Následne sme stanovili absorbanciu roztoku v jednotlivých jamkách spektrofotometrom pri vlnovej dĺžke 490 nm. Viabilitu buniek sme vypočítali pomocou nasledujúceho vzorca:

$$viabilita = \frac{A_v - A_b}{A_k - A_b} . 100\% \quad (1)$$

kde A_v je absorbancia vzorky, A_b absorbancia blanku (kultivačného média bez buniek) a A_k absorbancia kontrolných buniek. Hodnotu viability kontrolných buniek sme považovali za 100%.

2.4 Vyhodnotenie elektrických vlastností plazmových výbojov

Z osciloskopických dát nameraných počas aktivácie média plazmou sme vyhodnotili priebeh napätia a prúdu a vypočítali výkon plazmového výboja zo vzťahu:

$$P = f \int_0^T U(t).I(t)dt \quad (2)$$

Využitím známeho výkonu sme určili energiu dodanú médiu plazmovým výbojom za daný čas opracovania.

2.5 Štatistická analýza

Dáta sú prezentované ako priemer ± štandardná odchýlka (SD). Rozdiel viability kontrolnej skupiny a buniek inkubovaných s PAM bol testovaný nepárovým t testom. Za signifikantnú bola považovaná hodnota $p < 0,05$. V grafoch sme hodnotu signifikancie označovali ako: * $p < 0,05$, ** $p < 0,01$, *** $p < 0,001$.

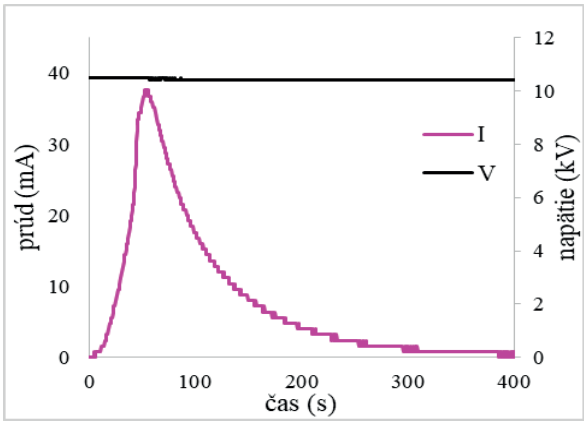
3 Výsledky

3.1 Elektrická charakteristika plazmových výbojov

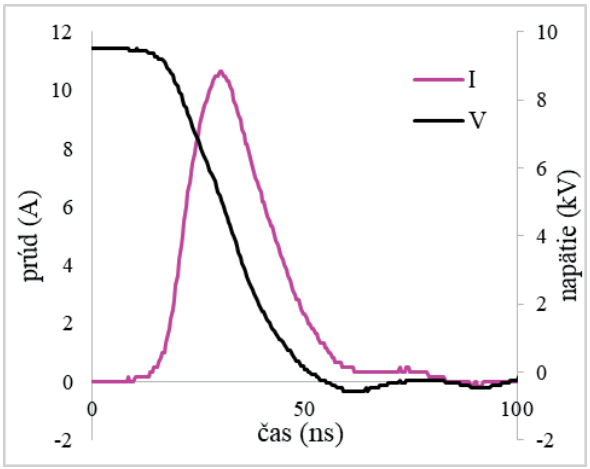
Experimentálne zapojenie pre generáciu streamerovej koróny aj prechodovej iskry je opísané v časti 2.2.

Frekvenciu korónového výboja sme nastavili na 10 kHz. Priebeh napätia a prúdu je zobrazený na obrázku 3. Hodnota napätia bola konštantná počas celej aktivácie média s minimálnym poklesom v čase pulzu, preto je maximálna aj priemerná hodnota napätia totožná U_{max} = 10 kV. Minimálny pokles napätia je spôsobený malým prúdom prechádzajúcim obvodom v čase pulzu. V čase výboja prúd vzrástol z 0 mA na I_{max} = 38 mA. Výkon SC bol za týchto podmienok P_{SC} = 0,33 W. Celková energia dodaná 1 ml média pri aktivácii s časom 0,5 min/ml bola $E_{0,5}$ = 2 J/ml a pri čase 2 min/ml E_2 = 8 J/ml.

Frekvencia iskrových výbojov mala hodnotu 1 kHz. Priebeh napätia a prúdu počas jedného pulzu je vyobrazený na obrázku 4. Napätie kleslo počas pulzu z hodnoty U_{max} = 10 kV na 0 kV. Maximálny prúd počas pulzu dosiahol 10,7 A, čo spôsobilo výrazný pokles napätia. Výkon TS bol 3-krát vyšší ako výkon SC, P_{TS} = 0,96 W. Celková energia dodaná 1 ml média pri aktivácii s časom 0,5 min/ml bola $E_{0,5}$ = 5,8 J/ml a pri čase 2 min/ml E_2 = 23,2 J/ml.



Obr. 3: Priebeh napätia a prúdu pri pulze SC



Obr. 4: Priebeh napätia a prúdu pri pulze TS

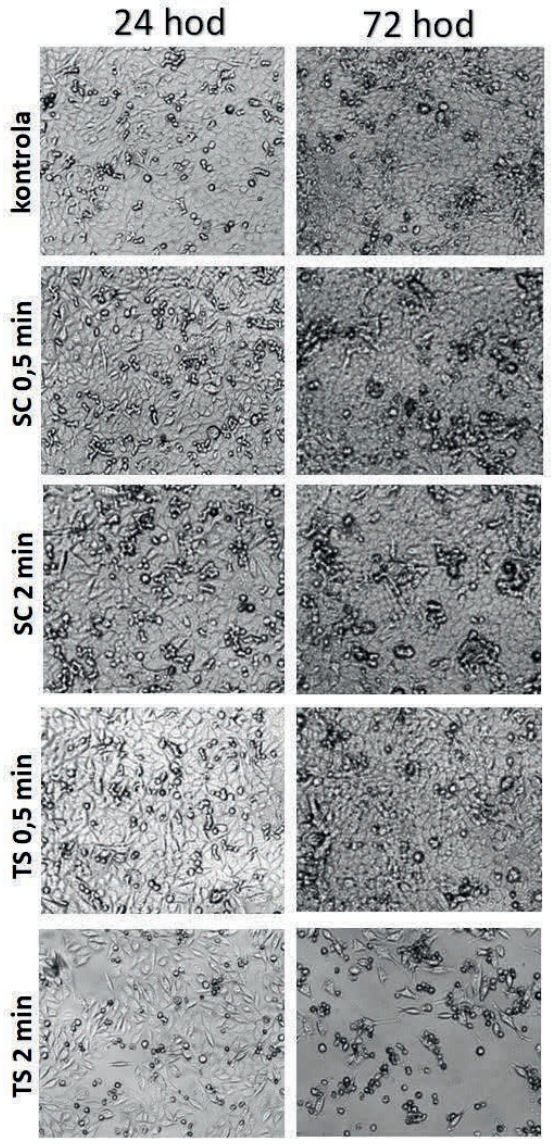
3.2 Vplyv PAM na viabilitu A375

Počet, konfluenciu a tvar rakovinových A375 buniek sme pozorovali optickým mikroskopom (Obr. 5) a viabilitu sme vyhodnotili MTT testom po 24-hodinovej (Obr. 6) a 72-hodinovej (Obr. 7) inkubácii s PAM a porovnávali sme ju s viabilitou buniek, ktoré boli inkubované v médiu neopracovanom plazmou.

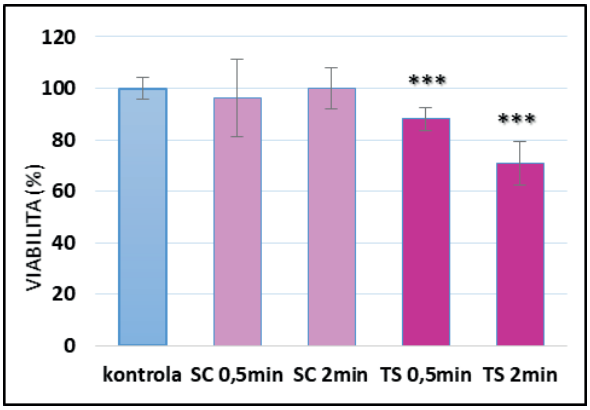
Po 24 hodinách sme nepozorovali výrazný efekt na bunky v dôsledku pridania PAM aktivovaného SC. Mikroskopicky sme videli väčšie množstvo zaguľatených buniek pri porovnaní s kontrolnými

bunkami, ale konfluencia a počet buniek neboli viditeľne zmenené. MTT test tiež nepotvrdil pokles viability. Naopak, PAM aktivované TS signifikantne zredukovalo počet a viabilitu rakovinových buniek. Pri aktivácii po dobu 0,5 min/ml bol pokles viability 10 % a pri dlhšej aktivácii po dobu 2 min/ml až 30 %.

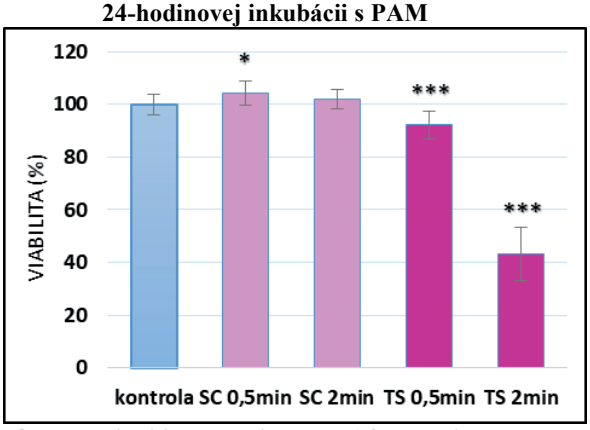
Po 72-hodinovej inkubácii sa efekt média prejavil výraznejšie. PAM aktivované SC nemalo efekt na zníženie viability, ale pri krátkej aktivácii (0,5 min/ml) sme pozorovali mierne stimulačný účinok na viabilitu buniek. Viabilita buniek inkubovaných s PAM aktivovaným TS signifikantne klesla v porovnaní s kontrolnými bunkami o 10 % pri kratšom čase aktivácie a o 55 % pri dlhšom čase aktivácie, čo bolo výrazne viditeľné aj pod mikroskopom.



Obr. 5: Fotky A375 buniek po 24- a 72-hodinovej inkubácii s PAM



Obr. 6: Viabilita rakovinových A375 buniek po 24-hodinovej inkubácii s PAM



Obr. 7: Viabilita rakovinových A375 buniek po 72-hodinovej inkubácii s PAM

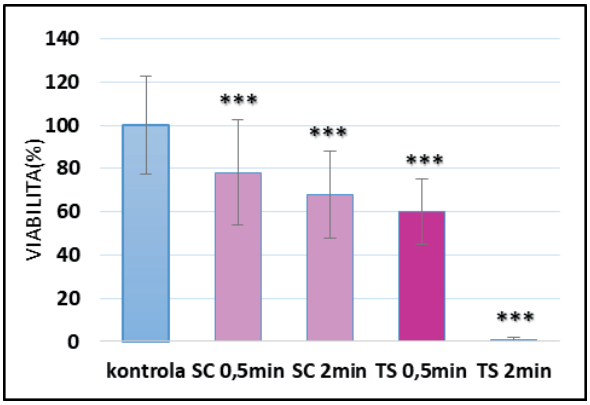
3.3 Vplyv PAM na viabilitu HEK293T

Pomocou optického mikroskopu sme sledovali počet, konfluenciu a tvar ľudských obličkových HEK293T buniek po 24- a 72-hodinovej inkubácii s PAM (Obr. 9) a využitím MTT testu sme stanovili viabilitu buniek po 24 hodinách (Obr. 8) a 72 hodinách (Obr. 10) inkubácie s PAM, v prípade kontrolných buniek inkubácia prebiehala v normálnom bunkovom médiu.

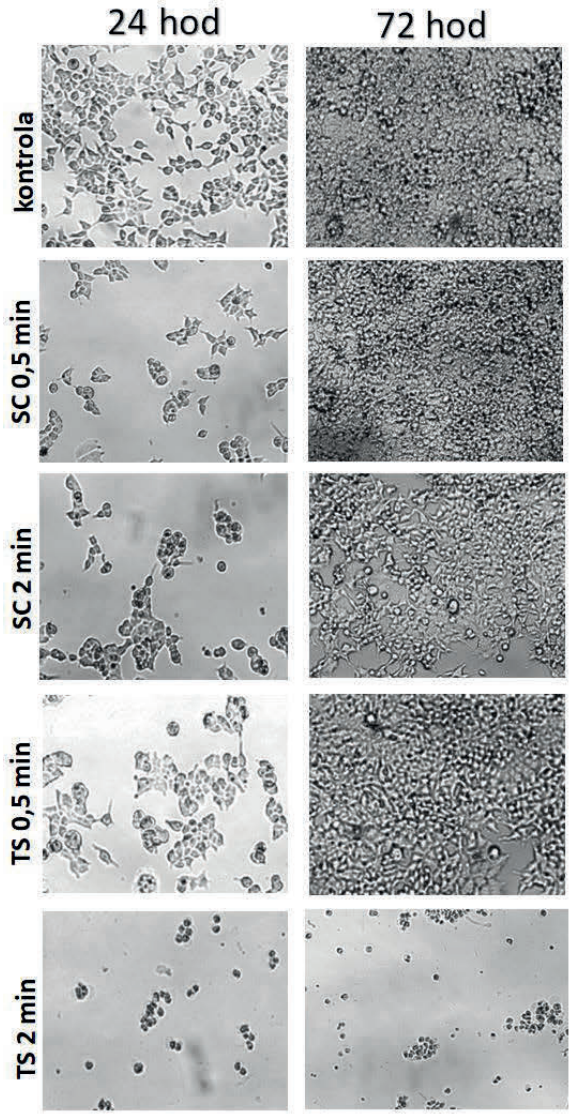
Po 24 hodinách inkubácie buniek s PAM aktivovaným oboma typmi výbojov počet a konfluencia buniek viditeľne klesli. MTT test potvrdil signifikanciu účinku. Viabilita buniek inkubovaných s PAM aktivovaným SC s časom 0,5 min/ml poklesla o 20 %, s časom 2 min/ml o 30 %. Cytotoxický účinok PAM aktivovaným TS bol ešte zreteľnejší. Pri aktivácii po dobu 0,5 min/ml sa viabilita buniek zredukovala na 60 % a pri aktivácii po dobu 2 min/ml takmer na 0 %.

Po 72-hodinovej inkubácii sa efekt PAM na normálne bunky výrazne líšil od vplyvu na rakovinové bunky. Okrem PAM aktivovaného prechodovou iskrou po dobu 2 min/ml, ktoré malo letálne účinky na HEK239T bunky, boli normálne bunky schopné kompletnej regenerácie. Pri kratšom čase aktivácie (0,5 min/ml) sme dokonca pozorovali

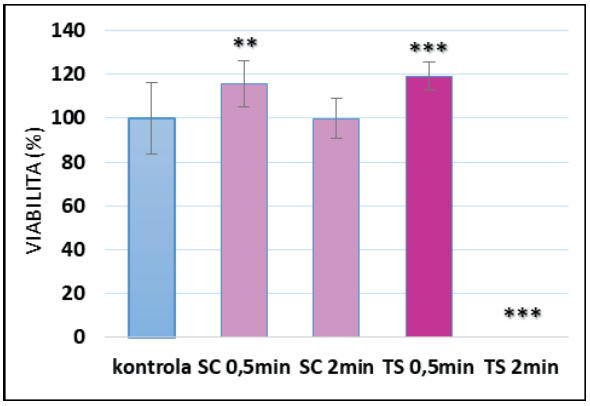
signifikantne zvýšenú viabilitu normálnych buniek oproti kontrolným bunkám o 15-20 %.



Obr. 8: Viabilita normálnych HEK293T buniek po 24-hodinovej inkubácii s PAM



Obr. 9: Fotky HEK293T buniek po 24- a 72-hodinovej inkubácii s PAM



Obr. 10: Viabilita normálnych HEK293T buniek po 72-hodinovej inkubácii s PAM

4 Diskusia

V medicíne sa na aplikáciu studenej plazmy využívajú dva základné spôsoby – priamy a nepriamy. V našej práci sme sa zamerali na nepriamy spôsob aplikácie formou tzv. plazmou aktivovaného média (PAM). Na plazmovú aktiváciu média sme využili dva typy plazmových výbojov. Výboje boli produkované v bežnom vzduchu. Na aktiváciu PAM sa vo väčšine prípadov využívajú výboje vo vzácnych plynoch generované plazmovými tryskami alebo dielektrickým bariérovým výbojom (DBD). V prítomnosti vzácnych plynov je možné generovať plazmový výboj jednoduchšie a pri nižšom napätí. Pri vyššom napätí a vhodnej experimentálnej zostave je možné produkovať plazmu aj v bežnom vzduchu, čo vedie k zníženiu experimentálnych nákladov, ale aj k vyššej produkcii RONS [Hensel et al., 2015]. Médium sme aktivovali pôsobením streamerovej koróny (SC) a zriedkavo používanou prechodovou iskrou (TS). Účinok plazmovej aktivácie je závislý od času aktivácie, zvolili sme preto dva rôzne časy – 0,5 minúty na mililiter média a 2 minúty na mililiter média.

Hoci nie je ešte objasnené, ktorá zložka PAM indukuje protirakovinový účinok, využitie PAM (alebo iných plazmou aktivovaných kvapalín) by malo významný prínos v medicíne pri liečbe priamo alebo chirurgicky nedostupných onkologických foriem, ako sú napríklad peritoneálne metastázy. Účinok média bol preukázaný aj po vyše 8 hodinách od aktivácie [Tanaka et al., 2011], čo by predstavovalo výhodu v klinickej praxi. V našej práci sme médium aplikovali na bunky po 1 hodine od aktivácie a dosiahli sme signifikantný účinok.

PAM sme aplikovali na rakovinové bunky ľudského epitelového melanómu A375. Bunky boli nasadené do 96-jamkovej platničky v počte 2.10^4 buniek na jamku s 200 µl média. Po 24 hodinách inkubácie buniek s PAM sme pozorovali zaguľacovanie buniek, čo odráža predovšetkým ich uvoľnenie z dna misky.

V prípade najintenzívnejšej aktivácie média prechodovou iskrou s časom 2 min/ml bol viditeľný pokles počtu buniek. Presnejšie vyhodnotenie efektu PAM na bunky sme získali použitím MTT testu, ktorým je možné stanoviť viabilitu buniek (normalizovanú na kontrolné bunky). PAM aktivované SC malo minimálny efekt na bunkovú viabilitu PAM aktivované TS signifikantne zredukovalo viabilitu buniek, výraznejšie v prípade dlhšej aktivácie. Po 72-hodinovej inkubácii A375 buniek s PAM aktivovaným TS sme pozorovali zníženú viabilitu buniek a tiež očividný pokles v počte. PAM aktivované SC po dobu 0,5 min/ml malo mierne stimulačný účinok, viabilita buniek s PAM aktivovaných po dobu 2 min/ml bola porovnateľná s viabilitou kontrolnej skupiny. Po 72-hodinovej inkubácii boli kontrolné rakovinové bunky prerastené, v dôsledku čoho už kontrolná skupina nemetabolizovala optimálne. Preto predpokladáme, že efekt PAM na rakovinové bunky po 72-hodinách by sa pri výpočte viability prejavil výraznejšie pri nasadení menšieho počtu buniek.

V podobných štúdiách bola po 24-hodinovej inkubácii pozorovaná znížená viabilita a preukázaná apoptóza po aplikácii PAM aktivovaného argónovou tryskou v prípade ľudských glioblastómových rakovinových buniek U251SP [Tanaka et al., 2011]. Takmer 100 % pokles viability buniek nasadených v počte 10^4 pozorovali pri plazmovej aktivácii s časom 1 min/ml. Účinok PAM aktivovaného argónovou tryskou bol testovaný tiež na ďalšie ľudské rakovinové bunkové línie pľúcneho epitelového adenokarcinómu A549, pečeňového hepatocelulárneho karcinómu HepG2 a buniek rakoviny prsníka MCF-7 [Adachi et al., 2015]. Viabilita buniek A549 klesla na 30 % pri aplikácii PAM aktivovaného s časom 0,5 min/ml a na 50 % pri zvyšných dvoch bunkových líniách. PAM bolo testované aj na chemorezistentné bunky rakoviny vaječníka NOS2 a NOS3 [Utsumi et al., 2013]. Po 24 hodinách bola viabilita NOS2 buniek signifikantne zmenená oproti kontrolným bunkám – aktivácia média 0,5 a 1 minútu pôsobila stimulačne, aktivácia 2-3 minúty znížila viabilitu o viac než 30 % a aktivácia s časom 5 minút bola pre bunky letálna. Pri aplikácii PAM na NOS3 bunky viabilita klesala s časom aktivácie, letálne bolo médium aktivované 3 minúty. Zníženie viability rakovinových buniek úmerne s časom aktivácie média bolo pozorované tiež pri aplikácii na glioblastómové bunky U87MG, bunky kolorektálneho karcinómu HCT-116 [Vandamme et al., 2012] a bunky rakoviny prsníka MCF-7 a MDA-MB-231 [Yan et al., 2015]. PAM aktivované héliovou tryskou bolo účinne použité na bunky skvamózneho karcinómu močového mechúra (SCaBER), pričom 2-minútová aktivácia zredukovala bunkovú viabilitu na polovicu a 4-minútová pôsobila takmer letálne [Mohades et al., 2015].

Jednou z ďalších možných výhod využitia plazmy pri liečbe onkologických ochorení je jej potenciálna selektivita. Hoci táto vlastnosť nebola ešte potvrdená dostatkom štúdií, zdá sa, že pri správne nastavených technických parametroch plazmy je deštrukčný účinok na zdravé bunky minimálny oproti účinku na rakovinové bunky [Tanaka, 2014]. Preto sme v našej práci testovali účinok PAM aj na ľudské embryonálne obličkové bunky HEK293T. Metóda kultivácie a aktivácie média bol rovnaká ako v prípade buniek A375.

Po 24-hodinovej inkubácii normálnych buniek s PAM sme už mikroskopicky mohli pozorovať výrazné zníženie počtu buniek vo všetkých prípadoch. MTT test potvrdil pokles viability o 20-40 % v závislosti od spôsobu a času aktivácie s výnimkou média aktivovaného TS po dobu 2 min/ml. PAM s touto dávkou plazmy bolo pre zdravé bunky letálne. Po 72-hodinovej inkubácii sme pozorovali kompletnú regeneráciu normálnych buniek (okrem buniek aktivovaných TS s časom 2 min/ml). V prípade kratšieho času aktivácie sme pri oboch typoch výbojov zaznamenali dokonca nárast viability buniek v porovnaní s kontrolnými bunkami. Tento nárast môže byť spôsobený stimulačným účinkom plazmovej aktivácie, pozorovaným v niektorých štúdiách pri priamej aplikácii plazmy.

Tanaka [Tanaka et al., 2011] vo svojej práci aplikoval PAM aktivované plazmovou argónovou tryskou s časom 1 min/ml na astrocyty ACBRI-371 a ich viabilita bola po 24-hodinách znížená o 20 %, pričom táto dávka bola už letálna pre rakovinové glioblastómové bunky U251SP. V ďalšej práci bol vplyv PAM testovaný na normálne fibroblasty (WI-38) [Tanaka et al., 2012], ktorých viabilita sa po 24 hodinách znížila o 40 %. Vo väčšine štúdií s aplikáciou PAM nebola testovaná viabilita normálnych buniek po viac ako 24 hodinách, v dôsledku čoho nemôžeme porovnať naše výsledky poukazujúce na schopnosť regenerácie buniek s výsledkami v iných prácach.

5 Záver

Studená plazma má potenciál zaradiť sa k novým metódam terapie onkologických ochorení. Jednou z možností jej aplikácie je nepriama aplikácia prostredníctvom plazmou aktivovaných kvapalín, napríklad pomocou plazmou aktivovaného média. Bolo ukázané, že za správnych podmienok plazmou aktivované médium dokáže signifikantne znížiť viabilitu rakovinových buniek už po jednorazovej aplikácii. Jeho vplyv na zdravé bunky je doposiaľ nedostatočne preskúmaný, ale vo väčšine prípadov médium vykazuje selektívny účinok – viabilita zdravých buniek je ovplyvnená minimálne

v porovnaní s rakovinovými bunkami alebo sú schopné regenerácie v relatívne krátkom čase (do 72 hodín).

Poďakovanie

Táto práca bola podporená Agentúrou na podporu výskumu a vývoja grantom APVV 0134-12 a grantom UK/379/2018.

Ďakujem môjmu školiteľovi doc. RNDr. Zdenkovi Machalovi, PhD. za profesionálne a entuziastické vedenie pri tvorbe tejto práce aj počas môjho doterajšieho doktorandského štúdia. Poďakovanie patrí tiež Ústavu lekárskej biológie, genetiky a klinickej genetiky LF UK, predovšetkým Ing. Helene Gbelcovej, PhD. za pomoc a spoluprácu.

Literatúra

[Adachi et al., 2015] Adachi, T., Tanaka, H., Nonomura, S. et al. (2015). Free Radical Biology and Medicine Plasma-activated medium induces A549 cell injury via a spiral apoptotic cascade involving the mitochondrial – nuclear network. *Free Radical Biology and Medicine*, *79*, 28–44.

[Barekzi, Laroussi, 2012] Barekzi, N., Laroussi, M. (2012). Dose-dependent killing of leukemia cells by low-temperature plasma. *L. Phys. D: Appl. Phys.*, *45*, 6.

[Bauer, Graves, 2016] Bauer, G., Graves, D. B. (2016). Mechanisms of Selective Antitumor Action of Cold Atmospheric Plasma-Derived Reactive Oxygen and Nitrogen Species. *Plasma Processes and Polymers*, DOI: 10.1002/ppap.201600089. https://doi.org/10.1002/ppap.201600089

[Hensel et al., 2015] Hensel, K., Kučerová, K., Tarabová, B., Janda, M., Machala, Z., Sano, K. et al. (2015). Effects of air transient spark discharge and helium plasma jet on water, bacteria, cells, and biomolecules. *Biointerphases*, *10*(2), 29515. https://doi.org/10.1116/1.4919559

[Hirst et al., 2016] Hirst, A. M., Frame, F. M., Arya, M., Maitland, N. J., O'Connell, D. (2016). Low temperature plasmas as emerging cancer therapeutics: the state of play and thoughts for the future. *Tumor Biology*, *37*(6), 7021–7031. https://doi.org/10.1007/s13277-016-4911-7

[Kalghati et al., 2011] Kalghatgi, S., Kelly, C. M., Cerchar, E. et al. (2011). Effects of Non-Thermal Plasma on Mammalian Cells. *PLoS ONE*, *6*(1), 1–11. https://doi.org/10.1371/journal.pone.0016270

[Mohades et al., 2015] Mohades, S., Laroussi, M., Sears, J., Barekzi, N., Razavi, H. (2015). Evaluation of the effects of a plasma activated medium on cancer cells. *Physics of Plasmas*, *22*(12). https://doi.org/10.1063/1.4933367

[Panngom et al., 2013] Panngom, K., Baik, K. Y., Nam, M. K., Han, J. H., Rhim, H., & Choi, E. H. (2013). Preferential killing of human lung cancer cell lines with mitochondrial dysfunction by nonthermal dielectric barrier discharge plasma. *Cell Death and Disease*, *4*(5), e642-8. https://doi.org/10.1038/cddis.2013.168

[Tanaka et al., 2014] Tanaka, H. et al. (2014). Plasma Medical Science for Cancer Therapy : Toward Cancer Therapy Using Nonthermal Plasma Medical Science for Cancer Therapy : Toward Cancer Therapy Using Nonthermal Atmospheric Pressure Plasma. *IEEE Transactions on Plasma Science*, *42*(December). https://doi.org/10.1109/TPS.2014.2353659

[Tanaka et al., 2011] Tanaka, H., Mizuno, M., Ishikawa, K., Nakamura, K., Kajiyama, H., Kano, H., … Hori, M. (2011). Plasma-Activated Medium Selectively Kills Glioblastoma Brain Tumor Cells by Down-Regulating a Survival Signaling Molecule , AKT Kinase. *Plasma Medicine*, *1*, 265–277.

[Tanaka et al., 2012] Tanaka, H., Mizuno, M., Ishikawa, K. et al. (2012). Cell survival and proliferation signaling pathways are downregulated by plasma-activated medium in glioblastoma brain tumor cells. *Plasma Medicine*, *2*(4), 207–220. https://doi.org/10.1615/PlasmaMed.2013008267

[Utsumi et al., 2013] Utsumi, F., Kajiyama, H., Nakamura, K., Tanaka, H., Mizuno, M. (2013). Effect of Indirect Nonequilibrium Atmospheric Pressure Plasma on Anti-Proliferative Activity against Chronic Chemo-Resistant Ovarian Cancer Cells In Vitro and In Vivo. *PLoS ONE ONE*, *8*(12), 1–10. https://doi.org/10.1371/journal.pone.0081576

[Vandamme et al., 2012] Vandamme, M., Robert, E., Lerondel, S. et al. (2012). ROS implication in a new antitumor strategy based on non-thermal plasma. *International Journal of Cancer*, *130*(9), 2185–2194. https://doi.org/10.1002/ijc.26252

[Yan et al., 2015] Yan, D., Talbot, A., Nourmohammadi, N. et al. (2015). Principles of using Cold Atmospheric Plasma Stimulated Media for Cancer Treatment. *Scientific Reports*, *5*(1). https://doi.org/10.1038/srep18339

[Zirnheld et al., 2010] Zirnheld, J. L. et al. (2010). Nonthermal plasma needle: Development and targeting of melanoma cells. *IEEE Transactions on Plasma Science*, *38*, 948–952.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 80–88
ISBN 978-8081470882, © 2018 Ivan Piovarči

VÝVOJ BIOSENZORA NA DETEKCIU AKTIVITY PROTEÁZ

Ivan Piovarči[1]*
Školiteľ: Tibor Hianik[1]
Konzultanti: Alexandra Poturnayová[1,2]
Marek Tatarko[1]
[1] Katedra biofyziky a jadrovej fyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2]Centrum biovied,Ústav biochémie a genetiky živočíchov, SAV, Dubrávska cesta 9, 840 05 Bratislava

Abstrakt

Pokroky v oblasti biofyziky biosenzorov umožňujú vývoj nových a relatívne lacných spôsobov ako merať fyzikálne veličiny súvisiace s procesmi v biologických systémoch. Biosenzor sa skladá z troch základných častí: bioreceptora, ktorý reaguje na rôzne biologické podnety vo vzorke, z fyzikálneho prevodníka signálu, ktorý zaznamenáva zmeny v receptorovej časti senzora a mení ich na fyzikálne merateľné veličiny (ako napríklad veľkosť prúdu, odporu, napätia atď.) a z analyzátora, ktorý vyhodnocuje signál z prevodníka.

V tejto práci sme sa venovali štúdiu jedného z možných zostavení biosenzora, ktorý by bol schopný merať aktivitu proteáz v rôznych biologických vzorkách. Ako prevodník signálu sme využili vlastnosti piezoelektrického kremenného kryštálu v zapojení QCM (Quartz Crystal Microbalance). Pre biosenzitívnu časť biosenzora bol využitý mliečny proteín β-kazeín. Na takto pripravený biosenzor sme aplikovali rôzne koncentrácie aktívneho chymotrypsínu a sledovali sme zmenu rezonančnej frekvencie a dynamického odporu biosenzora. Merania boli vykonané pri laboratórnej teplote (23 °C) a pri pH pufru 7,4 a 8,3. V práci sme následne určili limit detekcie daného biosenzora, vytvorili kalibračnú krivku pre merané koncentrácie pri oboch pH, modelovali priebeh zmeny rezonančnej frekvencie kryštálu jednoduchým vzťahom, prediskutovali sme možný efekt pH na parametre modelu ako aj zmeny rezonančnej frekvencie a dynamického odporu. Analyzovali sme taktiež závislosť rýchlosti štiepenia β-kazeínu od koncentrácie chymotrypsínu.

Kľúčové slová: proteázy, chymotrypsín, β-kazeín, biosenzor, piezokryštál

1 Úvod

Od roku 1962 kedy Leland C. Clark, Jr. vyvinul prvý biosenzor na meranie koncentrácie glukózy (jednalo sa o ním vyvinutú kyslíkovú elektródu, ktorá bola obalená dialyzačnou membránou, v ktorej bol zachytený enzým glukózooxidáza) sa rôzne vedecké tímy začali venovať možnostiam využitia biosenzorov. Biosenzory v sebe spájajú teoretické disciplíny od fyziky, chémie a biológie spolu s aplikovanými vednými odbormi ako nanotechnológie, elektronika a biomedicína. Nakoľko pokroky v biosenzoroch umožňujú výrobu lacných, selektívnych, stabilných a citlivých senzorov, toto odvetvie stále predstavuje bohaté pole pre vedecký výskum, ako aj možnosti praktického využitia v zdravotníckych zariadeniach a priemysle. Vysoká selektivita biosenzorov umožňuje ich využitie v medicíne ako jednoduchý, jednorázový klinický test pre rôzne látky (zvýšená koncentrácia glukózy, rôznych proteínov, rakovinových biomarkerov atď.). Rovnako sú biosenzory využiteľné v enviromentalistike na detekciu škodlivín v ovzduší a vo vode ako aj v potravinárskom priemysle na detekciu kontaminácie potravín a na sledovanie kvality mliečnych výrobkov. Vďaka novej bezdrôtovej technológií sa biosenzory začali stávať aj súčasťou prostetických srdcových chlopní a cievových stentov, čo umožnuje priame meranie diagnostických markerov ochorenia pri zranenom tkanive.

Každý biosenzor sa skladá z troch hlavných častí a to biologickej časti, nazývanej bioreceptor, z fyzikálnej časti, nazývanej prevodník a z analyzačnej časti nazvanej analyzátor. Prevodník prevádza interakciu bioreceptora so vzorkou na fyzikálne merateľný signál, ktorý sa následne pomocou analyzátora (zväčša ďalších elektronických súčiastok) zdigitalizuje a pošle na displej. Pre jednoduché biosenzory môže ísť o displej, ktorý zobrazuje iba konkrétnu hodnotu pri jednorázovom meraní. Pri zložitejších a vedeckých použitiach je biosenzor prepojený s počítačovým rozhraním, kde sa často signál biosenzora zbiera v čase a následne sa zobrazuje a upravuje špeciálnym softvérom.

Medzi používané bioreceptory patria enzýmy, bunky, DNA, aptaméry, nanočastice a proteíny. Tieto bioreceptory je často treba pripojiť k prevodníku bez straty ich interakcie s daným analytom, nakoľko práve bioreceptorová časť biosenzora súvisí s jeho selektivitou Pri výbere bioreceptora prichádzajú vhod znalosti z biológie a chémie na výber správnej interakcie bioreceptora a analytu, a zároveň znalosti z nanotechnológií pre výber správneho prevodníka a jeho prepojenia s bioreceptorom. Pre správny výber prevodníka sú potrebné znalosti z fyziky, biofyziky a elektroniky.

* piovarci.i@gmail.com

Ako jedny z prvých prevodníkov sa používali elektródy. Takéto biosenzory patria do kategórie elektrochemických biosenzorov a interakcia bioreceptora s analytom vytvára na prevodníku zmeny elektrických parametrov, ako napríklad zmena prúdu na pracovnej elektróde v dôsledku oxidačno-redukčných reakcií, zmena potenciálu, impedancie, alebo vodivosti. Ďalšou veľkou skupinou biosenzorov su takzvané optické biosenzory. Pri týchto biosenzoroch sa zväčša bioreceptor ožaruje laserom a vlastnosti odrazeného laserového lúča indikujú zmenu koncentrácie analytu, alebo interakciu analytu s bioreceptorom. Pri optických biosenzoroch sa využívajú javy ako SPR (Surface Plasmon Resonance), bioluminiscencia, Ramanovský rozptyl a zmena polarizácie svetelného lúča. Medzi ďalšie typy biosenzorov patria termálne a akustické. Akustickej metóde QCM sa budeme venovať v tejto práci podrobnejšie.

Biosenzory môžu byť použité pri meraní biologických vzoriek in vivo, alebo in vitro. K dôležitým biologickým vzorkám patria proteázy, ktoré štiepia bielkoviny. Vďaka schopnosti biosenzorov merať selektívne a senzitívne biologické vzorky, je možné detekovať proteázy (a iné enzýmy) na základe sledovania zmien koncentrácií produktu, alebo susbtrátu v enzymatickej reakcii. Biosenzory tak umožňujú vývoj lacných a rýchlych metód detekcie proteáz, alebo citlivých a špecifických metód na štúdium enzymatického štiepenia.

Proteázy majú dôležitú úlohu ako endogénne časti tráviaceho systému, koagulačného systému, imunitného systému (pri obrane proti patogénom a liečbe rán) u človeka a iných organizmov. Zároveň majú obrovské uplatnenie v medicíne, farmácií, ako aj v priemysle. Ich možné využitia v týchto odvetviach ako aj pri základnom výskume ďaleko presahujú možnosti tejto práce. Spomenieme len niektoré možnosti využitia ako sú napríklad: pomoc pri rozpúštaní zrazenín, rozkladanie toxických bielkovín od patogénnych baktérií, súčasť pracích práškov, v potravinárskom priemysle pri výrobe syrov atď.

1.1 Chymotrypsín, jeho biologická úloha a využitie

Chymotrypsín je serínová endopeptidáza, vyrábaná v pankreasi živočíchov. V pankreasi sa výraba v neaktívnej forme chymtrypsinogén. Po prijatí potravy je chymotrypsín spolu s inými proteázami, trypsínom a elastázou, vylúčený do tenkého čreva a konkrétne do duodena. Chymotrypsinogén sa v duodene pomocou trypsínu aktivuje, ktorý ho štiepi na 15 a 16 mieste medzi arginínom a izoleúcinom, čím sa mení na aktívnu formu chymotrypsínu. K jeho aktivácií prispieva aj už aktívny chymotrypsín. Aj trypsín a elastáza sú vyrábané v neaktívnej forme. V čreve je najprv aktivovaný trypsín, pomocou črevného enzýmu enteropeptidázy. V čreve tieto enzýmy rozkladajú bielkoviny na menšie časti a umožnuje ich vstrebávanie. Aby tieto enzýmy nepoškodzovali aj bunky tráviaceho systému, v čreve sa nachádzajú rôzne systémy na ich inhibíciu. V prípade chymotrypsínu ide v prvom prípade o jeho autolýzu a chymotrypsín prirodzene časom stráca aktivitu. V druhom prípade ide o rôzne inhibítory, z ktorých najvýznamnejšie sú serpíny, ktoré sa kovalentne viažu na dané enzýmy a menia ich štruktúru na neaktívnu.

Chymotrypsín sa spolu s trypsínom využíva aj v medicíne ako protizápalové liečivo. Mechanizmus, ktorým sa daná protizápalová aktivita týchto enzýmov vysvetluje je ich odstraňovanie fibrínových produktov a bielkovinových vrstiev vytvorených na povrchoch buniek. Po podaní chymotrypsínu alebo trypsínu sú tieto vrstvy rozložené a bunky imunitného systému majú lepší prístup k poškodeným bunkám. Môžu sa podávať orálne ako prášok, alebo injekčne. Chymotrypsín sa tiež osvedčil pri zrýchlenej liečbe kataraktu. Už v roku 1961 bola opublikovaná štúdia doktorom G.S. Harrisom, pri ktorej pozoroval 20 pacientov s rôznymi očnými problémami, pri liečbe ktorých sa používal chymotrypsín a 20 pacientov s porovnateľnými diagnózami, u ktorých sa chymotrypsín nepoužíval. Doktor Harris zaznamenal, že výber šošovky prebiehal ľahšie u pacientov, pri ktorých bol použitý chymotrypsín. V dnešnej dobe je už chymotrypsín bežne používaný pri týchto operáciach pre zníženie poškodenia oka a šošovky pri a po operácií.

1.2 Metódy štúdie aktivity proteáz

Jedna z najtypyckejších metód štúdie aktivity enzýmov je enzýmový test, v angličtine nazývaný enzyme assay. Ide o rôzne druhy testov, ktoré sú schopné zaznamenávať koncentráciu produktu, alebo substrátu v enzymatickej reakcii v čase. Tento signál musí pochádzať práve od jedného z týchto činiteľov v reakcii, nakoľko ak by signál nebol priamo určený, mohla by sa rýchlosť enzýmovej reakcie zašumieť odbúdaním produktu a zároveň pribúdaním substrátu. Ak sa nájde takáto metóda, principiálne je jedno, či sa zvolí signál z koncentrácie produktu, alebo substrátu (ak sa nájdu oba, berie sa ten jasnejší signál), nakoľko sa dá predpokladať, že koncentrácia spotrebovaného substrátu je rovná koncentrácií produktu, avšak signál z produktu má tú výhodu, že na začiatku je nulový, čo predstavuje lahšie praktické meranie pre jeho detekciu (väčšina druhov šumov sa zvyšuje s výškou signálu).

Z hľadiska zaznamenávania signálu v čase poznáme enzýmove testy kontinuálne a nekontinuálne. Kontinuálne sú schopné

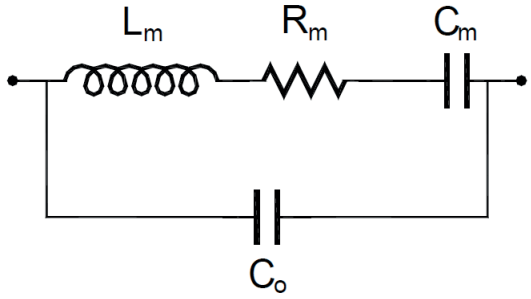
zaznamenávať signál veľmi rýchlo (prakticky rýchlosti sampling frekvencie prístroja), zatiaľ čo pri nekontinuálnych sa musí reakcia v určitých bodoch pravidelne zastavovať a nechať zmerať. Kontinuálne metódy sú preferovanejšie v týchto typoch merania. Medzi kontinuálne testy patria hlavne spektroskopické metódy (fluorescencia, absorpcia, turbidimetria, polarimetria atď.) a elektrochemické merania (pH-stat, potenciometria, O_2 alebo CO_2 elektródy). Medzi nekontinuálne testy patria separačné a záchytové metódy (ako napríklad HPLC, blotting atď.).

Výroba takýchto testov je vždy ovplyvnená rôznymi faktormi. Jedným z hlavných faktorov je samozrejme cena a dostupnosť takéhoto testu. Enzýmy sú však ovplyvňované rôznymi podmienkami pracovného prostredia. Každý enzým pracuje len v určitom teplotnom rozsahu, ako aj v rozsahu pH, pričom dosahuje maximum svojej aktivity, nazývané optimum, pri určitých hodnotách týchto parametrov. Iónová sila roztoku tiež ovplyvňuje aktivitu enzýmov. Enzýmy tiež bývajú nestabilné, napriek tomu, že by to nebolo podmienené ich štruktúrou, ktorá býva naopak veľmi stabilná. Je pravdepodobné, že niektoré enzýmy môžu podstupovať autolýzu, ako aj znečistenie enzýmu v laboratóriu inými proteázami výrazne mení aktivitu daného enzýmu v čase.

Testy pre proteázy sú početné a rôzne, nakoľko samotných proteáz je viacero. Testy na proteázy sa môžu deliť na všeobecné, ktoré dokazujú iba schopnosť enzýmu štiepiť proteíny a špecifické, ktoré musia byť nadizajnované na konkrétne druhy proteáz.

Pre meranie aktivity proteáz sa osvedčilo vytvoriť tenkú vrstvu na citlivom povrchu (akým sú napríklad zlaté elektródy) a sledovať štiepenie tejto vrstvy pomocou danej proteázy. Zo začiatku metódy fungovali na základe detekcie produktov reakcií, ako napríklad biosenzor na detekciu ureázy. Tento senzor mal na zlatom pokrytej elektróde naviazanú vrstvu polyméru metylmetakrylátu a kyseliny metakrylovej. Enzymatická reakcia ureázy s jej substrátom močovinou viedlo k zvýšeniu pH na povrchu, čo viedlo k degradácií vrstvy a zmene kapacitancie elektródy. Táto metóda bola rýchla a senzitívna, avšak nemerala aktivitu enzýmu priamo, ale nepriamo cez degradáciu vrstvy, cez zmenu pH po reakcii. Novšie štúdie sa zameriavajú na vrstvy zložené z prirodzeného substrátu pre daný enzým a na meranie zmeny vlastností vrstvy priamo štiepením enzýmom. Jeden z príkladov takéhoto senzoru je meranie impedancie cez vrstvu gelatínu. Táto vrstva je potom nechaná štiepiť kolagenázou so schopnosťou namerať koncentrácie kolagenázy až 0,2 mg/ml. Medzi ďalšie zostavy patrili biosenzory s vrstvou fibrinogénu ako substrát pre ľudskú neutrofilnú elastázu, kde sa merala zmena rezonančnej frekvencie a dynamického odporu pomocou metódy QCM, alebo polysacharidový substrát dextránu využitý ako substrát pre dextranázu, kde sa merala degradácia vrstvy pomocou povrchovej plazmónovej rezonancie (SPR).

V tejto práci sme použili na štúdium štiepenia β-kazeínu chymotrypsínom akustickú metódu QCM. Jej princíp je založený na meraní rezonančnej frekvencie a dynamického odporu kremenného kryštálu. Tento kremenný kryštál má na oboch stranách naparené zlaté elektródy o ploche 0,2 cm^2. Napätie privedené na tieto kremenné kryštály vytvára strižné kmity kryštálu. Toto kmitanie má svoju rezonančnú frekvenciu, pre bežné kryštály sa môže táto frekvencia pohybovať okolo 3-20 MHz.



Obrázok 1 Ekvivalentná schéma piezokryštálu. C_o - elektrická kapacita nemodifikovaného kryštálu, L_m, R_m, C_m - induktancia, dynamický odpor a elektrická kapacita citlivej vrstvy na povrchu kryštálu

Kryštál sa dá modelovať ekvivalentným elektrickým LRC obvodom. Pri QCM sa dajú vyhodnocovať rôzne parametre, ako napríklad rezonančná frekvencia senzora, dynamický odpor, naznačený v modeli elektrického ekvivalentného obvodu ako R_m, alebo disipácia energie (Obr. 1). Možnosti sledovania týchto parametrov závisia od konkrétneho analyzátora pripojeného k biosenzoru. V našej práci sme merali rezonančnú frekvenciu a dynamický odpor v čase. Zmena rezonančnej frekvencie súvisí s hustotou naviazaného materiálu na povrchu zlatej elektródy. Tento vzťah odhaduje Sauerbreyho rovnica.

$$\Delta f = \frac{-2f_0}{A\sqrt{\rho_q \mu_q}} \Delta m \qquad (1)$$

Táto rovnica bola odvodená pre kryštál vo vákuu s homogénnou naviazanou vrstvou, ktorá má podobné vlastnosti ako kryštál (čo znamená dostatočne rigidná vrstva), avšak je častokrát využiteľná aj pri iných podmienkach. Ďalšie parametre, ktoré ovplyvňujú zmenu rezonančnej frekvencie sú viskózne vlastnosti vrstvy a prostredia, teplota, hydrostatický tlak a iné. Ak sú však tieto parametre zafixované, podľa Sauerbreyho rovnice je frekvencia nepriamo úmerná zmene hmotnosti na povrchu. Vystupuje v nej rezonančná frekvencia nezaťaženého kryštálu f_0, aktívna plocha kryštálu

(plocha elektródy) A, hustota a šmykový modul pružnosti kryštálu ρ_q a μ_q a zmena hmotnosti Δm. Pre zmenu dynamického odporu existuje vzťah, kde už vystupujú konštanty aj pre hustotu a viskozitu kvapaliny ρ_l a η_l a pre kapacitanciu kryštálu C_0

$$\Delta R = \frac{\pi}{8K^2C_0}\sqrt{\frac{\rho_l\eta_l}{\pi f_0\rho_q\mu_q}} \qquad (2)$$

2 Materiál a metódy

2.1 Použité chemikálie

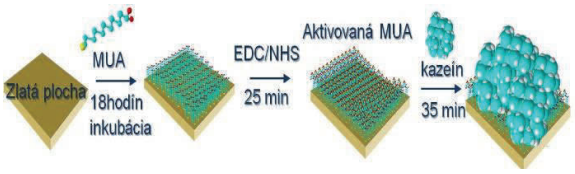
Chemikálie potrebné na prípravu biosenzora boli zakúpene od Sigma-Aldrich Nemecko, chemikálie potrebné na čistenie kryštálov boli zakúpené od Slavus Slovensko. Deionizovaná voda bola pripravená v našom laboratóriu pomocou prístroja Purelab Classic UV (Elga, Anglicko). Všetky chemikálie mali čistotu p.a. Použili sme taktiež tieto chemikálie:

- PBS (phosphate buffer saline) (1 tableta na 200 ml vody, pH 7,4; Sigma Aldrich, Nemecko).
- NaOH (Slavus, Slovensko).
- HCl (Slavus, Slovensko).
- MUA (11-merkaptoundekánová kyselina, Sigma Aldrich, Nemecko).
- EDC (N-(3-dimetylaminopropyl)-N'-etylkarbodiimid, Sigma Aldrich, Nemecko).
- NHS (N-hydroxisukcinimid, Sigma Aldrich, Nemecko).
- β – kazeín z kravského mlieka (Sigma Aldrich, Nemecko).
- Chymotrypsín-α z kravského pankreasu, typ II, lyofilizovaný (Sigma Aldrich, Nemecko)
- H2O2 (Slavus, Slovensko).
- NH3 (Slavus, Slovensko).

2.2 Príprava senzora

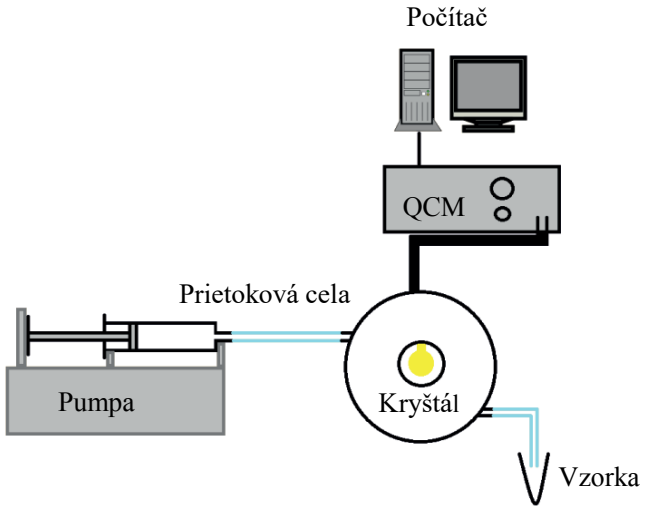
Senzor sa pripravoval na zlatej vrstve kremenného kryštálu. Najprv sa nechal kryštál cez noc inkubovať 16-18 hodín pri izbovej teplote s 2 mM MUA rozpustenou v etanole. MUA je karboxylová kyselina so sulfidovou skupinou -SH. Sulfidová časť interaguje so zlatom na kryštáli a vytvorí samousporiadanú vrstvu. Po inkubácií bol kryštál opláchnutý etanolom, destilovanou vodou a bolo naňho aplikované 20 mM EDC a 50 mM NHS na 25 minút. Tieto látky reagujú s karboxylovou časťou MUA a aktivujú ju, aby mohla vytvárať kovalentnú väzbu s inými aminokyselinami. Následne sme kryštál zase očistili, vysušili dusíkom a vložili do cely. Na takto pripravenú vrstvu sme priviedli 1 mg/ml β-kazeínu rozpusteného v PBS. Po 35 minútach sme pridávali už iba čisté PBS pre odplavenie fragmentov nenaviazaných na vrstvu.

Po každom meraní boli kryštály dôkladne vyčistené pomocou roztoku zásaditej pirane (5:1:1 destilovaná voda, H_2O_2, NH_3). Kryštály boli vložené na 25 minút do kadičky s piraňou a kadičky boli

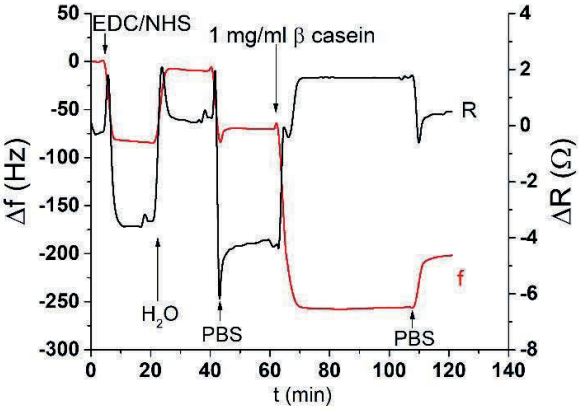


Obrázok 2 Schéma prípravy biosenzora

vložené do vodného kúpeľa s približne 75 °C. Po 25 minútach boli kryštály vybrané a premyté destilovanou vodou. Toto sa opakovalo pre každý kryštál 3-krát. Schéma prípravy biosenzora je uvedená na Obr. 2 a schéma meracej aparatúry na Obr. 3.



Obrázok 3 Schéma meracej metódy



Obrázok 4 Zmena rezonančnej frekvencie a dynamického odporu pri príprave senzitívnej vrstvy biosenzora

2.3 Priebeh merania

Po naviazaní β-kazeínu na povrch elektródy a ustalení frekvencie (vymytí všetkých nenaviazaných zvyškov) sme na kryštál aplikovali chymotrypsín v koncentráciach 1 pM – 10 nM. Po 35 minútovej aplikácií chymotrypsínu sme do cely pustili PBS a počkali kým sa rezonančná frekvencia neustálila. Zmenu rezonančnej frekvencie od aplikácie chymotrypsínu po ustálenie hodnoty v PBS sme brali ako množstvo odštiepeného kazeínu z vrstvy. Pri nižších koncentráciach (1pM, 10pM, 100 pM) sme následne aplikovali vyššiu dávku chymotrypsínu (aspoň s koncentráciou vyššou o 2 rády). Pri takýchto meraniach sme veľkosť odštiepenú meraním brali ako zmenu frekvencie od počiatočného stavu po ustálenú hodnotu po štiepení. Tieto merania sme robili jednak pre pH pufru 7,4 ako fyziologické pH u človeka a pH 8,3 ako zásadité pH, ktoré je bližšie k optimu štiepenia chymotrypsínu. Pufor mal upravené pH pomocou NaOH a HCl. Vzniknuté kinetické krivky štiepenia sme modelovali jednoduchým modelom:

$$\Delta f = f_0 + f_{max}(1 - e^{-t/\tau}) \qquad (3)$$

kde Δf je zmena rezonančnej frekvencie, f_0 je frekvencia v čase nula (avšak keďže sme zaznamenávali len zmenu rezonančnej frekvencie začína približne pri nule), f_{max} je ustálená hodnota frekvencie a τ je časová konštanta (čas, za ktorý sa zmena frekvencie zvýši na 64%). Z derivácie tohto modelu sme zistili počiatočnú rýchlosť reakcie a upravenou Michaelis-Mentenovej konštantou sme odhadli parameter K_m

$$v_0 = v_{max}\left(\frac{[E]}{[E] + K_m}\right) \qquad (4)$$

Táto rovnica sa od klasickej Michaelis-Mentenovej rovnice líši tým, že miesto koncentrácie substrátu *[S]* v nej vystupuje koncentrácia enzýmu *[E]*. Význam konštanty K_m to veľmi nezmení, je to koncentrácia enzýmu pri ktorej dosiahne reakcia polovičnú saturáciu (a teda $v_0 = v_{max}/2$), a stále sa bude rovnať pomeru konštánt rýchlostí čiastkových reakcií reakcie:

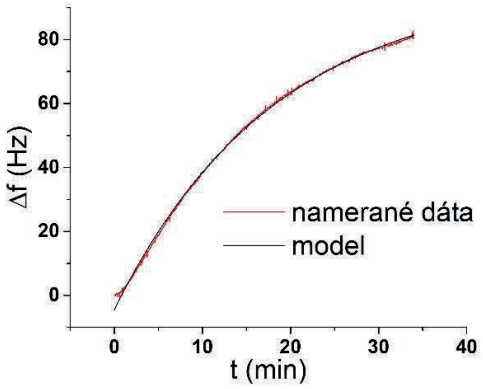
$$E + S \underset{k_{-1}}{\leftrightarrow^{k_1}} ES \rightarrow^{k_2} E + P \qquad (5)$$

a teda bude platiť

$$K_m = \frac{k_{-1} + k_2}{k_1} \qquad (6)$$

Maximálna rýchlosť reakcie bude v tomto prípade definovaná ako:

$$v_{max} = k_2[S] \qquad (7)$$



Obrázok 5 Príklad priebehu štiepenia vrstvy 10 nM chymotrypsínom spolu s modelom

3 Výsledky

3.1 Kinetika zmien rezonančnej frekvencie a dynamického odporu pri štiepení β-kazeínu chymotrypsínom

V experimentoch sme zmerali kinetiku tvroby β-kazeínovej vrstvy a jej štiepenia chymotrypsínom. Na Obr. 4. je uvedená kinetika zmien rezonančnej frekvencie dynamického odporu súvisiaca s formovaním kazeínovej vrstvy. Vidieť, že pridanie β-kazeínu na povrch vrstvy MUA aktivovaný NHS/EDC vedie k výraznému poklesu rezonančnej frekvencie a k rastu dynamického odporu. Pokles frekvencie súvisí s formovaním kazeínovej vrstvy na povrchu kryštálu, kým rast dynamického odporu svedčí o príspevku povrchovej viskozity. Následne sme pridali v prietoku chymotrypsín v rôznych koncentráciách. Poznamenáme, že pred každým meraním sme zmerali zmenu rezonančnej frekvencie a dynamického odporu po aplikácií β-kazeínu. Na Obr. 5. je uvedená kinetika zmien rezonančnej frekvencie po pridaní chymotrypsínu v koncentrácii 10 nM k sformovanej vrstve β-kazeínu. Vidieť, že frekvencia exponenciálne vzrastá, čo súvisí so znížením hrúbky, resp. hmotnosti vrstvy. Čierna krivka predstavuje fit pomocou rovnice (3). Zo získaných výsledkov sme určili percentuálny podiel zmeny rezonančnej frekvencie a štandardnú chybu priemeru V prípade, že sme nemali dosť údajov, bola štandardná chyba odhadnutá na 2 Hz. Získané údaje sú uvedené v Tab. 1. pre pH 7,4 a v Tab. 2 pre pH 8,3. Tiež sme uviedli konkrétne parametre modelu pre dané koncentrácie v Tab. 3 pre pH 7,4 a v Tab. 4 pre pH 8,3.

Tabuľka 1 Absolútna zmena rezonančnej frekvencie, a dynamického odporu, s relatívnou zmenou

rezonančnej frekvencie pre rôzne koncentrácie chymotrypsínu pri pH 7,4

c (nM)	Δf ± SE (Hz)	Δf ± SE (%)	ΔR ± SE (Ω)
10^{-3}	9 ± 2	6 ± 2	-0,1 ± 0,5
10^{-2}	13 ± 0,5	12 ± 1	-0,35 ± 0,6
10^{-1}	12 ± 2	9 ± 2	-0,4 ± 0,5
1	18 ± 3	16 ± 2	-0,8 ± 0,5
10	43 ± 5	32 ± 4	-1,5 ± 0,5

Tabuľka 2 Absolútna zmena rezonančnej frekvencie, a dynamického odporu, s relatívnou zmenou rezonančnej frekvencie pre rôzne koncentrácie chymotrypsínu pri pH 8,3

c (nM)	Δf ± SEM (Hz)	Δf ± SEM (%)	ΔR ± SEM (Ω)
10^{-3}	17 ± 2	9 ± 2	-1,4 ± 0,5
10^{-2}	17 ± 2	11 ± 2	-0,2 ± 0,5
10^{-1}	21 ± 2	12 ± 2	-0,5 ± 0,5
1	18 ± 8	14 ± 2	-0,1 ± -0,1
10	70 ± 19	45 ± 4	-2 ± 0,85

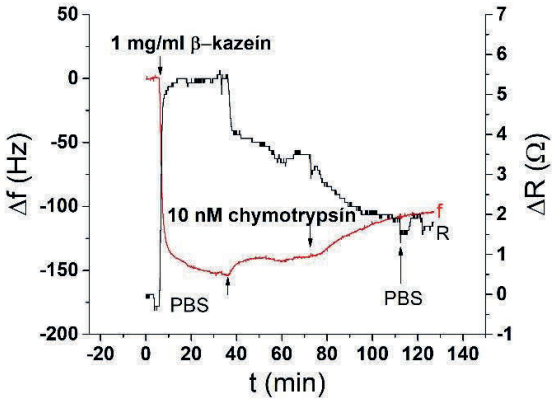
Z nameraných údajov sme spravili kalibračnú krivku. Každé prvé meranie na kryštály sme preložili modelom a určili sme parameter f_0, f_{max} a τ. Všetky modely mali $r^2 > 0,9$.

Tabuľka 3 Parametre modelu pre rôzne koncentrácie pri pH 7,4

c (nM)	f_0 (Hz)	f_{max} (Hz)	τ (min)
10^{-3}	-0,2	13	12
10^{-2}	0,2	12	14
10^{-1}	0,1	19	46
1	-	-	-
10	-3,0	53	38

Tabuľka 4 Parametre modelu pre rôzne koncentrácie pri pH 8,3

c (nM)	f_0 (Hz)	f_{max} (Hz)	τ (min)
10^{-3}	0,4	18	12
10^{-2}	-0,6	36	72
10^{-1}	-	-	-
1	0,5	9	13
10	-4,4	102	18



Obrázok 6 Priebeh rezonančnej frekvencie a dynamického odporu pri naväzovaní kazeínu a štiepení 10 nM chymotrypsínom pri pH 7,4

3.2 Vplyv pH na štiepenie β-kazeínu chymotrypsínom

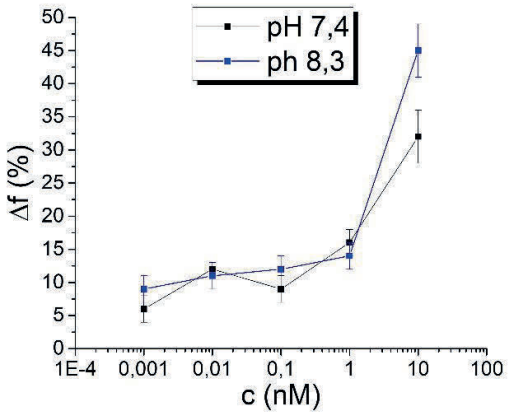
Pomocou Anova metódy sme porovnávali vplyv koncentrácie a pH na relatívnu zmenu rezonančnej frekvencie a na parametre modelu zo vzťahu (3). V Tab. 5 uvádzame p-hodnotu a MS z Anovy pre závislosť variancie relatívnej zmeny rezonančnej frekvencie od koncentrácie a pH. V Tab. 6 uvádzame p-hodnoty pre závislosti variancie parametrov modelu od pH a koncentrácie. Uviedli sme aj závislosť zmeny relatívnej rezonančnej frekvencie od koncentrácie, nazývanou kalibračná krivka pre obe pH (obrázok 7).

Tabuľka 5 p-hodnota nulovej hypotézy, anovy spolu so sumou štvorcou variancie podelenou stupňami volnosti pre zmenu rezonančnej frekvencie

parameter	MS	p-hodnota
pH	31	0,39
Koncentrácia	273	0,03
Náhodná chyba	33	-

Tabuľka 6 p-hodnota nulovej hypotézy anovy pre koncentráciu a pH pre rôzne parameter modelu

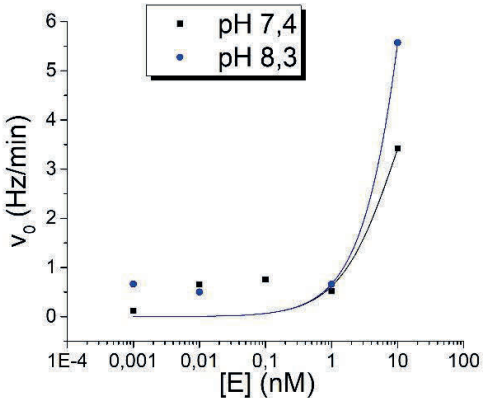
Parametre modelu	c	pH
f_0	0,02	0,56
f_{max}	0,09	0,28
τ	0,77	0,95



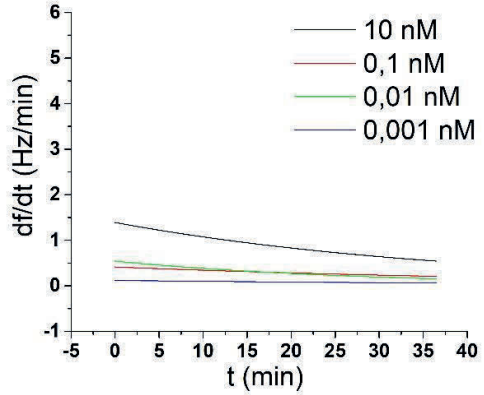
Obrázok 7 Kalibračná krivka pre obe pH v logaritmickej škále

3.3 Analýza rýchlosti štiepenia β-kazeínu chymotrypsínom

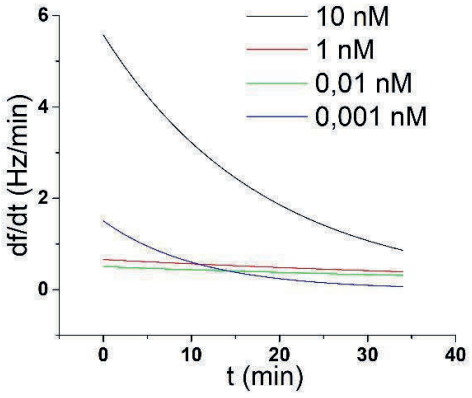
Derivovali sme model, ktorým sme modelovali priebeh štiepenia v čase, čím sme získali rýchlosť reakcie v čase. Urobili sme závislosť rýchlosti reakcie od koncentrácie enzýmu a modelovali sme ju Michaelis-Mentenovej rovnicou (4). V Tab. 7 uvádzame parametre modelu Michaelis-Mentenovej



Obrázok 8 Závislosť rýchlosti reakcie od koncentrácie enzýmu spolu s Michaelis-Mentenovej modelom



Obrázok 9 Derivácia modelu (rýchlosť reakcie) pre rôzne koncentrácie chymotrypsínu pri pH 7,4



Obrázok 10 Derivácia modelu (rýchlosť reakcie) pre rôzne koncentrácie chymotrypsínu pri pH 8,3

pre rôzne pH a na Obr. 8 uvádzame závislosť počiatočnej rýchlosti štiepenia od koncentrácie enzýmu a modelujeme tieto výsledky modelom Michaelis-Mentenovej. Tiež poukazujeme na priebeh derivácie (rýchlosti reakcie) v čase štiepenia na Obr. 9 pre pH 7,4 a Obr. 10 pre pH 8,3.

Tabuľka 7 Parametre Michaelis-Mentenovej modelu

pH	V_{max} ± SEM	K_m ± SEM	r^2
7,4	7 ± 8	10 ± 22	0,86
8,3	31 ± 140	45 ± 250	0,96

4 Diskusia

Zmerali sme absolútne a relatívne zmeny rezonančnej frekvencie a absolútne zmeny dynamického odporu pre pH 7,4 a 8,3 (Tabuľka 1 a 2). Relatívna zmena mala vo všeobecnosti menšiu štandardnú chybu. Zmena rezonančnej frekvencie sa pohybovala od 9 do 70 Hz a od 6 do 45 % odštiepenej vrstvy. Relatívna zmena frekvencie predstavuje lepší parameter ako absolútna zmena, nakoľko nám umožňuje porovnávať údaje aj bez toho, aby sme vedeli, aká presne je naviazaná vrstva kazeínu. Zmena rezonančnej frekvencie bola zapríčinená štiepením β-kazeínovej vrstvy a odplavovaním sa zvyškov vrstvy. Zmena dynamického odporu nebola veľká, od 0,1 po 2 Ω. Zmena dynamického odporu zodpovedá zmene viskóznych vlastností vrstvy (nemôže ísť o zmenu viskóznych vlastností prostredia, nakoľko sa pracovalo stále v tom istom pufri). Nakoľko táto zmena nebola veľká, odhadujeme, že viskozita vrstvy sa nezmenila výrazne a že za zmenu rezonančnej frekvencie môže hlavne úbytok hmotnosti kazeínu na povrchu kryštálu. Na kalibračnej krivke (Obrázok 6) je vidieť, že hodnoty pri koncentráciach nižších ako 10 nM sa od seba nelíšili viac ako o 10% odštiepenej vrstvy. Pri 10 nM potom táto hodnota vzrástla pre obe pH, blížiac sa už k odštiepeniu polovice prítomnej kazeínovej vrstvy. Predpokladáme, že enzýmové štiepenie je spomalované prvým krokom a to vytvorením ES komplexu. Domnievame sa, že kazeínová vrstva neumožňuje dostatočne dobrý prístup chymotrypsínu k jeho štiepnemu miestu, avšak keď už sa chymotrypsín dostane do komplexu ES, štiepi ho relatívne rýchlo. Väčšia koncentrácia chymotrypsínu rýchlejšie odhalí nové miesta na vrstve, kde sa môže chymotrypsín pripojiť a teda štiepenie prechádza oveľa rýchlejšie.

Modelovali sme priebeh štiepena kazeínovej vrstvy v čase pomocou jednoduchého modelu (Tabuľka 3 a 4). Model mal tri parametre a to f_0, f_{max} a τ. Prvé dva parametre f_0 a f_{max}, záviseli štatisticky od koncentrácie (pre $\alpha = 0{,}1$), nie však od pH (Tabuľka 6).Parameter f_0 je parameter, ktorý by mal vždy byť približne rovný nule, nakoľko berieme len zmenu rezonančnej frekvencie, nie jej hodnotu. Napriek tomu nám vyšiel závislý od koncentrácie. Naopak parameter f_{max} má význam absolútnej zmene rezonančnej frekvencie a teda odhadujeme, že by od koncentrácie mal závisieť silnejšie, ako len na hladine $\alpha = 0{,}1$. Parameter f_0 bude závisieť od sklonu (rýchlosti štiepenia) nakoľko matematicky bude lepšie sedieť iné číslo ako nula. Pre f_{max} zase platí to,

čo sme spomínali už predtým a to, že absolútna zmena rezonančnej frekvencie nezávisí iba od koncentrácie enzýmu. Parameter τ nezávisel ani od pH a ani od koncentrácie. Až na prípady, kedy sa tento parameter veľmi zväčšil, väčšinu času sa pohyboval okolo 15 minút a teda chymotrypsínu trvá približne 45 minút kým nevyštiepi maximum vrstvy, ktorú je schopný. Toto číslo je len orientačné, nakoľko odkrytie nových miest predchádzajúcim štiepením môže urýchliť štiepnu reakciu.

Pri analýze závislosti relatívnej zmeny rezonančnej frekvencie od pH sme zistili, že pH vnáša do údajov podobnú variáciu ako náhodná chyba a teda môžeme usúdiť, že v rámci nami používanej koncentrácie je skutočne zmena pH nevýznamná (Tabuľka 5). Tento poznatok môže pomôcť pri určovaní rozmedzia koncentrácií chymotrypsínu na ktorú je tento biosenzor vhodný. Pre koncentrácie chymotrypsínu 1 pM až 1 nM by mohol byť tento biosenzor menej citlivý na pH, avšak toto by bolo ešte treba otestovať pri vyšších koncentráciach a pri kyslom pH, bližšie k izoelektrickému bodu kazeínu.

Pri analýze rýchlosti reakcie sme urobili deriváciu predchádzajúceho modelu a teda sme odhadli rýchlosť enzýmovej reakcie štiepenia kazeínovej vrstvy chymotrypsínom. Pri nižších koncentráciach bola rýchlosť reakcie skoro až konštantná, čo poukazuje na reakciu prvého stupňa a teda enzymatická reakcia je závislá od rýchlosti jediného kroku, ktorým je asi vytváranie ES komplexov. Keď je koncentrácia chymotrypsínu dostatočne vysoká, Tvorba týchto komplexov je dostatočne rýchla, aby reakcia začala závisieť aj od ďalších krokov v reakcii.

Model závislosti počiatočnej rýchlosti reakcie od koncentrácie enzýmu síce má hodnotu $r^2 > 0,85$ avšak štandardná chyba parametrov je niekoľkokrát väčšia ako samotné parametre, a vie ich posunúť aj do nezmyselných záporných hodnôt. Preto hodnoty, ktoré uvádzame (Tabuľka 7) predstavujú iba veľmi hrubý odhad týchto parametrov. Chyby, ktoré vstupujú do tohto modelu nie sú len bežné chyby metódy, ale aj fakt, že nami upravená rovnica Michaelis-Mentenovej platí len pre rovnakú koncentráciu substrátu, čo sme pri našom meraní nemohli zaručiť. Pre doplnenie informácie by bolo vhodné namerať ešte klasickú rovnicu Michaelis-Mentenovej pre rôzne koncentrácie blokátora vrstvy pred použitím kazeínu. Zatial iba môžeme odhadnúť, že pri vyššom pH má chymotrypsín rýchlejšie prebiehajúci posledný krok reakcie a to štiepenie (má vyššie k_2 ako je evidentné z pomeru v_{max}). Dôvod prečo toto nie je zjavné pri relatívnej zmene rezonančnej frekvencie bude pravdepodobne stále prvý krok reakcie tvorby komplexov. Je pravdepodobné, že pH nevýrazne ovplyvňuje schopnosť chymotrypsínu naviazať sa na vrstvu, avšak keď už sa naviaže, ostatné kroky reakcie prebiehajú rýchlejšie. Je dokonca možné, ako vidno na K_m, ktorá je vyššia pre vyššie pH, že vyššie pH dokonca spomaluje vytváranie komplexov ES. Môže to byť zapríčinené tým, že pri vyššom pH je kazeín lepšie rozpustený a vytvorí rovnomernejšiu vrstvu ako pri nižšom pH.

5 Záver

Vytvorili sme akustický biosenzor pomocou QCM metódy a naviazanej vrstvy mliečneho proteínu β-kazeínu pre detekciu aktivity proteázy chymotrypsínu. Určili sme limit detekcie daného biosenzora na 1 pM chymotrypsínu. Urobili sme kalibračnú krivku zmien rezonančnej frekvenice pre rôzne koncentrácie chymotrypsínu pri pH 7,4 a 8,3. Štatisticky sme zanalyzovali rozdiely štiepenia pri pH 7,4 a 8,3 a vyhodnotili sme ich v danom rozsahu pH a koncentrácií ako nevýznamné. Analyzovali sme rýchlosť štiepenia β-kazeínu pomocou pozmenej Michaelis-Mentenovej rovnice, odhadli sme hodnotu K_m a k_2.

Poďakovanie

Táto práca bola finančne podporená projektom číslo 690898, FORMILK riešenom v programe H2020-MSCA-RISE-2015 Európskej únie. Táto práca bola taktiež vytvorená realizáciou projektu "Rozvoj Centra excelentnosti pre využitie informačných biomakromolekúl na zlepšenie kvality života", na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja (ITMS 26240120027).

Literatúra

[Petr Skládal, 2016] Skládal, P. (2016). Piezoelectric biosensors, *Trends in Analytical Chemistry*, 79:127-133

[Carlos López-Otín, 2008] López-Otín, C., Bond, J. S. (2008). Proteases: Multifunctional Enzymes in Life and Disease, *The Journal of Biological Chemistry*, 283-45:30433-30437

[Qingsong Bai, 2015] Qingsong B., Huang X. (2015). Using Quartz Crystal Microbalance for Field Measurement of Liquid Viscosities, *Journal of Sensors* 2016

[Ming La, 2015] La M., Zhao, X. et. al. (2015). Electrochemical Biosensors for Probing of Protease Activity and Screening of Protease Inhibitors, *International Journal of Electrochemical Science* 10: 3329-3339

[Palchetti, 2010] Palchetti I., Mascini M. (2010) Biosensor Technology: A Brief History. In: Malcovati P., Baschirotto A., d'Amico A., Natale C. (eds) *Sensors and Microsystems. Lecture*

Notes in Electrical Engineering, vol 54. Springer, Dordrecht

[Innam Lee, 2012] Lee I., Luo, X. et. al. (2010) Detection of Cardiac Biomarkers Using Single Polyanaline Nanowire-Based Conductometric Biosensors. *Biosensors*, 2:205-220

[Harris, 1961] G.S. Harris (1961) Alpha-chymotrypsin in Cataract Surgery, *Canad. M. A. J.* 85

[Qing Li, 2012] Qing L., Marek, P. et. al. (2012), Commercial proteases: Present and future. *FEBS Letters* 587:1155-1163

[Ebrahum Ghafar-Zadeh, 2015] Ebrahim G. (2015) Wireless Integrated Biosensors for Point-of-Care Diagnostic Applications. *Sensors*, 15:3236-3261

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 89
ISBN 978-8081470882, © 2018 Lucia Ilavská, Dominika Sersenová

Metabolizmus tryptofánu u detských pacientov s depresívnym ochorením (rozšírený abstrakt)

Lucia Ilavská [1]* Dominika Sersenová[1]
Školiteľ: Marcela Morvová Jr. [1]‡

[1] Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Poruchy nálady v detskom a adolescentnom veku sú závažným celosvetovým problémom v detskej psychiatrii. Prevalencia psychiatrických porúch sa neustále zvyšuje a ich výskyt sa posúva do skorších rokov [Vaváková et al., 2015].

Depresia je multifaktoriálne ochorenie, ktoré ovplyvňujú environmentálne, genetické, biologické faktory. V jej patogenéze hrá úlohu niekoľko molekulových mechanizmov a jedným z nich je aj porušenie funkcie mozgového serotonínergického systému. Abnormality v tomto systéme sú ovplyvňované enzýmami metabolizmu serotonínu a syntézou jeho prekurzora tryptofánu. Depresia je tiež spájaná so zápalovými procesmi a zvýšenou hladinou prozápalových cytokínov. Zvýšená produkciou prozápalových cytokínov vedie k aktivácii enzýmu indolamín 2,3-dioxygenáza (IDO), ktorý degraduje tryptofán (TRP) na kynurenín (KYN) [Dantzer, 2011]. To má za následok zníženie dostupnosti tryptofánu a vzniku ďalších metabolitov kynurenínovej dráhy Na stanovenie aktivity IDO sa využíva pomer KYN/ TRP.

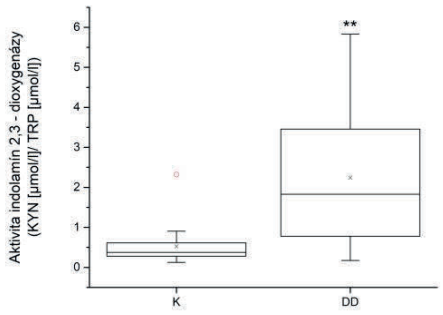
V práci sme experimentálne stanovili hladiny tryptofánu a kynurenínu v moči detských pacientov s depresívnym ochorením (DD, n = 20) a v moči zdravých dobrovoľníkov (K, n = 20). U detských pacientov sa uprednostňuje neinvazívne vyšetrovanie, medzi ktoré patrí vyšetrenie moču.

Metabolity sme stanovili pomocou vysoko - účinnej kvapalinovej chromatografie. Tryptofán bol stanovený fluorescenčnou detekciou pri excitačnej vlnovej dĺžke 280 nm a emisnej vlnovej dĺžke 370 nm a kynurenín absorpčnou detekciou (λ = 257 nm). Absolútne koncentrácie tryptofánu (μmol/l) a kynurenínu (μmol/l) sme normalizovali na koncentráciu kreatinínu (mmol/l).

Zistili sme signifikantne vyššiu aktivitu IDO v moči pacientov s depresívnym ochorením oproti zdravým dobrovoľníkom ($p < 0.01$) (Obr. 1). Taktiež sme zistili signifikantne nižšiu hladinu tryptofánu a vyššiu hladinu kynurenínu v moči pacientov s depresívnym ochorením oproti zdravým dobrovoľníkom (dáta nie sú zobrazené).

Znížená hladina tryptofánu môže byť spôsobená jeho rýchlejšou degradáciou kynurenínovou cestou, čo sme aj experimentálne pozorovali (zvýšený kynurenín). Znížená hladina môže následne ovplyvniť hladinu serotonínu, ktorý ovplyvňuje okrem iného aj náladu človeka.

Poďakovanie
Táto práca bola uskutočnená v rámci projektu VEGA 1/0703/13 a APVV – 15 – 0063.



Obr. 1 Krabicové diagramy porovnávajúce strednú hodnotu aktivity indolamín 2,3- dioxygenázy v moči pre kontrolnú skupinu (K, n = 20) a pre pacientov s depresívnym ochorením (DD, n = 20). **P < 0,01

Literatúra

[Dantzer, 2011] DANTZER, Robert, Jason C. O'CONNOR, Marcus A. LAWSON a Keith W. KELLEY, 2011. Inflammation-associated depression: From serotonin to kynurenine. *Psychoneuroendocrinology*. 2011, roč. 36, č. 3, s. 426–436. ISSN 03064530.

[Vaváková et al., 2015] VAVÁKOVÁ, M., Zdeňka Ďuračková a Jana TREBATICKÁ, 2015. Markers of Oxidative Stress and Neuroprogression in Depression Disorder. *Oxidative Medicine and Cellular Longevity*. 2015, roč. 2015. ISSN 19420994.

* ilavska21@uniba.sk
‡ morvova2@uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 90–100
ISBN 978-8081470882, © 2018 Ondrej Štefík

Automatická tvorba polygonálneho modelu miest z databázy VIIRS programom Polygon Maker

Ondrej Štefík[1]*
Školiteľ: Miroslav Kocifaj[2‡]

[1] KEF, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2] ICA, SAV, 843 05 Bratislava

Abstrakt

Pre potreby modelovania svetelného znečistenia v okolí miest je potrebné vytvoriť model mesta ako zdroja svetla. Napríklad simulátor svetelného znečistenia SkyGlow[1] používa model mesta v tvare polygónu vyžarujúceho do horného polpriestoru ako plošný zdroj.
Program PolygonMaker vznikol z potreby získať model miest v podobe uzavretých polygónov čo možno najjednoduchším spôsobom. Ako primárny zdroj informácií o vyžarovaní mesta sa využíva databáza VIIRS[2,3]. Program analyzuje nočné snímky VIIRS, poloautomaticky nájde polygón ohraničujúci mesto a vygeneruje model mesta v požadovanej štruktúre.
Kľúčové slová: intenzita svetla, polygón, mesto, algoritmus, interpolácia

1 Úvod

Polygonálny model mesta môžeme získať rôznymi spôsobmi. Bežnou možnosťou je označenie okraja mesta v programe „Google Earth“ uzavretou čiarou *„path“*. Napriek tomu, že máme software na konverziu *„path“* na polygonálny model mesta, samotné ohraničenie mesta je časovo veľmi náročné. Preto sme sa rozhodli napísať vlastný software, ktorý by tuto prácu uľahčil a urýchlil. Ako primárne údaje sme sa rozhodli využiť databázu VIIRS, čo sú v podstate nočné snímky povrchu Zeme na rôznych vlnových dĺžkach. My využijeme snímky so senzora DNB (viditeľne svetlo).

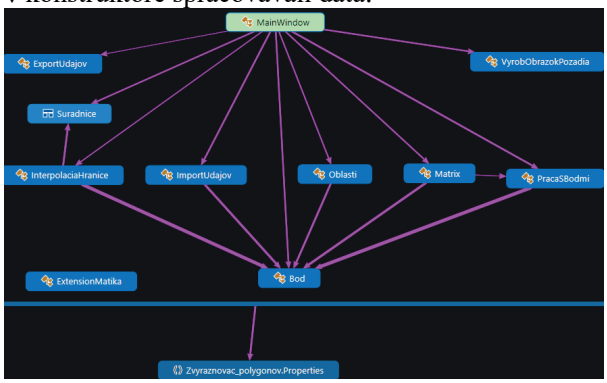
Práca s programom má niekoľko fáz:

- Načítanie údajov z VIIRS a zobrazenie svetelnej mapy na obrazovke počítača.
- Nastavenie prahovej úrovne jasu. Všetky pixeli s jasom vyšším ako prahová hodnota sa považujú za mesto
- Nájdenie ohraničujúcich bodov mesta (robí sa automaticky na základe bodu 2)
- Nastavenie limitu na minimálnu veľkosť miest
- Nastavenie „zriedenia“ obrysových bodov za účelom redukcie výsledných dát
- Vyexportovanie polygónu zvoleného mesta (miest)

„*Polygon Maker*“ je napísaný v programovacom jazyku C#, je pred kompilovaný a používať sa dá po krátkej inštalácii. Obsahuje 2 dátové zložky („*Data*“ a „Export“) v jednej je doporučené mať dáta z VIIRS[2,3] databázy („*Data*“) a do druhej sa vyexportované dáta ukladajú. Samozrejme, cieľ, kde sú dáta z VIIRS uložené, je možné zmeniť, a to výberom priečinka. Tak isto to platí aj pre export dát.

2 Prehľaď pojmov

Pár slov k štruktúre jednotlivých tried a ku štruktúre podkapitol v rámci kapitoly *„Polygon Maker“*. Hlavná metóda, ktorá sa spustí ako prvá pri inicializácii triedy je tzv. konštruktor, ktorý slúži vo väčšine prípadov na import dát do danej triedy na ich vnútorné ukladanie do vnútorných premenných triedy (vnútorné premenné sú vždy súkromné a na ich označovanie používame podčiarkovník „_“, ktorým vždy začíname ich názov) ako aj do verejných vlastností (rozdiel medzi vlastnosťou a premennou je okrem formy zápisu v tom, že vlastnosť, ktorá neodkazuje na žiadnu premennú má túto premennú implicitne zadefinovanú). Ďalej sme v niektorých prípadoch v konštruktore spúšťali aj niektoré funkcie či procedúry, ktoré už priamo v konštruktore spracovávali dáta.



Obrázok 1 – Mapa kódu vygenerovaná programom Visual Studio 2017 Enterpise edition

* stefik5@uniba.sk
‡ kocifaj@savba.sk

V texte používame termíny ako metóda, funkcia a procedúra, vo všeobecnosti je metóda všeobecný názov pre procedúry a funkcie, funkciami nazývame metódy, ktoré majú návratovú hodnotu (túto hodnotu potom uvádzame v zátvorke) a procedúrami nazývame metódy, ktoré majú vykonávaciu funkciu a sú bez návratovej hodnoty (v prípade procedúr v zátvorke uvádzame, že návratovou hodnotou je *„void“* a teda, že sú bez návratovej hodnoty).

Bola zvolená aj štruktúra tried, kedy sme nechceli, aby bol kód príliš zauzlený, vzájomnú interakciu kódu si môžeme pozrieť na obrázku nižšie.

Podľa obrázku 1 vidíme, že hlavná zobrazovacia a kontrolná trieda je *„MainWindow“*, ktorá je závislá prakticky od všetkých ostatných tried. Ďalej tu máme dve pomocné triedy, ktoré sú na ostatných nezávislé a to *„ExportUdajov“* a *„VyrobObrazokPozadia“*. Potom tu máme modelové triedy, ako je trieda *„Bod“* a štruktúra (struct) *„Suradnice“*, ktoré sú používané ostatnými triedami. A v neposlednej rade tu máme vykonávacie triedy, ktoré sú závislé od modelových tried ale zároveň vykonávajú prácu pre hlavnú triedu *„MainWindow“*.

3 Štruktúra vstupných dát

Dáta, ktoré sme potrebovali spracovávať pochádzajú z databázy VIIRS, odkiaľ boli vyextrahované vo formáte DSV pomocou iného programu od iného člena projektového tímu. Dátové kategórie v tomto formáte sú oddelené oddeľujúcim znakom, v našom prípade ide o niekoľko medzier (tabulátor). Jednotlivé stĺpce sú v poradí zemepisná šírka, zemepisná dĺžka a intenzita svetla v danom bode. Príklad výstupu dát z databázy VIIRS je na obrázku 2.

Tieto dáta je nutne spracovať a importovať do programu. Na toto vznikla trieda *„ImportUdajov“*.

9	32.375652	-111.172790	1.377492e-009
10	32.372833	-111.180275	1.282368e-009
11	32.366055	-111.181500	1.383891e-009
12	32.359276	-111.182724	3.638194e-009
13	32.352493	-111.183930	2.812018e-009
14	32.345720	-111.185170	1.948777e-009
15	32.401665	-111.159584	2.218689e-009
16	32.394894	-111.160840	1.643937e-009
17	32.388123	-111.162110	1.331623e-009
18	32.381350	-111.163360	1.218103e-009
19	32.374573	-111.164610	4.444173e-009
20	32.371723	-111.172100	1.460267e-009
21	32.364944	-111.173325	1.165339e-009

Obrázok 2 – Dáta z databázy VIIRS

4 Načítanie dát – trieda *„ImportUdajov“*

Táto trieda vznikla na účely načítania dát zo vstupného dátového súboru. Tieto dáta potom vracia v podobe dátového objektu, zloženého z jednotlivých objektov inej triedy – *„Bod“*, kde každý reprezentuje jeden dátový riadok zo vstupného súboru.

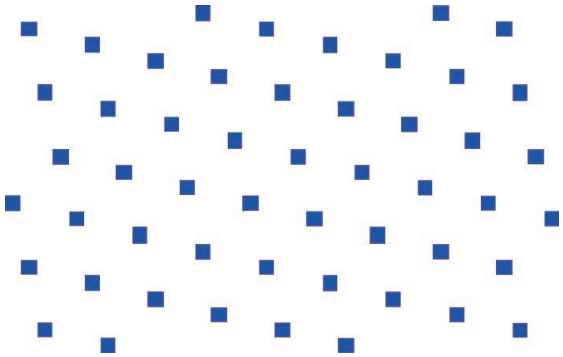
5 Model bodu – trieda *„Bod“*

Trieda *„Bod“* vznikla z potreby mať štruktúru, ktorá bude obsahovať všetky potrebné informácie o konkrétnom dátovom bode (riadku v dátovom súbore) a tiež všetky informácie, ktoré nám zjednodušia prácu s daným bodom, napríklad súradnice bodu (zemepisná dĺžka, zemepisná šírka), intenzita daného bodu, jeho meno, či informácia o jeho polohe.

6 Usporiadanie bodov do mriežky – trieda *„Matrix“*

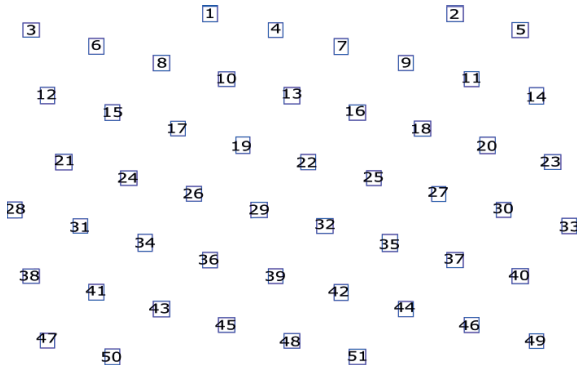
Po úspešnom importovaní údajov pomocou triedy *„ImportUdajov“* a vďaka využitiu triedy *„Bod“*, sa nám naskytla možnosť pracovať s každým jedným vytvoreným bodom. Ďalej sa nám naskytla príležitosť vykresliť získané dáta. Tieto dáta však nie sú vhodné na ďalšiu prácu, pretože predstavujú sústavu šikmých čiar (obrázok 3), spôsobené to bolo natočením satelitu pri získavaní dát. Preto je nutné dáta prepočítať do pravidelnej štvorcovej mriežky.

Ako nová štruktúra mriežky bola zvolená trieda *„Mriezka“* a na interpolovanie chýbajúcich bodov bola zvolená trieda *„InterpoláciaHranice“*.



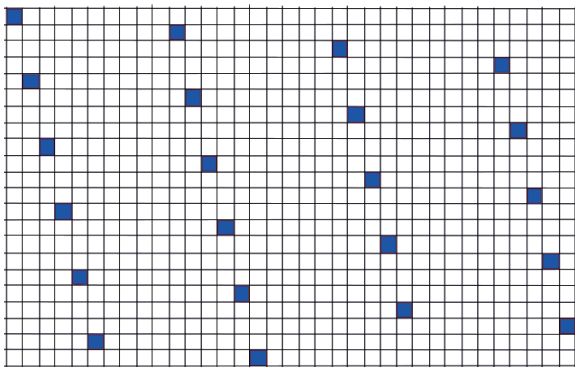
Obrázok 3 – Príklad rozloženia bodov v dátovom súbore VIIRS

Treba si však uvedomiť, že nie len rozloženie bodov, ale aj poradie, ktorým boli body zapísané do dátového súboru, hrá svoju rolu (pozri obrázok 4).



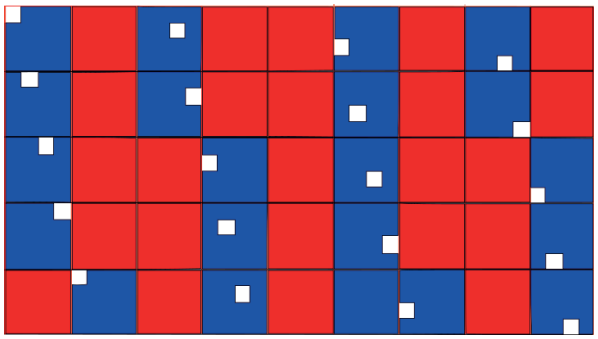
Obrázok 4 – VIIRS dáta s reprezentujúcim poradím, v ktorom by boli zapísané v dátovom súbore

Ako je z obrázkov 3 a 4 zrejmé, dáta musia byť poukladané do „rozumnej“ štruktúry, s ktorou sa nám bude ľahšie pracovať a zároveň ju budeme vždy presne poznať. Prvým krokom je usporiadanie týchto diskrétnych bodov do prechodnej mriežky (tzv. medzi-mriežky) a to tak, že každý bod sa nachádza na práve jednom riadku a jednom stĺpci, pričom počet riadkov sa rovná počtu stĺpcov a ten sa rovná počtu bodov. Na obrázku 5 je príklad takejto tzv. medzi-mriežky.



Obrázok 5 – Príklad usporiadania diskrétnych bodov do tzv. medzi-mriežky

Dáta z medzi-mriežky usporiadame do mriežky v triede *„Mriezka“*. Výslednú mriežku tvorí obrovský počet malých štvorcov. Je nutné nájsť správny rozmer týchto štvorcov, aby sa nestalo, že budú tieto štvorce príliš veľké, kedy by sa priveľa pôvodných bodov nachádzalo v jednom z týchto štvorcov. Avšak nesmú byť ani priveľmi malé, aby sa nestalo, že bude veľmi veľa prázdnych štvorcov medzi jednotlivými bodmi. Vtedy by sa totiž výsledky skreslili, lebo väčšina bodov by bola dopočítaná. Nakoniec sme zvolili takú metódu, pri ktorej sme mriežkovú konštantu našli ako najmenšiu vzdialenosť medzi dvoma bodmi na medzi-mriežke. A z tejto najmenšej vzdialenosti sme zobrali celočíselnú hodnotu.



Obrázok 6 – Reprezentuje konečnú mriežku, kde červené políčka sú interpolované body a modré políčka majú hodnoty pôvodných (bielych) bodov (Obrázok 5)

Na interpoláciu prázdnych miest sme použili metódu geometrického priemeru z už existujúcich (nenulových či medzi časom dopočítaných) bodov, s ktorými dopočítavaný bod priamo susedil. Takto sme prepočítali všetky body v smere zľava doprava a potom zdola na hor celkovo päťkrát. (Pri pokusoch sa ukázalo, že väčší počet iterácií nepriniesol ďalšie zásadné zlepšenie).

7 Pomocná trieda na prácu s dátami – trieda *„PracaSBodmi“*

Trieda *„PracaSBodmi“* je statickou triedou, ktorá slúži na rozšírenie možností práce s bodmi. Definujeme v nej statické metódy a aj tzv. *„Extension methods”* – ide o metódy, ktoré rozširujú možnosti jednotlivých tried.

8 Model súradníc – štruktúra *„Suradnice“*

Táto trieda vznikla ako model súradníc, ktorý sa používa v triede *„InterpolaciaHranice“*. Ide o malú štruktúru („*Struct*“), ktorý slúži hlavne na sprehľadnenie práce so súradnicami.

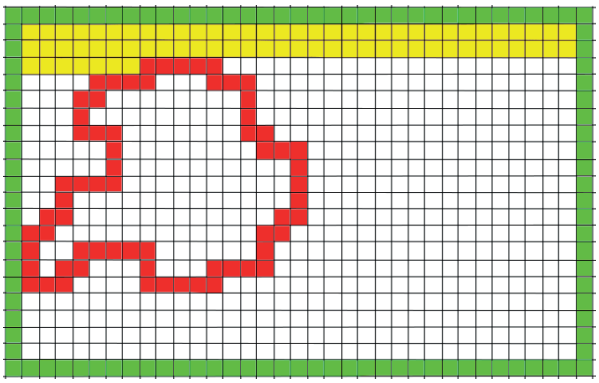
9 Zobrazovanie dát – trieda *„MainWindow“*

Trieda *„MainWindow“* je vyústením nášho prvého cieľa, a to vykreslenia dát získaných z databázy VIIRS. Dáta bolo nutné najprv získať v triede *„ImportUdajov“* následne bolo treba vytvoriť mriežku a v nej interpolovať chýbajúce dáta. Následne sme schopní tieto dáta zobraziť. Na zobrazovanie používame preddefinovaný typ projektu v Microsoft Visual Studio, a to WPF – windows presentation foundation. Ide o technológiu od Microsoftu používanú na vytváranie počítačových aplikácii s grafickým užívateľským rozhraním (GUI).

Tento projekt predstavuje prázdne okno, ktoré neobsahuje žiadne dáta, iba preddefinované udalosti (events), ktoré môžeme používať. Prvým krokom bolo vytvoriť plátno (canvas), na ktoré vykresľujeme naše dáta. V tomto okamihu sa ukázala potreba pretransformovať dáta z globálnych súradníc (zemepisná šírka, zemepisná dĺžka) na lokálne (vizuálne) súradnice. Táto transformácia bola vykonaná už v triede *„Matrix“*, aby sme mohli pracovať priamo z pretransformovanými súradnicami.

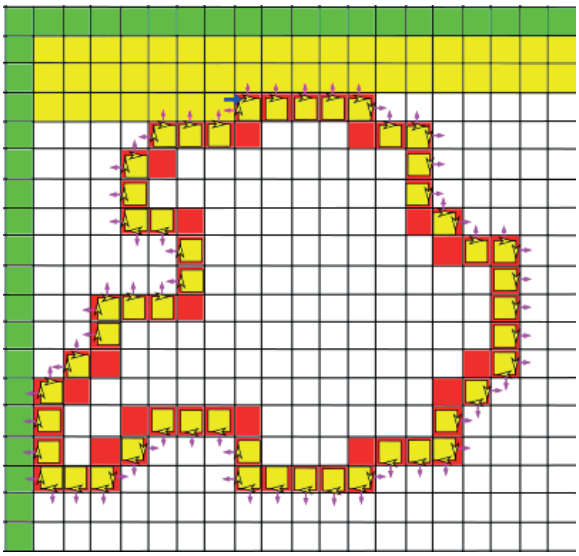
Vykresľovanie prebieha vytvorením plátna, na ktoré sa nanášajú miniatúrne štvorce, ktorých farba reprezentuje intenzitu svetla z databázy VIIRS vo forme 256 odtieňov žltej farby. Najprv zistíme minimálnu a maximálnu hodnotu intenzity svetla a následne tento interval rozdelíme na 256 dielikov logaritmickej stupnice (rozdiel v intenzitách bol cca 2-3 rády). Tento proces nanášania jednotlivých štvorcov je efektívny len pre malý počet štvorcov, na skúšobných dátach bolo omeškanie znesiteľné, vykresľovanie trvalo cca 10 sekúnd. Avšak pri reálnych dátach sa čas výpočtov rádovo predĺžil. Preto sme sa rozhodli prerobiť vykresľovanie tak, že sme v kóde generovali obrázok pixel po pixeli ako bitovú mapu a následne sme grafike poslali zobraziť celu bitovú mapu, na rozdiel od vykresľovania tisícky miniatúrnych obrázkov. Týmto postupom sme sa znova dokázali dostať do znesiteľných dôb vykresľovania obrázkov.

Po dokončení vykresľovania sa presúvame k druhému cieľu tohto programu, a to k vymedzeniu a následnému vykresleniu ohraničených oblasti s podobnou hodnotou svetelnej intenzity. Vykresľovanie uzavretých oblastí sme dosiahli zvolením pevnej hodnoty intenzity svetla, ktorá slúži ako hranica a hľadanie tejto hranice sme vykonávali metódou kráčania (obrázok 8 a text nižšie).



Obrázok 7 – mriežka, kde zelené body sú hranice mriežky, červené body sú hranice mesta a žlté body sú kroky

Ako vidíme na obrázku 7, kráčanie bolo vykonávané zhora nadol a zľava doprava (žlté štvorce).



Obrázok 8 – Ukážka kráčania po hranici plochy, fialové šípky reprezentujú pohľad vľavo, po úspešnom nájdení bodu ideme žltou šípkou, červené rohy sú miesta, kde sa algoritmus priamo presunul na ďalší bod, lebo tam nebolo možné mať neúspešný pohľad vľavo, lebo vľavo sa vždy nachádzal bod

Program kráčaním narazí na oblasť v bode, na ktorý smeruje modrá šípka (Obrázok 8). Keďže program kráča vždy zhora nadol a zľava doprava, tak poznáme vždy smer kroku v počiatočnom bode. Následne sa algoritmus pozrie vľavo (fialová šípka) a ak sa tam nenachádza bod, ktorý ma intenzitu vyššiu ako hraničná hodnota, tak je tento pohľad neúspešný a pozrie sa pred seba (tento náhľad na susediace body sa deje v smere hodinových ručičiek a začína vždy v smere naľavo od smeru kráčania). Ak sa pred aktuálnym bodom nachádza bod splňujúci podmienku, tak sa naň posunie (žltá šípka), ak nie, šípka by bola fialová a pozrel by sa vpravo. Ak aj tá šípka by bola fialová, tak by sa algoritmus pozrel späť. V prípade, že sa tento algoritmus zopakuje pre všetky (4) pohľady, tak je plocha reprezentovaná jediným bodom. V opačnom prípade tento algoritmus prebehne všetky body, až sa dostane do pôvodného bodu a v ňom sa algoritmus ukončí. Kráčanie sa ukončí, ak má niektorý bod rovnaké meno ako vstupný bod a ak sa z neho kráča rovnakým smerom. Toto pravidlo nám dovolí vytvoriť zoznam bodov, ktoré pri pospájaní vytvoria uzavretú krivku. Samozrejme, vždy, keď narazíme na oblasť, tak prebehneme už existujúce oblasti a porovnávame, či sa daný bod už nenachádza v nami nájdených oblastiach. Ak áno, pokračujeme ďalším krokom vpravo, ak nie, tak začneme kráčanie.

V prípade, že by sa nevyužíval postup kráčania po hranici ale kráčalo by sa len po bodoch ako takých (po centrách bodov – stredoch), tak by sa mohlo stať, že nedôjde k nájdeniu všetkých bodov tvoriacich

obvod danej plochy – mesta. Napríklad vyčnievajúci stĺpec bodov (šírky 1 bodu a dĺžky aspoň 2 body) z plochy by mohol spôsobiť zosypanie algoritmu, kedy by nedošlo k nájdeniu celej uzavretej krivky (z bodu „A“ do bodu „A“), ale iba k nájdeniu krivky začínajúcej v bode „A“ a končiacej v bode „B“ – vo vrchole tohto stĺpca.

Potom, ako sme boli schopní ohraničiť plochu s intenzitou väčšou ako hraničná hodnota, sme potrebovali zadefinovať, ako budeme túto hraničnú hodnotu určovať. Ukázalo sa, že najlepším riešením je rozdeliť interval medzi najnižšou intenzitou a najvyššou intenzitou na niekoľko rovnako veľkých dielikov, znova bolo využité logaritmické delenie. Touto cestou získal užívateľ programu možnosť nastaviť si primeranú hodnotu intenzity svetla, pre ktorú chce hľadať ohraničené plochy.

Posledný a zásadný cieľ programu je vygenerovať výsledné plochy do textového súboru tak, aby spĺňoval konkrétnu vopred danú štruktúru.

10 Transformácia z grafických súradníc – trieda *„InterpoláciaHranice“*

Pri vykresľovaní hranice sme používali nové súradnice – grafické súradnice. Tieto súradnice zodpovedali súradniciam plátna, ktoré sme použili na vykresľovanie, odtiaľ sme odvodili ich názov. Z tohto dôvodu sme mali zjednodušenú prácu s vykreslenými objektami a s vykresľovaním ako takým. Avšak pri spätnom exporte vybraných dát sme museli tieto dáta spätne prepočítať do svetových súradníc, v ktorých sme tieto dáta získali. Treba si uvedomiť, že časť dát, ktoré sa exportujú, je získaných interpoláciou geometrickým priemerom. To v dôsledku znamená, že poloha interpolovaných bodov v svetových súradniciach nie je zadefinovaná, a preto sa musí vypočítať (na rozdiel od pôvodných bodov, ktorých poloha sa dá spätne získať).

Vzorec na výpočet horizontálnej polohy interpolovaných bodov je obsiahnutý v premennej „$VypocetMriezkovejVzdialenostiSirka$“ a má nasledovný tvar:

$$\frac{maxDlzka - minDlzka}{_sirkaMrezoviny} \quad (1)$$

Vzorec na výpočet vertikálnej polohy interpolovaných bodov je obsiahnutý v premennej „$VypocetMriezkovejVzdialenostiDlzka$“ a má nasledovný tvar:

$$\frac{maxSirka - minSirka}{_sirkaMrezoviny} \quad (2)$$

Treba si uvedomiť, že *„maxSirka“* je zemepisná šírka bodu, ktorý sa nachádza najviac „vpravo“ teda má najväčšiu zemepisnú šírku a *„minSirka“* je zemepisná šírka bodu, ktorý sa nachádza najviac „vľavo“, teda má najmenšiu zemepisnú šírku. Analogicky to platí aj pre *„maxDlzka“* a *„minDlzka“*, kde sa berie do úvahy namiesto zemepisnej šírky zemepisná dĺžka. Posledný parameter vo vzorci je *„_sirkaMrezoviny“*, čo je počet bodov, ktoré tvoria šírku (dĺžku) matice – matica bola vytvorená ako štvorcová matica, aby sa dala pekne zobraziť, čo nám umožňuje toto vizuálne zjednodušenie využiť aj pri výpočtoch.

11 Vytváranie oblastí – trieda *„Oblast“*

Trieda *„Oblast“* slúži na vytváranie oblastí. Vo vnútri tejto triedy dochádza ku ohraničovaniu oblastí a zároveň je tu logická vrstva, ktorá zamedzuje vytváraniu oblastí, ktoré by boli vnorené do už existujúcich oblastí. Ďalej oblasti, ktoré tu vznikajú, sa na hranici mriežky uzatvárajú a produktom tejto triedy je zoznam všetkých oblastí, ktoré splňujú podmienku hraničnej intenzity svetla.

12 Vytváranie mapy svetelnej intenzity – trieda *„VyrobObrazokPozadia“*

Táto trieda vznikla pre potreby urýchliť vykresľovanie svetelnej mapy. Najprv sa používalo vykresľovanie nanášaním, kedy sa farebné štvorce nanášali po jednom na plátno. Tento spôsob bol však príliš zdĺhavý a náročný na výpočtový výkon. Tak sme sa rozhodli používať iný prístup, kedy sa generujú jednotlivé pixely tejto mapy a tie sa následne zašlú na vykreslenie na grafiku. Týmto prístupom prišlo k významnému zrýchleniu vykresľovania, lebo celé skladanie obrázku vytvára procesor, a naraz to zašle na vykreslenie grafike, na rozdiel od pôvodného postupu, kedy robí celý výpočet taktiež procesor, ale zasiela na grafiku jednotlivé štvorce, a tým vykresľuje konečnú mapu.

13 Exportovanie údajov – trieda *„ExportUdajov“*

Táto trieda je poslednou triedou, ktorá vznikla a jej účel je vyexportovať získané údaje z grafického rozhrania. Trieda bola navrhnutá tak, aby bola schopná vygenerovať konkrétny typ dátového súboru. Tento typ má názov *„*.cty“* a ide o textový súbor, v ktorom sú dáta zapisované v DSV štýle (Delimiter-separated values, príkladom je napríklad CSV formát – comma separated values, hodnoty sú v tomto prípade oddeľované čiarkami), ako dátový separátor sme využili medzery / tabulátor.

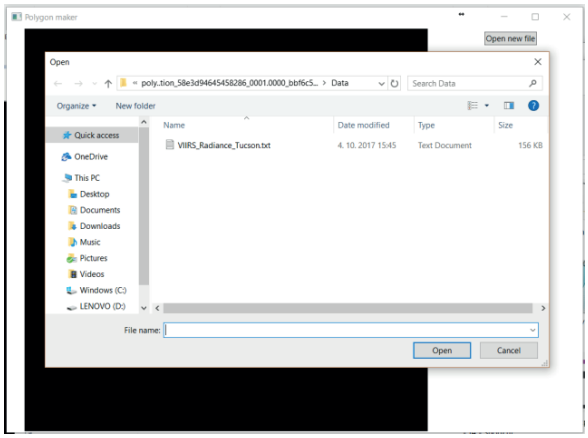
14 Popis programu a návod na jeho použitie

Program obsahuje inštalačný súbor – setup.exe, ktorý program automaticky nainštaluje. Dáta sú ukladané v užívateľskej zložke užívateľa, ktorý program nainštaloval.
Dáta si užívateľ môže exportovať a ukladať buď do preddefinovanej zložky alebo kamkoľvek inde chce. Rovnako to platí aj pre importované dáta.

Zložka v ktorej má „*Polygon Maker*“ preddefinované vyhľadávanie vstupných dát sa nazýva “*Data*” a tá, kde má nastavené prednastavené exportovania a následné ukladanie dát sa nazýva “*Exported*”. Po inštalácii sa nám na ploche zobrazí program. Spustime ho dvojklikom. Otvorí sa nám úvodne okno (obrázok 9).



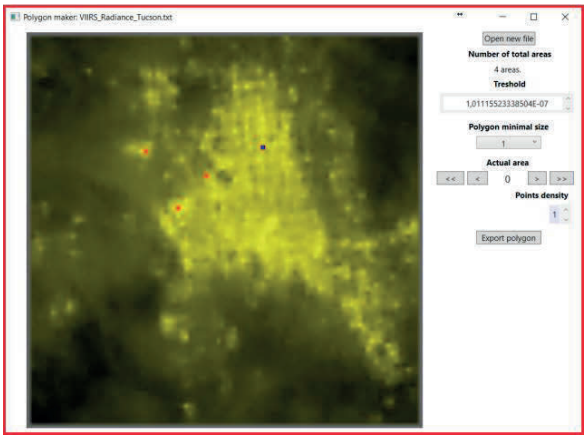
Obrázok 9 Úvodné zobrazenie pre „*Polygon Maker*“



Obrázok 10 Otvorenie nového vstupného dátového súboru

Po vybratí nového súboru cez “*Open new file*” sa objavíme v preddefinovanej zložke “*Data*”, odkiaľ si môžeme vybrať náš dátový súbor, alebo môžeme ísť do inej zložky (Obrázok 10).

Po otvorení súboru získame vizualizáciu dát. A predvolenú intenzitu svetla danej oblasti. Oblasti, ktoré budú túto intenzitu prevyšovať sa hneď ohraničia červenou hranicou. (Obrázok 11).



Obrázok 11 Vizualizácia vybraného dátového súboru

Jedna z plôch je hneď od začiatku zvolená. Zároveň vidíme, že na pravej strane v menu sa objavili nové tlačidlá.

14.1 Menu

- Tlačidlo “*Open new file*” načíta dáta z VIIRS databázy a zobrazí nám ich v Canvase. Pri načítaní dochádza k interpolácii chýbajúcich dát, aby sme mali peknú štvorcovú mriežku.

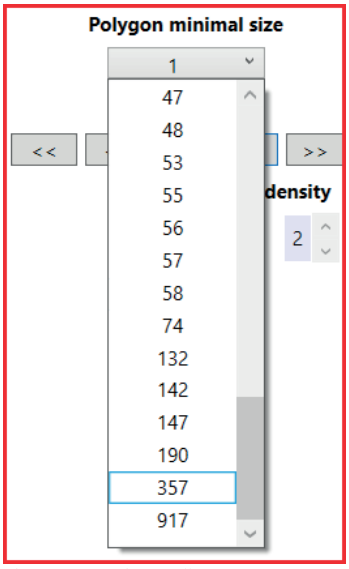


- Ďalej máme k dispozícii popisok “*Number of total areas*”, kde mame celkový počet nájdených plôch



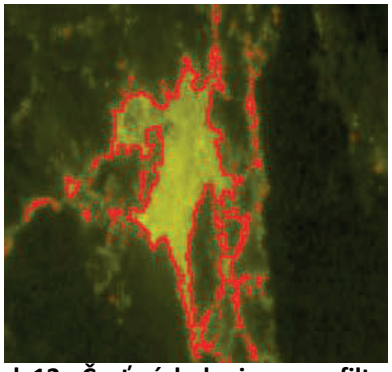
- “*Threshold*” určuje hraničnú intenzitu svetelného žiarenia, pričom na začiatku je nastavené na maximálnu hodnotu a šípkami si vieme nastaviť nižšiu intenzitu, čím získame viac ohraničených plôch ako aj väčšie plochy.



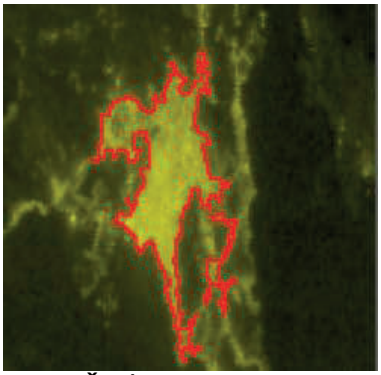


- Ďalej máme na výber "*Polygon minimal size*", ktorý slúži ako filter malých polygónov. Vieme si v ňom zvoliť minimálne množstvo bodov, od ktorého sa polygóny zvýraznia.

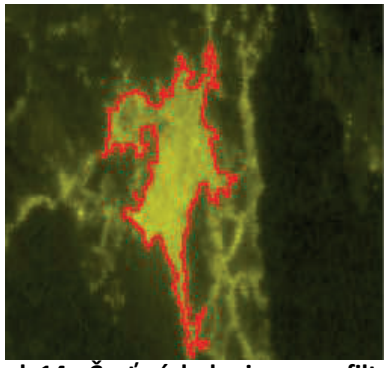
Pre lepšie vysvetlenie uvedieme príklad toho istého dátového modelu zobrazeného s filtrom 1 bod, s filtrom 141 bodov a s filtrom 587 bodov.



Obrázok 12 - Časť výslednej mapy s filtrom 1 bod



Obrázok 13 - Časť výslednej mapy s filtrom 141 bodov



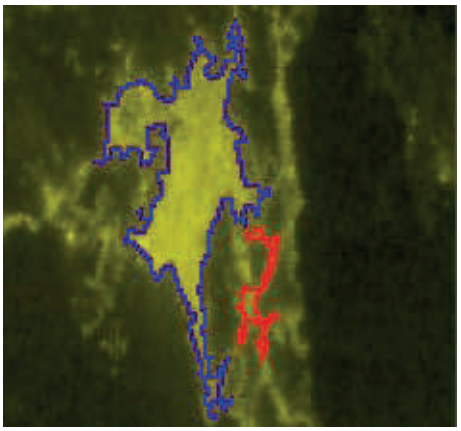
Obrázok 14 - Časť výslednej mapy s filtrom 587 bodov

Na obrázkoch 12 až 14, vyššie je jasne vidieť, že ako sa zvyšuje hodnota filtra, tak je pre užívateľa jednoduchšie rozpoznať plochu mesta, ktorú chce zvýrazniť.

- Nachádza sa tu ešte "*Actual area*" – ide o aktuálne zvolenú plochu. Zobrazuje sa nám tu aktuálne poradové číslo danej plochy. Po plochách sa môžeme presúvať stlačením „obyčajnej" šípky < , > alebo zrýchlene pomocou << , >>. Nie je to však nutné, keďže program vie zvoliť danú plochu aj tak, že dôjde ku kliknutiu do jej vnútra.



Nižšie uvádzame príklad zvýraznenej plochy z predchádzajúceho príkladu, pri rovnako zvolenom "*Threshold*"-e a filtri 141 bodov. (Obrázok 15)



Obrázok 15 - Časť výslednej mapy s filtrom 141 bodov – aktuálne zvolená

- Predposledná vec je "*Points density*", ktorou si môžeme prispôsobiť hustotu hraničných bodov.

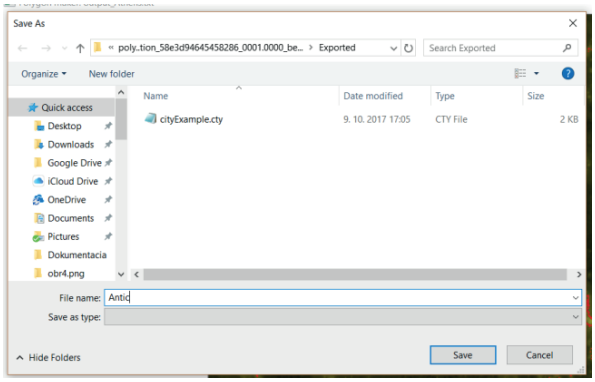


Číslo reprezentuje presný počet hraničných bodov, ktoré budú vyexportovane do finálneho dátového súboru.

- Posledná a najdôležitejšia vec je "*Export polygon*", čo je tlačidlo, slúžiace na exportovanie výsledného polygónu a to v tvare "*cityName.cty*".

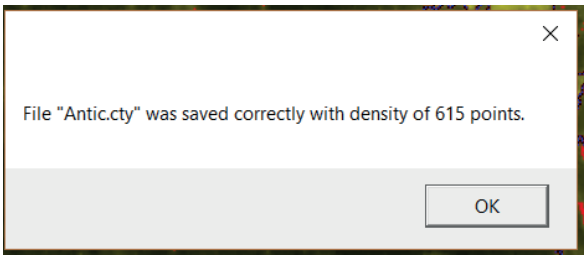


Po stlačení tlačidla „*Export polygon*" sa nám zobrazí ukladacie okno, kde si môžeme zvoliť vlastnú zložku. Alebo môžeme na ukladanie využiť priamo preddefinovanú cestu, pozri obrázok 16.



Obrázok 16 Dialóg pri ukladaní vyexportovaných dát

Následným pomenovaním súboru určime aj meno mesta, ktorého polygonálnu mapu sme vytvorili, pozri obrázok 17.

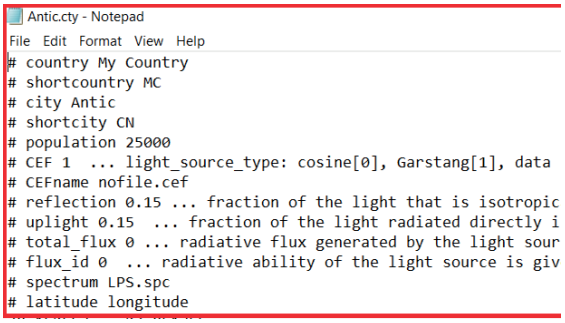


Obrázok 17 Popis po úspešnom uložení súboru

14.2 Štruktúra vyexportovaných dát

Vyexportovaný súbor má dve časti:

1. Hlavička (Metadáta) – jej tvar je zobrazený na obrázku 18.



Obrázok 18 Príklad metadát s bližšími informáciami, slúžiacimi na popísanie daného mesta

Vidíme, že „*Header*" obsahuje názov nášho mesta v riadku city a ďalšie dodatočné informácie, ktoré sú však v našom programe preddefinované a je vhodné, aby si ich užívateľ doplnil na základe svojich poznatkov o daných vstupných dátach.

2. Telo – je tvorené dátami získanými „*Polygon Makerom*". Príklad týchto dát sa nachádza na obrázku 19.

```
# latitude longitude
38,152557    23,851755
38,154243    23,850905
38,152153    23,857305
38,144707    23,858906
38,145886    23,863705
38,143797    23,870104
38,135715    23,874650
38,134570    23,883242
38,129020    23,873196
```

Obrázok 19 Príklad vyexportovaných dát získaných programom „*Polygon Maker*", ľavý stĺpec reprezentuje zemepisnú šírku a pravý stĺpec reprezentuje zemepisnú dĺžku jednotlivého bodu polygónu ohraničujúceho mesto

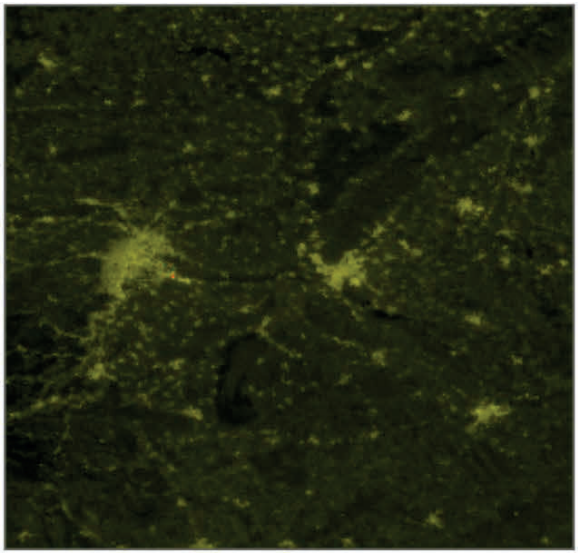
14.3 Ovládanie programu

- Otvoríme program "*Polygon maker*" a vyberieme "*Open new file*" – vyberieme dáta.
- Následne sa zobrazí vizualizácia dát s predvolenou plochou a hraničnou intenzitou.
- Nastavíme intenzitu svetla a na jej základe sa zobrazia ohraničenia plôch.
- Pomocou filtra zobrazíme len plochy, ktoré nás zaujímajú.
- Plochu vyberieme kliknutím do jej vnútra, či jej výberom pomocou softwarových šípok či pomocou šípok klávesnice vľavo alebo vpravo.
- Nastavením hustoty bodov hranice určime požadovaný počet hraničných bodov.
- Pomocou tlačidla "*Export polygon*" vyexportujeme výsledný „*.cty" súbor s hlavičkou a dátami.

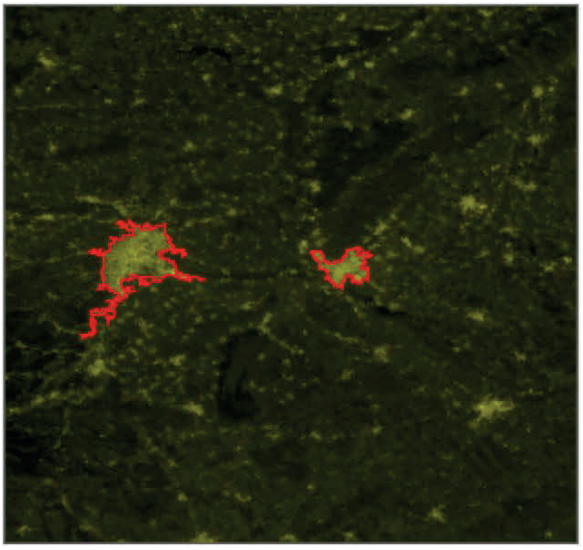
15 Ukážka reálnych dát získaných z databázy VIIRS pomocou „Polygon Makera“

Uvádzame dve oblasti, na ktorých sme testovali náš program.

15.1 Bratislava a Viedeň



Obrázok 20 – Oblasť rozprestierajúca sa cez západné Slovensko, východné Rakúsko a severo-západné Maďarsko. Centrom tejto oblasti je bod so zemepisnou dĺžkou 17.1097222 a zemepisnou šírkou 48.1438889. (Rozmery oblasti 200x120km)



Obrázok 21 – Oblasť rozprestierajúca sa cez západné Slovensko, východné Rakúsko a severo-západné Maďarsko. Zvýraznená hraničnou hodnotou intenzity svetla 7.41766 * 10^{-9}. Pričom bol nastavený filter pre 141 plus bodov hranice, čím sme dosiahli, že vidíme len 2 mestá a to Viedeň vľavo a Bratislavu vpravo.

Z obrázka 20 vidíme jasne žiariace oblasti Viedne a Bratislavy, plus ešte nejaké ďalšie menšie mestá. V „*Polygon Makeri*“ si zvolíme konkrétnu hodnotu svetelnej intenzity.

Vidíme, že pri správnom zvolení hraničnej hodnoty intenzity svetla sme boli schopní vyznačiť na svetelnej mape ako Viedeň, tak aj Bratislavu a následne by sme boli schopní postupne vygenerovať „*cty*“ súbor pre každé z týchto miest. (Obrázok 21)

Treba ešte dodať, že „*Polygon maker*“ vyrába štvorcovú mriežku, teda, ak vstupné dáta nebudú mať tvar štvorca, tak vykresľovanie bude deformované. V tomto prípade je pomer výšky ku šírke 200:120.

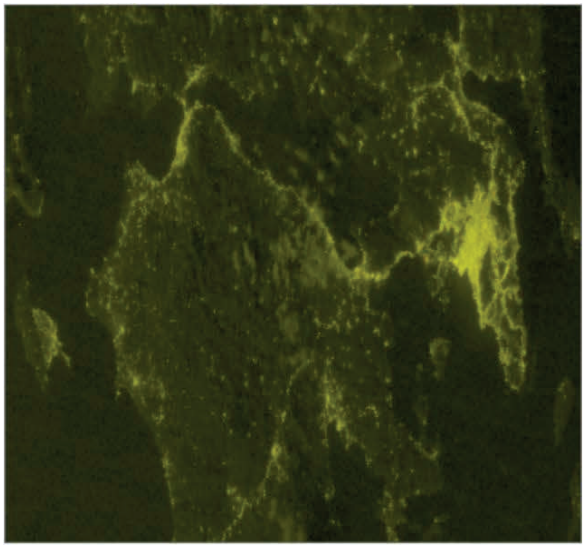
15.2 Grécko

Ďalšiu oblasť, ktorú sme mali k dispozícii je oblasť južného Grécka, nachádzajú sa tu napríklad Atény.

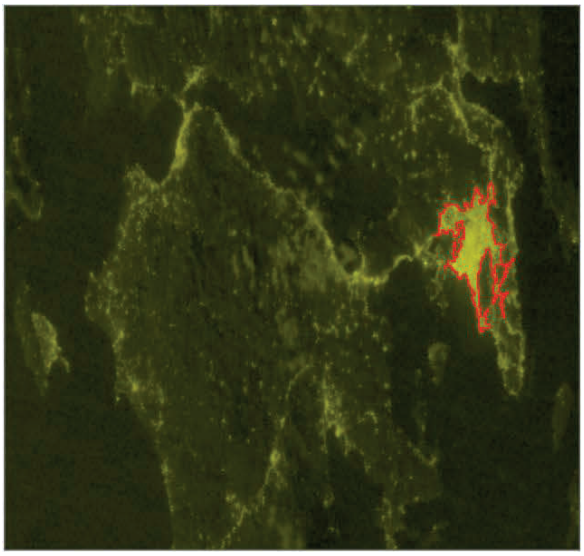
Ale táto oblasť sa odlišuje aj tým, že sa tu nachádzajú moria, čiže oblasti s veľmi nízkou absolútnou hodnotou intenzity svetla.

Ďalej táto oblasť nemá vôbec štvorcový tvar, čiže vizuálne dáta budú pomerne deformované. Keďže pomer strán (výška : šírka) je 140:420.

Obrázok 22 reprezentuje výslednú svetelnú mapu bez zvýraznených miest. Obrázok 23 reprezentuje výslednú svetelnú mapu so zvýraznenými Aténami.



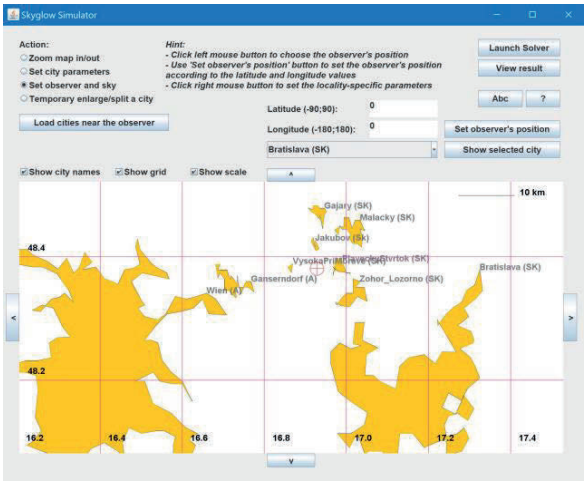
Obrázok 22 – Oblasť rozprestierajúca sa cez Grécky polostrov. Centrom tejto oblasti je bod so zemepisnou dĺžkou 23.7997222 a zemepisnou šírkou 37.9327778. (Rozmery oblasti 420x140km)



Obrázok 23 – Oblasť rozprestierajúca sa cez Grécky polostrov. Zvýraznená hraničnou hodnotou intenzity svetla $9.992256*10^{-9}$. Pričom bol nastavený filter pre 810 plus bodov hranice, čím sme dosiahli, že vidíme len jediný objekt a to Atény.

16 Príklad využitia a vizualizácie dát z databázy VIIRS získaných programom Polygon Maker

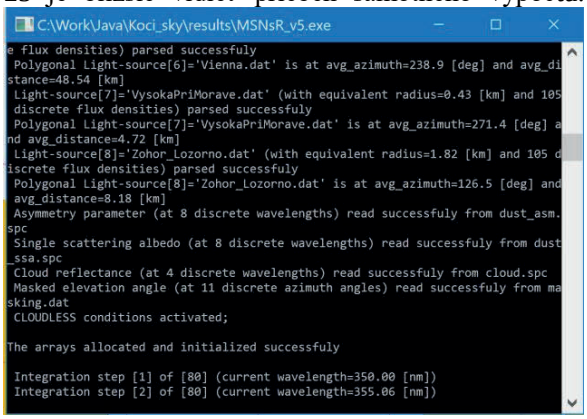
Dáta získané programom Polygon maker môžu byť využité napríklad programom SkyGlow[1]. Tento program slúži na výpočet svetelného znečistenia v ľubovoľnej lokalite za rôznych atmosférických podmienok.



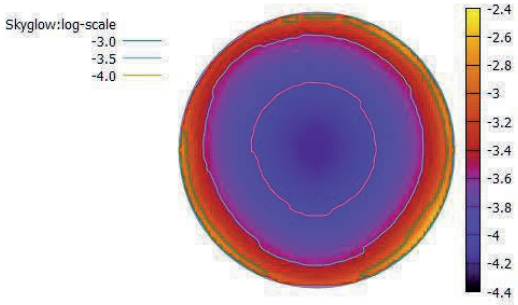
Obrázok 24 – Miesto označené krížikom je umiestnenie virtuálneho pozorovacieho zariadenia – v blízkosti Vysokej na Morave. Z obrázku je zrejmé, že pre výpočet boli použité aj ďalšie mestá: Viedeň, Bratislava, Ganserndorf, Plavecký Štvrtok, Zohor, Lozorno, Gajary a Vysoká na Morave.

Ako vstupné parametre slúžia informácie o zdroji svetla (meste), teda geometria (získaná programom Polygon maker), celková intenzita (odhadnutá z počtu obyvateľov), vyžarovacia funkcia (použitý jeden zo známych modelov). Výpočet vykonávame pre vlnové dĺžky podľa potreby. Príklad vstupného rozhrania programu SkyGlow[1] je na obrázku 24.

Na obrázku 24 vidíme model pre výpočet svetelného znečistenia v okolí Vysokej pri Morave, pričom do úvahy boli zobrané najbližšie menšie mestá a tiež Viedeň a Bratislava, ktoré by taktiež mohli ovplyvňovať svetelné znečistenie. Na obrázku 25 je bližšie vidieť priebeh samotného výpočtu.

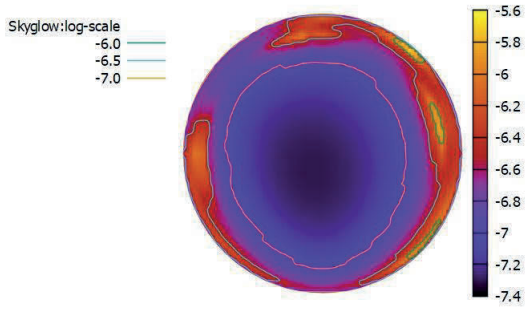


Obrázok 25 – Priebeh výpočtu svetelného znečistenia v okolí Vysokej pri Morave. Vo výpise vidno napríklad zoznam vstupných svetelných zdrojov (miest) a ich vzdialeností od miesta, v ktorom dochádza k výpočtu



Obrázok 26 – Výsledok výpočtu programom SkyGlow[1] pre okolie Vysokej pri Morave pri jasnej oblohe. Obrázok reprezentuje jas oblohy v skotopickom videní (jednotka cd/m^2 v logaritmickej škále).

Výsledky výpočtu uvádzame vo forme grafov (obrázky 26 a 27). Graf na obrázku 26 reprezentuje výsledky výpočtu programom SkyGlow[1] pre jasnú oblohu v okolí Vysokej na Morave. Graf na obrázku 27 reprezentuje výsledky výpočtu programom SkyGlow[1] v okolí Vysokej pri Morave pre zamračenú oblohu.



Obrázok 27 – Výsledok výpočtu programom SkyGlow[1] pre okolie Vysokej pri Morave pri zamračenej oblohe. Výsledkom je žiara oblohy (v jednotkách W/m²/srad v logaritmickej škále) pre vlnové dĺžky v rozmedzí 600-610nm (žltá farba typická pre vysokotlakové sodíkové výbojky pouličného osvetlenia) – ide o oveľa užší interval vlnových dĺžok ako v prípade skotopického videnia.

Na obrázku 26 vidíme, aké svetelné znečistenie vníma človek. V zenite je hodnota cca 0,0001 cd/m2, čo je na prímestské pomery pomerne tmavá obloha a tento údaj sa dobre zhoduje s reálnymi hodnotami pre túto lokalitu.

Graf z obrázku 27 bol vytvorený pre rozsah vlnových dĺžok 600nm až 610nm. Zdôvodnenie je, že toto rozmedzie vlnových dĺžok zodpovedá oblasti, kde majú veľké vyžarovanie vysokotlakové sodíkové výbojky (žlté pouličné osvetlenie). Obrázok 27 teda ilustruje, ktorá časť zamračenej oblohy je presvetlená od pouličného osvetlenia.

Priame porovnanie výsledkov na obrázkoch 26 a 27 nie je možné, keďže do výpočtu je zahrnutý iný interval vlnových dĺžok a aj jednotky sú iné. Vo všeobecnosti má zamračená obloha rádovo vyšší jas než jasná obloha.

Poďakovanie

Chcel by som poďakovať Františkovi Kundracikovi, že mi dal podnet a možnosť venovať sa tejto téme. Ďalej mu ďakujem za všetky rady, ktoré mi poskytol, a za jeho priebežné pripomienky a nápady na vylepšenie tohoto programu. Ďalej chcem poďakovať môjmu školiteľovi Miroslavovi Kocifajovi, že mi dal možnosť sa zapojiť do projektu APVV-14-0017, z ktorého bola moja práca podporená a vďaka ktorému sa mi naskytla príležitosť pracovať na programe PolygonMaker a tak urýchliť generovanie polygonálnych modelov miest, ktoré budú následne použité v ďalších fázach riešenia projektu.

Literatúra

[1] Kocifaj M. (2007). Light-pollution model for cloudy and cloudless night skies with ground-based light sources. Applied optics, 46(15), 3013-3022, https://doi.org/10.1364/AO.46.003013

[2] Visible Infrared Imaging Radiometer Suite (VIIRS).On-line:https://ncc.nesdis.noaa.gov/VIIRS/

[3] Cao, C et al. (2014). Early On-orbit Perfor-mance of the Visible Infrared Imaging Radiometer Suite (VIIRS) onboard the Suomi National Polar-orbiting Partnership (S-NPP) Satellite. IEEE Trans. on Geosci. and Remote Sens., 52(2), 1142 – 1156. DOI: 10.1109/TGRS.2013.2247768.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 101–105
ISBN 978-8081470882, © 2018 Viktor Šroba

Vplyv nízkoteplotnej atmosférickej plazmy na vlastnosti mungo fazule

Viktor Šroba[1]*
Školiteľ: Veronika Medvecká[1‡]

[1] Katedra experimentálnej fyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

So zvyšovaním sa populácie rastie dopyt po zabezpečení vyššej produkcie potravín. Zlepšovanie vlastností osív (klíčivosti, rýchlosti rastu, zvyšovanie produkcie a lepšia prispôsobivosť na nehostinnejšie podmienky) je cieľom poľnohospodárstva pri pestovaní obilnín, strukovín a iných hospodársky významných rastlín. Jednou z metód, ktorou sa dá toto dosiahnuť, je opracovanie povrchu obilnín a strukovín plazmou. Úlohou tejto práce je preskúmať vplyv nízkoteplotnej plazmy na vlastnosti povrchu mungo fazule (*Vigna radiata*). Pri experimentoch sa použila nízkoteplotná plazma generovaná tzv. Difúznym koplanárnym povrchovým bariérovým výbojom v laboratórnom vzduchu. Skúmané boli zmeny kontaktného uhla vody na povrchu, imbibície, klíčivosti, morfológie povrchu a chemických väzieb na povrchu. Merania boli uskutočnené ako na referenčných vzorkách, tak aj na vzorkách s rôznymi časmi expozície v plazme.

Kľúčové slová: mungo, DCSBD, kontaktný uhol, imbibícia, klíčivosť, FTIR, SEM

1 Úvod

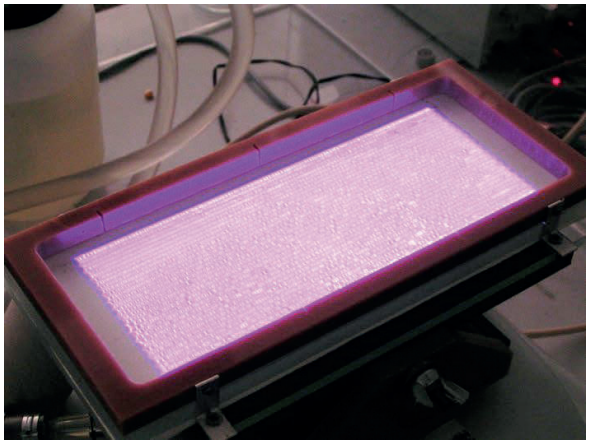
V poslednej dobe sa zvyšuje dopyt po klíčených strukovinách hlavne kvôli ich vysokému obsahu proteínov. Mungo fazule sú primárne používané na konzumáciu ako klíčky. Fazule mungo sa ošetrujú jedine pomocou pesticídov na zabránenie napadnutia chorobami. Použitie nízkoteplotnej plazmy v minulosti preukázalo pozitívny vplyv na biologický materiál. Naskytá sa aj možnosť opracovania strukovín pomocou nízkoteplotnej plazmy za účelom dekontaminácie a zlepšenia klíčivosti rôznych typov osív [Bormashenko et al., 2012]. Nízkoteplotná plazma bola napríklad použitá na inhibíciu patogénnych baktérií na povrchu čierneho korenia. Toto opracovanie v atmosférickom tlaku preukázalo významné zredukovanie kolónie baktérií na povrchu korenín [S. Mošovská et al. 2018]. Pri opracovaní semien plazmou sa znížilo percento infekcií na povrchu pod 1%, bez zníženia klíčivosti pod komerčných 85% [M. Selcuk et al., 2008]. Takisto bola nízkoteplotná plazma použitá na opracovanie sóje, šošovice, fazule a iných strukovín. Bolo pozorované zníženie kontaktného uhla ako aj zlepšenie imbibície [Juraj Surovčík, 2016]. V našom experimente sme použili tzv. Difúzny koplanárny povrchový bariérový výboj na opracovanie mungo fazúľ. Tento výboj je nízkoteplotný a operuje za atmosférického tlaku, vďaka čomu nenastáva poškodenie povrchu fazúľ kvôli vysokej teplote alebo nízkemu tlaku [M. Černák et al., 2011]. V práci sa zaoberáme vlastnosťami povrchu súvisiacimi so zmáčavosťou povrchu, absorpciu vody a takisto aj samotnej klíčivosti. Ďalej sme skúmali aj zmeny morfológie a chemických väzieb na povrchu.

2 Experiment

2.1 Difúzny koplanárny povrchový bariérový výboj (DCSBD)

Na opracovanie fazúľ bol použitý Difúzny koplanárny povrchový bariérový výboj (DCSBD). DCSBD generuje nízkoteplotnú difúznu plazmu pri atmosférickom tlaku. Systém pozostáva z dvoch hrebeňových elektród uložených na jednej strane keramickej platne na báze Al_2O_3. Generovaná je tenká vrstva plazmy na povrchu tvorená veľkým množstvom mikrovýbojov, ktoré sú rovnobežné s povrchom keramiky, vďaka čomu nenastáva tzv. pinholing, poškodzujúci materiál. Počet mikrovýbojov v tvare H rastie so zvyšujúcim sa príkonom. Pri dostatočne veľkom príkone sa plazma začne javiť ako makroskopicky homogénna, vďaka čomu je opracovanie povrchu rovnomernejšie. Opracovanie prebiehalo pri príkone plazmy 400W, ktorý vytvára dostatočne uniformnú vrstvu plazmy.

* viktor.sroba@gmail.com
‡ veronika.medvecka@fmph.uniba.sk



Obrázok 1: Plazma generovaná pomocou DCSBD

2.2 Kontaktný uhol

Jednou z techník na pozorovanie zmien zmáčavosti povrchu mungo fazúľ je meranie kontaktného uhla destilovanej vody na povrchu fazule. Kvapka o objeme 2µl, bola kvapnutá na povrch fazule a bol odmeraný uhol na rozhraní vody, povrchu fazule a vzduchu. Pre každé meranie bolo získaných min. 10 hodnôt kontaktných uhlov, ktoré boli štatisticky spracované. Na meranie kontaktného uhla bol použitý prístroj Drop Shape Analyzer DSA30 (Krüss GmbH, Hamburg, Germany).

2.3 Imbibícia

Imbibícia vody referenčných a opracovaných fazúľ plazmou bola určená meraním hmotnosti fazúľ (približne 10g pred namočením) a nasatej vody v intervaloch 30 minút počas prvých 6 hodín a potom po 24-och hodinách. Počas merania sú fazule ponorené vo vode, pred vážením sú scedené a dôkladne osušené. Testu boli podrobené referenčné vzorky, vzorky opracované 60 s a 180 s.

2.4 Klíčivosť

Určenie klíčivosti fazúľ bolo merané po troch dňoch. 25 kusov mungo fazúľ referenčnej vzorky a vzoriek s časmi expozície 15, 30, 60 a 180 sekúnd boli uložené na dva kusy filtračného papiera na Petriho misky a každý deň zaliate 5 ml vody. Po troch dňoch sa pre každý čas expozície spočítali vyklíčené fazule (s dĺžkou klíčku viac ako 1 cm) a celkový počet vzoriek pre daný čas. Meranie bolo realizované paralelne dvakrát.

2.5 Fourierovská infračervená spektroskopia (FTIR)

FTIR je metóda používajúca sa na určenie chemických skupín a väzieb na povrchu meranej vzorky. Použitá bola metóda jednorazového odrazu (single ATR). Meranie bolo realizované pomocou spektrometra Bruker Vector 22 FTIR s príslušenstvom Pike MIRacleTM rozsahu 4000-500 cm^{-1} pri parametroch 20 scanov a rozlíšení 4 cm^{-1}. FTIR sme použili ako na referenčnú vzorku, tak aj na vzorky s časom opracovania 60 a 180 s.

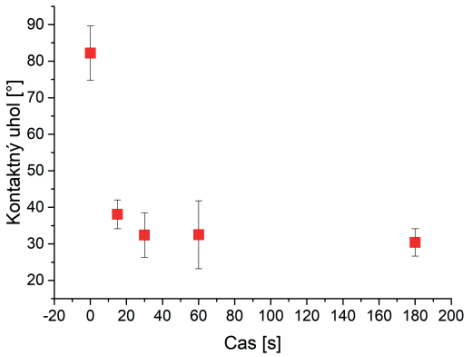
2.6 Elektrónový mikroskop (SEM)

Elektrónový mikroskop (SEM) je prístroj používaný na skúmanie štruktúr príliš malých na pozorovanie pomocou viditeľného svetla. Funguje na princípe interakcie elektrónového lúča s povrchom vzorky. Na skenovanie bol použitý prístroj Vega II SBH (Tescan, CZ).

3 Výsledky

3.1 Meranie kontaktného uhla

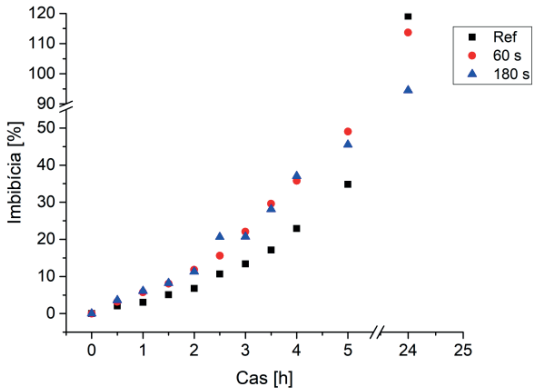
Obrázok 2 zobrazuje zmenu kontaktného uhla kvapky destilovanej vody na povrchu fazule pri rôznych meraných časoch opracovania plazmou. Opracovanie plazmou výrazne znížilo kontaktný uhol. Už po čase expozície 15 s sa kontaktný uhol znížil na polovicu v porovnaní s referenčnou vzorkou. S rastúcim časom expozície sa však už kontaktný uhol ustálil a výrazne sa nemenil.



Obrázok 2: Graf závislosti kontaktného uhla od doby opracovania mungo fazúľ plazmou

3.2 Imbibícia

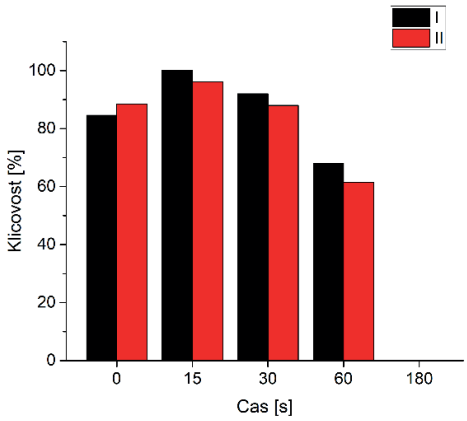
Pre vzorky s časom expozície 60 a 180 s je imbibícia vyššia, ako vyplýva z obrázka 3. Už bezprostredne po opracovaní a počas celého experimentu bola do 1,5 h imbibícia vzoriek vystavených plazme takmer totožná ale stále vyššia ako pri referenčných vzorkách. V nasledujúcich časoch sa imbibícia pre rôzne doby expozície líšila. Avšak po 24h bola imbibícia pre referenčnú vzorku vyššia ako pre obe opracované vzorky. Imbibícia pre vzorky opracované 180 s bola výraznejšie nižšia od referenčnej ako pre vzorku vstavenú plazme 60 s.



Obrázok 3: Graf závislosti imbibície od času opracovania

3.3 Klíčivosť

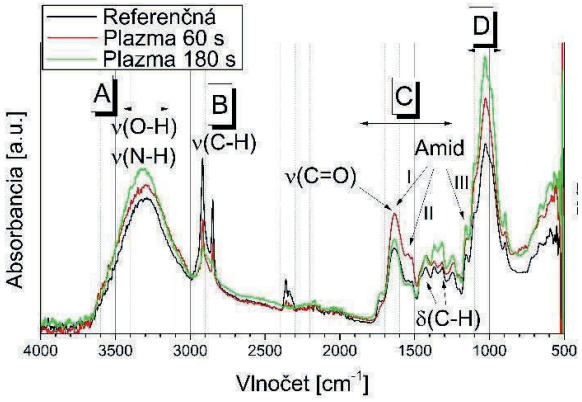
Pri určení klíčivosti sme vykonali dva paralelné experimenty (I a II). Obrázok 4 zobrazuje, že v oboch experimentoch sa pre opracovanie 15 a 30 sekúnd klíčivosť zvýšila oproti referenčnej vzorke. Pre dobu opracovania 15 s bola klíčivosť v experimente I dokonca 100 %. Pre dobu opracovania 60 s je klíčivosť porovnateľná s referenčnou a následne pre dobu opracovania 180 s bola klíčivosť nulová.



Obrázok 4: Graf závislosti klíčivosti od doby opracovania

3.4 FTIR

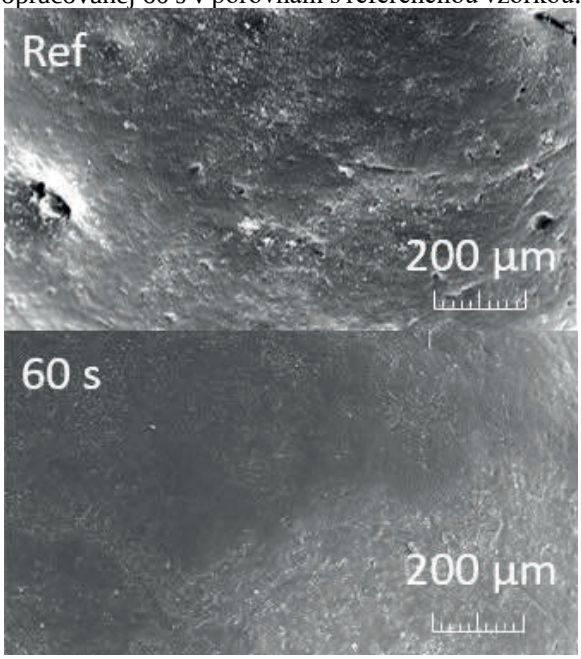
U biologického materiálu sa na povrchu zväčša vyskytujú väzby typické pre polysacharidy, proteíny a lipidy. Na obrázku 5 pás A naznačuje výskyt valenčných vibrácií O-H väzby (prevažne voda) a N-H väzby (amid IV). V tejto oblasti sú pozorované zmeny zväčšujúce sa so zvyšujúcim sa časom opracovania. V páse B sa nachádzajú symetrické a asymetrické valenčné vibrácie C-H väzby najmä prítomnej v CH_2. Tu vidíme výrazný pokles pri opracovaných vzorkách v porovnaní s referenčnou vzorkou. Pre vzorky opracované 180 s je tento pokles ešte výraznejší. Tento pokles môže indikovať odstránenie lipidovej vrstvy, čo môže byť zodpovedné za zníženie kontaktného uhla po opracovaní. Široký pás C zahŕňa väzby typické pre proteíny ako aj deformácie väzieb O-H a C-H. Vyskytujú sa tam amidové väzby I (C=O), II a III a deformácie väzieb N-H a C-N. Pás D naznačuje výskyt glykozidovej väzby (O-C-O), typickej pre polysacharidy. Po opracovaní 60 s a viac pre 180 s pozorujeme jej zvýšenie pravdepodobne zapríčinené odstránením lipidovej vrstvy.



Obrázok 5: FTIR spektrá prislúchajúce neopracovanej fazuli mungo a po opracovaní 60 s, a 180 s

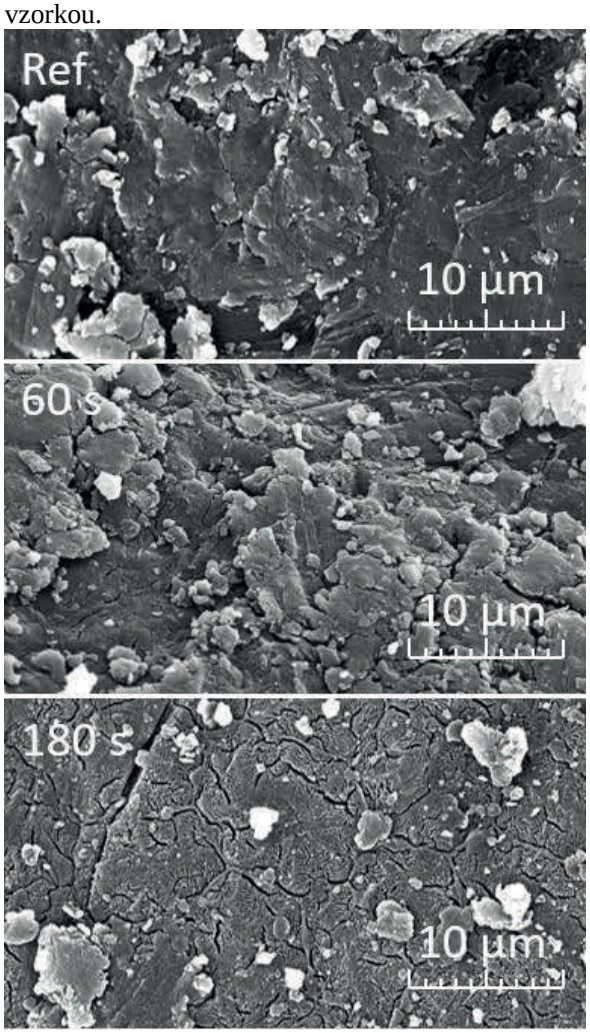
3.5 SEM

Pomocou elektrónového mikroskopu sme zhotovili snímky fazúľ po rôznych časoch opracovania plazmou, ktoré boli následne porovnané. Na obrázku 6 je možné pozorovať vyhladenie povrchu vzorky opracovanej 60 s v porovnaní s referenčnou vzorkou.



Obrázok 6: Referenčná vzorka mungo fazule a vzorka opracovaná 60 s

Z obrázka 7 je zrejmé, že povrch vzorky s dobou opracovania 180 s bol poškodený v porovnaní s referenčnou vzorkou na obrázku 8 a opracovanou 60 s. Toto poškodenie môže zapríčiňovať pozorovanú drasticky zníženú klíčivosť fazúľ opracovaných 180 s. Takisto pre vzorku opracovanú 60 s je vidieť vznik prasklín na povrchu v porovnaní s referenčnou vzorkou.



Obrázok 7: Referenčná vzorka mungo fazule, vzorka opracovaná 60 s a 180 s

4 Diskusia

Na základe experimentálnych výsledkov sme zistili, že DCSBD vplýva na povrchové vlastnosti fazule mungo (*Vigna radiata*). Kontaktný uhol sa opracovaním výrazne znížil čím sa zvýšila zmáčavosť povrchu fazúľ. So zvyšujúcim sa časom opracovania už zmena nebola taká výrazná. Z merania počas piatich hodín sme zistili, že s opracovaním taktiež rastie imbibícia fazúľ. Po 24 hodinách bola však imbibícia referenčnej vzorky vyššia v porovnaní s opracovanými vzorkami. Pri meraní klíčivosti sme z dvoch experimentov zistili že klíčivosť fazúľ opracovaných 15 s a 30 s bola vyššia v porovnaní s referenčnou vzorkou a pri jednom experimente s dobou opracovania 15 s bola klíčivosť dokonca 100%. Ďalej bola klíčivosť pre vzorky opracované 60 s porovnateľná s referenčnou vzorkou a pre vzorky opracované 180 s bola klíčivosť nulová. Z FTIR sme zistili nárast O-H a N-H väzieb na povrchu opracovaných vzoriek. Ďalej sme pozorovali pokles C-H väzieb, pravdepodobne zapríčinený odstránením lipidovej vrstvy na povrchu vzorky. Odstránenie tejto vrstvy môže zapríčiňovať spomínané zvýšenie zmáčavosti povrchu opracovaných vzoriek viditeľné z poklesu kontakntého uhla vody. Ďalej z FTIR vyplýva zvýšenie väzieb O-C-O, prevažne sacharidov. Všetky tieto zmeny boli väčšie pre vzorky opracované 180 s v porovnaní so 60 s opracovaním. Zo snímok SEM bolo pri menšom zväčšení pozorované vyhladenie povrchu vzorky opracovanej 60 s. Pri väčšom zväčšení sme pozorovali výrazné poškodenie vzoriek opracovaných 180 s a menej viditeľné poškodenie pre 60 s oproti referenčnej vzorke. Opracovaním plazmou DCSBD môžeme dosiahnuť ako zníženie kontaktného uhla tak aj zvýšenie imbibície a zvýšenie klíčivosti. Čas opracovania však nesmie byť príliš vysoký aby sme predišli poškodeniu povrchu a zníženiu klíčivosti. Ideálny čas opracovania sa v našich experimentoch ukázal byť 15 s resp. 30 s.

Poďakovanie

Chcel by som sa poďakovať svojej školiteľke RNDr. Veronike Medveckej, PhD. za pomoc pri experimentoch, analýze a spracovaní dát, a Ing. Pavlovi Ďurinovi, PhD. za zhotovenie snímkov povrchu fazúľ pomocou SEM.
Tento výskum bol realizovaný v rámci projektu APVV-16-0216.

Literatúra

[Juraj Surovčík, 2016] Juraj Surovčík, (2016). Štúdium interakcie nízkoteplotnej plazmy s biologickým materiálom, pp.25–40.

[Černák et al., 2009] Černák et al., (2009). Diffuse coplanar surface barrier discharge and its applications for in-line processing of low-added-value materia, pp.2–5.

[S. Sadhu et al., 2017] S. Sadhu et al., (2017). Influence of cold plasma on the enzymatic activity in germinating mung beans (Vigna radiate), pp. 97 – 104

[El-Bahy, G.M.S., 2005] El-Bahy, G.M.S., (2005). FTIR and Raman spectroscopic study of fenugreek (Trogonella foenum graecum L.) seeds. Journal of Applied Spectroscopy, 72(1), pp.106–110.

[Kuhnen, S. et al., 2010] Kuhnen, S. et al., (2010). ATR-FTIR spectroscopy and chemometric

analysis applied to discrimination of landrace maize flours produced in southern Brazil. International Journal of Food Science and Technology, 45(8), pp.1673–1681.

[Plans, M. et al., 2013] Plans, M. et al., (2013). Characterization of common beans (Phaseolus vulgaris L.) by infrared spectroscopy: Comparison of MIR, FT-NIR and dispersive NIR using portable and benchtop instruments. Food Research International, 54(2), pp.1643–1651.

[Vasques, C.T. et al., 2007] Vasques, C.T. et al., (2007). Effect of thermal treatment on the stability and structure of maize starch cast films. Starch/Staerke, 59(3-4), pp.161–170.

[M. Selcuk et al., 2008] M. Selcuk et al., (2008). Bioresource Technology, 99, pp. 5104–5109.

[Bormashenko et al., 2012] Bormashenko et al., (2012). Cold Radiofrequency Plasma Treatment Modifies Wettability and Germination Speed of Plant Seeds, pp. 1-8.

[S. Mošovská et al. 2018] S. Mošovská et al., (2018). Cold atmospheric pressure ambient air plasma inhibition of pathogenic bacteria on the surface of black pepper, Food Research International, 106 (2018), pp. 862–869.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 106–113
ISBN 978-8081470882, © 2018 Tomáš Fiantok

Teplom indukovaný štruktúrny vývoj Nb - Al - N tvrdých vrstiev a jeho vplyv na mechanické vlastnosti

Tomáš Fiantok[1]

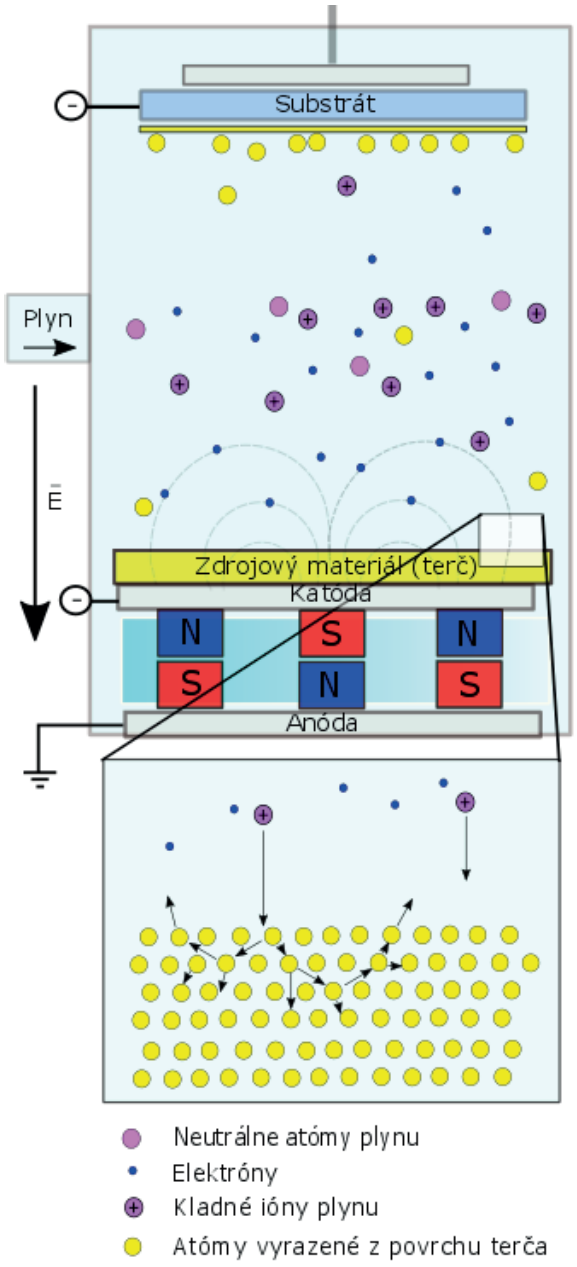
Školiteľ: Marián Mikula[2]

[1] Katedra experimentálnej fyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2] Katedra experimentálne fyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt: Vývoj tenkých vrstiev s excelentnými mechanickými vlastnosťami, najmä extrémne vysokou tvrdosťou, teplotnou stabilitou, výbornou oxidačnou odolnosťou a odolnosťou proti tvorbe trhlín, predstavuje jednu z najdôležitejších úloh súčasnej materiálovej vedy reflektujúcej požiadavky strojárskeho priemyslu. Typickými predstaviteľmi tvrdých vrstiev sú ternárne keramické systémy na báze nitridov prechodových kovov, napr. Ti-Al-N, Cr-Al-N. Z hľadiska štruktúry sú tieto vrstvy najčastejšie tvorené kubickým tuhým roztokom vykazujúcim vysoké hodnoty tvrdosti > 25 GPa (tvrdosti legovaných ocelí sú v intervale 7 GPa až 10 GPa) a hodnoty Youngovho modulu pružnosti presahujúce 400 GPa v závislosti od koncentrácie prítomných kovov. Teplom indukované procesy (žíhanie nad $\approx 800\,^{\circ}$ C) vedú k rozpadu tuhého roztoku a následnému formovaniu veľmi jemnej nanoštruktúry tvorenej zrnami veľkými niekoľko nanometrov. Vznik nanoštrukúrovanej vrstvy je sprevádzaný výrazným nárastom tvrdosti až o viac ako 10 %.

V tomto článku sa venujeme príprave tvrdých Nb-Al-N vrstiev, ktoré predstavujú perspektívny materiál pre splnenie týchto požiadaviek. Na základe výsledkov získaných pomocou skenovacej (SEM) a transmisnej elektrónovej mikroskopie (TEM), energetickej disperznej spektroskopie (EDX), röntgenovej difrakcie (XRD) a nanoindentačných techník diskutujeme chemické zloženie, štruktúrny vývoj a mechanické vlastnosti nanesených a žíhaných Nb-Al-N vrstiev.

Kľúčové slová: tvrdé vrstvy, tvrdosť, teplotná stabilita



Obr. 1: Ilustrácia reaktívneho magnetrónového naprašovania so znázorneným odprašovacím mechanizmom prebiehajúcim na terči

[1] tomasfiantok1@gmail.com

[2] marian.mikula@fmph.uniba.sk

1 Úvod

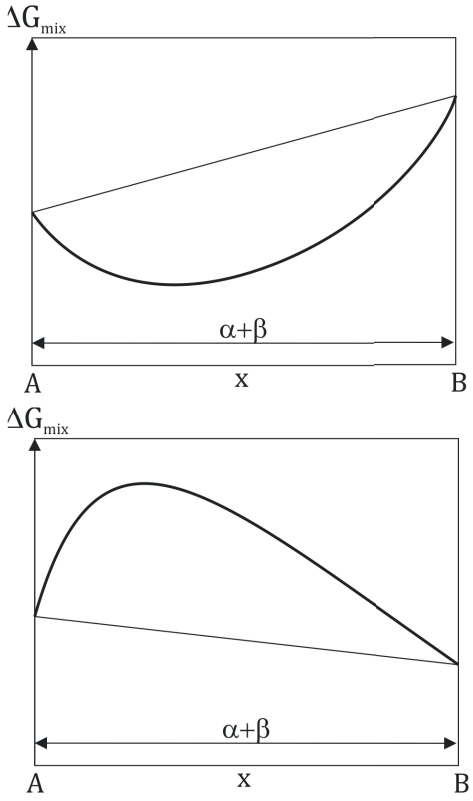
1.1 Príprava vrstiev

Fyzikálna depozícia z pár je v súčasnosti jednou z preferovaných metód využívaných na prípravu tenkých vrstiev. Jej typickým predstaviteľom je reaktívne magnetrónové naprašovanie. Pevný zdrojový materiál (terč) je za prítomnosti plazmy asistovaných procesov vystavený intenzívnemu iónovému bombardovaniu. Dopad iónov spôsobuje odprašovanie atómov terču. Tie dopadajú na substrát, kde nukleačnými mechanizmami rastú v podobe tenkej vrstvy. (obr.1) [1][4]

Príprava vrstiev magnetrónovým naprašovaním má množstvo jedinečných výhod. Táto metóda umožňuje modifikovať štruktúru vrstvy počas jej rastu, kontrolou depozičných parametrov (teplota substrátu, tlak pracovného plynu, výkon na terčoch, atď.). Jej hlavnou výhodou je, že ide o termodynamicky nerovnovážny proces, pomocou ktorého možno zmiešať prvky do tenkovrstvových tuhých roztokov, ktoré nie je možné pripraviť v podobe objemového materiálu.[1]

1.2 Tuhé roztoky

Tuhý roztok definujeme ako zlúčeninu, resp. zliatinu dvoch, poprípade viac prvkov, ktoré spolu tvoria homogénnu štruktúru. Tuhý roztok pre binárny systém vzniká ak je prvok B, rozpustný v prvku A. To znamená, že možno substituovať atómy prvku A atómami prvku B, poprípade atómy prvku B uložiť do intersticiálnych medzier mriežky atómov prvku A. Stabilitu tuhého roztoku určuje Gibbsova voľná energia (obr. 2). V prípade, že krivka Gibbsovej voľnej energie je konvexná a ľubovoľný bod tejto krivky sa nachádza pod spojnicou Gibbsových voľných energií jednotlivých konštituentov (Nb, Al) potom hovoríme, že tuhý roztok je stabilný v celom rozsahu koncentrácií. V prípade, že táto krivka je konkávna, tuhý roztok je nestabilný a dochádza k jeho rozpadu. Dodaním aktivačnej energie zvýšením teploty - žíhaním, možno meniť tvar krivky Gibbsovej voľnej energie z konvexnej na konkávnu a tuhý roztok sa môže rozpadnúť (dekomponovať) na tzv. nanoštrukturovaný materiál. [2][3]



Obr. 2: Definícia stability tuhého roztoku pomocou kriviek Gibbsovej voľnej energie[3]

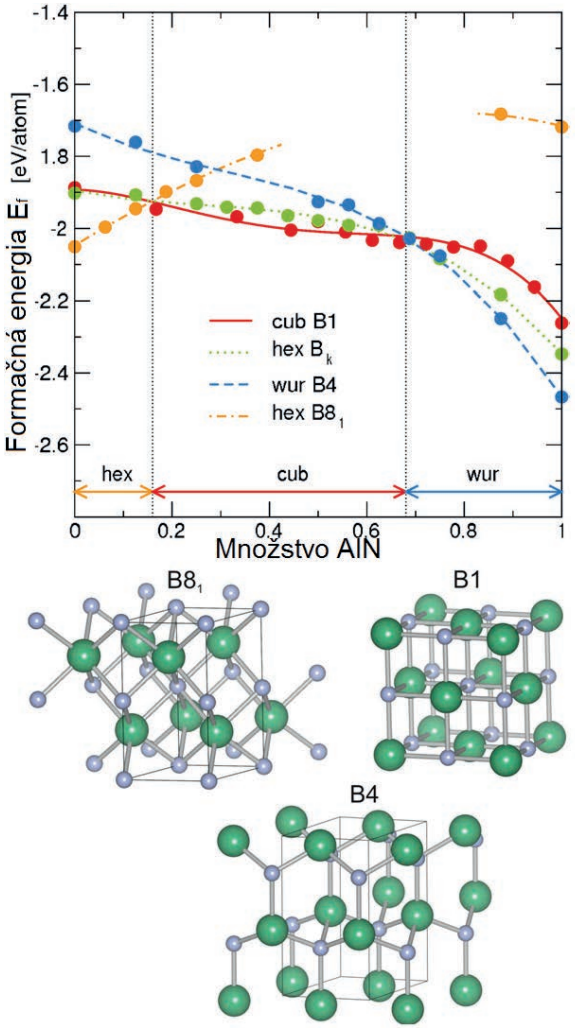
1.3 Nanoštruktúrovaný materiál

[H] O tvrdej vrstve ako o nanoštruktúrovanom materiály hovoríme práve vtedy, keď je jeho štruktúra tvorená zrnami, s typickým rozmerom 1 - 100 nm. V takomto materiály je iný pomer objemu zŕn ku hraniciam zŕn. To vedie k inej reakcii na deformáciu ako v prípade hrubozrnného materiálu. Nanoštruktúrované materiály vykazujú lepšie mechanické vlastnosti ako ich hrubozrnné ekvivalenty. Vykazujú najmä výrazne zvýšené hodnoty tvrdosti a hodnoty Youngovho modulu pružnosti.[5]

1.4 Teoretické predikcie

Jedným z cieľov je potvrdenie teoretických predikcií publikovaných Holecom a kol. [6], ktorí pomocou *ab initio* prístupov získali závislosť formačnej energie E_f od koncentrácie hliníka v ternárnom systéme Nb-Al-N. Formačnú energiu možno definovať

ako energiu, ktorú systém ušetrí tým, že sa v ňom vytvorí daná kryštalografická štruktúra. Obr. 3 ukazuje že pri nízkych koncentráciách Al sa podľa výpočtov s najväčšou pravdepodobnosťou bude realizovať hexagonálna $B8_1$ fáza (typická pre zlúčeninu NiAs) . Pri vyšších koncentráciách sa bude realizovať kubická fáza (s mriežkou podobnou mriežke kuchynskej soli (NaCl), s tým že niektoré atómy Nb(Na) budú substituované atómami Al) a pri vysokých hodnotách koncentrácie Al sa s najväčšou pravdepodobnosťou realizuje wurtzitová B4 fáza (typická pre zlúčeninu ZnS). Pre predstavu ilustrujeme základné bunky týchto kryštalografických fáz.



Obr. 3: Závislosť formačnej energie od koncentrácie Al vo vrstve, ukazuje, ktorá fáza ma najväčšiu pravdepodnosť sa sformovať (pri danej koncentrácií); pod ňou ilustrujeme základné bunky preferovaných kryštalografických fáz[6]

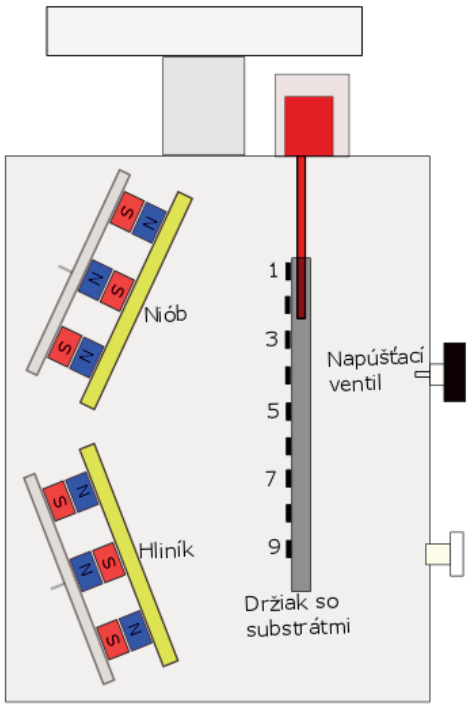
2 Experimentálna časť

2.1 Experimentálne detaily prípravy vrstiev

Nb-Al-N vrstvy boli pripravované použitím reaktívneho DC (jednosmerného) magnetrónového naprašovania s nevyváženým magnetickým poľom [4], odprašovaním Nb terča (priemer 100 mm, čistota 99.99%) a Al terča (priemer 100 mm, čistota 99.99%). Hustoty výkonov na terči boli nastavené na 6 W/cm^2. Sustráty tvorili kremíky Si (100) a zafírové platničky Al_2O_3 (100), umiestnené na duralovom držiaku umiestneného oproti terčom (obr. 4). Substráty sme uložili do 9 možných polôh na držiaku. 1 odpovedala polohe najbližšie k Nb terču. 9 bola najbližšie k Al terču. To nám umožnilo pripraviť ternárny systém Nb-Al-N s rôznym prvkovým zastúpením, počas jednej depozície. Všetky substráty boli pred depozíciou ultrazvukovo a chemicky (acetón, izopropyl alkohol) čistené. Po vyčerpaní komory na základný tlak $3*10^{-3}$ Pa, bol do aparatúry napustený inertný plyn Ar a reaktívny plyn N_2 ako zmes pracovného plynu s celkovým tlakom 0.5 Pa. Teplota substrátov počas depozície bola $\approx$ 250 - 280 °C.

2.2 Analýza vrstiev

S cieľom popísať vzorky komplexne, sme na analýzu vrstiev využívali veľký počet analytickým metód. Ako prvé sme popísali hrúbku, morfológiu a chemické zloženie, v závislosti od umiestnenia vzoriek na držiaku. Na to sme využili skenovací elektrónový mikroskop SEM v kombinácií s energetickou disperznou spektroskopiou - EDX. Takisto sme určovali chemické väzby medzi jednotlivými prvkami pomocou fotoelektrónovej spektroskopie - XPS (v štádiu prípravy). Ďalej nás zaujímala štruktúrna charakteristika pomocou röntgenovej difrakcie XRD, bližší pohľad na štruktúru na atomárnej úrovni nám poskytla transmisná elektrónová mikroskopia - TEM (v štádiu prípravy). Mechanické vlastnosti sme determinovali pomocou nanoindentačných techník, kde sme určovali indentačnú tvrdosť a Youngov modul pružnosti.



Obr. 4: Schématický náhľad do experimentálnej aparatúry.

3 Hlavné výsledky

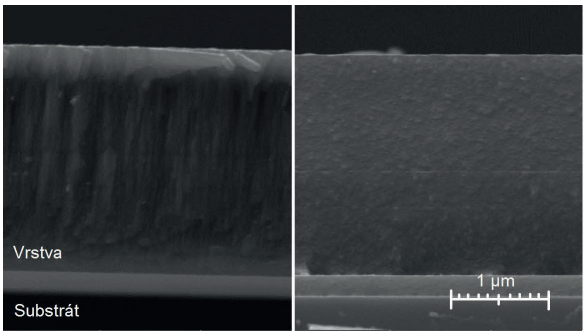
3.1 Chemické zloženie

Výsledky prvkovej analýzy možno vidieť v tab. č. 1. Ukazuje sa, že vrstvy obsahujú približne 55 at.% N a zvyšok tvoria kovy Nb/Al v rôznom vzájomnom pomere v závislosti od ich polohy na držiaku voči terčom. Zaznamenali sme kontamináciu vrstiev kyslíkom, nepresahujúcu 4 at.%.

3.2 Morfológia a hrúbka

Analýza priečneho lomu vrstvy skenovacou elektrónovou mikroskopiou (obr. 5) nám poskytla predstavu o hrúbke vrstvy a morfológií lomu a povrchu. Ukazuje sa, že vrstvy s nižšími kocentráciami Al sú tvorená typickou dlhozrnnou kolumnárnou štruktúrou. Pri vyšších koncentráciách Al sa kolumnárna štruktúra menila na takmer beztvarú štruktúru tvorenú menšími ekviaxiálnymi zrnami.

Hrúbka vrstvy (pre 90 min. depozíciu) sa menila približne z hodnoty 1.5μm na 2μm s rastúcou koncentráciou hliníka vo vrstve. Je to preto, lebo atómy



Obr. 5: Priečny lom vrstvy - záber zo skenovacieho elektrónového mikroskopu, vľavo vzorka č.5, napravo vzorka č.9

Nb sú ťažšie ako atómy Al, teda 1 atóm argónu je pri náraze do terča schopný vyraziť viac atómov Al ako Nb (Al má väčší naprašovací výťažok). Takisto možno uvážiť dopad ťažších atómov Nb na povrch rastúcich vrstiev, čo môže spôsobovať miernu redukciu hrúbky vrstiev.[7]

Dodnes (najmä kvôli časovej náročnosti prípravy vzoriek) sme vykonali len niekoľko zobrazení pomocou TEM. Výsledky analýzy (vzorky č.5) možno vidieť na obr. 6.

3.3 Kryštalografická štruktúra

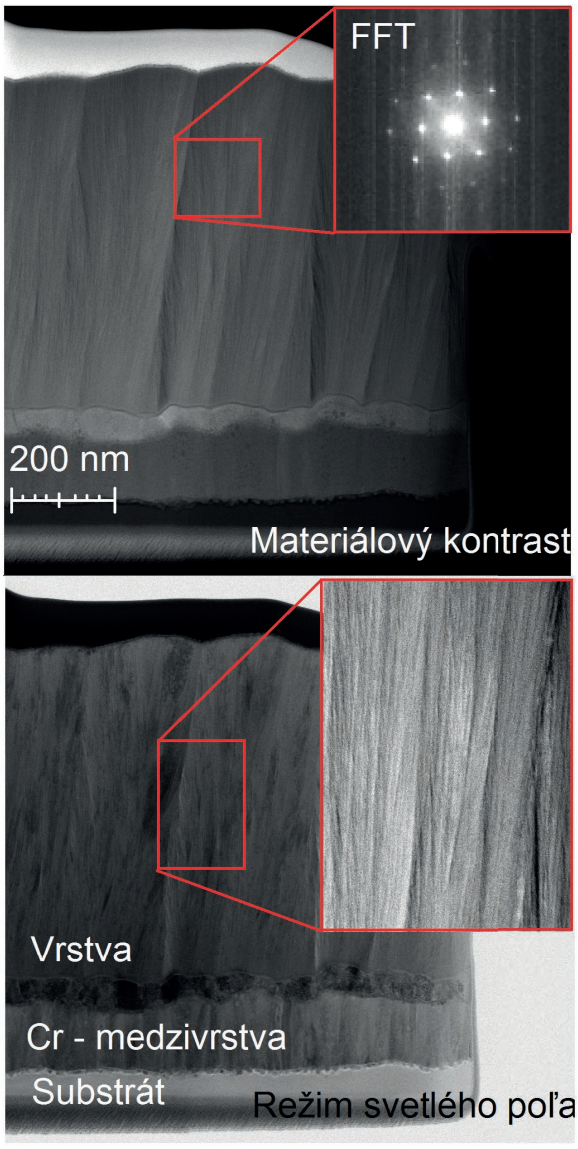
3.3.1 Po depozícií

Zmena štruktúry s rastúcou koncentráciou Al vo vrstvách je demonštrovaná na XRD zázname na obr. 7. Pri nízkych koncentráciach Al (vzorka č.1 Al $\approx$ 7 at.% , x=0.64) pozorujeme dominantnú fázu, ktorú sme identifikovali ako kubický tuhý roztok c-NbAlN. Pri rastúcej koncentrácií Al, zaznamenávame posun píkov smerom k vyšším hodnotám difrakčných uhlov. To súvisí so zmenšovaním mriežkového parametra. Pri vysokých hodnotách Al (vzorka č.9 $\approx$ 29 at.%, x=0.24) dochádza vo vrstvách k zániku kubickej c-NbAlN fázy a pozorujeme zvýšené pozadie v okolí reflexií prislúchajúcich hexagonálnej AlN fáze. Tým sme potvrdili teoretické predikcie uvedené v článku [6]. Takisto možno odhadnúť kritickú hodnotu rozpustnosti Al v c-NbN. Vidíme, že pri vzorke č. 7. (ružová) dochádza k potláčaniu c-NbAlN a formovaniu novej wurtzitovej (hexagonálnej) fázy w-NbAlN, pri koncentrácií Al $\approx$ 23 at.%. Teoretické predikcie hovoria o hodnote 26.5 at.%.[8]

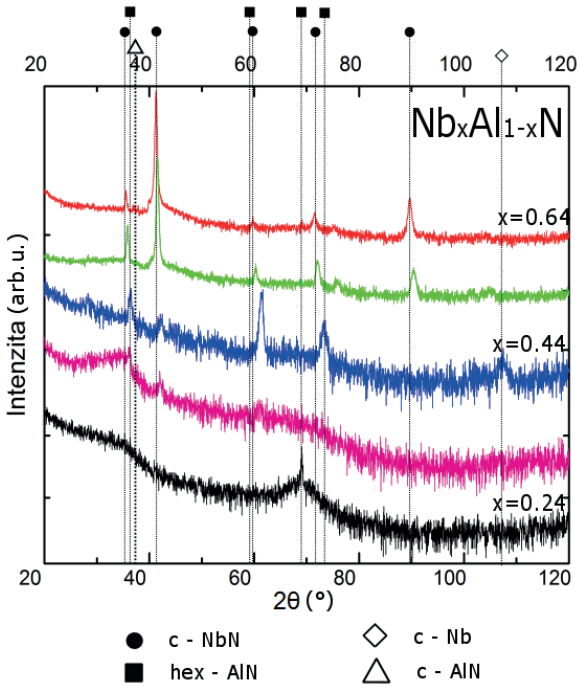
Na obr. 6 možno vidieť záber z TEM pre vzorku č. 5 a výsledok rýchlej fourierovej transformácie tejto

Tabuľka 1: Táto tabuľka ukazuje výsledky prvkovej analýzy - energetickej disperznej spektroskopie pre Nb-Al-N vrstvy

Výsledky EDX analýzy				
Pozícia vzorky	N (%)	O (%)	Al(%)	Nb (%)
1.≈ $Nb_{0.64}Al_{0.36}N$	58.28	3.10	6.55	31.86
5.≈ $Nb_{0.44}Al_{0.56}N$	57.41	2.35	18.16	21.91
9.≈ $Nb_{0.24}Al_{0.76}N$	56.58	2.91	28.63	11.77



Obr. 6: Obrázok ukazuje zábery z TEM a výsledok rýchlej fourierovej transformácie FFT vzorky č.5

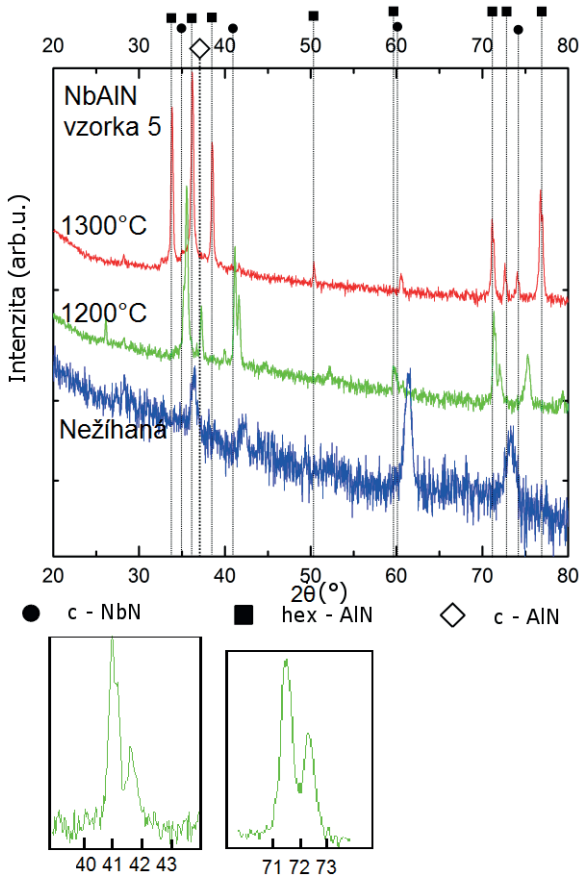


Obr. 7: Záznam z rontgenovej difrakcie, ukazujúci že štruktúra vrstvy je funkciou koncentrácie Al vo vrstve

štruktúry. Jasné, ostré, body FFT, indikujú takmer dokonalé periodické usporiadanie atómov na dlhých vzdialenostiach v kryštalografickej štruktúre - homogenitu c-NbAlN štruktúry. Mierna deformácia je spôsobená náklonom vzorky voči primárnemu zobrazovaciemu zväzku elektrónov.

3.3.2 Žíhané vrstvy

Vrstvy sme po depozícií začali žíhať vo vysokom vákuu ($\approx 10^{-5}$Pa). Ukazuje sa, že ich štruktúra je teplotne stabilná až do teploty 1200°C. Na obr. 8 je uvedený XRD záznam vzorky č.5 (nežíhanej, žíhanej na 1200°C a 1300 °C). V nežíhanej vzorke vidíme pík odpovedajúci kubickému tuhému roztoku c-NbAlN.



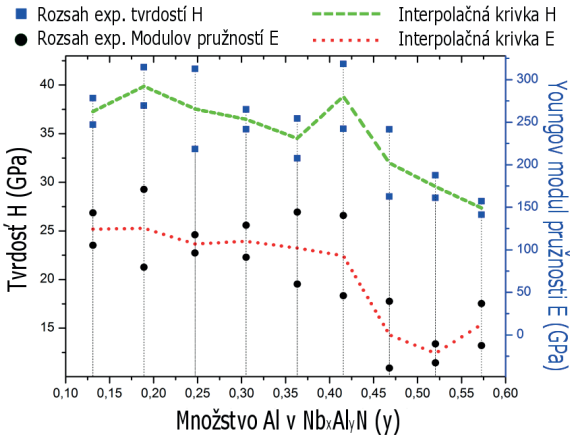
Obr. 8: Záznam z rontgenovej difrakcie pre vzorku č.5, ukazujúci zmenu štruktúry materiálu v závislosti od teploty žíhania, pod záznamom možno vidieť detail na vznikajúce dupletné píky pri T=1200°C

Pri 1200 °C možno vidieť rozštiepenie vybraných píkov na dva - začiatok dekompozície. NbAlN sa dekomponuje na duálnu štruktúru na c-NbN + c-AlN (1200°C). A pri vyšších teplotách (1300°C) dochádza k ďalšej transformácií na c-NbN + w-AlN.

3.4 Mechanické vlastnosti

3.4.1 Po depozícií

Tvrdosť a Youngov modul pružnosti ako funkcie množstva Al vo vrstvách sú vyobrazené na obr. 9. Ukazuje sa, že tvrdosť vrstiev bola približne rovnaká v širokom kocentračnom rozsahu (až do $y \approx 0.4$) máme jej hodnotu na úrovni 25GPa . Táto hodnota je približne rovnaká ako v prípade binárnej kubickej NbN fázy. Pri ďalšom zvyšovaní koncentrácie $y > 0.4$, dochádza k rapídnemu poklesu tvrdosti, dôsledkom zmeny štruktúry na hexagonálnu. Nízke hodnoty



Obr. 9: Experimentálne určené hodnoty tvrdosti H a Youngovho modulu pružnosti E a interpolácia týchto dát v závislosti od množstva Al vo vrstvách

Youngovho modulu pružnosti naznačujú zvýšenú húževnatosť, zlepšenú odolnosť voči tvorbe trhlín.

3.4.2 Žíhané vrstvy

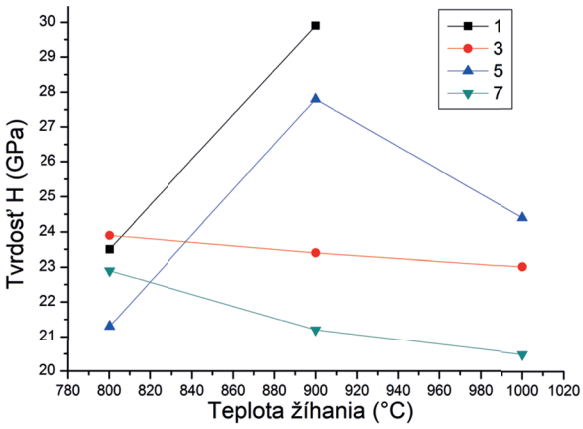
Žíhanie vrstvy vykazujú zmenu mechanických vlastností ako ukazuje tabuľka č.2 a obr. 10 a 11. Domnievame sa, že napriek tomu, že sme nedosiahli teploty, pri ktorých dochádza k zmene štruktúry, vo vrstvách dochádza k odmiešavacím procesom - postupným separáciam jednotlivých fáz, už pri nižších teplotách. Bližší pohľad prinesie TEM (štádium prípravy). Vrstvy vykazujú nevyhovujúcu adhéziu (priľnavosť) a vysokú teplotnú stabilitu. Preto pri vysokých teplotách dochádza k odlúpnutiu vrstvy od substrátu a my žiaľ nie sme schopní nad teplotou 1000 °C korektne určiť mechanické vlastnosti.

4 Záver

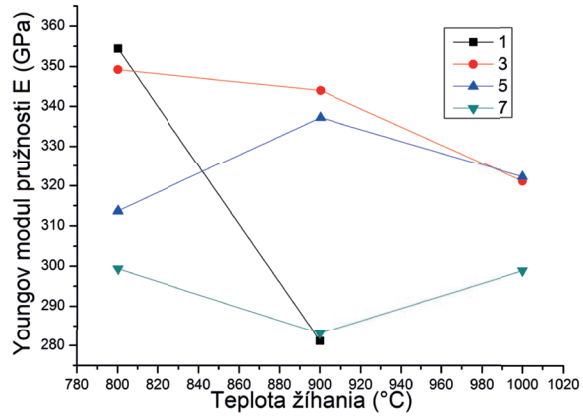
Dokázali sme pripraviť a charakterizovať tvrdé NbAlN vrstvy s rôznym pomerom Nb/Al. Podarilo sa nám experimentálne potvrdiť teoretické predikcie uvažujúce plynulú zmenu štruktúry NbAlN vrstiev z kubickej na hexagonálnu pri rastúcej koncentrácii Al. Najvyššiu tvrdosť z pripravených vrstiev vykazuje vzorka č.1. a to hodnotu 25.2 GPa. Vrstvy vykazujú nízke hodnoty modulov pružnosti na úrovni 250 GPa, čo indikuje zvýšenú schopnosť materiálu brániť sa proti tvorbe trhlín. Ukázalo sa, že vrstvy sú vysoko teplotne stabilné, nakoľko k zmene štruktúry došlo až po prekročení teploty 1200 °C. Do teploty žíhania

Tabuľka 2: Táto tabuľka ukazuje výsledky nanoindentačných meraní tvrdostí - Nb-Al-N vrstvy

Hodnoty tvrdostí H (GPa)				
Pozícia vzorky	Po depozícií	800°C	900 °C	1000 °C (%)
1.	25.2	23.5	29.9	x
3.	23.7	23.9	23.4	23
5.	23.2	21.3	27.8	24.4
7.	14.3	22.9	21.2	20.5



Obr. 10: Experimentálne určené stredné hodnoty tvrdosti vrstiev (rôzneho chemického zloženia) ako funkcia teploty žíhania vrstiev



Obr. 11: Experimentálne určené stredné hodnoty Youngovho modulu pružnosti vrstiev (rôzneho chemického zloženia) ako funkcia teploty žíhania vrstiev

1000 °C sme preukázali pozitívny vplyv tohto merania na tvrdosť a Youngov modul pružnosti. Najvyššiu tvrdosť zo žíhaných vrstiev dosiahla vzorka č.1 a to hodnotu až 30 GPa vyžíhaná na 900°C. Vysoké hodnoty tvrdosti, nízke hodnoty Youngovho modulu pružnosti a vysoká teplotná stabilita vrstiev v celom rozsahu koncentrácií Nb/Al predurčujú materiál NbAlN ako potenciálneho kanditáta na priemyselné aplikácie.

Poďakovanie

V prvom rade ďakujem školiteľovi Mariánovi Mikulovi za nekonečnú ochotu a trpezlivosť pri odpovedaní na moje otázky Ďakujem pánom, menovite, Leonid Satrapinsky, Tomáš Roch, Maroš Gregor, Peter Švec za vykonanie analýz a cenné rady pri spracovaní výsledkov. V neposlednom rade rodine a priateľke za trpezlivosť a ústretovosť.

Literatúra

[1] Bunshah, R., *Handbook of hard coatings : Deposition technologies, properties and applications*, University of California, Los Angeles, (2000), ISBN 978-0815517535.

[2] Fiala, J., a kol., *Sturktura a vlastnosti materiálu*,(Plzeň, 2003), ISBN 80-200-1223-0.

[3] Mikula, M., *Tvrdé nanoštruktúrované vrstvy - habilitačná práca*, FMFI UK, Bratislava (2017).

[4] Styrakova, K., *Zvyšovanie teplotnej stability a oxidačnej odolnosti nanoštruktúrovaných tvrdých vrstiev - diplomová práca*, FMFI UK, Bratislava (2015).

[5] Cavaleiro, A.,de Hossonde Hosson, T. *Nanostructured Coatings (Nanostructure Science and Technology)*,(2006), ISBN 978-0387256429.

[6] Holec, D. et. al, *Structure and stability of phases within the NbN-AlN system - článok)*,Christian Doppler Laboratory for Advanced Hard Coatings at the department of Physical Metallurgy and Materials Testing, Leoben, Rakúsko,(2010).

[7] Mikula, M. et. al, *Toughness enhancement in highly NbN-alloyed Ti-Al-N hard coatings - článok)*,FMFI, Bratislava, Acta Materialia 121 (2016) 59 - 67.

[8] Benkahoul, M., *Niobium nitride based thin films deposited by dc reactive magnetron sputtering NbN, NbSiN and NbAlN - dizertačná práca)*, École polytechnique fédérale de Lausanne, Alžírsko (2005)

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 114–120
ISBN 978-8081470882, © 2018 Ján Blaško

Elektrónmi indukovaná fragmentácia molekuly 2,6 - dichloroanizolu

Ján Blaško[1]*
Školiteľ: Marián Danko[1‡]

[1]Katedra Experimentálnej Fyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

V práci sme študovali tvorbu kladných iónov molekuly 2,6-dichloroanizolu (DCA). Použitím monochromatického elektrónového zväzku a kvadrupólového hmotnostného spektrometra sme boli schopní merať a popísať procesy elektrónovej ionizácie a elektrónovej disociácie. Fragmentácia molekuly je charakterizovaná sekvenciami s postupnou disociáciou benzénových uhlíkových atómov. Ionizačná energia molekuly bola určená na hodnotu 8,83 eV. Taktiež boli určené disociačné prahové energie pre niektoré ostatné ionizované fragmenty.

Kľúčové slová: 2,6-dichloroanizolu (DCA), elektrónová ionizácia, elektrónová disociácia, hmotnostná spektrometria

1 Úvod

Nepríjemný zápach, alebo chuť celosvetovo známa pod pojmom korková chuť, respektíve korkový pach vína je vážny problém pre odvetvie vinárenského a korkového hospodárstva na celom svete. Výskumom boli identifikované zlúčeniny ako potenciálni prispievatelia, ktoré spôsobujú spomínanú zatuchnutú chuť až plesnivú arómu vín. Medzi tieto zlúčeniny sa zaraďujú hlavne chloroanizoly, a to najmä 2,4,6-trichloroanizol (TCA); 2,6- dichloroanizolu (DCA); 2,3,4,6-tetrachloroanizol (TeCA); pentachloroanizol (PCA); pentachlorofenol (PCP); bromoanizoly ako napríklad 2,4,6-tribromoanizol (TBA) a iné. Keďže TCA a TBA sme už v minulosti merali a vyhodnocovali, teraz sa budeme zaoberať zlúčeninou DCA. V experimentálnej práci [1-2] autori poukazujú na ovplyvnenie chute európskych fľaškových vín korkovou chuťou a to medzi 0,1 až 10% objemu ich produkcie.

Chloroanizoly sú pravdepodobne formované mikrobiologickými metyláciami halogénových fenolov za prítomnosti rôznych mikroorganizmov, predovšetkým baktérií, alebo húb. Častokrát dochádza k tejto formácii chloroanizolov pri špecifických podmienkach teploty a vlhkosti [3].

Syntetické látky obsahujúce chlorofenoly boli v minulosti odporúčané ako ohňovzdorné materiály [4]. Materiály obsahujúce chlorofenoly sa používajú na výrobu odevov, papiera, farieb, plastov, v organických polyméroch používaných v elektrických zariadeniach a v potravinárskom priemysle na impregnáciu obalov proti plesniam a na zníženie horľavosti obalov na balenie jedál. Použitie pescitídu pentachlorofenolu (PCP) bolo zakázané Európskou Úniou kvôli jeho toxicite, ale používanie ostatných zlúčenín ako tribromofenol (TBP) a ostatných chlorofenolov nie je doposiaľ regulované, a tak sa TBP používa namiesto PCP ako fungicíd. Korkové zátky sa vyrábajú z kôry korkových dubov (Quercus suber), ktoré pri výrobe prechádzajú úpravami a ošetreniami najčastejšie napríklad so silikónom obsahujúcim teflónovú prísadu. Zdroj „korkovej chuti“ podľa Chatonneta a kol. [5] pochádza od halogénových fenolov používaných ako insekticídy v technickom hospodárstve.

Charakteristická chuť a vôňa pitnej vody je taktiež dôsledkom prítomnosti chloroanizolov. Jedným z hlavných problémov je taktiež nepríjemná vôňa, ktorá môže mať nádych zatuchnutosti. Tieto zlúčeniny nie je jednoduché odstrániť z pitnej vody. Vykonaný výskum na odstránenie škodlivín pomocou metódy ozonizácie [6] alebo karbonizácie [7] nie je dostatočný, nakoľko len malá časť z neho bola zameraná práve na tieto chemikálie. Pri dlhom pobyte pitnej vody v pohári s TCA, alebo DCA sa mení chuť a rovnako je to pri jedlách, kde je cítiť

*janblasko871@gmail.com
‡mdanko@centrum.sk

chuť istej skazenosti až plesnivosti [8]. Dôležitosť týchto zlúčenín je teda významná aj pri jedlách.

Existujú štúdie, ktoré potvrdzujú prestup chloroanizolov z korkov do vín, avšak demonštrujú aj, že tento prestup nie je až tak významný [9-10]. Faktom však je, že už veľmi malý prestup stačí na zníženie kvality vína, teda veľmi malá koncentrácia nežiaducich zlúčenín postačuje na zapríčinenie „korkového pachu“ vína. V experimentálnej práci [11] autori poukazujú na možnosť spôsobenia nepríjemného zápachu alebo chute už pri koncentráciách 1 - 50 ng l^{-1}.

Viacerí autori [12-13] analyzovali obsah chloroanizolov v kontaminovaných vínach a následne v kontaminovaných korkových zátkach. Boli zistené rôzne hodnoty prahových koncentrácií chloroanizolov v jednotlivých vínach a v korkových zátkach týchto vín. Koncentrácie vo vínach sa pohybovali medzi 0,2 až 41,0 ng l^{-1}, zatiaľ čo v korkových zátkach sa pohybovala od 1 až do 125 ng cork $^{-1}$. Napríklad Tanner a kol. [14]. uviedli, že až 50 % chloroanizolov prítomných v korkovej zátke môže byť prenesená do vína. Na druhej strane Chatonnet a kol. [15] uviedli, že táto hodnota v ich pozorovaniach bola nižšia ako 6%. Juanolu a kol. [16] získali hodnoty prestupu od 1 do 54 % v závislosti od “spiking metódy”. Preto neexistujú žiadne presvedčivé výsledky týkajúce sa vzťahu medzi celkovým obsahom chloroanizolov vo víne a vo vínovej korkovej zátke danej fľaši. Kvôli nejednoduchosti presného učenia koncentrácie je identifikácia a následná analýza vedľajších produktov výzvou už roky. Analytické postupy na presné určenie týchto druhov zlúčenín vyžadujú vysokocitlivé analytické spôsoby. V minulosti sa na prípravu vzoriek používali rôzne metódy, ako napríklad extrakcia kvapalina- kvapalina (LLE), extrakcia na sorpčných miešadielkach (SBSE), extrakcia podporovaná mikrovlnným žiarením (MAE), extrakcia tuhou fázou (SPE), odparovanie (PV), mikroextrakcia v balených striekačkách (MEPS), alebo metóda plynnou fázou a následná mikroextrakcia tuhou fázou (HS–SPME). Takto pripravené vzorky boli analyzované plynovou chromatografiou (GC) alebo hmotnostnou spektrometriou (MS), alebo ich kombináciou (GC–MS).

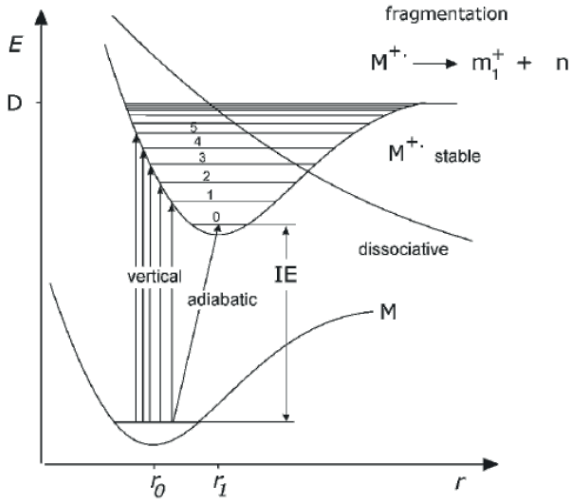
V experimentálnom článku autor Riu a kol. [17] zmerali celkovú koncentráciu chloroanizolov v rôznych druhoch korkových zátok, a to buď prirodzene alebo umelo kontaminovaných. V laboratórnych podmienkach používali vysoko-citlivú diagnostickú metódu vyvinutú z jednotlivých základných metód ako je metóda plynnou fázou a následná mikroextrakcia tuhou fázou (HS-SPME). Takýmto spôsobom pripravené vzorky boli analyzované metódou plynovej chromatografie (GC) s použitím detektora elektrónového snímania. Na záver dali do porovnania analytickú metódu plynovej chromatografie s metódou hmotnostnej spektrometrie. V ich výsledkoch môžeme sledovať, že práve 2,6-dichloroanizol má najväčšiu koncentráciu a to vo všetkých typoch korkov, pričom boli študované typy korkov z prírodného, aglomerovaného a šumivého vína. Juanola a kol. [1] v experimentálnej práci zistili, že za určitých podmienok z kontaminovaných korkov prešlo do vína až 76% TCA a 44% DCA.

Existuje niekoľko technológií na elimináciu nežiaducich prímesí z korkového materiálu. Doposiaľ najmodernejším popredným postupom je ozonizácia. Táto metóda však nie je uspokojivá, ani pri vínach, pretože metóda ozonizácie prenikne iba do 5 mm hrúbky korkovej zátky. Okrem eliminácie molekuly TCA a TBA z materiálov je potrebná aj jej kvantifikácia. V súčasnosti najmodernejšou metódou pre stanovenie koncentrácie je laserová desorpcia a následná analýza pomocou metódy IMS (ion mobility spectrometry) – iónovej pohyblivostnej spektrometrie [18].

2 Experiment

2.1 Elektrónová ionizácia a disociatívna ionizácia

Elektrónová ionizácia a disociatívna ionizácia sú procesy vedúce k vzniku kladných iónov vplyvom elektrónového nárazu.



Obr. 1. Potenciálové krivky molekuly M a molekulárneho iónu M^+ v základnom stave so znázornením elektrónového prechodu [19].

Proces elektrónovej ionizácie začína v závislosti od charakteru molekuly pri energiách interagujúcich elektrónov typicky v rozsahu 7 – 15 eV. Ionizácia atómov a molekúl je rýchly a dynamický proces, pri ktorom dochádza k interakcii voľného elektrónu s elektrónom vo viazanom stave. Po interakcii následne dochádza k zmene usporiadania nábojových hustôt v častici a v prípade molekúl aj k zmene atómových súradníc.

Existujú dva typy zrážok častíc a to pružné, pri ktorých platí zákon zachovania energie, v tomto prípade kinetickej energie častíc a zákon zachovania hybnosti, a nepružné, pri ktorej sa zmení energetický stav jednej alebo obidvoch zrazených častíc. Takéto zrážanie molekúl a elektrónov s dostačujúcou energiou na formáciu iónov sa nazýva elektrónová a disociatívna ionizácia. Patria medzi nepružné zrážky pri ktorých vzniká ión a jeden alebo viac voľných elektrónov.

$$e^{-}(1) + M \rightarrow M^{+} + e^{-}(1) + e^{-}(2) \qquad (1)$$

Rovnica (1) zobrazuje ilustračný príklad vzniku kladného molekulového iónu pri elektrónovej ionizácii, kde dochádza k uvoľneniu elektrónu $e^{-}(2)$ z viazaného stavu, ktorý obsadzoval najvyšší molekulový orbitál molekuly M. Jeho väzbová energia je najnižšia potrebná energia elektrónu zo zväzku $e^{-}(1)$ na odštiepenie elektrónu z molekuly $e^{-}(2)$. Táto energia sa označuje ako ionizačná energia (IE).

$$e^{-} + M \rightarrow 2e^{-} + A + B^{+} \qquad (2)$$

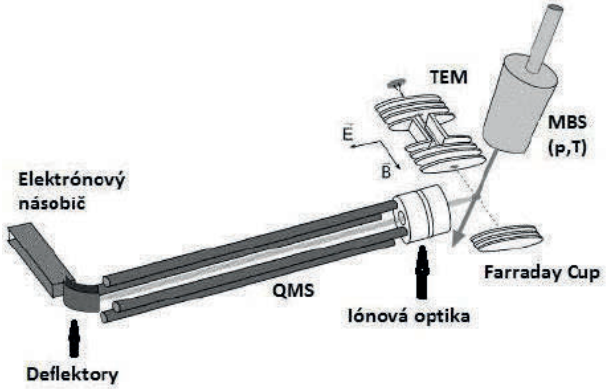
Rovnica (2) zobrazuje ilustračný príklad vzniku kladného molekulového iónu pri disociatívnej ionizácií, kde dochádza k rozbitiu molekuly M nárazom elektrónu na fragmenty A a B, kde z jedného atómu dochádza k uvoľneniu elektrónu a stáva sa kladným iónom. Celkovú vnútornú energiu molekuly možno vyjadriť ako súčet vibračnej, rotačnej a elektrónovej energie

$$E_{vnútorná} = E_v(v) + E_r(J) + E_e(n, l, \lambda) \qquad (3)$$

Tieto energie sú definované súborom kvantových čísel, ktorých hodnoty určujú stav danej molekuly. Pred interakciou sa molekula nachádza v základnom stave a celková energia molekuly má minimálnu hodnotu. Po ionizácii dochádza k zmene celkovej vnútornej energie, k zmene väzbových dĺžok a tvaru potenciálu. Proces ionizácie je ilustrovaný na obr. 1. Vrchná krivka (M^{+}) zobrazuje ión molekuly s príslušnými vibračnými hladinami. Ionizačná energia (IE) vyjadruje minimálne množstvo dodanej energie do systému s molekulou, aby nastal jej prechod do ionizovaného stavu. Danú hodnotu možno určiť ako rozdiel energií medzi základným stavom molekuly a vzniknutého iónu.

2.2 Aparatúra a meranie

Meracia aparatúra [20] sa skladá z výpočtovo - riadiacej časti, do ktorej patria zariadenia na vyhodnotenie a ovládanie merania, a zo samotných zariadení na experimentálne meranie. Na výskum elektrón - molekulových reakcií sa používajú skrížené zväzky – elektrónový a molekulový (obr. 2). Elektrónový zväzok je tvorený trochoidálnym elektrónovým monochromátorom (TEM), ktorý vytvára zväzok monochromatických elektrónov v rozsahu energií od 0 eV až po 120 eV. Následne sú elektróny transportované na zbernú anódu (Farraday Cup), kde dokážeme pripojením pikoampérmetra (Keithley 485 pA) určiť elektrónový prúd. Hlavná časť aparatúry pozostáva z vyhrievanej komory do ktorej vchádza úzka kapilára, ktorou je privádzaný molekulový zväzok do vákuovej komory. Vzorky v kvapalnom a plynnom skupenstve sú umiestnené v externom napúšťacom systéme. Pri štúdiu vzorky v pevnom skupenstve je umiestnená tuhá látka zväčša priamo v komore, kde pri zohrievaní sublimuje do vákua. Ióny generované interakciou molekulového a elektrónového zväzku sú slabým elektrickým poľom unášané na iónovú optiku. Iónová optika nasmeruje ióny na hlavnú os kvadrupólového hmotnostného spektrometra (QMS). Separované ióny sú po prechode hmotnostným spektrometrom pomocou deflektorov nasmerované na elektrónový násobič. Signál následne vstupuje do meracej karty, ktorá je riadená meracím softvérom. QMS je riadený kontrolnou jednotkou, ktorá v závislosti od príkazov riadi parametre QMS, čím je možné meniť pomer *m/z* (*m* - hmotnosť molekuly, z - náboj molekuly), a rozlišovaciu schopnosť spektrometra. Tak sa zabezpečí prechod len určitej skupiny častíc.



Obr. 2. Experimentálna aparatúra (TEM)- trochoidálny elektrónový monochromátor (QMS)- kvadrupólový hmotnostný spektrometer (MBS)- zdroj molekulového zväzku [21].

Meranie elektrónmi indukovaných procesov pozostáva z dvoch štandardných módov. Prvý mód prebieha pri konštantnej energii interagujúcich elektrónov a dochádza ku zmene pomeru *m/z* na QMS. Týmto spôsobom získavame tzv. hmotnostné spektrum pozostávajúce z ionizovaných produktov tvorených elektrónmi indukovanými procesmi. V prípade prezentovanej štúdie bolo hmotnostné spektrum získané pri energii elektrónov 70 eV. Pri druhom móde dochádza pri konštantnej hodnote *m/z* na QMS k lineárnej zmene urýchľovacieho napätia pre elektróny. Pre ióny s daným pomerom hmotnosti a náboja sa stanoví závislosť ich tvorby od energie interagujúcich elektrónov, tzv. relatívny účinný prierez. Pri kladných iónoch sme namerali takéto závislosti pre ióny už detegované v hmotnostnom spektre. Pri vyhodnocovaní meraní sme sa zaujímali hlavne o oblasť nábehovej hrany daného účinného prierezu, kde sme hľadali hodnotu počiatku nábehovej hrany. Tá definuje hodnotu prahovej energie (AE – appearance energy) pre danú reakciu.

Na to sa využíva špeciálny tvar Wanierovej formuly [22], kde je ε energia interagujúcich elektrónov, *AE* hľadaná prahová energia, *a, b, d* sú voľné parametre Jednoprahový prechod molekuly do ionizovaného stavu predstavujú rovnice:

$$S(\varepsilon) = b \; ; \; \varepsilon < AE \tag{4}$$

$$S(\varepsilon) = b + a\,(\varepsilon - AE)^{d} \; ; \; \varepsilon > AE \tag{5}$$

Dvojprahový prechod molekuly do ionizovaného stavu predstavujú rovnice:

$$S(\varepsilon) = b \; ; \; \varepsilon < AE_1 \tag{6}$$

$$S(\varepsilon) = b + a_1\,(\varepsilon - AE_1)^{d1} \; ; \; \varepsilon > AE_1 \tag{7}$$

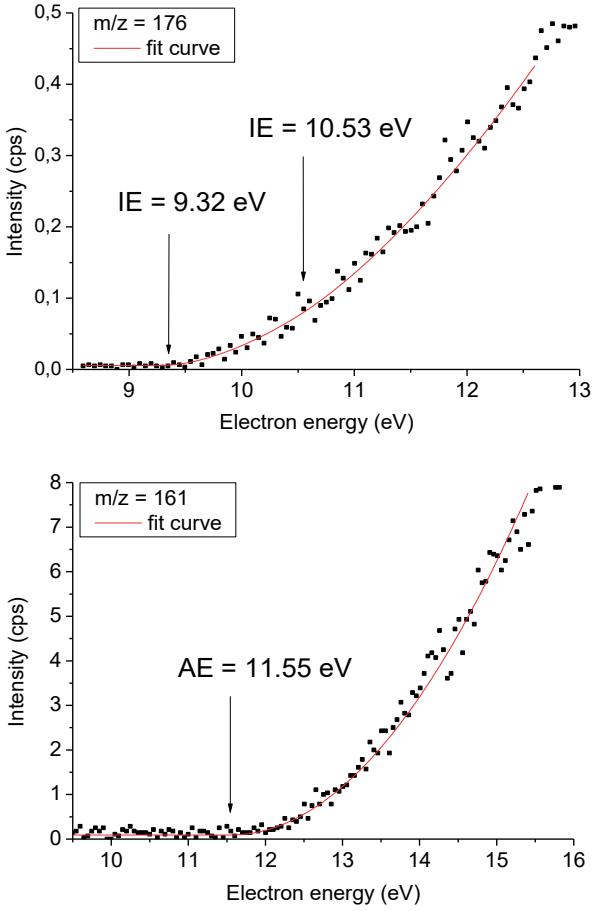
$$S(\varepsilon) = b + a_1\,(\varepsilon - AE_1)^{d1} + a_2\,(\varepsilon - AE_2)^{d2} \; ; \; \varepsilon > AE_2 \tag{8}$$

Pri skúmaní účinných prierezov je dôležitá kalibrácia energetickej škály. Kalibrácia bola vykonaná meraním ionizačnej energie atómov Ar, ktorej hodnota je IE = 15,759 eV [23]. Ako kalibračný plyn sa môže využiť každý zo vzácnych plynov, vďaka ich strmej nábehovej hrane v účinnom priereze a dobre známym hodnotám. Kvôli zlepšeniu pomeru signálu voči šumu sa merania účinných prierezov periodicky opakovali a následne priemerovali.

Analyzovanú tuhú vzorku sme objednali z firmy Sigma- Aldrich. Číslo vzorky 157325: 2,6-dichloroanisole s 97% čistotou. Vzorku sme neumiestnili rovno do vákuovej komory, ale do externého napúšťacieho systému, z dôvodu zanášania monochromátora parami zo vzorky. Tam bola zohrievaná a vyparovaná do vákuovej komory cez kapiláru formujúcu molekulárny zväzok. Vyformovaný molekulárny zväzok sa zrážal so zväzkom elektrónov za "single-collision" podmienok.

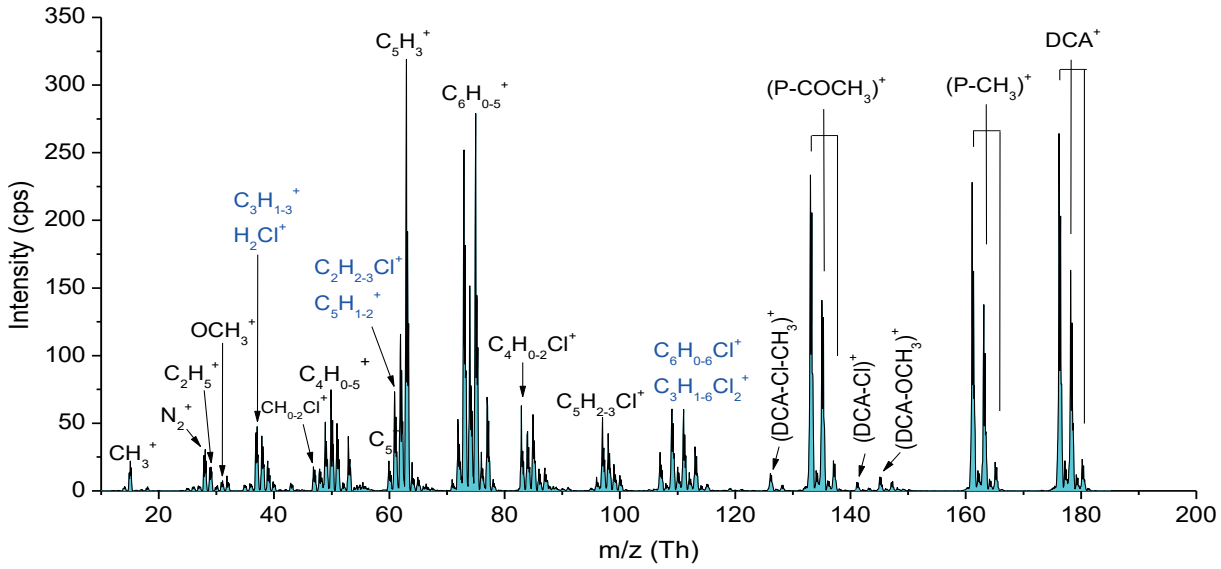
3 Výsledky a diskusia

Na obrázku č. 4 prezentujeme hmotnostné spektrum tvorby kladných iónov molekuly 2,6 – dichloroanizolu (DCA). Hmotnostné spektrum molekuly DCA v rozsahu od 10 do 360 Th bolo zaznamenané pri energii interagujúcich elektrónov 70 eV. Pre niektoré vybrané procesy sme vyšetrovali účinný prierez v oblasti nábehovej hrany a stanovili sme hodnoty prahových energií. Prahové energie nábehových hrán vybraných fragmentov sú uvedené na obrázku č. 3.



Obr. 3. Oblasti nábehových hrán účinných prierezov pre vybrané procesy molekuly DCA.

V hmotnostnom spektre môžeme pozorovať výrazný izotopický charakter molekuly, ktorý je dôsledkom prítomnosti chlórových atómov.

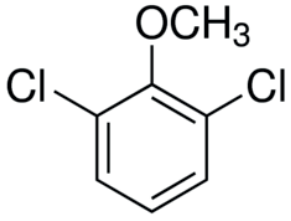


Obr. 4. Hmotnostné spektrum molekuly DCA pri energii elektrónov 70 eV

Izotopický pík je pík ktorého chemické prvkové zloženie obsahuje izotop prvku, avšak tento izotopický prvok v píku nemá väčšiu intenzitu ako prvok prirodzeného výskytu. Pre atóm chlóru ^{35}Cl je známy stabilný izotop ^{37}Cl s pravdepodobnosťou výskytu v pomere 1:0,324. Pre dva atómy chlóru $^{70}Cl_2$ sú izotopy $^{72}Cl_2$ a $^{74}Cl_2$ v pomere 1:0,65:0,11. Skutočnosť, že poznáme izotopické pomery nám umožňuje výrazne lepšie charakterizovať jednotlivé produkty, ktoré vznikli pri procesoch elektrónovej ionizácie a elektrónovej disociácie.

V spektre možno pozorovať niekoľko charakteristických sekvencií. Takéto sekvencie sú reprezentované postupnou disociáciou benzénových uhlíkových atómov. K daným sekvenciám dochádza po parciálnej disociácii niektorých častí molekuly. Návrh jednotlivých sekvencií je znázornený na obr. 4. V hmotnostnom spektre sme kvôli lepšej prehľadnosti uviedli produkty jednotlivých kladných iónov líšiace sa o jeden, alebo viac vodíkových atómov znakom napríklad H_{0-2}.

Keď postupujeme v hmotnostnom spektre od najväčšej hmotnosti produktov, tak na hmotnosti *m/z* 176 môžeme pozorovať tvorbu iónu DCA^+. Tento produkt sa tiež môže označiť ako P^+ z anglického slova Parent s ionizačnou energiou 9,32 eV. Následne môžeme pozorovať tvorbu $(DCA - CH_3)^+$ s m/z 161. Prahovú energiu sme určili s hodnotou 11,55 eV. Z rozdielu energií tvorby daných produktov môžeme odhadnúť hodnotu disociačnej energie (DE z ang. dissociation energy) pre disociáciu CH_3 z kladného molekulového iónu DCA^+, DE $(DCA^+ - CH_3) = 2,23$ eV. Zaujímavosťou je tvorba kladného iónu s hmotnosťou *m/z* 133 $(DCA - COCH_3)^+$. Daný proces je oveľa intenzívnejší ako tvorba iónov $(DCA - Cl)^+$ a $(DCA - OCH_3)^+$, ktoré sa dajú očakávať, že pri ionizácii vzniknú. Disociačná energia pre daný proces dosahuje približne 3,88 eV. Ďalší súbor píkov je na hmotnosti okolo *m/z* 110. Z pomeru intenzít vychádza, že tieto píky reprezentujú fragmenty $C_6H_{0-6}Cl^+$ alebo kombináciu fragmentov $C_6H_{0-6}Cl^+$ a $C_3H_{1-6}Cl_2^+$. V spektre si môžeme následne všimnúť prvú začínajúcu charakteristickú sekvenciu s rozdielom približne 12 Th. Čo predstavujú fragmenty $C_6H_2Cl^+$, $C_5H_2Cl^+$, $C_4H_2Cl^+$. Za touto charakteristickou sekvenciou nasleduje hneď ďalšia charakteristická sekvencia, ktorú reprezentujú produkty $C_6H_2^+$, $C_5H_2^+$, $C_4H_2^+$. Na hmotnosti *m/z* 61 a 62 je pravdepodobnosť tvorby štyroch produktov a to $C_2H_{2-3}Cl^+$, $C_5H_{1-2}^+$. Následne na hmotnosti *m/z* 37 až *m/z* 39 sa nachádza súbor píkov, ktorý má podobnú vlastnosť ako modrou farbou označené produkty pri vyšších hmotnostiach. V tomto prípade píky sú reprezentované buď produktmi $C_3H_{1-3}^+$, alebo na hmotnosti *m/z* 37 sa môže nachádzať produkt H_2Cl^+ so svojimi izotopmi aj fragmenty $C_3H_{1-3}^+$. Najľahší fragment v spektre vystupuje na hmotnosti *m/z* 15 čo je CH_3^+.



Obr. 5. Molekula 2,6-dichloroanizol (DCA)

Najintenzívnejší pík v hmotnostnom spektre bol detegovaný s *m/z* 63 a predstavuje fragment $C_5H_3^+$. Vo vákuovej komore sa nachádza aj reziduálny vzduch, ktorý môžeme pozorovať na hmotnosti *m/z 28* a predstavuje N_2. Medzi reziduálny vzduch taktiež patrí voda s *m/z* 18 a kyslík s *m/z* 32. Môžeme tvrdiť, že sme mali dobre vyčerpanú aparatúru, keďže píky reziduálneho vzduchu sú malé až zanedbateľne malé.

Tabuľka č. 1: Výsledné hodnoty prahových energií pre danú hmotnosť a produkty disociácie molekuly DCA

m/z (Th)	Produkt	Prahová energia
176	DCA^+	9,32
161	$(DCA - CH_3)^+$	11,55
133	$(DCA - COCH_3)^+$	13,2
111	$C_6H_4Cl^+$ $C_3H_5Cl_2^+$	14,42
110	$C_6H_3Cl^+$ $C_3H_4Cl_2^+$	14,88
109	$C_6H_2Cl^+$ $C_3H_3Cl_2^+$	17,00
107	C_6Cl^+ $C_3HCl_2^+$	16,5
98	$C_5H_3Cl^+$	13,44
97	$C_5H_2Cl^+$	15,3
85	$C_4H_2Cl^+$	15,9
84	C_4HCl^+	16,81
83	C_4Cl^+	16,45
76	$C_6H_4^+$	12,94
75	$C_6H_3^+$	15,25
74	$C_6H_2^+$	16,95
73	C_6H^+	17,63
72	C_6^+	16,82
63	$C_5H_3^+$	14,8
62	$C_5H_2^+$ $C_2H_3Cl^+$	20,06
61	C_5H^+ $C_2H_2Cl^+$	19,84
48	C_4^+ $CHCl^+$	17,22
47	CCl^+	21,41
38	$C_3H_2^+$	22,2
37	C_3H^+ H_2Cl^+	23,55

V tabuľke č. 1 sme demonštrovali výsledné hodnoty prahových energií vybraných produktov disociácie DCA. V tabuľke je zaujímavé si všimnúť produkt na hmotnosti *m/z* 63 čo reprezentuje $C_5H_3^+$ a produkt $C_5H_2^+$ na hmotnosti *m/z* 62. Pri prvom spomínanom fragmente sa disociuje o jeden vodík menej ako pri druhom. Tento produkt má síce menšiu prahovú energiu, avšak tieto energie pre dané dva produkty sa líšia až o 5,26 eV. Mohlo by to znamenať, že pri hmotnosti *m/z* 62 by sa mohol tvoriť aj iný fragment ako produkt $C_5H_2^+$. V tomto prípade jediným možným ďalším fragmentom je $C_2H_3Cl^+$. Podobe aj na hmotnosti *m/z* 61 by sa mohol tvoriť aj fragment $C_2H_2Cl^+$. S týmto sme počítali aj v spektre pri určovaní pravdepodobností chemických formúl z intenzít.

4 Záver

V práci sme namerali hmotnostné spektrum molekuly 2,6-Dichloroanizolu a jednotlivé prahové energie pre nábehové hrany daných produktov, ktoré vznikli pri procese elektrónovej ionizácie a elektrónovej disociatívnej ionizácie. Následne sme určili s najväčšou pravdepodobnosťou o aký fragment molekuly DCA sa jedná pri daných prahových energiách a hmotnostiach. Určili sme disociačnú energiu molekuly DCA, ktorej hodnota bola stanovená na 9,32 eV. V najbližšej dobe sa budeme zaoberať meraním podobných molekúl a následne porovnáme experimentálne výsledky.

Referencie

[1] R. Juanola, D. Subir`a, V. Salvad´o, J.A. Garc´ıa Regueiro, E. Antic´o, J. Chromatogr. A 953 (2002) 207.
[2] QUERCUS Qualitative experiments to determine the components responsible and eliminate the causes of undesirable sensory characteristics in drinks stoppered with cork, European Union and C.E. Lie`ge Contract No. AIR 1-CT92-0372, 1996
[3] Ariel R. Fontana, Jorgelina C. Altamirano, Talanta 81 (2010) 1536–1541
[4] Ariel R. Fontana, Jorgelina C. Altamirano, Talanta 81 (2010) 1536–1541
[5] Chatonnet, P.; Bonnet, S.; Boutou, S.; Labadie, M. D. J. Agric. Food Chem. 52 (2004)1255–1262
[6] L. Meunier, S. Canonica, U. Von Gunten, Water Research 40 (2006) 1864.
[7] M.F. Tennant, D. W. Mazyck, Pergamon 45 (2007) 858.
[8] Frank B. Whitfield, Kevin J. Shaw, T. H. Ly Nguyen, J. Sci. Food Agric. 31 (1986) 85-96
[9] D.L. Capone, G.K. Skouroumounis, M.A. Sefton, Aust. J. Grape Wine Res. 8 (3) (2002) 196.
[10] R. Juanola, D. Subir`a, V. Salvad´o, J.A. Garc´ıa, E. Antic´o, Eur. Food Res. Technol. 220 (2005) 347.

[11] P. Rib´ereau-Gayon, Y. Glories, A. Maujean, D. Dubordieu (Eds.), Handbook of Enology: The Chemistry of Wine and Stabilisation and Treatments, vol. 2, John Wiley & Sons Ltd., Chichester, 2000, p. 209.
[12] A.P. Pollnitz, K.H. Pardon, D. Liacopoulos, G.K. Skouroumounis, M.A. Sefton, Austr. J. Grape Wine Res. 2 (1996) 184.
[13] [19] P.R. Howland, A.P. Pollnitz, D. Liacopoulos, H.J. McLean, M.A. Sefton, Austr. J. Grape Wine Res. 3 (1997) 141.
[14] H. Tanner, C. Zannier, Schweiz. Z. Obst-Weinbau 117 (1983) 468.
[15] P. Chˆatonnet, G. Guimberteau, D. Dubordieu, J.N. Boidron, J. Int. Sci. Vigne Vin. 28 (2) (1994) 131.
[16] R. Juanola, D. Subir`a, V. Salvad´o, J.A. Garc´ıa, E. Antic´o, Eur. Food Res. Technol. 220 (2005) 347.
[17] M. Riu, M. Mestres, O. Busto, J. Guasch Universitat Rovira i Virgili, c./Marcel·l´ı Domingo s/n, 43007 Tarragona, Catalonia, Spain
[18] Z. Lichvanova, V. Ilbeigi, M. Sabo, M. Tabrizchi, S. Matejcik, Talanta, 127 (2014) 239-243
[19] E. Illenberger, J. Momigny- Gaseous Molecular Ions
[20] M. Stano, S. Matejcik, J.D. Skalny, T.D. Märk, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 36 (2003) 261.
[21]http://neon.dpp.fmph.uniba.sk/workgroup/index.php?option=com_content&view=article&id=16&Itemid=115
[22] WANIER, G. H. Phys. Rev. 90 (1953) 817.
[23]http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C7440371&Units=SI&Mask=20#Ion-Energetics

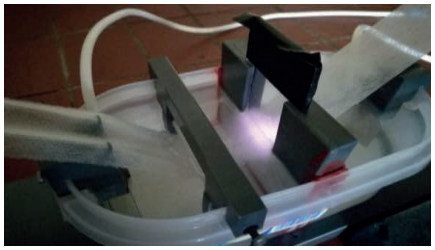
Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 121
ISBN 978-8081470882, © 2018 Patrícia Multáňová

Vplyv koncentrácie AAc vo vodnom roztoku na plazmovú polymerizáciu iniciovanú diafragmovým výbojom
(Rozšírený abstrakt)

Patrícia Multáňová[1]*
Školiteľ: Mgr. Dušan Kováčik, PhD.[1]‡

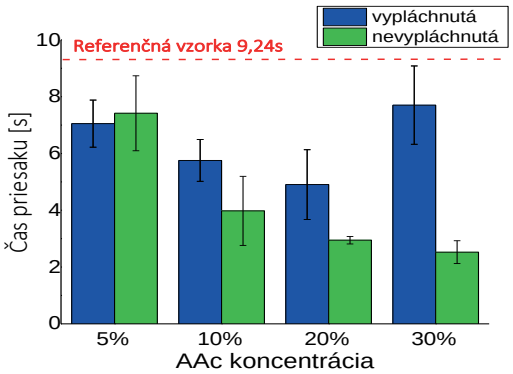
[1] Katedra experimentálnej fyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Prezentovaná práca sa zaoberá možnosťou využitia plazmy, generovanej v kvapalnom prostredí pomocou diafragmového výboja, na iniciovanie polymerizácie kyseliny akrylovej (AAc). Diafragmový výboj horí v úzkej štrbine rovinnej dielektrickej priečky (Obr. 1), oddeľujúcej dve oblasti s vodivým roztokom, do ktorých sú privedené vysokonapäťové elektródy [1, 2]. Na napájanie diafragmového výboja bol použitý zdroj impulzného napätia s tyratrónovým spínačom (-25 kV, 100 Hz). Kvapalné prostredie bolo tvorené roztokom destilovanej vody a monoméru kyseliny akrylovej pri troch koncentráciách: 20%, 10% a 5%.



Obr. 1: Fotografia zachytávajúca diafragmový výboj generovaný vo vodnom roztoku AAc.

Pri prechode polypropylénovej netkanej textílie (PPNT) cez štrbinu v dielektrickej priečke je generovaná plazma v kontakte s povrchom textílie a iniciuje proces polymerizácie za súčasného vzniku tenkej vrstvy kyseliny polyakrylovej. Takýmto spôsobom je možné získať povrch s veľkým zastúpením polárnych karboxylových skupín, vďaka čomu sa PPNT stala permanentne hydrofilnou. Povrchové zmeny na PPNT po procese AAc plazmovej polymerizácie s expozičným časom 3,5 s boli študované spektroskopickou metódou FTIR. Ďalej sme sa zaoberali meraním času priesaku, ktoré spočívalo v stanovení času potrebného na to, aby testovací roztok s objemom 5ml prešiel cez študovanú textíliu (Obr. 2). Jednotlivé merania sme realizovali pre nevypláchnutú vzorku a pre vzorku vypláchnutú dvakrát v destilovanej vode.



Obr. 2: Závislosť času priesaku PPNT od koncentrácie vodného roztoku AAc.

Overili sme aj stálosť povrchovej úpravy, resp. starnutie opracovaných vzoriek. Opätovné premeriavanie času priesaku a jednotlivých FTIR spektier sme robili po 8 dňoch. Plazmovú úpravu možno považovať za stálu pre koncentrácie AAc 20% a 10%, pretože ani po dlhšom časovom úseku nedochádzalo k výraznému zvýšeniu času priesaku. Následná realizácia peel testu nám umožnila získať predstavu o adhéznych vlastnostiach PPNT povrchovo upravenej polymerizáciou AAc využitím diafragmového výboja

Kľúčové slová: diafragmový výboj, plazmová polymerizácia, kyselina akrylová, FTIR

Poďakovanie

Táto práca bola finančne podporená projektom VEGA 1/0930/17.

Literatúra

[1] P. Šunka, Pulse Electrical Discharges in Water and Their Applications, Physics of Plasmas 8 (2001), 2587
[2] A. Buček, A. Popelka, A. Zahoranová, D. Kováčik, I. Novák, M. Černák, Acrylic Acid Plasma Treatment of Polypropylene Nonwoven Fabric, Fibres & Textiles in Eastern Europe 24, 6 (120) (2016), 161-164

* patricia.multanova@gmail.com
‡ kovacik@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 122
ISBN 978-8081470882, © 2018 Barbora Stachová

Electron impact excitation of H_2O in gaseous state

Barbora Stachová[1]*
Supervisor: Juraj Országh[1‡]

[1] FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

The optical emission spectrum following electron impact on H_2O was studied in a crossed-beam experiment. Emissions of OH*, H_2O^+*, H* and O* were detected along with the spectral lines of the Balmer series which is the series of spectral emission lines of H* that result from electron transitions from higher levels down to the energy level with principal quantum number of 2.

Molecules of H_2O along with other are profound elements of extraterrestrial objects such as comets. Previous study [Bodewits et al., 2016] indicated, that the emission observed is mostly produced by dissociative electron impact excitation of different parent species. Therefore, thorough analysis of the optical emission spectra is needed. [Cochran et al., 2002] on high spectral observations of comet 122P/de Vico suggested that high resolution spectroscopic observations offer unique opportunities for studies of the origin and subsequent chemistry of comets and can place valuable new constraints on physical processes in the solar nebula and proto-planetary disk during the comet formation epoch.

For this study, a crossed beams setup was used [Danko et al., 2013]. Electron gun was used as a source of electrons and the beam collided with H_2O molecules causing their excitation and subsequent deexcitation during which a photon was emitted. The spectrum in wavelengths within 300-700 nm was measured at 50 eV electron energy. Relative cross sections in the electron energy range from 5 eV to 100 eV were measured for the most significant spectral lines and bands.

The intensive band in the wavelength range from 300-340 nm corresponds to the OH*. Several H_2O^+* bands were determined at the wavelengths of 427-700 nm. The lines equivalent to the Balmer series of H* deexcitation were identified as well, and specified in Table 1.

Table 1: Identified spectral emission lines

Wavelength	Transition
[nm]	
305-330	OH(A-X)(0,0)
	OH(A-X)(1,1)
	OH(A-X)(2,2)
	OH(A-X)(3,3)
410,7	H-δ(6-2)
434,5	H-γ(5-2)
486,7	H-β(4-2)
657	H-α(3-2)

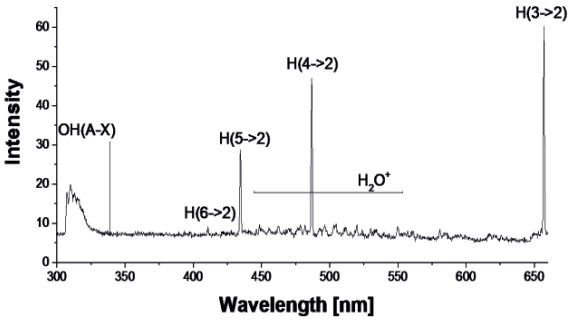


Figure 1: Emission spectrum at 50 eV energy level.

References

[Bodewits et al., 2016] D. Bodewits, L. M. Lara, M. F. A'Hearn et al. (2016). Changes in the physical environment of the inner coma of 67P/Churyumov-Gerasimenko with decreasing heliocentric distance. *The astronomical journal,* 152:130 (15pp), 2016 November.

[Cochran et al., 2002] Anita L. Cochran, William D. Cochran (2002). A High Spectral Resolution Atlas of Comet 122P/de Vico. *Icarus 157*, (2002), pages 297–308.

[Danko et al., 2013] M. Danko, J. Orszagh, M. Ďurian et al. (2013). Electron impact excitation of methane: determination of appearance energies for dissociation products. *Journal of physics B: Atomic, molecular and optical physics,* 46 (2013) 045203 (10pp).

* stachovab@gmail.com
‡ juraj.orszagh@uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 123
ISBN 978-8081470882, © 2018 Magdaléna Poláčková

Electron induced oxygen fluorescence

Magdaléna Poláčková[1*]
Supervisor: Juraj Országh [1 ‡]

[1]FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

In this experiment we analyzed the emission spectrum of oxygen O_2 after its collision with electrons. The relative cross sections were measured for the wavelengths with the highest intensity.

It is possible to simulate physical and chemical processes that occur in cometary gases by this method. The comets are mostly composed of ice. While the ice is melting, water, oxygen and other gases are released. Oxygen is also present in the atmospheres of various space bodies. It is the second most frequent gas in our atmosphere. Optical emission spectroscopy is one of the most important analytical methods for plasmas.

The excitation in this measurement was carried out by a crossed-beam setup. A beam of oxygen collided with an electron beam generated by electron gun. The energy of electrons used for the spectrum measurement was 50 eV and the studied spectral region was within 485 – 660 nm. The relative cross sections were measured in the electron energy range from 5 eV to 100 eV for transitions O_2^+(b→a) (1,1), O_2^+(b→a) (4,2), OI(^{1}D-^{3}P) and OII(^{2}P^0-^{2}S).

The analysis of emission spectrum showed that excited atoms OI, OII and ions O_2^+ are responsible for the emitted photons. Majority of the identified spectral bands correspond to O_2^+(b→a) at various vibrational levels. The highest intensity was observed at wavelength 558.7 nm and its surroundings. This peak corresponds to transitions of atomic oxygen OII (^{2}P^0-^{2}S) and ions O_2^+(b→a) between vibration levels (3,2), (2,1) and (1,0).

Transition	λ[nm]
O_2^+(b→a) (4,2)	525.6
O_2 (b→a) (2,0)	529.6
O_2^+(b→a) (3,2)	556.7
OII(^{2}P^0-^{2}S)	558.7
O_2^+(b→a) (1,0)	563.2
O_2^+(b→a) (3,3)	587.8
O_2^+(b→a) (1,1)	597.6
OI(^{5}D^0-^{5}P)	615.8
OI(^{1}D-^{3}P)	636

Table 1: The wavelength according to the type of transition

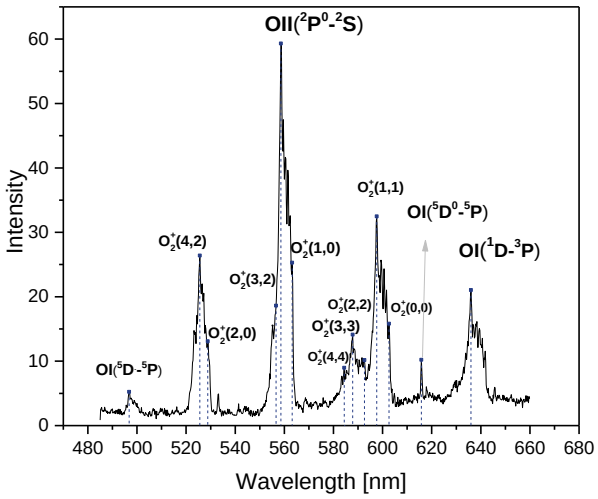


Figure 1: Emission spectrum of oxygen induced by electron impact

References

[Bodewits et al., 2016] Bodewits, D., Lara L. M., A'Hearn, M. F. (2016). Changes in the physical environment of the inner coma of 67P/Churymuov_Gerasimenko with decreasing heliocentric distance. *The Astronomical Journal*.

[Brooks, 1986] Brooks, L. R. (1986). The UV-visible emission spectra of oxygen and nitrogen in solid hydrogen and deuterium hosts. *The Journal of chemical Physics.*

[McConkey et al., 1969] McConkey, J. W. and Woolsey, J. M. (1969). Excitation of O_2+ bands by electron impact. *Journal of physics B: Atomic, molecular and optical Physics.*

[Terrell, et al., 2013] Terrell, CH., Hansen, D. and Ajello, J. (2013). The near-ultraviolet and visible emission spectrum of O_2 by electron impact. *Journal of physics B: Atomic, molecular and optical Physics.*

[NIST] NIST Atomic Spectra Database. https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database

*magdalena.polacek@gmail.com

‡juraj.orszagh@uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 124
ISBN 978-8081470882, © 2018 Filip Marcell

Optimalizácia LIBS analýzy volfrámu pre aplikácie v termojadrovej fúzii

Filip Marcell

Školiteľ: Pavel Veis Konzultant: J. Miškovičová, M. Horňáčková, M. Anguš

LIBS (Laser Induced breakdown spectroscopy), je populárnou metódou na určovanie prvkového zloženia daného materiálu. Použitím vysoko energetického laserového pulzu na povrch vzorky sa následnou abláciou materiálu vytvorí plazma ,ktorá nesie informáciu o prvkovom zložení materiálu a koncentrácii elektrónov. Táto metóda spotrebuváva iba malé množstvo vzorky, vďaka čomu sa dá nazvať kvázi-nedeštruktívnou [1].

V práci sa budeme zaoberať časovým vývojom plazmy volfrámu [2][3] v jednotlivých oneskoreniach, ktoré boli optimalizované pre pozorovanie vývoja neutrálných a iónových častíc volfrámu, výber dľžky expozície bol k oneskoreniu v pomere 1:1. Zvolené hodnoty boli 150ns, 250ns, 400ns, 750ns, 1000ns, 2000ns.

Použitá vzorka bola volfrámová elektróda valcového tvaru tvorená čistým volfrámom (99,9 % čistota garantovaná výrobcom). Na vytvorenie plazmy bol použitý pulzný tuho-látkový laser Nd:YAG, (opakovacia frekvencia 10Hz, šírka pulzu 8ns, maximálna energia 80mJ), ktorý bol modulovaný kryštálom na pracovnú frekvenciu 266nm (štvrtú harmonickú). Pri meraniach bola vzorka ofukovaná dusíkom, ktorý bol privádzaný do komory. Spektrum bolo analyzované spektrometrom Machelle (ME5000, Andor inc., rozlíšenie $\lambda/\Delta\lambda$=4000, rozpätie 230-900nm) a zachytávané iCCD kamerou (iStar DH743, Andor Inc. , Δt = 5ns) a nasledne spracované na počítači. Spektrometer bol kalibrovaný Hg-Ar lampou pred prvým meraním.

Výsledné spektrum bolo tvorené akumláciou 50 výstrelov. Teplota pre všetky merané oneskorenia bola počítaná z Boltzmannového vzťahu pre neutrálne častice a zo Saha-Boltzmanového vzťahu pre iónové častice [4]. Koncentráciu elektrónov sme určili zo Starkovho rozšírenia volfrámovej čiary (653.81 nm) [5]. Výsledná teplota a koncentrácie elektrónov sú uvedené v Tab.1. Je viditelný pokles teploty a koncentrácie elektrónov v závyslosti od rastúceho oneskorenia, čo znamená, že s rastúcim časom po výstrele plazma chladne. Koncentrácia elektrónov je najväčšia pri skorších časoch kde je predpoklad, že ešte prevláda žiarenie kontinua.

τ_d (ns)	τ_g (ns)	T (eV)	T_N (eV)	T_I (ns)	n_e (m^{-3})
150	150	0.59	0.57	0.59	$6.35\text{x}10^{20}$
250	250	0.60	0.57	0.56	$3.50\text{x}10^{20}$
400	400	0.52	0.52	0.52	$2.00\text{x}10^{20}$
750	750	0.48	0.48	0.46	$6.05\text{x}10^{19}$
1000	1000	0.46	0.47	0.45	$2.15\text{x}10^{19}$
1500	1500	0.45	0.45	0.43	$1.45\text{x}10^{19}$
2000	2000	0.44	0.45	0.42	$1.1\text{x}10^{19}$

Tab.1 porovnanie teplotného vývoja častíc plazmy volfrámu od oneskorenia

Literatúra:

[1] A. W. Miziolek, V. Palleschi, and I. Schechter, *LIBS Fundamentials and Applications*. 2006.

[2] M. Pribula *et al.*, "Use of the near vacuum UV spectral range for the analysis of W-based materials for fusion applications using LIBS," *Phys. Scr.*, vol. 2016, no. T167, 2016.

[3] A. Semerok and C. Grisolia, "LIBS for tokamak plasma facing components characterisation: Perspectives on in situ tritium cartography," *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A Accel. Spectrometers, Detect. Assoc. Equip.*, vol. 720, pp. 31–35, 2013.

[4] E. Tognoni *et al.*, "A numerical study of expected accuracy and precision in Calibration-Free Laser-Induced Breakdown Spectroscopy in the assumption of ideal analytical plasma," *Spectrochim. Acta - Part B At. Spectrosc.*, vol. 62, no. 12, pp. 1287–1302, 2007.

[5] R. Fantoni *et al.*, "Hydrogen isotope detection in metal matrix using double-pulse laser-induced breakdown-spectroscopy," *Spectrochim. Acta - Part B At. Spectrosc.*, vol. 129, pp. 8–13, 2017.

Táto práca SVK bola podporená projektami APVV-16-0612 a VEGA No. 1/0903/1.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 125–135
ISBN 978-8081470882, © 2018 Adam Broniš

Conversion electron-γ spectroscopy of ^{254}Fm

Adam Broniš*

Supervisor: Boris Andel†

Department of nuclear physics and biophysics, FMFI UK, Mlynská dolina 842 48 Bratislava

Abstract: In this project, the excited states of ^{254}Fm populated after the ^{254}Md electron capture (EC) decay were investigated by using the conversion electron-γ coincidence (CE-γ) technique. Energies of conversion electrons were analyzed to estimate energy of the ^{254}Fm highest populated state. The ground-state spin and parity of ^{254}Md were estimated by evaluating theoretical and experimental single-particle states of isotopes and isotones in its vicinity. Moreover, a tentative scheme of ^{254}Fm excited states populated after EC decay of ^{254}Md was proposed and the velocity separator SHIP and its detector system were described.

Keywords: velocity filter, ^{254}Md, CE-γ coincidence technique, electron capture decay, conversion electrons

1 Introduction

The scarcity of nuclear spectroscopy data in the region of superheavy elements and even more in the region of N=152 closed shell makes any interpretations based on systematics very difficult. Therefore any experimental information about the ground or excited states of these nuclei is valuable and can be considered as an improvement of the systematics in this region. Excited states of ^{254}Fm populated after β^- decay of ^{254}Es were identified for the first time in 1962 [J. Unik, 1962] by using γ-γ and β-γ coincidence techniques and later studied in 1973 [I. Ahmad, 1973]. These are the only spectroscopic data investigating excited states of ^{254}Fm. For isotope ^{254}Md only estimations of excitation energies based on the energy of the ^{258}Lr α decay were proposed [C. E. Bemis, 1976]. However, these excitation energies have not been well established [A. Bhagwat, 2005]. Moreover, the theoretical study focused on the nuclear structure of isotopes in the region of N=152 closed shell shows a possibility of the K-isomer in ^{254}Md [P. C. Sood, 2016]. No experimental data investigating excited states of ^{254}Md and ^{254}Fm populated after ^{254}No EC decay are available. Our primary goal is to investigate these excited states for the first time and try to examine the possibility of K-isomer in ^{254}Md.

2 Theoretical background

2.1 Electron capture decay

During the electron capture (EC) decay, the inner shell electron is captured by the proton-rich atomic nucleus. The captured electron vacancy is filled by an electron from a higher electron shell and during this process, X-ray characteristic for the given element or Auger electron is emitted. We can identify the EC decay process by assigning this characteristic X-ray to a given element. Q_{EC} value expressing the net energy released in EC, is in a following form:

$$Q_{EC} = [M(^{A}\mathrm{Z}_N) - M(^{A}(\mathrm{Z\text{-}1})_{N+1})]c^2 \qquad (1)$$

where M correspond to the atomic masses. An important feature of the EC decay is that it is a dominating process of a decay in the region of superheavy elements when compared to the β^+ decay. Heavy nuclei attract the inner shell electrons due to their electric charge so strongly, that a huge part of the electron orbits is practically in the atomic nucleus. For these nuclei it is easier to capture an electron from the inner shell instead of emitting a positron [Hofmann, 2002].

Since an angular momentum is conserved in EC decay, the angular momentum of a parent nucleus ($\vec{J_P}$) can be expressed as:

$$\vec{J_P} = \vec{J_D} + \vec{L} + \vec{S} \qquad (2)$$

where $\vec{J_D}$ is the angular momentum of a daughter nucleus. $\vec{S}$ is a sum of electron and neutrino spin. $\vec{L}$ is a sum of angular momenta carried by electron and neutrino.

On the basis of different $\vec{S}$ values, we distinguish two modes of EC decay:

- Fermi decay (Tab. 1 - F) if $\vec{S}$=0, which corresponds to the arrangement of lepton spins in the opposite direction.

*adam.bronis@gmail.com
†boris.andel@fmph.uniba.sk

- Gamow-Teller decay (Tab. 1 - GM), when $\vec{S}$=1 and lepton spins are in the same direction.

According to the conservation of an angular momentum in the EC decay the change in total angular momentum $\Delta\vec{J}$ can be derived from Eq.2, and is expressed as:

$$\Delta\vec{J} = \vec{J}_P - \vec{J}_D = \vec{L} + \vec{S} \tag{3}$$

Regarding the parity of the daughter nucleus π_P or the change of parity $\Delta\pi$ we can write:

$$\pi_P = \pi_D(-1)^L \qquad \Delta\pi = (-1)^L \tag{4}$$

The ft value can be introduced, which expresses "forbiddenness" of the EC decay regarding the changes of spin and parity, as follows [W. D. Loveland, 2006]:

$$ft = t_{1/2} f(Z_D, Q) = \frac{2\pi^3\hbar^7 ln2}{m_e{}^5 c^4} \frac{1}{g^2 |M_{fi}|^2} \tag{5}$$

and it depends on the nuclear matrix element $|M_{fi}|$ and the coupling constant g. Fermi function f depends on the Q value of the β decay and proton number of the daughter nucleus. It is useful to express the ft value in form of logarithm:

$$log(ft) = log(f) + log(t) \tag{6}$$

due to the fact, that the $\log(f)$ function can be calculated theoretically, and $\log(t)$ is experimentally measured. Using equations 3 and 4 to determine $\Delta\pi$ and $\Delta\vec{J}$ for a given L, it is possible to form a table for the classification of β decay with corresponding observed ft values as shown in Tab. 1. However, one has to take notice that the Gammow-Teller β decay between the 0^+ state of the parent nucleus and the 0^+ state of the daughter nucleus is forbidden due to the conservation of the angular momentum.

With the use of Tab. 1, we are able to estimate the changes of the spin and parity between the mother and daughter nucleus during the β decay according to $\log(ft)$ systematics. Summary of the distribution of the $\log(ft)$ values is illustrated in Fig. 1 for allowed transitions and Fig. 2 for forbidden transitions. However, estimation of the spin and parity changes during the EC decay based on the $\log(ft)$ value systematics does not take into account changes of the nuclear structure. Therefore inconsistencies between experimental and expected $\log(ft)$ value can occur.

Table 1 – Classification of the β decay. F-Fermi transition, GT-Gamow-Teller transition. L denotes sum of the leptons angular momenta. $\Delta\pi$ corresponds to the change of the parity in β decay, ΔJ stands for the change of the total angular momenta between the mother and daughter nucleus.

Classification	$log(ft)$	L	$\Delta\pi$	F-ΔJ	GT-ΔJ
superallowed	2.9-3.7	0	+	0	X
allowed	4.4-6.0	0	+	0	0,1
1. forbidden	6.0-10.0	1	-	0,1	0,1,2
2. forbidden	10.0-13.0	2	+	1,2	1,2,3
3. forbidden	>15	3	-	2,3	2,3,4

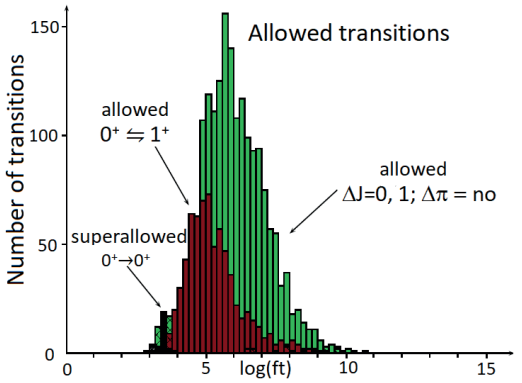


Figure 1 – Log (ft) systematics for allowed transitions [B. Singh, 1998]. Different colours denote different change in spin ΔJ between the mother and daughter nucleus.

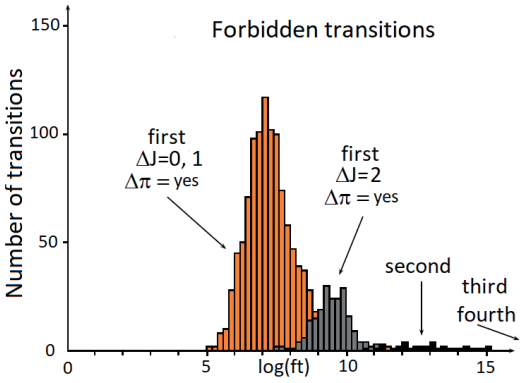


Figure 2 – Log (ft) systematics for forbidden transitions [B. Singh, 1998]. Different colours denote different change in spin ΔJ between the mother and daughter nucleus.

2.2 Gamma decay

In nuclear reactions, excited states of atomic nuclei are often produced. One of the ways of their deexcitation is γ-ray emission. During this process, the atomic

nucleus shifts to the lower energy state via γ quantum emission. One can define the states of the atomic nucleus before and after γ-ray emission with parity and angular momentum. Based upon the conservation of the angular momentum during emission of γ quantum, possible values of transition multipolarity L (L = 1 for dipole, L = 2 for quadrupole, etc) are given by the following selection rule:

$$\mid I_i - I_f \mid \leq L \leq (I_i + I_f) \tag{7}$$

where I_i and I_f are angular momenta of initial and final state. The angular momentum carried by the photon is $L\hbar$. Regarding the change of the parity, we can write:

$$\Delta\pi(EL) = (-1)^L \qquad \Delta\pi(ML) = (-1)^{L+1} \tag{8}$$

while EL stands for the electric and ML stands for the magnetic multipole. Large difference in the spin of initial and final state of nucleus and the change of parity leads to the suppression of transition. The γ-ray transition probability per unit time can be estimated by Weisskopf formula for electric multipole (2^L) [Weisskopf, 1951]:

$$T_E(L) \cong \frac{4.4(L+1)}{L[(2L+1)!!]^2}\left(\frac{3}{L+3}\right)^2\left(\frac{\hbar\omega}{197MeV}\right)^{2L+1} \times (\mathrm{R\ in}\ 10^{-13}\,cm)^{2L} 10^{21}\,\mathrm{sec}^{-1}$$

Regarding the magnetic multipole (2^L), the estimation of the γ-ray transitions probability per unit time $T_M(L)$ is:

$$T_M(L) \cong \frac{1.9(L+1)}{L[(2L+1)!!]^2}\left(\frac{3}{L+3}\right)^2\left(\frac{\hbar\omega}{197MeV}\right)^{2L+1} \times (\mathrm{R\ in}\ 10^{-13}\,cm)^{2L-2} 10^{21}\,\mathrm{sec}^{-1}$$

These Weisskopf's formulas can be expressed using the dependence on the γ-ray transition energy E_γ and the nucleon number A for different electric and magnetic multipole (Tab. 2).

Table 2 – Weisskopf's single particle transition rates (E_γ is in MeV) for electric (E) and magnetic (M) multipole.

	E	M
L	$\lambda(s^{-1})$	$\lambda(s^{-1})$
1	$1.03\times10^{14}A^{2/3}E_\gamma^3$	$3.15\times10^{13}E_\gamma^3$
2	$7.28\times10^{7}A^{4/3}E_\gamma^5$	$2.24\times10^{7}A^{2/3}E_\gamma^3$
3	$3.39\times10^{1}A^{2}E_\gamma^7$	$1.04\times10^{1}A^{4/3}E_\gamma^3$
4	$1.07\times10^{-5}A^{8/3}E_\gamma^9$	$1.03\times10^{-6}A^{8/3}E_\gamma^9$
5	$2.40\times10^{-12}A^{10/3}E_\gamma^{11}$	$7.36\times10^{-13}A^{8/3}E_\gamma^{11}$

The general features of the γ transitions are [Krane, 1988]:

- It is possible that both electric and magnetic transitions can contribute to the decay probability.
- γ transition with $L = 0$ is forbidden due to the law of conservation of momentum. However, the internal conversion is possible.
- Electric transitions are usually faster than the magnetic transitions with the same multipolarity.
- The lowest multipolarity is the most probable.

2.3 Internal conversion

Internal conversion is the competing process to the γ emission. During this process, the nucleus in an excited state deexcites via electromagnetic interaction with an inner shell electron. Through this interaction, the electron obtains a sufficient energy to be released from the electron shell. Electron vacancy is filled with the electron from higher shell, and through its transition the X ray characteristic of the given element, or the Auger electron is emitted (Fig.3).

Kinetic energy of the released electron T_e is defined as:

$$T_e = E_T - E_b - E_k \tag{9}$$

where E_T is the energy of transition, E_b is the electron binding energy and E_k is the kinetic energy of the recoiling nucleus due to the conservation of linear momentum. The relation between the probability of γ quantum emission and the probability of internal conversion is expressed as the internal conversion coefficient α:

$$\alpha = \frac{\lambda_{IC}}{\lambda_\gamma} \tag{10}$$

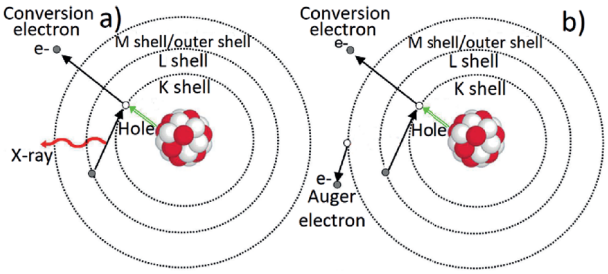


Figure 3 – Processes regarding the internal conversion. **a)** Process of characteristic X-ray emission. **b)** Process of Auger electron emission. The green arrow indicates the electromagnetic interaction of the excited nucleus with the inner shell electron [Ch. Balonek, 2006].

where λ_{IC} is the probability of transition via internal conversion and λ_γ is the probability of γ-ray emission. We can define the total internal conversion coefficient α_t as a sum of the conversion coefficients α_t for each electron shell and subshell in form [Krane, 1988]:

$$\alpha_t = \alpha_K + \alpha_{L1} + \alpha_{L2} + \alpha_{L3} + \alpha_{M1} + ... \qquad (11)$$

It is possible to estimate the internal conversion coefficient of the different electron shells for electric multipole $\alpha(EL)$ with a following equation [W. D. Loveland, 2006]:

$$\alpha(EL) \cong \frac{Z^3}{n^3}\left(\frac{L}{L+1}\right)\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\right)^4\left(\frac{2m_ec^2}{E}\right)^{L+5/2} \qquad (12)$$

Similarly, regarding the magnetic multipole $\alpha(ML)$ we can write:

$$\alpha(ML) \cong \frac{Z^3}{n^3}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\right)^4\left(\frac{2m_ec^2}{E}\right)^{L+3/2} \qquad (13)$$

where n is the principal quantum number of a bound electron, whereas K-shell corresponds to n=1, L-shell corresponds to n=2 etc. L is the multipolarity of the transition and E is the energy of the transition. Eqs. (12) and (13) demonstrate the general features of internal conversion [M. Schädel, 2006]:

- Conversion coefficient increases with decreasing transition energy. It changes significantly near the threshold of the electron binding energy.
- Conversion coefficient increases with increasing multipolarity of transition. Therefore, for dipole it is lesser than for a quadrupole transition.
- Magnetic transitions are converted more than electric transitions with the same energy and multipolarity.
- A strong dependence of the internal conversion coefficient on proton number $\sim Z^3$. Thereby, the internal conversion becomes a dominant process of deexcitation in superheavy elements in comparison with light elements.
- The dependence of the conversion coefficient on the principal quantum number of the bound electron $\sim\frac{1}{n^3}$. The probability of internal conversion for electrons in outer electron shells is far lower than the probability for the innermost electron shells.

3 Experimental background

3.1 Velocity filter SHIP

SHIP (Separator for Heavy Ion reaction Products) belongs into the group of the Wien (velocity) filters [Wien, 1898], by virtue of its modus operandi. The main purpose of this filter is a highly effective separation of accelerated projectiles from the reaction products due to their different kinematic properties (Fig. 4b). It is able to accept the relative velocity of width $\pm 5\%$, an angular width of 26 mrad in axial and radial direction, and a relative charge width of $\pm 10\%$ [G. Münzenberg, 1979]. The separation itself is caused by the crossed magnetic and electric fields. However, in contrast to the classical Wien filter, the magnetic and electric fields in the SHIP filter are separated. Based on the angular momentum conservation, we can write:

$$v_0 = \frac{m_1}{m_0}v_1 \qquad m_0 = m_1 + m_2 \qquad (14)$$

where v_0 is the velocity of the compound nucleus with the corresponding mass m_0, v_1 is the projectile velocity with the mass m_1 and m_2 is the mass of the target nucleus. If an ion has to pass the velocity filter without deflection, its velocity v_0 must be equal to the value when electric force is identical to the magnetic force. This fact can be expressed by the following equations:

$$\begin{aligned} F_B &= F_{el} \qquad (15)\\ -qv_0B &= qE \\ v_0 &= -E/B \end{aligned}$$

Therefore, for the given E and B the resultant force is zero. This specific way of separation is more effective when the reaction products velocity is significantly different from the velocity of the ions in primary beam. The primary ion beam is produced by the 28 GHz ECR (Electron Cyclotron Resonance) ion source, and different ionisation states of ions are possible [W. Barth, 2006]. Afterwards, ions are accelerated by the UNILAC (Universal Linear Accelerator), operating in a pulsed regime. Usual duration of the pulse is 5 ms with a 15 ms pause, and the ion beam intensities can be as high as 10^{13} ions per second. Primary beam of accelerated ions is directed towards the rotating target wheel (Fig. 4 a) with the radius of 165 mm. Thickness of the target material is usually 450 $\mu g/cm^2$, and compound materials are often used due to their ability to withstand higher beam intensities. Target wheel is composed from eight segments with dimensions 110×23 mm, and it is rotating in order to distribute the beam intensity into the larger area. Its rotation is synchronized with the pulses of the accelerator.

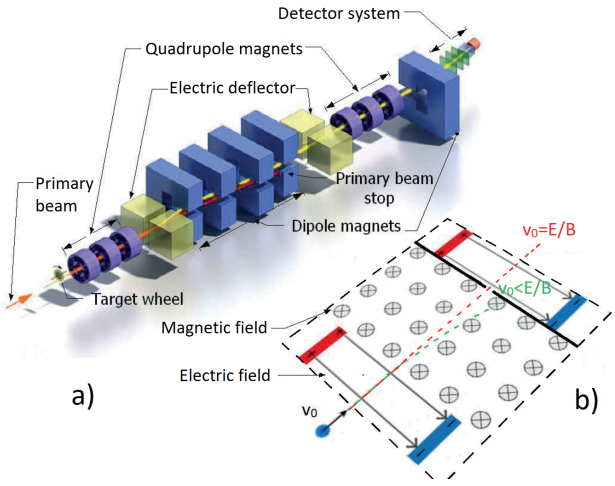


Figure 4 – **a)** Scheme of velocity filter SHIP [GSI,] with corresponding separated magnetic and electric fields **b)**, v_0 is the velocity of the reaction products or accelerated ions.

The incident ions are colliding with the target nuclei and products of complete fusion are created. Compound nuclei cool down by emitting nucleons and γ rays, and evaporation residues (ER) are flying out from the target in the beam direction. Throughout this process, they are scattered by the target nuclei. However, any dispersion is undesirable and a system of three magnetic quadrupoles is used to focus scattered beam of reaction products. Axes of these quadrupole magnets are turned by 120° and this arrangement is analogous to the optical lens. After being focused by system of quadrupole magnets, the beam of reaction products and projectiles enter the velocity filter composed from electric deflectors and dipole magnets. Projectiles are deflected due to their different velocity on the Faraday cup where their charge is collected (Fig.4). The beam of reaction products with velocity consistent with parameters of magnetic and electric fields continues without deflection. However, due to the passage through filter, they are partially scattered, and the system of three quadrupole magnets placed behind the separator is used to focus the beam of reaction products. Finally, they are deflected from the line of the separator by the last 7.5° dipole magnet to the system of detectors. Projectiles, which were able to pass through filter due to the fulfilling of the kinematics condition, are less deflected than the reaction products. As a result of such arrangement, the background suppression of two or three orders of magnitude is achieved.

3.2 Detector system

System of detectors is placed behind the SHIP filter and comprise from following parts:

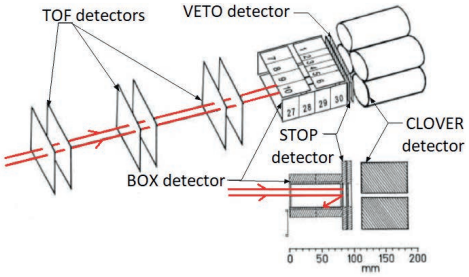


Figure 5 – A scheme of detector system arrangement. Red lines denote the trajectory of fusion products and scattered projectiles [Hofmann, 2009].

- TOF detectors (Time of Flight Fig. 5), the purpose of which is to distinguish the fusion products from the scattered projectiles by analyzing their time-of-flight. They are composed of pairs of thin (30 $\mu g/cm^2$) carbon foils, and the principle of operation is based on the registration of secondary electrons. These electrons are produced by ionizing particles crossing the carbon foils. Low energy secondary electrons

are accelerated by the electric field and deflected by the magnetic field on the microchannel plates (MCP) where their signal is multiplied [Š. Šáro, 1996]. The time resolution of the TOF detector is 600 ps. Counting efficiency of the TOF detector system is 99.8 percent for heavy evaporation residues. A scheme of the foil-MCP detector is illustrated in Fig. 6

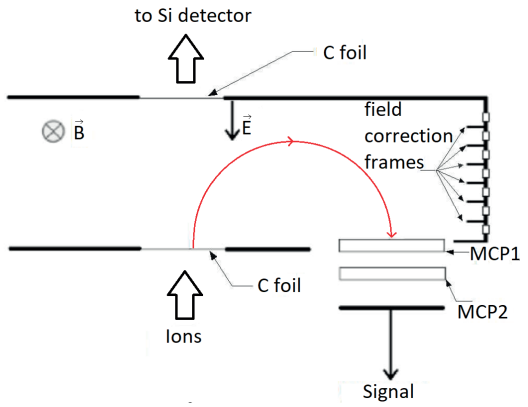


Figure 6 – A scheme of the foil-MCP detector. Trajectory of the electrons knocked-out from the carbon foil and deflected by the magnetic field is denoted by the red arrow [Š. Šáro, 1996].

- STOP detector (Fig. 5) which is a position-sensitive silicon detector (PSSD) composed of 16 strips cooled to 263 K . Its role is to measure the energy of α particles, conversion electrons or fission fragments from the decays of the implanted reaction products. Moreover, it is able to measure their *y*-position along the strip, as well as of the implanted nuclei in each strip. Energy resolution of the STOP detector was ≈25 keV (FWHM) for α particles and position resolution was 150 μm (FWHM). Geometric efficiency of the STOP detector was ≈53% .

- BOX detector (Fig. 5) which is composed of 6 silicon-strip detectors cooled to 263 K . The implantation depth of the reaction products in the STOP detector is only few micrometers. Alpha particles and fission products from decays of the implanted nuclei can escape from the STOP detector in backward direction. The purpose of the BOX detectors is to capture these particles. Its energy resolution was 60 keV (FWHM). Lower resolution in comparison with the STOP detector is caused by the passage of escaped particles or fission fragments through the dead layers of STOP and BOX detector. Geometric efficiency of the BOX detector in conjunction with STOP detector was 90%.

- VETO detector (Fig. 5), which is a silicon detector used to suppress the low-energy background caused mostly by high-energy protons depositing part of their energy when passing through the STOP detector.

- CLOVER detector (Fig. 5), that is composed of 4 germanium crystals and is able to measure γ or X-rays in prompt/delayed coincidence with signals from STOP detector. Resolution of CLOVER detector for summed spectra of all 4 crystals was 1.8 keV for energy ≈560 keV.

3.3 Experiment

Target material ^{208}PbS with thickness 450 $\mu g/cm^2$ was irradiated by ^{48}Ca projectiles with kinetic energy of 218.4 MeV. In complete fusion reaction compound nuclei ^{256}No* were produced and 2n evaporation channel was the dominating channel which lead to the ^{254}No evaporation residues (ER). Based on the HIVAP ([Reisdorf, 1981]) calculations, direct production of ^{254}Md via pn evaporation channel was negligible [F.P. Hessberger, 2010]. The evaporation residues were implanted into the position sensitive STOP detector where their α and β decays occured.

4 Data analysis

Decay products were identified by comparing observed energies of α particles (Fig. 7 a), with the known energies (Tab. 3).

Investigated isotopes ^{254}Fm and ^{254}Md were produced in a decay chain $^{254}\text{No} \xrightarrow{EC} {}^{254}\text{Md} \xrightarrow{EC} {}^{254}\text{Fm}$. Using prompt CE-$\gamma$ coincidence technique, the characteristic *K* X-rays of nobelium, mendelevium and fermium were identified (Fig. 8 b). Strong γ-ray transitions (53, 841, 887, 943 keV) corresponding to de-excitation of ^{254}No isomeric state previously reported in [R. D. Herzberg, 2006], [S. K. Tandel, 2006] were present (Fig. 8 a).

Using the CE-γ-γ coincidences technique, we investigated the prompt coincidences between characteristic fermium *K* X-rays and corresponding γ transitions in coincidence with conversion electron. Ma-

Table 3 – Summary of the decay data of isotopes identified according to the (Fig. 7 a) .

Isotope	$E_{\alpha EXP}$ / keV	$E_{\alpha REF}$ / keV	$T_{1/2REF}$	i_{relREF}	Reference
^{254}No	8094 ± 10	8088 ± 10	51 s±10	≈1.0	[F.P. Hessberger, 2006]
^{250}Fm	7430 ± 10	7435 ± 11	30 min±2	0.83 ± 0.03	[G. Münzenberg, 1981]
^{254}Fm	7188 ± 10	7192 ± 2	3.240 h±0.002	0.849 ± 0.005	[I. Ahmad, 1984]
^{246}Cf	6751 ± 10	6758 ± 10	35.7 h±0.5	0.793±0.01	[M. Magara, 1996]

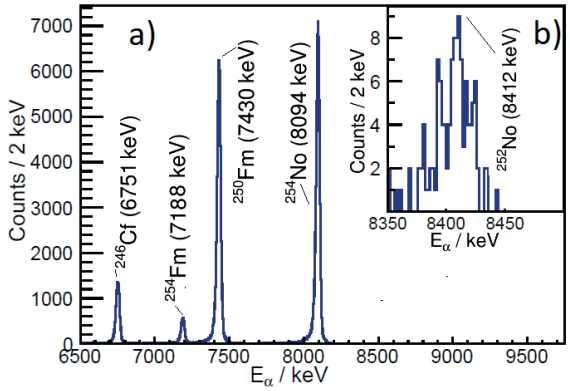


Figure 7 – **a)** Spectrum of α decays observed in beam pause. **b)** Inset displays part of the same spectrum in the range 8350-8500 keV. Isotope ^{252}No was produced due to the ^{206}Pb impurities in the target material.

trix of γ-γ coincidences in coincidence with conversion electrons (Fig. 9) gated by intervals 113-117 keV (Fm $K_{\alpha 2}$) and 119-122 keV (Fm $K_{\alpha 1}$) were used to investigate transitions in coincidence with characteristic fermium X-rays (Fig. 10). However, characteristic X-rays of fermium and nobelium were overlapping, namely $K_{\alpha 1}$ of fermium (121.06 keV) and $K_{\alpha 2}$ of nobelium (120.95 keV). As a result γ-ray transitions corresponding to the deexcitation of ^{254}No isomeric state with their corresponding Compton-scattered transitions were present in these gated spectra. For pointing out the γ transitions in coincidence with characteristic fermium K X-rays, both gated spectra (113-117 keV and 119-122 keV) were summed (Fig. 10). Summary of γ-γ matrix in coincidence with conversion electrons gated for the fermium characteristic X-rays and the most intense ^{254}Fm γ-ray transitions is in Tab. 4.

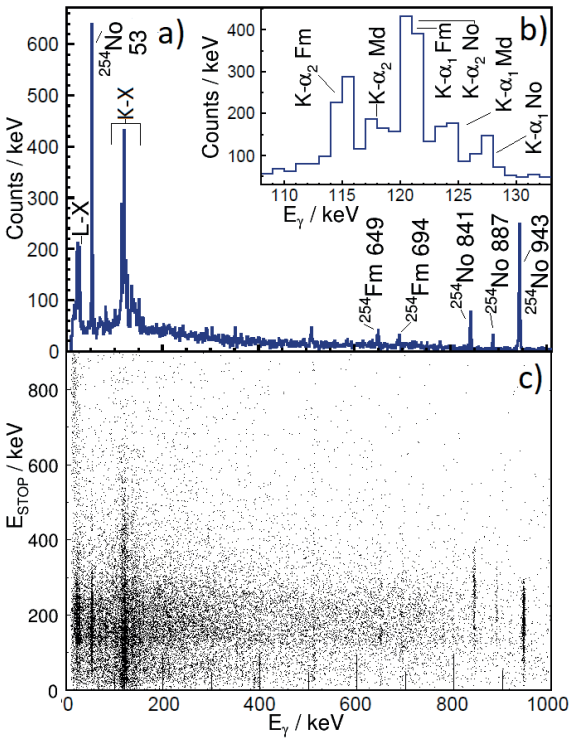


Figure 8 – **a)** Energy spectrum of γ transitions and and X-rays in prompt coincidence with conversion electrons (E_{CE}=0-900 keV). **b)** Inset displays part of the same spectrum in the range 108-133 keV. K X-rays characteristic for given elements are visible. **c)** CE-γ coincidence matrix which displays coincidences of γ and X-rays with conversion electrons (E_{CE}=0-900 keV). Y axis corresponds to the conversion electron energy.

4.1 Level scheme of states populated after EC decay of ^{254}Md

Presented investigation of ^{254}Fm excited states, showed possible new γ-ray transition in decay scheme of ^{254}Fm following the ^{254}Md EC decay and confirmed previously observed γ-ray transition in [J. Unik, 1962]. The 97 keV transition was observed in coincidence with 649 keV and 694 keV transitions

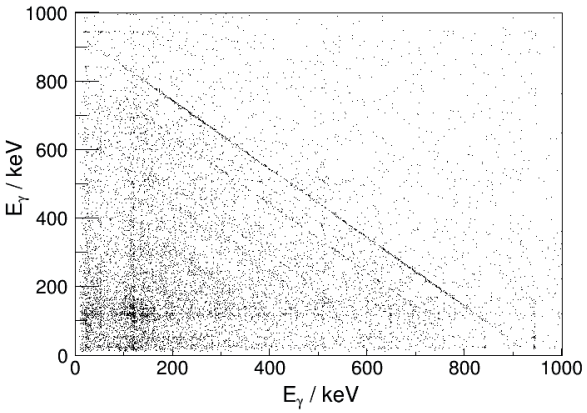


Figure 9 – γ-γ coincidence matrix in a prompt coincidence with conversion electrons ($E_{CE} = 900 keV$) during beam pause. Diagonal lines correspond to the Compton-scattered transitions (mostly 943 keV).

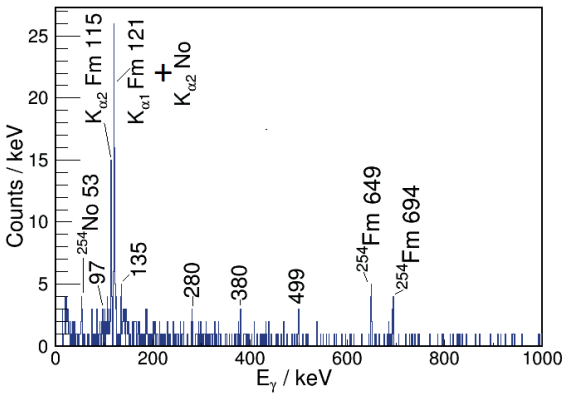


Figure 10 – Spectrum of γ-γ matrix in coincidence with conversion electrons gated by intervals corresponding to the fermium characteristic X-rays (115 keV and 121 keV).

(Tab. 4). Therefore we compared 97 keV transition total intensities calculated for different multipolarities, with the sum of total intensities of the coinciding γ-ray transitions. We used γ detection efficiency from [F.P. Hessberger, 2010]. From the agreement of 97 keV transition total intensity based on the E1 multipolarity with the sum of coinciding lines total intensities we assume its multipolarity as E1. Number of observed γ-rays was determined from spectrum Fig. 8 after background subtraction. Conversion coefficient was calculated by using [T. Kibédi, 2008]. The mean value of the conversion electron energy was evaluated for the most intense ^{254}Fm γ-ray transitions (Fig. 11). Due to the depopulation of the same ^{254}Fm energy level, similar kinetic energies of these

Table 4 – Registered γ-γ coincidences gated by the fermium K X-rays or the most intense ^{254}Fm γ transitions (649 and 694 keV). Energies are in keV.

Gate	Coinciding lines
115 Fm $K_{\alpha1}$	*97*, 115, 121, 135, 380, 649, 694
121 Fm $K_{\alpha2}$	53 (^{254}No), *97*, 115, 121, 280, 499, 649, 693
649 ^{254}Fm	97, 115, 121, 144, 292
694 ^{254}Fm	97, 115, 121, 249
97	121, 153, 286, 649, 694

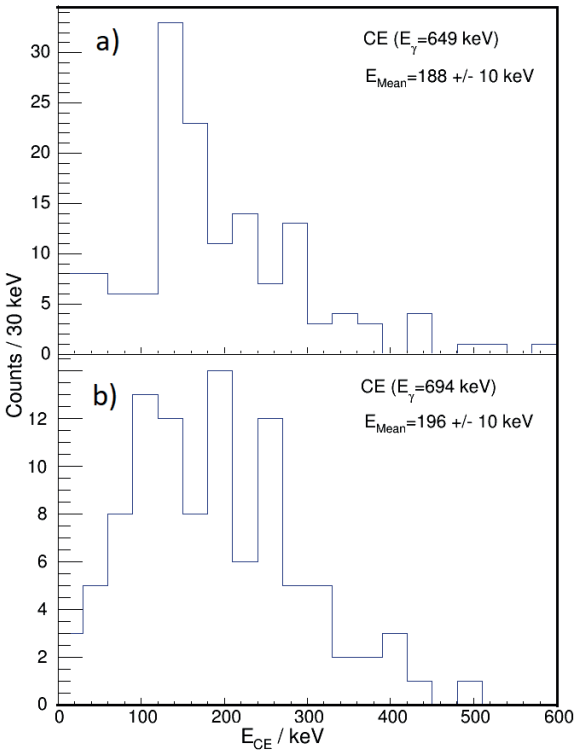


Figure 11 – Energy spectra of the conversion electrons in coincidence with the ^{254}Fm γ-ray transitions. **a)** Conversion electrons in coincidence with 649 keV γ- ray transition. **b)** Conversion electrons in coincidence with 694 keV γ-ray transition.

conversion electrons were expected. Mean values of these energies, 188±10 keV and 196±10 keV corresponding to the 649 keV (Fig. 11a) and 694 keV γ-ray transitions (Fig. 11b) were in good agreement. Using

≈450 keV as a maximum of CE kinetic energy, we are able to estimate the higher limit of the excitation energy 1460 keV as a sum of the 694 keV γ-ray transition energy, the maximum of the conversion electron kinetic energy ≈450 keV, twice the conversion electron K shell binding energy 142 keV, observed γ-ray transition 97 keV and its L shell binding energy 28 keV. Similar approach can be used for estimating the lower limit of the excitation energy 1230 keV, where we used three times of the L shell binding energy 28 keV.

According to the energy spectra of conversion electrons in coincidence with the most intense ^{254}Fm γ-ray transitions (694 and 649 keV) their maximum kinetic energy is ≈450 keV (Fig. 11). If we assume only one high energy transition corresponding to these electrons, its internal conversion coefficient must be low. However, no such transition was observed. At least two transitions in cascade with 97 keV transition are therefore expected. Sum of these transitions energies can be evaluated as ^{254}Fm excitation energy (1230-1460 keV) minus the energies of 97 keV and 694 keV transitions. From the number of K X-rays and from observation of K X-rays in coincidence with K X-rays we can assume that the energies both of these transitions are higher than K shell electron binding energy. Unfortunately, it was not possible to identify these γ-ray transitions due to their anticipated high conversion coefficient.

5 Discussion

Isotope ^{254}Md has odd number of protons and odd number of neutrons, therefore it has 2-quasi particle (2-qp) states due to its unpaired nucleons. Nucleon configuration of such isotope can be estimated by using the 1-qp states of even-odd or odd-even isotopes in its vicinity. Spin and parity of ground and excited states of 1-qp states of isotopes and isotones in the vicinity of ^{254}Md were independently determined by using the theoretical calculations [A. Parkhomenko, 2004] and [A. Parkhomenko, 2005] and from experimental values. Theoretical calculations were done within a macroscopic-microscopic approach. The Yukawa plus-exponential model was used for the calculation of the macroscopic part of the energy [H. J. Krappe, 1979]. Calculations of the microscopic part of the energy were done by using the Strutinsky shell correction [V. M. Strutinsky, 1967]. According to the coupling rule, spin of the ^{254}Md 2-qp states corresponds to the integer values between the sum or difference of the 1-qp states spin. Moreover, by using the Gallagher-Moszkowski (G-M) rule [C. J. Gallagher, 1958] configuration of both unpaired nucleon spins in the same direction is more

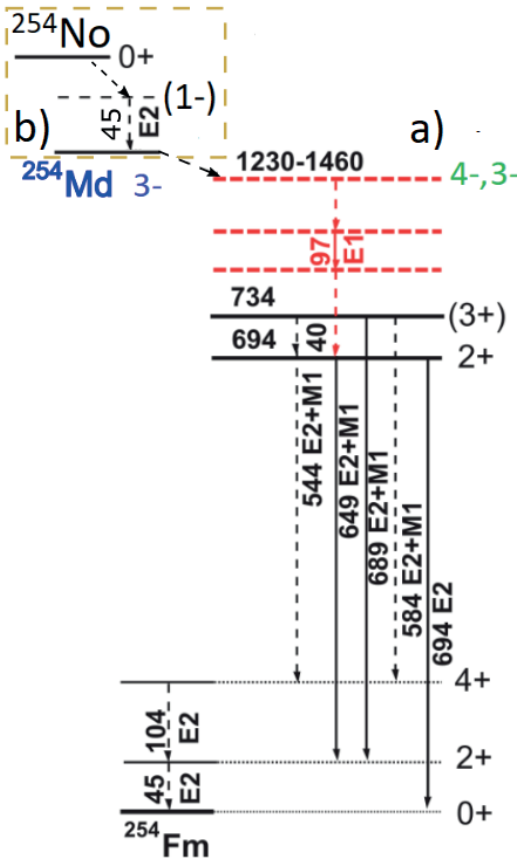


Figure 12 – **a)** Decay scheme and level energies (in keV) populated after EC of ^{254}Md. The energies are rounded to integers for a better presentation. Red arrows denote previously unobserved γ-ray transitions. Black arrows are all γ-ray transitions observed in [J. Unik, 1962]. Only full arrows correspond to the γ-ray transitions which were observed in our work. Blue - ground state spin and parity of ^{254}Md was determined by using the experimental 1-qp states of isotopes and isotones in its vicinity (Tab. 5). Green - spin and parity of the highest level populated after EC decay of ^{254}Md which were determined by using the logft systematics (Fig. 1). Red - levels with corresponding energies identified by using the CE-γ and CE-γ-γ coincidence technique. **b)** Transitions and tentative levels populated after EC of ^{254}No.

probable for the ground state, which is denoted in red color in Tab. 5. For the sake of clarity we also determine the configurations applying Brennan-Bernstein [M. H. Brennan, 1960] rules which are another coupling rules used in the cases of odd-odd nuclei. By using this coupling rules the same configurations of ^{254}Md ground state were obtained. Summary of possible 2-qp configurations is in Tab. 5. Using the

Table 5 – Possible 2-qp configurations of ^{254}Md from coupling of the theoretical and experimental 1-qp states of isotopes (^{253}Md) and isotones (^{253}Fm) in its vicinity where g.s. corresponds to ground state, exc.s. stands for the excited state. Most probable spin of the ground state estimated by using the G-M rule is denoted in red. Number in brackets are Nillson quantum numbers [N n_z Λ] where N is the oscillator principal quantum number, n_z is the number of nodes in the Z direction and Λ is projection of angular momentum on the symmetry axis.

Theoretical 1-qp states	g.s. ^{253}Md 1/2- [521]	1.exc.s. ^{253}Md 7/2- [514]
g.s. ^{253}Fm 1/2+ [620]	0-	3-
	1-	4-
1.exc.s. ^{253}Fm 3/2+ [622]	1-	2-
	2-	5-
Experimental 1-qp states	g.s. ^{253}Md 7/2- [514]	1.exc.s. ^{253}Md 1/2- [521]
g.s. ^{253}Fm 1/2+ [620]	3-	0-
	4-	1-
1.exc.s. ^{253}Fm 3/2+ [622]	2-	1-
	5-	2-

log(ft) calculator [M. Emeric,], the log(ft) value of the ^{254}Md EC decay was estimated ≈6, where we asssumed EC decay from the ground state of ^{254}Md to the excited state of ^{254}Fm. The Q value used in this calculation was determined by using Eq.1 and experimental nuclear masses from the database [M. Wang, 2012]. Resulting log(ft)≈6 corresponds to the allowed transition according to the log(ft) systematics (Fig. 1) with possible change of spin 0 or 1 and without the change in parity. Based on the log(ft) value of ^{254}Md EC decay, estimate of the ^{254}Md ground state spin and parity and observed ^{254}Fm γ-ray transitions, it is possible to present the level scheme of ^{254}Fm (Fig. 12a). We exclude the possibility of ^{254}Md ground state spin and parity 0- . In this case based on the log(ft) value change of spin 0,1 and the ^{254}Fm populated state excitation energy >1230 keV with spin and parity 0-, 1- we expected several hundreds keV transition to lower energy states with low spin. However, we do not observed such transition.

As noted previously, investigated isotopes ^{254}Fm and ^{254}Md were produced in a decay chain ^{254}No$\xrightarrow{EC}$^{254}Md$\xrightarrow{EC}$^{254}Fm. The ground state of even Z even N nucleus ^{254}No with spin and parity 0+ decays via EC into the ^{254}Md. No coincidences between the characteristic X-rays of mendelevium and γ-ray transitions were observed. In the case of direct EC decay from 0+ state of ^{254}No to the 3- state of ^{254}Md third forbidden transition is required (see Tab. 1). However, such decay should be suppressed. Therefore, the 3- ground state of ^{254}Md has to be populated indirectly. According to the Tab. 5 [p_1 : 1/2-[521]⊗n_0 : 1/2+[620]]$_{1-}$ and calculation by Sood [P. C. Sood, 2017] there is a possibility of the first excitated state 1- in ^{254}Md. The energy difference between this 1- state and 3- ground state is ≈45 keV [P. C. Sood, 2017]. In that case no γ rays in coincidence with mendelevium X-rays should be observed. Connection between the first excited state 1- and ground state 3- could be via low energy transition with multipolarity E2 which should be highly converted (Fig. 12b).

6 Conclusion

Excited states of ^{254}Fm populated after EC decay of ^{254}Md were investigated for the first time and limits of ^{254}Fm excitation energy were calculated (1230-1460 keV). Moreover possible 2-qp configurations of ^{254}Md were investigated. Based on observed ^{254}Fm γ-ray transitions following the EC decay of ^{254}Md, the log(ft) value corresponding to this EC decay and 2-qp configurations of ^{254}Md, the level scheme populated after EC of ^{254}Md was proposed for the first time.

Acknowledgements

I would like to thank my supervisor, Mgr. Boris Andel, PhD. for his valuable comments, advices, support and patience. I am very grateful to doc. Mgr. Stanislav Antalic, PhD. for many insightful discussions. Last, not least I would like to thank Mgr. Dušan Štefánik, PhD. for his patience with my questions.

References

[Š. Šáro, 1996] Š. Šáro, e. a. (1996). Large size foil-microchannel plate timing detectors. *Nuc. Ins. Meth. in Phys. Res. A*, 381:520–526.

[A. Bhagwat, 2005] A. Bhagwat, e. a. (2005). Nuclear Data Sheets for A = 254. *Nuclear Data Sheets*, 105:972.

[A. Parkhomenko, 2004] A. Parkhomenko, e. a. (2004). Proton one-quasiparticle States of Heaviest Nuclei. *Acta. Phys. Pol. B*, 35:2447–2471.

[A. Parkhomenko, 2005] A. Parkhomenko, e. a. (2005). Neutron One-Quasiparticle States of Heaviest Nuclei. *Acta. Phys. Pol. B*, 36:3115–3137.

[B. Singh, 1998] B. Singh, e. a. (1998). Review of Log ft Values in β decay. *Nuclear Data Sheets*, 84:487–563.

[C. E. Bemis, 1976] C. E. Bemis, e. a. (1976). X-Ray Identification and Decay Properties of Isotopes of Lawrencium. *Ann. Rpt. Oak Ridge*, 5111:58.

[C. J. Gallagher, 1958] C. J. Gallagher, e. a. (1958). Coupling of Angular Momenta in Odd-Odd Nuclei. *Phys. Rev.*, 111:1282.

[Ch. Balonek, 2006] Ch. Balonek, e. a. (2006). The new precise α_K measurement as a test of internal conversion theory. Cyclotron Institute.

[F.P. Hessberger, 2006] F.P. Hessberger, e. a. (2006). Alpha-gamma decay studies of ^{255}No. *Eur. Phys. J. A*, 29:165–173.

[F.P. Hessberger, 2010] F.P. Hessberger, e. a. (2010). Decay studies of K isomers in ^{254}No. *Eur. Phys. J. A*, 43:55–66.

[G. Münzenberg, 1979] G. Münzenberg, e. a. (1979). The velocity filter SHIP, a separator of unslowed heavy ion fusion products. *Nuc. Ins. Meth.*, 161:65–82.

[G. Münzenberg, 1981] G. Münzenberg, e. a. (1981). Identification of Element 107 by α-Correlation Chains. *Z. Phys. A*, 300:107–108.

[GSI,] GSI. Velocity Filter SHIP https://www.gsi.de/en/work/research/nustarenna/nustarenna-divisions/she-physik.htm.

[H. J. Krappe, 1979] H. J. Krappe, e. a. (1979). Unified nuclear potential for heavy-ion elastic scattering, fusion, fission, and ground-state masses and deformations. *Phys. Rev. C*, 20:992.

[Hofmann, 2002] Hofmann, S. (2002). On beyond Uranium, Journey to the end of periodic table.

[Hofmann, 2009] Hofmann, S. (2009). Superheavy Elements. *Lecture Notes in Physics*, 764:203–252.

[I. Ahmad, 1973] I. Ahmad, e. a. (1973). Alpha-decay of 39.3 h ^{254m}Es isomer. *Nuc. Phys. A*, 208:287–301.

[I. Ahmad, 1984] I. Ahmad, e. a. (1984). Alpha Decay Properties of ^{247}Cf, ^{248}Cf, ^{252}Fm and ^{254}Fm. *Nucl.Phys. A*, 413:423–431.

[J. Unik, 1962] J. Unik, e. a. (1962). The decay scheme of 39.3 h ^{254}Es. *Nuc. Phys.*, 36:284–304.

[Krane, 1988] Krane, K. S. (1988). Introductory Nuclear Physics. page 436, Hoboken, New Jersey. John Wiley and Sons.

[M. Emeric,] M. Emeric, e. a. Logft National Nuclear Data Center, Brookhaven National Laboratory http://www.nndc.bnl.gov/logft/.

[M. H. Brennan, 1960] M. H. Brennan, e. a. (1960). j-j Coupling Model in Odd-Odd Nuclei. *Phys. Rev.*, 120:927–933.

[M. Magara, 1996] M. Magara, e. a. (1996). Decay properties of ^{245}Cf. *Radiochim.Acta*, 72:39–43.

[M. Schädel, 2006] M. Schädel, e. a. (2006). The chemistry of superheavy elements. Berlin-Heidelberg. Springer-Verlag.

[M. Wang, 2012] M. Wang, e. a. (2012). The AME2012 atomic mass evaluation. *Chinese Physics C*, 36:1603–2014.

[P. C. Sood, 2016] P. C. Sood, e. a. (2016). Description of Long-Lived Isomers in ^{254}Md. *Proceedings of the DAE-BRNS Symp. on Nucl. Phys.*, 61.

[P. C. Sood, 2017] P. C. Sood, e. a. (2017). Characterization of long-lived isomers in the odd-odd heavy actinide ^{254}Md. *Phys. Rev. C*, 95:171–176.

[R. D. Herzberg, 2006] R. D. Herzberg, e. a. (2006). Nuclear isomers in superheavy elements as stepping stones towards the island of stability. *Nature*, 442:896–899.

[Reisdorf, 1981] Reisdorf, W. (1981). Analysis of fissionability data at high excitation energie. *Z. Phys. A*, 300:227–238.

[S. K. Tandel, 2006] S. K. Tandel, e. a. (2006). K Isomers in ^{254}No: Probing Single-Particle Energies and Pairing Strengths in the Heaviest Nuclei. *Phys. Rev. Lett.*, 97:21–24.

[T. Kibédi, 2008] T. Kibédi, e. a. (2008). Evaluation of theoretical conversion coefficients using BrIcc. *Nucl. Instr. and Meth. A*, 589:202–229.

[V. M. Strutinsky, 1967] V. M. Strutinsky, e. a. (1967). Shell effects in nuclear masses and deformation energies. *Nuc. Phys. A*, 95:420–443.

[W. Barth, 2006] W. Barth, e. a. (2006). UNILAC upgrade program for the heavy element research at GSI-SHIP. *Proceedings of EPAC*.

[W. D. Loveland, 2006] W. D. Loveland, e. a. (2006). Modern nuclear chemistry. Hoboken, New Jersey. John Wiley and Sons.

[Weisskopf, 1951] Weisskopf, V. F. (1951). Radiative Transition Probabilities in Nuclei. *Physical Review*, 83:1073.

[Wien, 1898] Wien, W. (1898). Untersuchungen über die electrische Entladung in verdünnten Gasen. *Ann. Physik*, 301:440–452.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 136–146
ISBN 978-8081470882, © 2018 Terézia Eckertová

Metódy kontinuálneho merania radónu vo vodách

Terézia Eckertová[1*]
Školiteľ: Monika Müllerová[2*]
Konzultant: Karol Holý[3*]

[*] Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

Kontinuálne monitorovanie koncentrácií ^{222}Rn vo vodách so sebou prináša viaceré technické problémy. Keďže väčšina princípov merania objemových aktivít radónu (OAR) a jeho dcérskych produktov je založená na ich detekcii v plynnom médiu, vynára sa otázka ako rýchlo a čo s najvyššou účinnosťou odseparovať radón z objemu vzorkovej vody do pracovného objemu detektora. V takomto prípade je dôležité zároveň zamedziť prístupu všadeprítomnej vlhkosti do citlivých častí meracej aparatúry. Výhodou takto získaných informácií je nepretržitý záznam priebehu koncentrácií ^{222}Rn, ktoré možno využiť pri štúdiu rôznych procesov zapríčiňujúce ich zmeny, či objasniť dynamiku vodného zdroja. V tejto práci sú podrobnejšie opísané a skonštruované kontinuálne monitory radónu vo vodách a tiež sú prezentované výsledky ich testovania pri meraní radónu vo vodách z vodovodného potrubia.

Kľúčové slová: Kontinuálny monitoring, Radón vo vodách, Saturovaný stav, Difúzia

1 Úvod

Radón (izotop ^{222}Rn) je rádioaktívny inertný plyn s dobou polpremeny 3,826 dňa. Ide o alfa žiarič, ktorý vzniká premenou ^{226}Ra z uránového premenového radu. Ten je súčasťou zemskej kôry a preto je ^{238}U spolu so svojimi produktmi premeny zastúpený s určitým pomerom takmer vo všetkých typoch podložia. Keďže radón je za bežných podmienok chemicky nereaktívny, jeho koncentrácia v určitom bode merania je funkciou množstva a distribúcie jeho materského prvku v pôvodnom materiáli, účinnosti prenosových metód do biosféry a jeho doby polpremeny [Patschová, 2001].

V závislosti od štruktúry a zloženia okolitého materiálu môže radón uviaznuť v minerály hneď po svojom vzniku alebo sa hromadiť v póroch či puklinách. Do okolitého prostredia sa dostáva procesom emanácie, ktorej stupeň hodnotí koeficient emanácie. Ten vyjadruje pomer počtu atómov ^{222}Rn, ktoré unikli z materiálu, k celkovému počtu atómov radónu, ktoré v materiáli vznikli za jednotku času [Nazaroff and Nero, 1988]. Je to aj jeden zo spôsobov, akým sa radón dostáva do vôd obmývajúcich tieto horniny. V prípade, ak sa rádium nachádza na povrchu horniny, dochádza aj k difúzii radónu do vody s koeficientom difúzie 10^{-5} cm^2s^{-1} [Cothern and Smith, 1987]. V prípade silne porušenej horniny sa ^{222}Rn uvoľňuje aj z hĺbky kapilár či z tektonických zlomoch s rýchlou cirkuláciou vody [Daniel et al., 1996]. Len 1 % radónu, ktoré nachádzame vo vodách má pôvod priamo v rádioaktívnej premene rádia obsiahnutom vo vode [Asikainen and Kahlos, 1979].

Prenos radónu do vôd ovplyvňujú najmä faktory ako rádioaktivita hornín a tektonická povaha prostredia. Dominantným mechanizmom, ktorým je radón dopravený do infiltračného povodia je tok podzemnej vody [Cothern and Smith, 1987]. Podľa dĺžky existencie systému voda - hornina sa hromadia jednotlivé izotopy do tekutej fázy. V počiatočných etapách sa krátkožijúce izotopy nahromaďujú rýchlejšie ako tie dlhožijúce, s predlžovaním kontaktu tohto systému prevládajú nahromadené dlhožijúce izotopy [Cothern and Smith, 1987].

Do povrchových vôd sa radón dostáva výverom podzemných vôd spolu s prenesenými rádioaktívnymi prvkami, emanáciou a vylúhovaním hornín riečneho koryta. Koncentrácia radónu je v povrchových vodách spravidla nižšia ako pri spodných vodách a dôležitú úlohu pri tom zohráva uvoľňovanie radónu z otvorenej hladiny vodných tokov a vodných nádrží. V dôsledku prebublávania vodných vrstiev spôsobeného či už biochemickými plynmi alebo vetrom podnecujúcom premiešavanie vodnej masy je únik radónu o to rýchlejší [Patschová, 2001]. V prípade morí a oceánov sa pozorujú zmeny ^{222}Rn v dôsledku jeho uvoľňovania do atmosféry len do hĺbky okolo 20 m, vo väčších hĺbkach je radón v rovnováhe s rádiom, okrem miest s rýchlym vertikálnym premiešavaním jednotlivých vrstiev vôd [Gudzenko and Dubinčuk, 1987].

1 terka6@gmail.com
2 Monika.Mullerova@fmph.uniba.sk
3 Karol.Holy@fmph.uniba.sk

Samotná rozpustnosť radónu vo vodách je funkciou viacerých premenných. So zvyšujúcim sa tlakom narastá, so zvyšovaním stupňa mineralizácie vôd naopak klesá [Serdjukova and Kapitanov, 1969]. Pre koeficient rozpustnosti α v závislosti od teploty t (°C) pre vody platí vzťah (1), a teda s rastúcou teplotou sa rozpustnosť znižuje [Virk, Walia, Bajwa, 2001].

$$\alpha = 0{,}1057 \pm 0{,}405.e^{-0{,}0502t} \quad (1)$$

V praxi to znamená, že pri teplote 20 °C, kedy je α = 0,254, je pri rovnakom objeme kvapaliny a plynu nad ňou v stave rovnováhy medzi oboma tekutinami podiel radónu vo vode asi 25 % z jeho koncentrácie vo vzduchu.

2 Meranie ^{222}Rn vo vodách

Možností, ako merať ^{222}Rn vo vodách je niekoľko. Pri určovaní jeho koncentrácií sa využíva detekcia častíc alfa, beta alebo gama žiarenia, ktoré emituje pri svojej rádioaktívnej premene spolu so svojimi produktmi premeny. Podľa spôsobu, akým je nosný plyn s obsahom rádioaktívneho izotopu transponovaný do detekčného média sa delia metódy na aktívne a pasívne. Pri aktívnych metódach sa vzorkový plyn čerpá do meracieho zariadenia čerpadlami, pri pasívnom sa radón dostáva do pracovného objemu prostredníctvom difúzie.

Samotné merania môžu prebiehať buď integrálne, kedy je detektor na niekoľko dní, týždňov alebo mesiacov vystavený pôsobeniu žiarenia a až po expozícii sa určuje priemerná koncentrácia radónu spolu s jeho produktmi premeny počas doby ožarovania.

Ďalej je možné zaznamenávať aktuálnu informáciu o koncentrácií ^{222}Rn nepretržite počas časových intervaloch, kedy súčasne prebieha odber vzoriek ako aj ukladanie dát. Ide o kontinuálny spôsob merania využívaný najmä pri potrebe sledovania rýchlych zmien koncentrácií radónu.

Merania, kedy sa určuje okamžitá objemová aktivita radónu alebo jeho produktov premeny krátko po odbere vzorky, sa týkajú bodových odberov. Tie možno využiť buď pri určovaní vysokých koncentrácií radónu alebo pri kalibrácií iných meracích metód.

2.1 Detektory pre meranie ^{222}Rn

Pri detekcii radónu vo vodách možno využiť scintilačné komory, ionizačné komory, elektrety, metódu absorpcie na aktívnom uhlí, alebo metódu kvapalnej scintilačnej spektrometrie LSC.

Emanačná technika, na ktorej je založená aj detekcia prostredníctvom scintilačných komôr, patrí medzi jednu z najrozšírenejších metód pre meranie koncentrácií ^{222}Rn a jeho produktov premeny. Lucasove detekčné komôrky sú uzatvárateľné nádoby s objemom 0,1 - 1 ℓ, ktorých vnútorná strana je pokrytá luminescenčnou vrstvou ZnS(Ag) [Lucas, 1957]. Meranie je založené na registrácií svetelných záblesko v, ktoré vznikajú pri interakcii emitovaných alfa častíc so scintilátorom, ktoré prechádzajú okienkom na dne komôrky do fotonásobiča, ktorý ich konverguje na elektrický impulz.

Ionizačné komory sú detektory vhodné pre meranie zdrojov alfa s nízkou intenzitou, ktoré umožňujú detegovať aj impulzy od jednotlivých vzniknutých alfa častíc v reálnom čase. Touto technikou možno odlíšiť medzi impulzmi spôsobenými viacerými alfa žiaričmi [Miles, 2001]. Sú založené na ionizácii plynovej náplne detektora nabitými časticami. Alfa častica, ako je to v prípade merania radónu, stráca ionizáciou jednej molekuly vzduchu energiu približne 35 eV, čím sa vytvorí asi 157.10^3 iónových párov pri jej energii 5,5 MeV, ktoré sa zachytávajú na elektródach [Calin and Calin, 2011]. Tento elektrický náboj sa zaznamenáva a je úmerný objemovej aktivite radónu. Ako plynová náplň sa zvykne používať dusík, argón alebo vzduch [Tanaka, 1990].

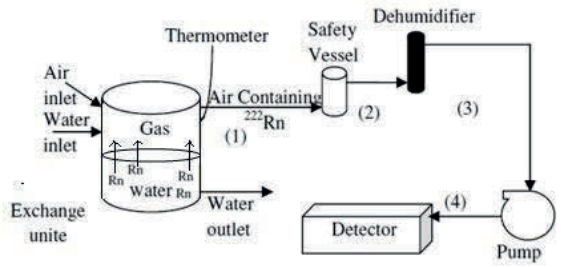
Elektretová ionizačná komora (EIC) je ionizačná komora, v ktorej elektret, nabitý teflónový disk, slúži ako zdroj elektrostatického poľa aj ako snímač. Radón, ktorý preniká do komory cez difúznu bariéru produkuje v objeme komory okrem elektrónov aj ióny, ktoré driftujú k záporne nabitému elektretu, čím znižujú jeho náboj. Tento pokles je mierou celkovej ionizácie vytvorenej počas doby expozície elektretu v objeme. Jeho náboj pred a po expozícií sa meria citlivou čítačkou elektrického napätia. Citlivosť a dynamický rozsah závisia od hrúbky elektretu a objemu komory. Koncentrácia radónu sa vypočíta pomocou vhodných kalibračných konštánt a doby expozície elektretu. Ide o nízkonákladové monitory, ktoré však poskytujú informáciu len o priemernej hodnote aktivity počas určitého krátkeho obdobia (deň až pár týždňov) [Kotrappa and Stieff, 1994].

Aktivované uhlie sa používa ako pasívne médium, na ktorom môže byť radón absorbovaný. Vzorkový vzduch, ktorý vzniká prebublávaním vzorky vody, prúdi cez filter na záchyt nečistôt a silikagel pre záchyt vlhkosti do utesnenej nádoby s dreveným uhlím, na ktorom sa zachytáva takmer s 99 % účinnosťou. Doba expozície sa môže pohybovať od niekoľkých hodín až po niekoľko dní v závislosti od očakávanej úrovne radónu a od požadovaného detekčného limitu [Ishimori et al., 2013]. Po expozícií, sa aktivita môže určiť gama spektrometriou prostredníctvom produktov premeny radónu ^{214}Pb a ^{214}Bi [George, 1984] alebo prevodom do Lucasovej komôrky zahratím uhlia na 400 - 500 °C [Gudzenko and Dubinčuk, 1987].

Metóda LSC alebo tiež metóda kvapalnej scintilácie nevyžaduje separáciu radónu obsiahnutom vo vodnej fázy do plynnej a registrácia častíc emitovaných ^{222}Rn a jeho produktmi premeny sa uskutočňuje priamo zo vzorkovej vody. Vzorka vody s objemom 17 mℓ sa zmieša s 5 mℓ kvapalným scintilátorom a po dosiahnutí rádioaktívnej rovnováhy sa meria počet impulzov po dobu 2 hodín kvapalným scintilačným spektrometrom. Uvedený postup je podľa normy STN 75 7615, podľa ktorej sa stanovuje objemová aktivita ^{222}Rn vo vode [STN 75 7615, 2014].

2.2 Prehľad metód kontinuálneho merania ^{222}Rn

Systém kontinuálneho monitoringu ^{222}Rn vo vodách uplatnili v práci [Montazeri et al., 2011] za účelom predpovedania zemetrasenia. Predmetom analýz bol horúci prameň Jowshan nachádzajúci sa v blízkosti aktívneho zlomu Gowk v Iráne. Pre určenie OAR sa použil detektor Alpha GUARD PQ2000 PRO, ktorý vykonával meranie prostredníctvom registrácie emitovaných alfa častíc v ionizačnej komore. Schéma celej meracej aparatúry je znázornená na Obr. 1.

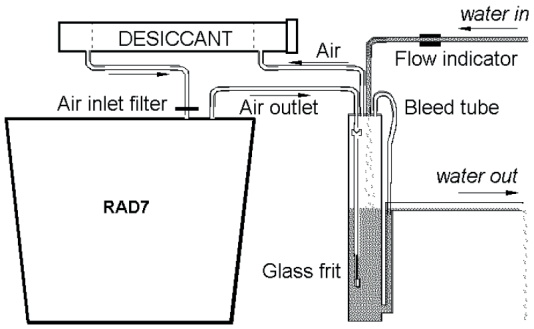


Obr. 1: Schematické znázornenie meracej aparatúry pre kontinuálny monitoring ^{222}Rn vo vodách [Montazeri et al., 2011]

Cez polyetylénovú rúrku sa prameň odvádzal pri konštantnom prietoku do výmennej jednotky, kde sa radón rozpustený vo vode uvoľňoval difúziou do priestoru nad hladinou. Odtiaľ sa vzduch odčerpával každých 10 min, prechádzal cez pohlcovač vodných pár s obsahom $CaCl_2$ a následne sa meral detektorom. Prostredníctvom neustáleho zaznamenávania množstva ^{222}Rn v prameni počas ôsmych mesiacoch autori zaznamenali koreláciu medzi anomáliami v OAR (za ktoré sa považovali hodnoty OAR mimo priemeru ± 2σ) a veľkosťou zemetrasenia a antikoreláciu so vzdialenosťou medzi epicentrami a monitorovacou stanicou.

Kontinuálnemu meraniu radónu vo vodách sa venovali aj v prácach [Burnett et al., 2001] a [Dulaiova, 2005], kde pomocou monitoringu určovali množstvo ^{222}Rn, ktoré sa dostáva do pobrežných oblastí oceánov cez podzemnú vodu. V oboch prácach používali detektor RAD-7, ktorý slúži na určovanie koncentrácií ^{222}Rn vo vzduchu cez zachytávanie kladne nabitých dcérskych produktov radónu $^{218}Po^{+}$ a $^{214}Po^{+}$ na jeho povrchu. Samotnú aktivitu vo vode potom bolo možné vypočítať cez koeficient rozpustnosti (α) radónu vo vodách pri danej teplote v stave rovnováhy medzi oboma fázami. Keďže pri pracovnej teplote (20°C) je vo vzduchu približne štyrikrát viac radónu (α ≈ 0,25) ako vo vode, tak pre zabezpečenie požadovaného množstva ^{222}Rn musí byť cez systém prečerpávaný štvornásobne väčší objem vody. V oboch článkoch však použili rozličný spôsob deemanovania radónu z vody.

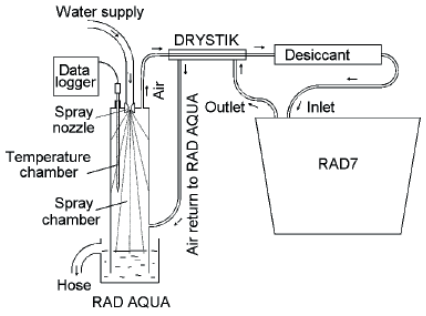
V práci [Burnett et al., 2001] sa vzorková voda pri konštantnom prúde privádzala do výmenníka (priehľadná plastová rúrka), kde sa z nej radón uvoľňoval cez prúd vzduchu prechádzajúci cez sklenú fritu. Takto obohatený vzduch prechádzal cez vysušovací článok a následne vstupoval do detektora. Odtiaľ bol čerpaný späť do výmenníka (Obr. 2), pričom stále cirkuloval v takto uzavretej slučke.



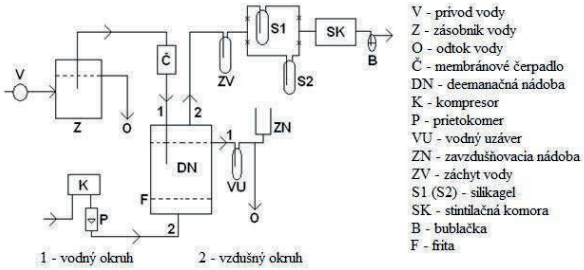
Obr.2 : Princíp kontinuálneho merania ^{222}Rn vo vodách podľa [Burnett et al., 2001]

Časová odozva zariadenia závisela od objemu a prietoku cirkulujúceho vzduchu v slučke, rýchlosti uvoľňovania radónu z vody (podmienené účinnosťou prevodu), rýchlosti pritekania vody do výmenníka a jej objemu v ňom. Realizácia experimentu sa uskutočnila v Mexickom zálive počas piatich dní, pričom detektor vyhodnocoval údaje každé 2 hodiny. Rozsah nameraných hodnôt bol (0,08 - 0,14) Bq.ℓ$^{-1}$ a zaznamenali sa systematické zmeny v koncentrácií OAR v 12-hodinových intervaloch súvisiacich so slapovými javmi. Vyhodnotiť presakovanie podzemnej vody do oceánu nebolo možné za tak krátky čas merania.

V práci [Dulaiova et al., 2005] bol použitý rovnaký princíp merania ako v práci [Burnett et al., 2001], len k emanácií radónu z vody do cirkulujúceho vzduchu vo výmenníku dochádzalo prostredníctvom vodnej trysky, ktorá vodu sprchovala vo forme jemných kvapôčok, z ktorých bol uvoľňovaný radón (Obr. 3).

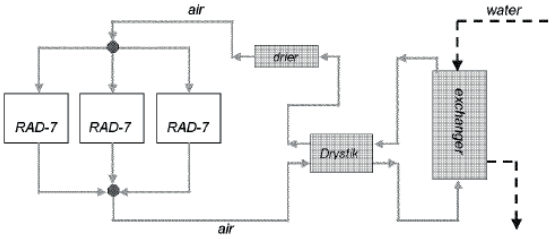


Obr.3 : Princíp kontinuálneho merania ^{222}Rn vo vodách podľa [Dulaiova et al., 2005]



Obr.6 : Schéma meracej aparatúry pre kontinuálne meranie ^{222}Rn vo vode [Holý et al., 2006]

Tento spôsob umožňoval vykonávať rýchlejšie merania v dôsledku väčšieho prietoku vody cez výmenník, keďže bolo potrebné dosiahnuť čo najrýchlejšie rovnováhu medzi pritekajúcou vodou a okolitým prúdiacim vzduchom cez aparatúru. Analyzovaním systému na jeho časovú odozvu pri zmene obsahu ^{222}Rn vo vode, sa striedavo prečerpávala deionizovaná voda s minimálnym množstvom ^{222}Rn (0,35 Bq. ℓ $^{-1}$) a voda z vodovodu ((6 -14) Bq. ℓ $^{-1}$). Časové oneskorenie pri zmene z nízko radónovej vody na vysoko radónovú sa prejavilo rýchlo a rovnováha sa dosiahla po 20 min. Pri opačnej zmene bola odozva značne pomalšia, čo je spôsobené dlhodobejším procesom rozpúšťania prebytočného radónu zo vzduchu do vody odtekajúcej zo systému oproti procesu uvoľňovania radónu z vody do vzduchu. Pre vylepšenie časového rozlíšenia (o trojnásobok) bol pri terénnych testoch použitý multidetektorový systém, v ktorom sa použili tri detektory (RAD-7) zapojené paralelne do sústavy (Obr. 4).



Obr. 4: Multidetektorový systém pre kontinuálne meranie OAR vo vodách [Dulaiova et al., 2005]

Takéto zapojenie bolo potrebné pri priestorovom určovaní OAR v oceáne, keďže sa meralo nepretržite počas pomalého pohybu loďou (2 - 3 uzly) smerom od pobrežia asi 5 km a späť. Objemovú aktivitu radónu na danom mieste bolo možné dosiahnuť s presnosťou ± (5 - 15) % v závislosti od veľkosti meraných koncentrácií.

Ďalšou aparatúrou, kedy na uvoľňovanie radónu z vody bola využitá frita, je publikované v prácach [Holý et al., 2006], [Gulášová, 2006] a jej schéma je znázornená na Obr. 6.

Celé zariadenie pracovalo v kontinuálnom režime, pričom súčasťou vodného okruhu bol prívod vzorkovej vody do deemanačnej nádoby (DN), ktorý bol udržiavaný na konštantnom objeme 120 mℓ a následne bola voda zbavená radónu zo systému odvedená. Vzdušný okruh zabezpečoval kolobeh vzduchu, na ktorý sa viazal radón. Pre experiment sa použila voda z vodovodného kohútika, ktorá pritekala do zásobníka a odtiaľ sa čerpala do deemanačnej nádoby s objemom 180 mℓ. Tam sa radón uvoľňoval pomocou frity, cez ktorú sa pomocou kompresora prefukoval neaktívny vzduch. Takto vzduch obohatený o radón prechádzal cez systémy záchytu vlhkosti a následne do 1 litrovej scintilačnej komôrky. Tá pracovala v prietokovom režime, neustále detegujúc pritekajúci aktívny vzduch. Objemovú aktivitu bolo potom možné vypočítať na základe poznania prietoku vzduchu cez DN a prietoku pritekajúcej vzorkovej vody zo zásobníka do DN. Problémom pri takomto usporiadaní systému bola jeho celková stabilita podmienená prepojením vzdušného okruhu s vodným, kedy je systém citlivý na zmeny prietoku vody a vzduchu.

Princíp, kedy bol radón odvádzaný z vody do pracovného objemu detektora prostredníctvom difúzie použili v práci [Tasaka et al., 1994]. V nej overovali čistotu vodu z hľadiska rozpadových produktov ^{226}Ra používanej v experimente Kamiokande na detekciu neutrín. Ako detektor použili kremíkový detektor umiestnený vo vodeodolnej, nehrdzavejúcej, oceľovej, cylindrickej komore, do ktorej radón difundoval cez semipermeabilnú polypropylénovú membránu Celgard 2400. Táto fólia neprepúšťala vodu do tlaku 40 kgf.cm^{-2} čo bolo za daných podmienok ekvivalentom hĺbky 400 m pod hladinou vody. Nameraná priemerná koncentrácia počas 6 mesiacov monitorovania bola 0,51 ± 0,11 Bq.m^{-3}, pričom detektor bol umiestnený v stálej hĺbke 50 cm pod vodnou hladinou.

2.3 Využitie meraní ^{222}Rn vo vodách

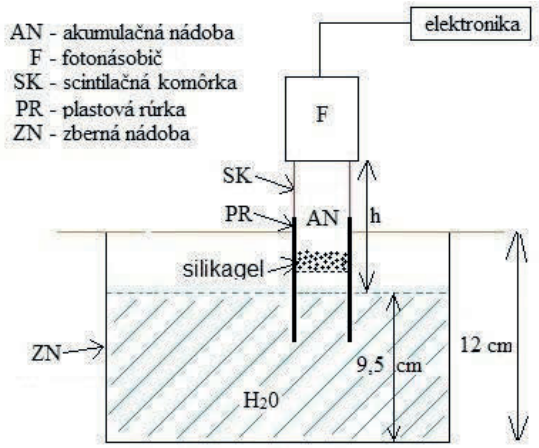
Detekcia radónu vo vodách nachádza množstvo uplatnení vo viacerých odvetviach.

Meraním jeho koncentrácií možno určovať vek mladých podzemných vôd a tiež aj dobu infiltrácie povrchových vôd do podzemných [Estrada, 2009] alebo pri štúdiu charakteru zvodnenia hornín smerom do hĺbky hydrogeologickej štruktúry [Pospíšil et al., 1981]. V oceánografii sa môže využiť pre posúdenie premiešavania morskej a podzemnej vody [Dulaiova et al., 2005]. Pre účely geologického výskumu môže slúžiť pri prospekcii uránu alebo ropy, či pri odhaľovaní trhlín alebo zlomov v oblastiach postihnutých zosuvmi pôdy. S tým súvisí aj jeho využitie pri predpovedaní zemetrasení či vulkanických procesov, kedy v závislosti od množstva trhlín v pôde dochádza k vytváraniu nových únikových ciest alebo práve k zamedzeniu únikových trás pre radón, čo sa môže prejaviť v náhlych zmenách v jeho množstve vo vodných zdrojoch [Luís, 1999]. Okrem toho, tieto pozorovania zmien jeho koncentrácií možno využiť aj pri sledovaní meteorologických procesoch ako atmosférický tlak, množstvo zrážok a s tým spojené aj zmeny vodnej hladiny [Smetanová, 2008]. V medicíne nájde aplikačné využitie pri liečení pohybového alebo srdcovo-cievneho aparátu či regenerácií organizmu [Gudzenko and Dubinčuk, 1987]. Dôležitosť jeho v monitorovania spočíva aj pri dodržovaní rádiohygienických limitov [Müllerová et al., 2008], či pre odhad miery spotreby vody z vodovodného potrubia [Blahušiak, 2012].

3 Metodika práce

Pre realizovanie kontinuálnych meraní koncentrácií ^{222}Rn vo vodách sme zostrojili dve rôzne varianty meracích aparatúr založených na dvojakom prístupe deemanovania radónu z kvapaliny s použitím scintilačných detektorov a AlphaGuardu.

Prvý systém (Obr. 5) pozostával zo špeciálne upravenej Lukasovej komôrky, ktorá bola pre potreby ponorenia do vody a miesta pre umiestnenie silikagelu pre záchyt vlhkosti predĺžená pripevnením 15 cm plastovej rúrky (PR) k miestu vstupu radónu. Plastová časť umožňovala odizolovanie aktívnej časti Lukasovej komôrky (SK) s hygroskopickou vnútornou vrstvou ZnS(Ag) od priameho styku s vodou. Priestor pre difundovanie radónu z kvapaliny do akumulačnej nádoby (AN) bol tvorený objemom scintilačnej komory a plastovej rúrky. Z druhej strany akumulačnej nádoby, v mieste svetlopriepustného okienka bola komôrka pripevnená k fotonásobiču. Vrch zbernej nádoby (ZN) určený pre záchyt pritekajúcej vody bol prekrytý tenkou umelohmotnou doskou s malým otvorom pre ručný odber vzorky vody pipetou, slúžiaci pre odtienenie kvapaliny od svetla a tiež aj pre zníženie úniku ^{222}Rn z nádoby do okolitého prostredia.



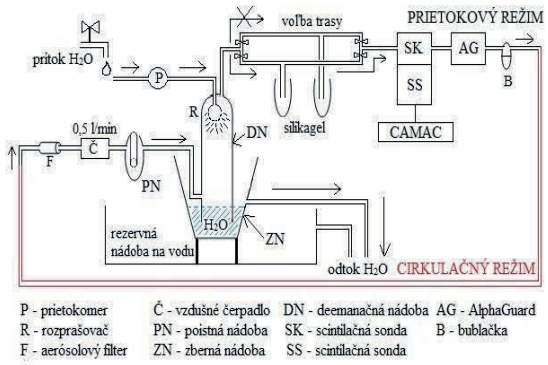
Obr. 5 : Schematické znázornenie meracej aparatúry pre kontinuálny monitoring ^{222}Rn vo vodách na báze difúzie

Elektronika systému pozostávala z jednokanálového analyzátora JKA 300 pripojeného k zdroju vysokého napätia (880 V) a počítača pre ukladanie dát. Pre objemovú aktivitu radónu vo vzduchu $A_{a,Rn}$ (Bq.m^{-3}) akumulačnej nádoby pri danej exhalácii E_s (Bq.m^{-2}.s^{-1}) radónu z vody prostredníctvom difúzie, za predpokladu jeho nulovej koncentrácie na počiatku merania platí vzťah (2),

$$A_{a,Rn} = \frac{E_s}{h\lambda^*}\left(1 - e^{-\lambda^* t}\right) \qquad (2)$$

kde h (m) predstavuje výšku stĺpca akumulačnej nádoby, v ktorej sa hromadí radón, t (s) je čas uplynutý od spustenia merania a λ^* (s^{-1}) je konštanta zahŕňajúca v sebe súčet konštanty premeny radónu λ_{Rn} (2,1.10^{-6} s^{-1}) a člena λ_b reprezentujúceho spätnú difúziu ^{222}Rn do kvapaliny a jeho únik z nádoby.

Aparatúra číslo 2 (Obr. 6) bola zostrojená na princípe uvoľňovania radónu z kvapaliny prostredníctvom rozprašovania pritekajúcej vody na malé kvapôčky prechodom prúdu pritekajúcej vody cez malé otvory (Φ ~ 1,5 mm) rozmiestnených po povrchu sklenej hlavice umiestnenej pred vstupom do deemanačnej nádoby (DN) fungujúcej podobne ako sprcha. Radón uvoľnený z vody sa zhromažďoval v deemanačnej nádobe, z ktorej bol vytláčaný tokom neaktívneho vzduchu s prietokom 0,5 ℓ.min^{-1} poháňaným čerpadlom Č cez poistnú nádobu PN (slúžiacu v prípade spätného toku vody) do kolónky s obsahom silikagelu pre záchyt vlhkosti. Vysušený vzduch ďalej prúdil do 1 litrovej scintilačnej komory pripojenej k scintilačnej sonde s elektronikou camac a nakoniec vstupoval do detektora AlphaGuard. Prívod a odtok vody tvoril nezávislú časť aparatúry. Konštrukcia systému umožňovala zber dát v dvoch režimoch zapojenia, v prietokovom a v cirkulačnom režime.



Obr. 6 : Schematické znázornenie meracej aparatúry pre kontinuálny monitoring ^{222}Rn vo vodách na báze sprchy

V prietokovom režime bol vzduch, ktorý prešiel cez AlphaGuard ďalej vyfúknutý von z celého systému, pričom do trasy bol vždy vháňaný nový neaktívny vzduch čerpadlom z okolia. Preto prísun molekúl ^{222}Rn v aparatúre bol okrem jeho rádioaktívnej premeny znižovaný aj v dôsledku jeho vytláčania zo systému a nahrádzaním ho neaktívnym vzduchom z okolia. Pre objemovú aktivitu radónu $A_{a,Rn}$ (Bq.ℓ$^{-1}$) meraného detektormi v čase t (s) platí vzťah (3),

$$A_{a,Rn} = \frac{R}{V\left(\lambda_{Rn} + \frac{P_a}{V}\right)}\left(1 - e^{-\left(\lambda_{Rn} + \frac{P_a}{V}\right)t}\right) \quad (3)$$

kde V (ℓ) je objem deemanačnej nádoby, P_a (ℓ.s^{-1}) je prietok vháňaného vzduchu čerpadlom, λ_{Rn} (s^{-1}) je konštanta premeny radónu a R (Bq.s^{-1}) predstavuje prísun aktivity ^{222}Rn do systému.

V prípade cirkulačného režimu, v uzavretej slučke koluje vzduch bez výmeny s okolím, ktorý sa postupne obohacuje o radón uvoľňovaný rozprašovaním v deemanačnej nádobe a zároveň ubúda v dôsledku jeho rádioaktívnej premeny. V tomto prípade pre objemovú aktivitu radónu meranú v cirkulujúcom vzduchu platí vzťah (4)

$$A_{a,Rn} = \frac{R}{V\lambda^*}\left(1 - e^{-\lambda^* t}\right) \quad (4)$$

kde R (Bq.s^{-1}) zahŕňa prísun aktivity ^{222}Rn do systému, V (ℓ) je celkový objem uzavretej sústavy a λ^* (s^{-1}) je konštanta zložená zo súčtu λ_{Rn} a člena λ_b predstavujúceho únik ^{222}Rn zo systému.

V oboch prípadoch možno prísun aktivity radónu do systému charakterizovať prostredníctvom (5):

$$R = P_w A_{w,Rn} \xi \quad (5)$$

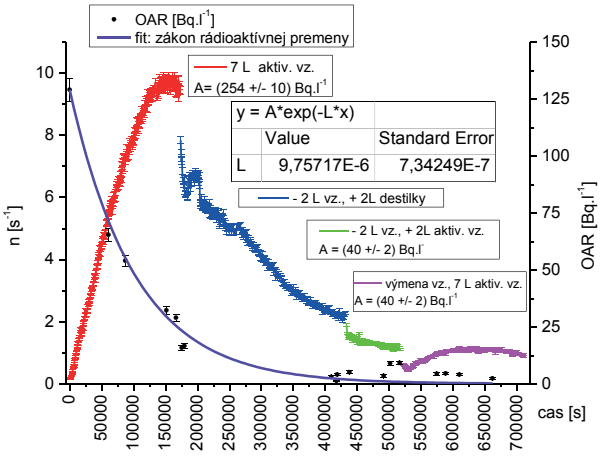
kde P_w (ℓ.s^{-1}) je prietok pritekajúcej vody, $A_{w,Rn}$ (Bq.ℓ$^{-1}$) je objemová aktivita radónu vo vode a ξ je deemanačný koeficient predstavujúci účinnosť, s akou je radón uvoľňovaný v procese rozprašovania z vody cez sprchový mechanizmus.

Okrem kontinuálnych meraní sa priebežne kontrolovala objemová aktivita vody v zberných nádobách a v pritekajúcej vode do aparatúr bodovými odbermi použitím Lukasových scintilačných komôrok s objemom 125 mℓ.

Merania s predloženými aparatúrami sa uskutočnili na FMFI UK v priebehu mesiacov február a marec 2018 s menšími prestávkami, počas ktorých dané návrhy prechádzali obmenami s cieľom pochopiť komplexné fungovanie celého systému alebo odozvu jednotlivých detektorov na určité zmeny. Pre uplatnenie aparatúry na báze difúzie ako systému pre nepretržité zaznamenávanie OAR v prúdiacej vode, sa dá zariadenie upraviť vytvorením otvoru pre prítok a odtok v zbernej nádobe alebo môže slúžiť pre meranie v stojacej vode.

4 Výsledky a diskusia

V navrhovanej schéme pracujúcej na princípe difúzie radónu do komôrky sa za účelom overenia fungovania systému a určenie jeho odozvy na prudkú zmenu koncentrácie radónu v objeme vzorkovej vody experimentovalo takmer deväť dní, počas ktorých sa do uzavretej zbernej nádoby pri zachovaní konštantného objemu vody striedavo prilievala vysoko aktívna vzorka a destilovaná voda v rozličných pomeroch. Výsledky týchto meraní sú ukázané na Obr. 6. Meranie sa začalo ponorením komôrky do 7 ℓ vzorkovej vody s aktivitou (129 ± 5) Bq.ℓ$^{-1}$. Akumulačná nádoba bola ponorená do vody do hĺbky 3,5 cm, tesne pod úrovňou vloženého silikagelu. Saturovaný stav nastal po 44 hodinách od spustenia merania. Za ten čas radón vo vzorke klesal rýchlosťou $\lambda^* = (9{,}4.10^{-6} \pm 3.10^{-7})$ s^{-1}. Tento parameter zahŕňa v sebe konštantu premeny a únik molekúl ^{222}Rn do okolitého ovzdušia.

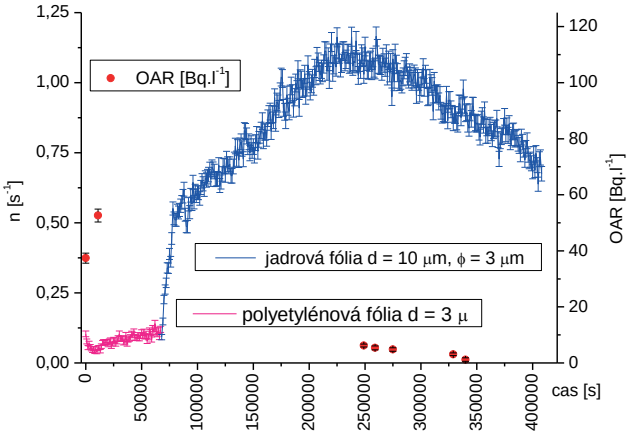


Obr.6 : Odozva početností pomocou aparatúry na báze difúzie

Po dosiahnutí stavu nasýtenia sme odobrali 2 litre vzorky a priliali 2 litre destilovanej vody pre zachovanie stáleho objemu 7 litrov. Za ten čas bol

detektor vypnutý a zariadenie s Lukasovou komôrkou povytiahnuté. V nameraných početnostiach sme zaznamenali prudký pokles v dôsledku vyvetrania objemu detektora a následne mierny nárast kedy sa dosiahlo nasýtenie a opäť pokles v dôsledku premeny radónu vo vzorke. Po opätovnom odobratí 2 litrov vzorky a priliatí 2 litrov aktívnej vzorky (A = (40 ± 2) Bq.ℓ$^{-1}$) sme zmenu v početnostiach nezaznamenali, okrem mierneho poklesu v dôsledku čiastočného úniku ^{222}Rn z akumulačnej nádoby počas výmeny vody. Preto sme po 10 hodinách merania vymenili celú vzorku a pridali 7 litrov vody s aktivitou (40 ± 2) Bq.ℓ$^{-1}$. Počas tohto úkonu sme nahradili už aj opotrebovaný silikagel, čo je príčina prudkého poklesu početností, keďže nahromadený plyn v komôrke mohol voľne unikať do okolia. Saturovaný stav nastal opäť po približne 40 hodinách merania.

Po ukončení meraní s výmenami vody sme sa pokúsili nahradiť silikagel umiestnený medzi vodou a aktívnou scintilačnou vrstvou iným materiálom, ktorý by plnil jeho účel bez potreby prerušenia merania a jeho výmeny po opotrebovaní, čo vždy viedlo k vyprázdneniu akumulačnej nádoby od už nadifundovaného plynu. Preto sme skúsili použiť 2 fólie, jednu obyčajnú polyetylénovú fóliu s hrúbkou 3 μm, ktorá neprepúšťa vodu a radón by mohol difundovať do komôrky. Druhou bola jadrová fólia s hrúbkou 10 μm a otvormi s veľkosťou 3 μm. Hodnoty nameraných početnosti od ^{222}Rn v nadifundovanom vzduchu spolu s bodovými odbermi objemových aktivít vo vzorke vody sú zakreslené na Obr. 7.



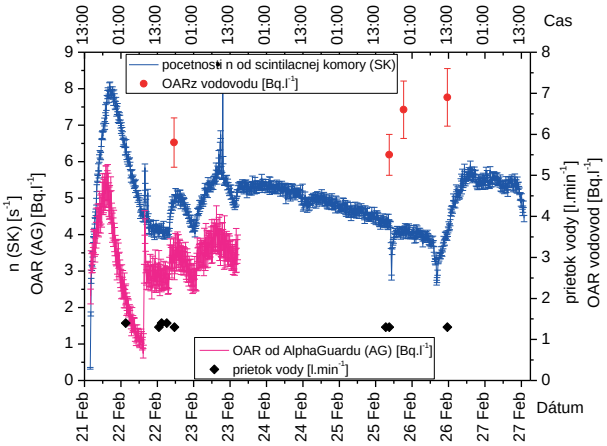
Obr. 7 : Graf nameraných početností aparatúrou na báze difúzie s použitím fólií

V prípade použitia obyčajnej polyetylénovej fólie vidíme značný pokles v zaznamenaných početnostiach v porovnaní s meraniami pri použití silikagelu (Obr. 6). Toto bolo spôsobené nielen nižšou aktivitou vody v nádobe, ale aj z dôvodu zamedzenia prestupu molekúl ^{222}Rn alebo vody do objemu komôrky. Difúzia radónu do akumulačnej nádoby bola v tomto prípade príliš pomalá a neefektívna pre dlhodobé sledovanie zmien koncentrácií radónu vo vodách. V prípade meraní s jadrovou fóliou vidíme rýchlejšiu odozvu systému na množstvo ^{222}Rn vo vzorke porovnateľnú s meraniami so silikagelom pri podobnej OAR vo vode zbernej nádoby. Rovnako aj doba dosiahnutia saturovaného stavu je porovnateľná s tou pri meraniach so silikagelom (~ 40 hod.). Avšak meranie s jadrovou fóliou bolo ukončené z dôvodu prepúšťania vody do pracovného objemu detektora a možného znefunkčnenia komôrky ako detekčného média.

Účinnosti, zahŕňajúce v sebe prestup ^{222}Rn do akumulačnej nádoby, sa pohybujú na úrovni 10 - 15 % v prípade použitia silikagelu, ~ 0,1 % pri použití obyčajnej fólie s hrúbkou 3 μm a 7 - 10 % pri meraniach s jadrovou fóliou s 3 μm otvormi a 10 μm hrúbkou. Tieto hodnoty boli vypočítané na základe OAR vo vode určenou bodovými odbermi v saturovanom stave, prislúchajúcich početností nameraných Lukasovou komôrkou a účinnosti detekcie komôrky.

S aparatúrou fungujúcej na báze sprchy (Obr. 6) sme monitorovali správanie sa systému a variácie vo vode z vodovodného kohútika. Okrem pracovania v dvoch režimoch cirkulácie vzduchu cez trasu (cirkulačný a prietokový), sme uskutočnili aj merania, kedy sme zmenili objem deemanačnej nádoby za účelom porovnania a vyhodnotenia účinnosti deemanácie ^{222}Rn z rozprašovanej vody. Menšia deemanačná nádoba mala objem 0,8 ℓ (časť nachádzajúca sa nad vodou) a väčšia 1,1 ℓ.

Prvé z týchto meraní boli vykonané s menšou DN a zapojenie bolo v prietokovom režime. Merali sme súčasne so scintilačnou komorou a AlphaGuardom, neskôr sme AlphaGuard odpojili a údaje sme zaznamenávali len scintilačnou komorou. Namerané hodnoty sú zakreslené na Obr. 8 spolu s prietokom vody a OAR vo vode priebežne bodovo odoberanej priamo z využívaného vodovodného kohútika.

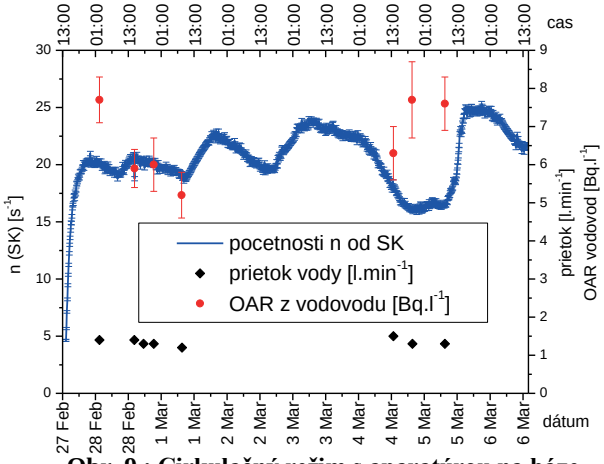


Obr. 8 : Prietokový režim s aparatúrou na báze sprchy s malou DN

V grafe je možno pozorovať variácie v koncentrácií ^{222}Rn, ktoré sú pravdepodobne reakciou na mieru využívania vody z vodovodnej siete. Počas piatka a víkendu (dni 23. - 25.2.), kedy sa na fakulte zdržovalo menší počet ľudí a využitie vodovodnej siete sa znížilo, možno pozorovať pokles v koncentrácií ^{222}Rn z dôvodu jeho rádioaktívnej premeny v potrubí. Opätovný nárast nastáva začiatkom týždňa, ako sa do siete dostáva už voda zo zdroja obohatená radónom.

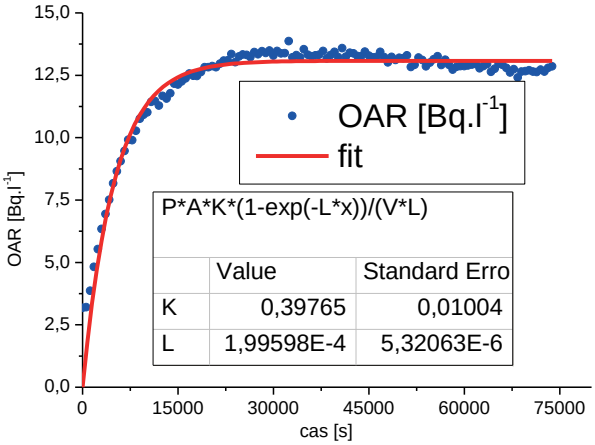
Ďalej sme systém prepli do cirkulačného režimu s použitím scintilačného detektora. Namerané výsledky spolu s OAR vo vodovode pomocou bodových odberov a prietoku vody sú ukázané na Obr. 9.

Ofitovaním nárastovej časti (Obr. 10) až po dosiahnutie saturovaného stavu (po cca 5 - 6 hod.) vzťahom (4) sme získali účinnosť, s akou deemanujeme radón z vody počas jej prečerpávania cez sprchovú hlavicu. Tento koeficient ξ je rovný 0,39 ± 0,01 a bol určený za predpokladu konštantného prietoku vody (1,3 ℓ.min^{-1}) a použitím priemernej OAR vo vode ((6,6 ± 0,7)Bq.ℓ$^{-1}$) meranú bodovými odbermi. Prepočet nameraných početností n na objemovú aktivitu A v meranom vzduchu potrebnú v použitom vzťahu sme určili zo zjednodušenej kalibrácie z hodnôt získaných počas súbežného merania scintilačnej komory (SK) a AlphaGuardu (AG) pri prietokovom režime (Obr. 11), pričom získaná rovnica má tvar: $A = 0{,}653.n + 0{,}163$.



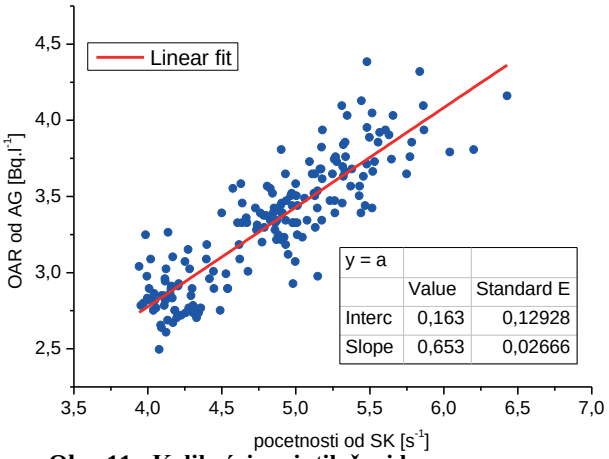
Obr. 9 : Cirkulačný režim s aparatúrou na báze sprchy s malou DN

Koncom februára sú zaznamenané nižšie početnosti, ktoré majú postupne narastajúci priebeh počas merania s miernym poklesom pred víkendom, s neočakávaným nárastom v sobotu a opätovným poklesom ďalšie dni. Nárast v množstve ^{222}Rn vo vode v dôsledku zvýšenej spotreby vody zo siete nastáva až od pondelka poobede.



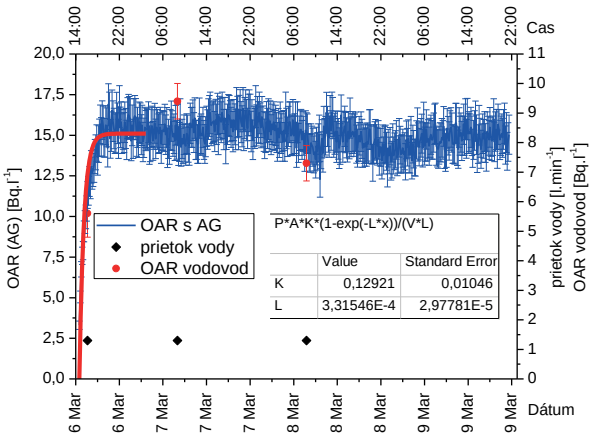
Obr. 10 : Určenie koeficientu deemanácie v počiatočnej fáze merania v cirkulačnom režime za použití malej DN

Preloženie fitu s predpisom podľa vzťahu (4) možno spraviť aj pri meraniach, kedy sa hodnoty zaznamenávali len s AlphaGuardom (Obr. 12). V tomto prípade je hodnota deemanačného koeficientu 0,13 ± 0,01. Saturovaný stav sa dosiahol za približne rovnaký čas ako pri meraní so scintilačnou komorou teda za 6 hodín.

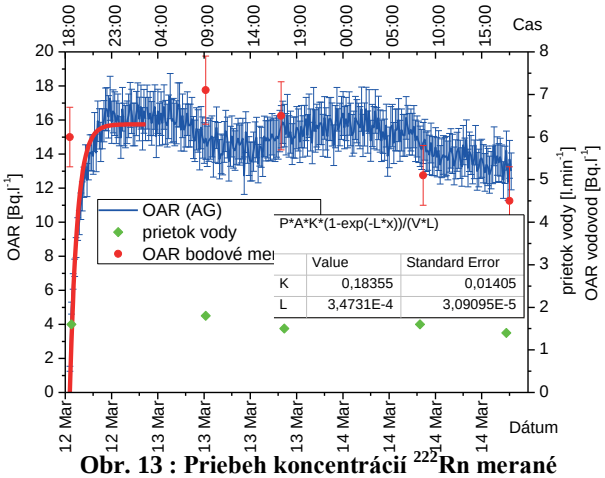


Obr. 11 : Kalibrácia scintilačnej komory pomocou AlphaGuardu meraniami v prietokovom režime pri malej DN

Ďalšie merania boli uskutočnené s aparatúrou pri väčšej deemanačnej nádobe. Priebeh koncentrácií ^{222}Rn pri cirkulačnom režime s meraniami len za použitia AlphaGuardu spolu s preložením fitu pre určenie deemanačného koeficientu sú na Obr. 13. Získaný deemanačný koeficient mal hodnotu 0,18 ± 0,01, pričom saturovaný stav nastal už po 4 hodinách merania. Porovnaním pomerov vo veľkosti objemov deemanačných nádob a získaných koeficientov je tento rozdiel adekvátny.

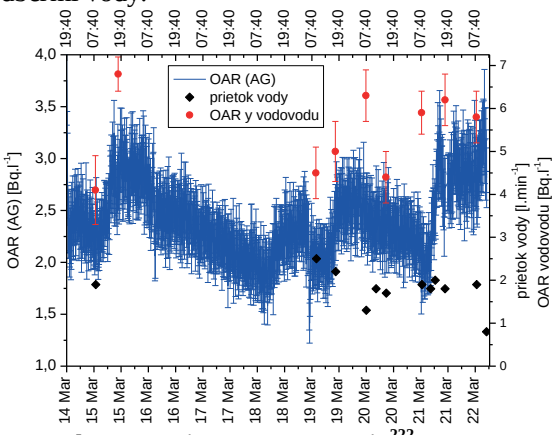


Obr. 12 : Priebeh koncentrácií ^{222}Rn merané AlphaGuardom v cirkulačnom režime pri malej DN a určenie koeficientu deemanácie



Obr. 13 : Priebeh koncentrácií ^{222}Rn merané AlphaGuardom v cirkulačnom režime pri veľkej DN a určenie koeficientu deemanácie

Zachovaním predchádzajúcich parametrov bol zmeraný priebeh OAR s AlphaGuardom aj pri prietokovom režime (Obr. 14). Meranie prebiehalo viac ako 7 dní, čo je už dostatočná doba pre získanie variácií v OAR z pritekajúcej vody. Meranie sa spustilo v stredu, pričom vo štvrtok začínala narastať koncentrácia ^{222}Rn v prúdiacom plyne. V piatok a v priebehu víkendu začala OAR rovnomerne klesať. Začiatkom ďalšieho týždňa je možné opäť pozorovať mierny nárast, uprostred týždňa zas viaceré zmeny v meranej koncentrácii a vo štvrtok opäť ako predchádzajúci týždeň nárast na približne rovnakú OAR. Tieto výkyvy sú objasniteľné mierou používania vody z vodovodného potrubia. Uprostred týždňa, kedy je voda nahromadená v potrubí vyčerpaná, je koncentrácia ^{222}Rn najvyššia z dôvodu jej čerpania priamo zo zdroja, kde dochádza k jej obohateniu. Koncom týždňa klesá spotreba vody, začína sa hromadiť vo vodovodných trubkách a súčasne radón v nej podlieha rádioaktívnej premene. Začiatkom týždňa, v závislosti od jej spotreby sa začína používať obohatená voda zo zásobárni spolu so zvyškom vody v potrubí a OAR pomaly narastá. Anomálie vyskytujúce sa v nameraných hodnotách sú pravdepodobne zapríčinené nepravidelnými odbermi vody.



Obr. 14 : Priebeh koncentrácií ^{222}Rn merané AlphaGuardom v prietokovom režime pri veľkej DN

5 Záver

Naším cieľom bolo navrhnúť schémy aparatúr pre kontinuálne meranie radónu vo vodách a zhodnotiť efektívnosť použitých metód. Testovaním navrhnutých monitorov sme dokázali zaznamenať zmeny v koncentrácií ^{222}Rn vo vodovodnej sieti prostredníctvom monitorovania OAR vo vode tečúcej z jedného vodovodného kohútika.

Pri meraniach so scintilačnou komôrkou ponorenou do vzorkovej vody sme spočiatku testovali odozvu systému na prudkú zmenu v koncentrácií ^{222}Rn vo vode, rýchlosť a účinnosť, s akou do nej radón nadifundoval. Saturovaný stav v tomto prípade nastal až po približne 40 hodinách, následne však zaznamenané početnosti odpovedali poklesu v dôsledku premeny ^{222}Rn v zbernej nádobe. Údaje o nepretržitom sledovaní však narušala výmena silikagelu, čo viedlo k úniku nahromadeného plynu v akumulačnej nádobe a teda aj k opätovnému čakaniu na dosiahnutie stavu nasýtenia. Nahradenie silikagelu fóliami pre odizolovanie vlhkosti a vody, ktoré nepotrebujú vymieňanie sa zistilo nepoužiteľné v dôsledku prepúšťania vody, resp. druhý limitný prípad zadržovania prestupu akýchkoľvek molekúl a teda aj radónu. Aj účinnosť, s akou ^{222}Rn difundoval do akumulačnej nádoby bola v prípade silikagelu najvyššia a to takmer 15 % po dosiahnutí saturovaného stavu.

Ďalšia testovaná aparatúra pracovala na princípe rozprašovania vody, prostredníctvom čoho sa mohol radón lepšie uvoľniť do okolitého vzduchu. Meraniami v prietokovom režime, ktoré trvali približne týždeň, sa nám podarilo zaznamenať také variácie v koncentráciách ^{222}Rn, ktoré by mohli odrážať množstvo spotrebovávanej vody z daného zdroja. Pred víkendom a počas neho množstvo

^{222}Rn klesalo z dôvodu zníženého používania vody na fakulte, maximum v OAR sa dosahovalo uprostred týždňa (streda, štvrtok) počas najvyššej spotreby vody, kedy do vodovodného potrubia prúdila obohatená voda priamo zo zdroja. Paralelnými meraniami scintilačnej komory a AlphaGuardu sa nám podarilo nájsť jednoduchý vzťah na prepočet získaných početností na OAR vo vzduchu, ktorý prúdil systémom. Oba detektory počas celej doby merania súbežne kopírovali akékoľvek zmeny.

V cirkulačnom režime sme na základe takto okalibrovanej scintilačnej komory prepočítali početnosti na OAR a preložili získané údaje fitom odpovedajúcom zmenám v OAR vo vzduchu v dôsledku rádioaktívnej premeny a prísunu z uvoľňovaného ^{222}Rn z pritekajúcej vody. Takto sme získali koeficient deemanácie s hodnotou 0,39 ± 0,01. Tento koeficient sme rovnako získali aj z dát počas merania AlphaGuardom. V tomto prípade bol 0,13 ± 0,01 pri meraní s menšou deemanačnou nádobou a o niečo vyššiu účinnosť 0,18 ± 0,01 sme získali pri použití väčšej DN. Rozdiel s hodnotou získanou pri použití dát zo scintilačnej komory sú pravdepodobne v dôsledku zjednodušenej kalibrácie.

Nasledujúcim cieľom bude relevantne okalibrovať scintilačnú komoru (Ward - Borakovou metódou), odmerať závislosť deemanácie od prietoku pritekajúcej vody a otestovať systém s ponorenou Lukasovou komorou s vodou pretekajúcou cez zbernú nádobu prostredníctvom prepojenia aparatúry so systémom na báze sprchy.

Poďakovanie

Ďakujem Monike Müllerovej a doc. Karolovi Holému za cenné rady a neustály záujem počas uskutočňovania meraní ako aj pri vyhodnocovaní výsledkov a pánovi Jozefovi Haškovi za pomoc pri zostrojovaní meracích aparatúr.

Literatúra

[Asikainen and Kahlos, 1979] Asikainen, M., Kahlos, H. (1979). Anomalously high concentration of uranium, radium and radon in water from drilled wells in the Helsinki region, *Geochimica et Cosmochimica Acta 43*.

[Blahušiak, 2012] Blahušiak, P. (2012). Kontinuálny monitor pre meranie radónu vo vodách, diplomová práca, FMFI UK, Bratislava.

[Burnett et al., 2001] Burnett, W.C., Kim, G., Lane-Smith, D. (2011). A continuous monitor for assessment of ^{222}Rn in coastal ocean, Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, Vol. 249, No.1.

[Calin and Calin, 2011] Calin, M., R., Calin, M., A. (2011). System for air ^{222}Rn activity concentration measurements based on ion-pulse ionization chamber detector, Jour of Radioanal and Nuclear Chem, 288, 109-114.

[Cothern and Smith, 1987] Cothern, C., R., Smith, J., E., Jr. (1987). Environmental Radon, Plenum Press, New York.

[Daniel et al., 1996] Daniel, J., Lučivjanský, L., Stercz, M. (1996). Geochemický atlas Slovenska, časť 4: Prírodná rádioaktivita hornín, Geologická služba Slovenskej republiky.

[Dulaiova et al., 2005] Dulaiova, H., Peterson, R., Burnett, W.C., Lane-Smith, D. (2005). A multi-detector continuous monitor for assessment of ^{222}Rn in the coastal ocean, Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, Vol. 263, No.2.

[Estrada, 2009] Estrada, A., A. (2009). Medición de Radón-222 en Ambientes Geohidrológicos en la Fracción Central de México, Tesis que para obtener el título de físico, Universidad Nacional Autónoma de México.

[George, 1984] George, A., C. (1984). Passive, integrated measurement of indoor radon using activated carbon, Health Physics Vol. 46, No. 4, pp. 867-872.

[Gudzenko and Dubinčuk, 1987] Gudzenko, V., V., Dubinčuk, V., T. (1987). Izotopi radia i radon v prirodnich vodach, Nauka, Moscow.

[Gulášová, 2006] Gulášová, Ž. (2006). Metódy merania objemovej aktivity ^{226}Ra a ^{222}Rn vo vodách, Diplomová práca, FMFI UK, Bratislava.

[Holý et al., 2006] Holý, K., Műllerová, M., Gulášová, Ž., Polášková, A. (2001). Vysokocitlivá metóda pre kontinuálne monitorovanie ^{222}Rn vo vodách, 28. dni radiačnej ochrany, ISBN 80-01-03575-1.

[Ishimori et al., 2013] Ishimori, Y., Lange, K., Martin, P., Mayya, Y., S., Phaneuf, M. (2013). Measurement and Calculation of Radon Releases from NORM Residues, International Atomic Energy Agency, Technical reports series No. 474, Vienna.

[Kotrappa and Stieff, 1994] Kotrappa, P., Stieff, L. (1994). Measurement of 220Rn (thoron) using electret ion chambers, International Radon Symposium, IIIP.

[Lucas, 1957] Lucas, H., L. (1957). Improwed Low-Level Alpha Scintillation Counter for Radon, Review of Scientific Instruments 28.

[Luís, 1999] Luís, M., C. (1999). Variación espacio-temporal del nivl de emisión de radón en una zona volcánica activa: Tenerife (Islas Canarias), Universidad de la Laguna, España.

[Miles, 2001] Miles, J. (2001). Methods of radon measurement and devices, National Radiological Protection Board, Chilton, Didcot, Oxfordshire, OX11 0RQ, UK.

[Montazeri et al., 2011] Montazeri, H., Abbasnejad, A., Negarestani, A. (2011). Continuous radon

monitoring in the Jowshan hot spring as an earthquake precursor, SE Iran, Geochemical Journal, Vol. 45, pp. 463 to 472.

[Müllerová et al., 2008] Müllerová, M., Holý, K., Gulášová, Ž., Polášková, A. (2008). Efektívnosť odstránenia radónu z vody pomocou rôznych metód, Zborník 10. Banskoštiavnické dni, Banská Štiavnica.

[Nazaroff and Nero, 1988] Nazaroff, W. W., Nero, Jr. V. A. (1988). Radon and its decay products in indoor air, A Wiley-Interscience Publication. New York.

[Patschová, 2001] Patschová, E. (2001). Kontinuálne monitorovanie ^{222}Rn vo vodách, diplomová práca, FMFI UK, Bratislava.

[Pospíšil et al., 1981] Pospíšil, P., Hulla, J., Šáro, Š. (1981). Využitie nuklidov v hydrogeológii, Alfa, Bratislava.

[Serdjukova and Kapitanov, 1969] Sedjukova, A. S., Kapitanov, J. T. (1969). Izotopy radona i korotkoživuščije produkty ich raspada v prirode, Atomizdat, Moskow.

[Smetanová, 2008] Smetanová, I. (2008). The monitoring of the ^{222}Rn activity concentration in borehole water - results from the first year of observation, Environmental Sciences, ISBN 978-80-223-2480-9.

[STN 75 7615, 2014] STN 75 7615 (2014). Kvalita vody, Rádiochemické ukazovatele, Stanovenie radónu 222, Výskumný ústav vodného hospodárstva, Národné referenčné laboratórium pre oblasť vôd na Slovensku.

[Tanaka, 1990] Tanaka, E. (1990). Ionization chamber, Patent no. 5003176, SUA.

[Tasaka et al., 1994] Tasaka, S., Sasaki, Y., Okazawa, H., Nakagawa, M. (1994). Development of an Underwater Radon Detector, J-Stage, Radioisotopes, Vol. 43.

[Virk, Walia, Bajwa, 2001] Virk, S.H., Walia, V., Bajwa, S.B. (2001). Radon monitoring in underground water of Gurdaspur and Bathinda districts of Punjab, India, *Indian Journal of Pure & Applied Physics*, Amritsar, page 746.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 147–155
ISBN 978-8081470882, © 2018 Adam Sitarčík

Spoľahlivosť teoretických modelov pre polčas rozpadu atómových jadier

Adam Sitarčík[1*]

Školiteľ: Stanislav Antalic[1†]

Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt: V oblasti ďaleko od línie stability je pre zostavenie experimentu na pozorovanie exotických jadier extrémne dôležité odhadnúť očakávané vlastnosti produkovaných jadier - najmä polčas rozpadu.

V súčasnosti existuje viacero teoretických modelov pre výpočet polčasov rozpadu - napr. Zovšeobecnenie Geiger-Nuttallovho zákona z [Qi et al., 2009. PHYSICAL REVIEW C, 80. 044326.] alebo SemFIS model (Semiempirical relationship based on fission theory of α decay) z [Poenaru et al., 1980. J. Physique Lett., 41. 589-590.]. Väčšina teoretických modelov je semiempirických.

V práci sú porovnané vybrané teoretické modely (primárne pre α rozpad) a následne aplikované na protónovú emisiu a emisiu ťažších jadier - klastrov. Zo získaných výsledkov je ďalej možné odvodiť vlastnosti nových izotopov.

Kľúčové slová: alfa rozpad, polčas, teoretický model, emisia klastrov, protónová emisia

1 α rozpad

V roku 1899 E. Rutherford rozdelil žiarenie na tri druhy - alfa, beta a gama - na základe ich prenikavosti a vplyvu magnetického poľa na ne. Alfa žiarenie bolo popísané ako najmenej prenikavé z nich, nesúce kladný náboj. Neskôr, v roku 1907 bolo dokázané, že α častice sú jadrá $^4_2$He.

1.1 Teória α rozpadu

V jadre je α častica viazaná Coulombovým potenciálom, ktorý sa dá napísať ako

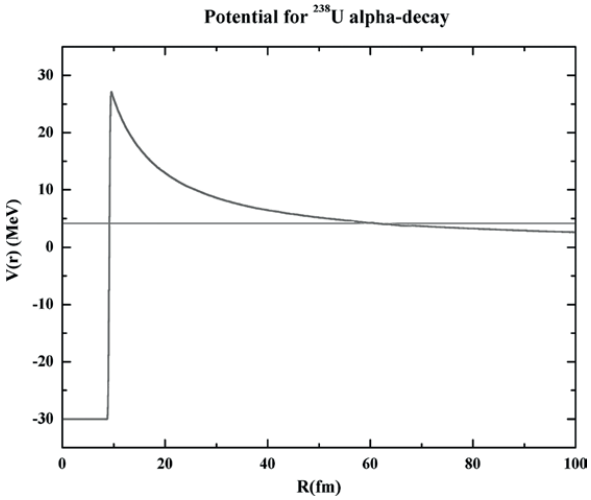
$$V_C = \frac{Z_\alpha Z_f}{R}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \tag{1}$$

kde Z_f je protónové číslo dcérskeho jadra, $Z_\alpha = 2$ je protónové číslo α častice a R je vzdialenosť medzi dcérskym jadrom a α časticou. Na približné určenie Coulombovho potenciálu zoberieme $R = 1.2(A^{1/3} + 4^{1/3})$ fm kde A je atómové číslo dcérskeho jadra. Pre rozpad ^{238}U teda podľa vzťahu 1 dostávame

$$V_C = \frac{(2)(90)(1.440\ \text{MeV.fm})}{1.2(234^{1/3} + 4^{1/3})} \approx$$

$$\approx \frac{259\ \text{MeV.fm}}{9.3\ \text{fm}} = 28\ \text{MeV}$$

čo je 6-7 krát viac ako je energia α rozpadu.



Obr. 1: Jednorozmerný diagram potenciálnej energie pre ^{238}U ($\approx$ -30 MeV Fermiho energia a $\approx$ 28 MeV Coulombova bariéra na 9.3 fm) a energie α častice (4.2 MeV). Vzdialenosť, v ktorej je energia bariéry rovná energii α častice je 62 fm.

Z pohľadu klasickej fyziky by α častica takto vysokú potenciálovú bariéru nemala prekonať, t.j nedochádzalo by k α rozpadu. Riešenie podáva kvantová fyzika. Všeobecná vlasnosť vlnovej funkcie je, že je nulová len v oblasti s nekonečným potenciálom. Keď je bariéra konečná, hlavná časť vlnovej funkcie je vo vnútri bariéry a zároveň malá, konečná časť funkcie (t.j. aj pravdepodobnosť jej výskytu) je aj za,

*adamsitarcik21@gmail.com
†Stanislav.Antalic@fmph.uniba.sk

resp. *vnútri* bariéry (tu je funkcia exponenciálne klesajúca). Tento jav sa nazýva kvantové tunelovanie a dovoľuje α časticiam prekonať Coulombovu bariéru.

1.2 Energetická bilancia α rozpadu

Jeden z hlavných dôvodov, prečo sa emituje práve jadro $^4_2$He, je jeho relatívne vysoká väzbová energia - 28.3 MeV. Kvôli tomu je energeticky výhodnejšie pre jadro emitovať α časticu ako inú kombináciu nukleónov. Ďalej emisiou α častice sa zníži Coulombova energia jadra, čo zvýši stabilitu ťažkého jadra bez ovplyvnenia celkovej väzbovej energie, pretože α častica má približne rovnakú väzbovú energiu na nukleón ako pôvodné jadro. Proces spontánnej emisie α častice sa dá zapísať ako

$$ {}^A_Z X_N \rightarrow {}^{A-4}_{Z-2} Y_{N-2} + {}^4_2 He_2 \tag{2} $$

Tento proces je možný, len keď súčet väzbových energií koncového stavu je väčší ako väzbová energia počiatočného stavu. Rozdiel medzi väzbovými energiami počiatočného a koncového stavu (teda Q hodnota α rozpadu - Q_α) sa dá napísať ako

$$ Q_\alpha = B(Z-2,A-2) + B(\alpha) - B(Z,A) \tag{3} $$

Typický rozsah energií emitovanej α častice je $E_\alpha = (4-11)$ MeV. Kinetická energia α častice (a rozpadnutého jadra) je z poklesu hmotnosti po jadrovom rozpade. Hodnotu Q_α môžeme vyjadriť cez kinetické energie (E) a hmotnosti (M) materského (i) a dcérskeho (f) jadra ako

$$ Q_\alpha = M_i c^2 - (M_f c^2 + M_\alpha c^2) = E_\alpha + E_f \tag{4} $$

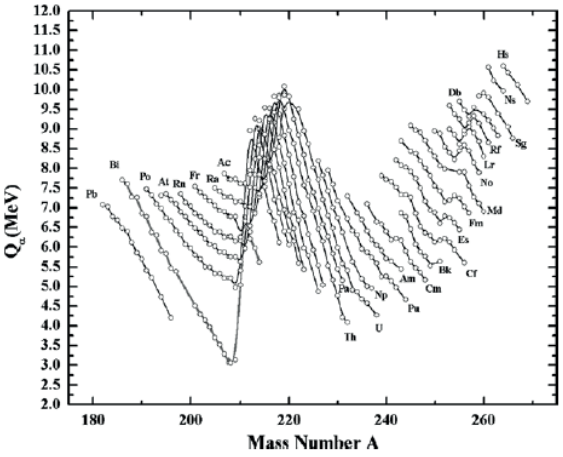
Z rovnice 4, uvážiac zákon zachovania momentu hybnosti, $|\vec{p}_\alpha| = |\vec{p}_f|$, vieme vyjadriť závislosť medzi kinetickou energiou α častice a Q hodnotou rozpadu:

$$ Q_\alpha = \frac{1}{2} M_\alpha v_\alpha^2 + \frac{1}{2} M_f v_f^2 = \frac{1}{2} M_\alpha v_\alpha^2 (1 + \frac{M_\alpha}{M_f}) $$

$$ Q_\alpha \approx E_\alpha \frac{A}{A-4} \tag{5} $$

Z rovnice 5 vyplýva, že väčšina energie α rozpadu je odnášaná α časticou a len malá časť prislúcha na jadro.

Vo všeobecnosti rastie Q hodnota s rastúcim atómovým číslom, ale zmeny spôsobené vrstvovými korekciami môžu potlačiť systematický rast (Obrázok 2).



Obr. 2: Zmeny energií α rozpadu, indikujúce efekty uzatvorených vrstiev $N = 126$ a $Z = 82$ spolu s $N = 152$ podvrstvou. [Loveland et al., 2006].

1.3 Polčas α rozpadu

Polčas α rozpadu je spätý s hodnotou Q_α. V roku 1911 H. Geiger a J.M. Nuttall ukázali lineárnu závislosť medzi logaritmom rozpadovej konštanty a doletom α častice, pôvodný článok [Geiger and Nuttall, 1911]. Dnes je táto závislosť známa ako Geiger-Nuttallov zákon (GN zákon):

$$ \log T_{\frac{1}{2}} = \frac{a(Z)}{\sqrt{Q_\alpha}} + b(Z) \tag{6} $$

kde $a(Z)$ a $b(Z)$ sú konštanty, meniace sa pre každý z izotopických radov. Z GN zákonu vyplýva, že malá zmena hodnoty Q_α spôsobí zmenu polčasu rozpadu aj o niekoľko rádov.

1.4 Faktor potlačenia α rozpadu

Teoretické modely na výpočet polčasu rozpadu sú určené pre párno-párne emitery. Nepárno-nukleónové emitery sa zvyčajne rozpadajú pomalšie, než je predpoklad založený na rozpade párno-párnych jadier. Je to spôsobené kvôli zvyčajnej rozdielnej konfigurácii stavov materského a dcérskeho jadra.

Alfa premena preferuje prechod medzi stavmi s rovnakými konfiguráciami. Takéto prechody sa nazývajú nepotlačené (unhindered). Rastúci rozdiel medzi stavmi spôsobuje zníženie pravdepodobnosti emisie α častice. Miera tohto potlačenia je vyjadrená

faktorom potlačenia (Hindrance Factor - HF):

$$HF = \frac{T_{\frac{1}{2},exp}}{T_{\frac{1}{2},teor}} \quad (7)$$

Vo všeobecnosti vetviaci pomer (HF) pre nepárnonukleónové jadrá nadobúda päť typických hodnôt [Loveland et al., 2006]:

1. Ak je HF medzi 1 a 4, prechod sa nazýva preferovaný. V tomto prechode je α častica zložená z dvoch párov nukleónov na nižších orbitáloch, vďaka čomu ostane jadro v rovnakom stave ako pred rozpadom.

   Aby sa sformovala v jadre α častica, musí sa spin dvoch neutrónov a dvoch protónov vyskladať na nulu a zároveň musí mať α častica nulový orbitálový uhlový moment. Tieto štyri nukleóny tvoriace α časticu najčastejšie obsadzujú v materskom jadre najvyššie hladiny. V nepárno nukleónových jadrách nie sú nukleóny spárované, kvôli čomu nukleóny tvoriace α časticu obsadzujú v materskom jadre rôzne hladiny. Rozpad takéhoto materského jadra vyústi do excitácie dcérskeho jadra. Takýto prechod má nižšiu Q hodnotu ako prechod medzi základnými stavmi.

2. HF 4-10 indikuje zmiešanie alebo preferované prekrývanie vlnových funkcií stavov materského a dcérskeho jadra.

3. Prechod s HF 10-100 nastane keď priemety spinu počiatočného a finálneho stavu majú rovnaký smer, ale prekrytie vlnových funkcií nie je preferované (resp. mení sa spin, smer spinu však ostáva rovnaký).

4. Prechod s HF 100-1000 nastane, keď sa mení parita, ale priemety spinov materského a dcérskeho jadra majú rovnaký smer.

5. Ak má prechod $HF \geq 1000$, vtedy dochádza k zmene parity a tiež k zmene smeru priemetu spinu, t.j. priemety spinov materského a dcérskeho jadra majú opačný smer. Dcérske jadro preto dodatočne preskupuje nukleóny, keď sa emituje α častica.

1.5 Vetviaci pomer - branching ratio

Jedno atómové jadro sa môže rozpadať viacerými rádioaktívnymi rozpadmi. Je dôležité poznať pomer medzi nimi (vetviaci pomer), kvôli rozdielnosti polčasov jednotlivých rozpadov. Vetviaci pomer sa definuje ako počet rozpadov realizovaných určitým typom rádioaktívneho rozpadu voči počtu všetkých rozpadov. Pri experimentálnom určení polčasu rozpadu sa nameria celkový polčas $T_{\frac{1}{2},tot}$, ktorý je "priemerom" jednotlivých parciálnych rozpadov, $T_{\frac{1}{2},parc}$, napr. pre parciálny polčas α rozpadu:

$$T_{\frac{1}{2},\alpha} = \frac{T_{\frac{1}{2},tot}}{b_\alpha} \quad (8)$$

Jednotlivé teoretické modely na výpočet polčasu rozpadu určujú parciálny polčas daného rozpadu, preto je nutné túto hodnotu porovnávať s experimentálnou hodnotou upravenou vetviacim pomerom (podľa vzťahu 8).

2 Emisia ťažších jadier - klastrov

Klastrový rozpad (resp. emisia ťažkých jadier, ťažko - iónová radiácia), je typ jadrového rozpadu pri ktorom jadro emituje dcérske jadro, napr. ^{14}C, ^{18}O,..., ktoré je väčšie ako pri α rozpade, ale menšie ako pri spontánnom štiepení. Teoretický predpoklad o existencii tohto typu rozpadu bol prvý krát publikovaný v [Sandulescu et al., 1980]. Experimentálne potvrdený bol v roku 1984 pri zaznamenaní rozpadu ^{223}Ra emisiou ^{14}C.

Tento typ rozpadu bol pozorovaný pri izotopoch rozpadajúcich sa primárne α rozpadom. Vetviaci pomer vzhľadom k α rozpadu je

$$b_\alpha = \frac{T_{\frac{1}{2},\alpha}}{T_{\frac{1}{2},c}} \quad (9)$$

kde $T_{\frac{1}{2},c}$ je polčas rozpadu klastra. Vo všeobecnosti je tento pomer veľmi malý, rádovo menej ako 10^{-9}.

Teoreticky, môže byť akékoľvek jadro so $Z > 40$ a s $Q_c > 0$ klastrovým emiterom. Prakticky sú však tieto merania náročné kvôli veľmi nízkym vetviacim pomerom klastrovej emisie vzhľadom na iné rozpady, čo spôsobuje veľké pozadie. Vysoké množstvo iných rozpadov preto sťažuje identifikáciu produktov klastrovej emisie.

Podobne, ako vo vzťahu 5, sa dá ukázať, že Q hodnota klastrového rozpadu, Q_c, je

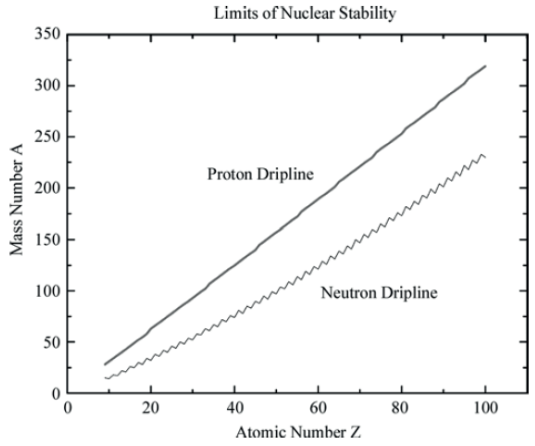
$$Q_c = E_c \frac{A_i}{A_f} \quad (10)$$

kde E_c je kinetická energia emitovaného jadra, A_i je atómové číslo materského jadra a A_f je atómové číslo dcérskeho jadra (t.j. $A_f = A_i - A_c$, kde A_c je atómové číslo emitovaného klastra).

Klastrový rozpad je, vzhľadom na veľkosť fragmentov, "medzikrok" medzi α rozpadom a spontánnym štiepením (SF). Rozdiel medzi SF a klastrovým rozpadom je, že dcérske jadrá pri SF sú rozdelené pravdepodobnostným rozdelením, zatiaľ čo pri klastrovom rozpade dané materské jadro emituje stále to isté jadro. Pri emisii ťažkých jadrových klastrov však okrem tohto neexistuje žiadny kvalitatívny rozdiel medzi SF a klastrovým rozpadom.

3 Protónová emisia

Pri protónovej emisii sa z materského jadra emituje jediný protón, pri čom sa uvoľní energia. Experimentálne potvrdenie tohto rozpadu bolo publikované v [Hofmann et al., 1982] (rozpad ^{151}Lu). Pre protónovo bohaté izotopy je Q hodnota pre protónovú emisiu, Q_p, kladná. Predpoklad, založený na semiempirickom hmotnostnom modeli, predpovedá oblasť, kde je Q_p kladné, t.j. jadrá sa môžu prirodzene rozpadať protónovou emisiou. ukázané na Obrázku 3 . Táto je vľavo od tzv. protónového driplinu. Dripline (protónový alebo neutrónový) je hranica, za ktorou sa jadrá rozpadajú emisiou protónu resp. neutrónu. Medzi týmito hranicami sa nachádza oblasť stability.



Obr. 3: Poloha protónového a neutrónového driplinu, predpovedaná kvapkovým modelom.

Protónová emisia by mala byť jednoduchým rozšírením α rozpadu, s rovnakým princípom tunelovania cez potenciálovú bariéru. Zjednodušenie spočíva v tom, že pri emisii protónu netreba uvažovať faktor predformovania pre protón (na rozdiel od α častice). Energie emitovaných protónov sú nízke aj pre veľmi ťažké jadrá ($E_p \sim 1-2$ MeV). Kvôli tomu je bariéra, potrebná na penetrovanie, širšia a zároveň je rozpad citlivejší na energiu protónu, zmenu uhlového momentu hybnosti atď.
Merania protónovej emisie sú náročné, kvôli nízkym energiám a krátkym polčasom rozpadu. Spolu s náročnosťou produkcie jadier blízko protónového driplinu to spôsobuje, že protónové emitery so $Z > 83$ neboli zatiaľ experimentálne pozorované.

4 Teoretické modely polčasov α rozpadu

4.1 Semiempirical relationship based on fission theory of α decay (SemFIS formula)

Model bol prezentovaný v [Poenaru et al., 1980], aktualizovaná sada konštánt a úpravy modelu boli publikované v [Poenaru et al., 2006]. Tento model zohľadňuje závislosť polčasu rozpadu od Z, ale tiež berie do úvahy veľký vplyv neutrónového vrstvového efektu (čiže polohu izotopu vzhľadom na magické čísla):

$$\log_{10} T_{\frac{1}{2}} = 0.43429 K_s \chi - 20.446 \qquad (11)$$

kde
$K_s = 2.52956 Z_f [A_f/(A_i \times Q_\alpha)]^{\frac{1}{2}} [\arccos\sqrt{x} - \sqrt{x(1-x)}]$
$x = 0.423 Q_\alpha (1.5874 + A_f^{\frac{1}{3}})/Z_f$

Hodnota Q_α je v MeV.
Numerický koeficient χ je polynóm druhého stupňa

$$\chi = B_1 + B_2 y + B_3 z + B_4 y^2 + B_5 yz + B_6 z^2$$

redukovaných premenných y a z, ktoré vyjadrujú vzdialenosť od najbližších magických-plus-jeden neutrónových (N_i) a protónových (Z_i) čísiel:

$y = (N - N_i)/(N_{i+1} - N_i); \quad N_i < N \leq N_{i+1}$
$z = (Z - Z_i)/(Z_{i+1} - Z_i); \quad Z_i < Z \leq Z_{i+1}$

Tabuľka 1: Hodnoty koeficientov pre $B_1 - B_6$ zvlášť pre párno-párne (e-e), nepárno- párne (o-e), párno-nepárne (e-o) a nepárno-nepárne (o-o) jadrá prezentované v [Poenaru et al., 2006] (SemFIS model).

	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	B_6
e-e	0.993119	-0.004670	0.017010	0.045030	0.018102	-0.025097
o-e	1.000560	0.010783	0.050671	0.013919	0.043657	-0.079999
e-o	1.017560	-0.113054	0.019057	0.147320	0.230300	-0.101528
o-o	1.004470	-0.160056	0.264857	0.212332	0.292664	-0.401158

s $N_i = \ldots, 51, 83, 127, 85, 229, \ldots$; $Z_i = \ldots, 29, 51, 83, 115, \ldots$. Koeficienty $B_1 - B_6$ boli získané z fitu experimentálnych dát. Hodnoty sú uvedené v Tabuľke 1 .

4.2 Model polčasov rozpadu založený na kvantovej preniknuteľnosti Coulombovej bariéry

Model prezentovaný v [Poenaru et al., 2006]. Je to všeobecne použiteľný model, na rozdiel od SemFIS modelu, ktorý sa dá použiť len na emisiu α častice. Jeho použitím je teda možné určiť polčasy rozpadov aj pre emisiu väčších jadier (klastrov) ale aj pre protónovú emisiu, kde sa emituje len jeden protón. Podľa tohto modelu možno polčas rádioaktívneho rozpadu vyjadriť ako:

$$\log_{10} T_{\frac{1}{2}} = -\log_{10} P_s - 22.169 + 0.598(A_e - 1) \quad (12)$$

kde

$$-log_{10} P_s = c_{AZ}\left[\arccos\sqrt{r} - \sqrt{r(1-r)}\right]$$

s $c_{AZ} = 0.22873(\mu_A Z_f Z_e R_b)^{\frac{1}{2}}$, $r = \frac{R_r}{R_b}$, $R_t = 1.2249(A_f^{1/3} + A_e^{1/3})$, $R_b = 1.43998 Z_f Z_e / Q$ (hodnota Q v MeV), a $\mu_A = A_f A_e / A$. Z_e a A_e sú protónové, resp. atómové číslo emitovaného jadra (pre α rozpad je $A_e = 4$ a $Z_e = 2$).

4.3 Zovšeobecnenie Geiger-Nuttallovho zákona

Model prezentovaný v [Qi et al., 2009]. Na rozdiel od Geiger-Nuttallovho zákona, tento model funguje pre všetky izotopické rady.

Podobne ako model z Poenaru 2006, tento model je možné použiť na výpočet polčasov klastrovej aj protónovej emisie:

$$\log_{10} T_{\frac{1}{2}} = a Z_e Z_f \sqrt{\frac{A}{Q}} + b\sqrt{A Z_e Z_f (A_f^{1/3} + A_e^{1/3})} + c \quad (13)$$

kde $A = A_f A_e/(A_f + A_e)$, hodnota Q v MeV. Konštanty a, b, c sú uvedené v Tabuľke 2 .

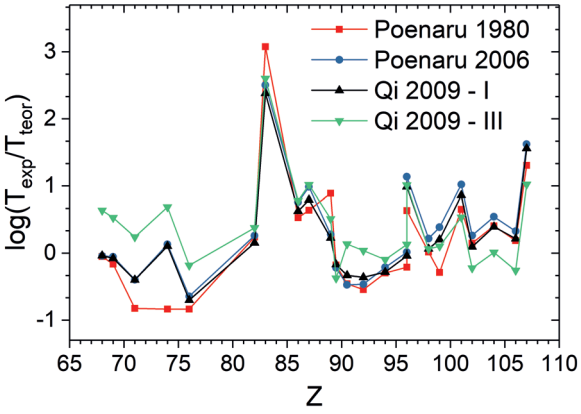
Tabuľka 2: Koeficienty: určené fitom experimentálnych dát pre α rozpad (I); emisiu zložených jadier (II); zmiešané pre α rozpad aj emisiu väčších jadier - klastrov (III)

	I	**II**	**III**
a	0.4065	0.3671	0.3949
b	-0.4311	-0.3296	-0.3693
c	-20.7889	-26.2681	-23.7615

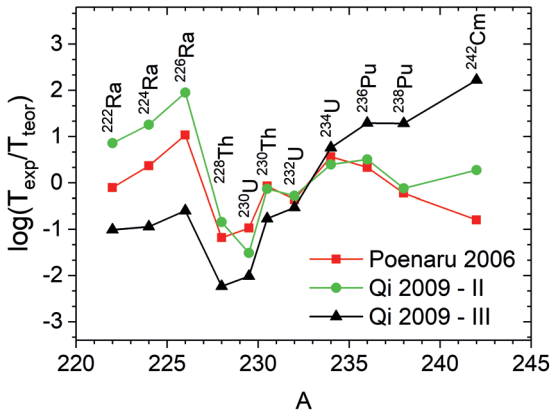
5 Výsledky

5.1 Aplikácia modelov na α rozpad

Vybrané modely, popísané v predchádzajúcej kapitole, sme aplikovali na 22 rôznych izotopov v rozsahu $67 \leq Z \leq 107$. Q hodnoty, rovnako ako experimentálne polčasy jednotlivých rozpadov boli určené z [NNDC, 2018] . Porovnanie presnosti jednotlivých modelov je na Obr. 4 .



Obr. 4: Porovnanie jednotlivých modelov na výpočet polčasu α rozpadu. x-ová os predstavuje protónové číslo vybraných izotopov, y-ová zas logaritmus pomeru teoretického a experimentálneho polčasu rozpadu, t.j. logaritmus HF. Model Poenaru 1980; Poenaru 2006; Qi 2009, koeficienty podľa Tabuľky 2: I - α rozpad; III - zmiešané pre α rozpad/emisiu klastrov. Experimentálne neistoty nie sú zahrnuté v obrázku, kvôli logaritmickej mierke (neistoty sú približne desatiny rádu, t.j. príliš malé na zobrazenie).



Obr. 5: Porovnanie jednotlivých modelov na výpočet polčasu emisie klastrov. V obrázku sú materské jadrá, ich módy rozpadu sú v tabuľke 3. Modely Poenaru 2006; Qi 2009, koeficienty podľa Tabuľky 2: II - emisia klastrov; III - zmiešané pre α rozpad/emisiu klastrov. x-ová os predstavuje atómové číslo skúmaných izotopov a y-ová os predstavuje logaritmus pomeru experimentálneho a teoretického polčasu rozpadu - faktor potlačenia (HF). Experimentálne neistoty sú na úrovni 0.5 rádu.

Z obrázku 4 vidíme, že pre všetky skúmané izotopy je $\log HF \approx 0 \pm 1$. Výnimkou je $^{213}_{83}$Bi, pre ktorý je $HF \approx 10^2 - 10^3$, t.j. náš predpoklad, podľa 1.4, je, že sa pri rozpade mení parita.

Experimentálne údaje to potvrdzujú, spin-parita materského jadra je $9/2^-$, spin-parita dcérskeho jadra je $1/2^+$. Experimentálna hodnota faktora potlačenia je $HF_{exp} = 264$, [NNDC, 2018].

5.2 Aplikovanie modelov na emisiu ťažších jadier - klastrov

Teoretické polčasy rozpadu jadier emisiou ťažších iónov - klastrov - sú uvedené v Tabuľke 3 .

Obrázok 5 predstavuje porovnanie teoretických hodnôt s experimentálnymi. Experimentálne hodnoty polčasov rozpadu sú z [Bonetti and Guglielmetti, 2007] .

5.3 Aplikovanie modelov na protónovú emisiu

Obrázok 6 ukazuje aplikáciu modelov na protónovú emisiu. Experimentálne hodnoty, s ktorými sú dané modely porovnávanie, sú z [NNDC, 2018].

5.4 Nový izotop ^{189}At

Podľa teoretického modelu pre hmotnosti izotopov FRDM - Finite-Range Droplet Macroscopic model - sme určili teoretické hodnoty pre Q_α a Q_p tohto izotopu ako $Q_\alpha = (M_i - M_f - M_\alpha)c^2 = 6.913$ MeV a $Q_p = (M_i - M_i - M_p)c^2 = 0.905$ MeV. Z týchto hodnôt sme určili teoretické polčasy pre jednotlivé rozpady, uvedené v Tabuľke 4.
Vidíme, že pre všetky tri hodnoty je hodnota α rozpadu rádovo 1 s, veľký rozdiel nastáva pri emisii protónu. Predpokladáme, že sa tento izotop rozpadá len α rozpadom, resp. emisiou protónu, t.j.

$$b_\alpha + b_p = 1 \Rightarrow b_p = 1 - b_\alpha \qquad (14)$$

Z pomerov polčasov pre jednotlivé rozpady zistíme opačné pomery prislúchajúcich vetviacich pomerov

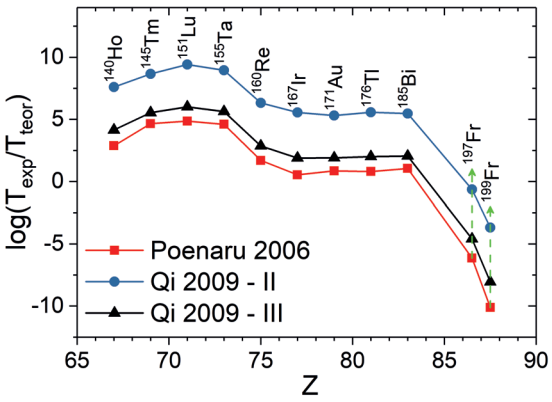
$$\frac{T_{1/2,\alpha}}{T_{1/2,p}} = \frac{b_p}{b_\alpha}$$

Dosadením zo vzťahu 14 dostávame

$$\frac{b_p}{b_\alpha} = \frac{1 - b_\alpha}{b_\alpha} = \frac{1}{b_\alpha} - 1 \Rightarrow \frac{1}{b_\alpha} = \frac{T_{1/2,\alpha}}{T_{1/2,p}} + 1$$

Tabuľka 3: Experimentálne a teoretické hodnoty polčasov rozpadu pre emisiu klastrov podľa jednotlivých modelov: (I) - Poenaru 2006; (II) - Qi 2009 , koeficienty pre klastre; (III) - Qi 2009 , koeficienty zmiešané pre α rozpad aj emisiu zložených jadier.

Izotop	Emitované jadro	$log_{10}T^{exp.}_{1/2}$	$log_{10}T_{1/2}(I)$	$log_{10}T_{1/2}(II)$	$log_{10}T_{1/2}(III)$
^{222}Ra	^{14}C	11.0	11.1	10.2	12.0
^{224}Ra	^{14}C	15.9	15.5	14.6	16.8
^{226}Ra	^{14}C	21.2	20.2	19.3	21.8
^{228}Th	^{20}O	20.7	21.9	21.6	23.0
^{230}U	^{22}Ne	19.2	20.2	20.7	21.2
^{230}Th	^{24}Ne	24.6	24.7	24.7	25.4
^{232}U	^{24}Ne	20.4	20.8	20.7	20.9
^{234}U	^{28}Mg	25.8	25.2	25.4	25.0
^{236}Pu	^{28}Mg	21.5	21.2	21.0	20.2
^{238}Pu	^{32}Si	25.3	25.5	25.4	24.0
^{242}Cm	^{34}Si	23.2	24.0	22.9	20.9



Obr. 6: Porovnanie jednotlivých modelov na výpočet polčasu protónovej emisie. Modely Poenaru 2006; Qi 2009, koeficienty podľa Tabuľky 2: II - emisia klastrov; III - zmiešané pre α rozpad/emisiu klastrov. x-ová os predstavuje protónové číslo skúmaných izotopov a y-ová os predstavuje logaritmus pomeru experimentálneho a teoretického polčasu rozpadu - faktor potlačenia (HF). Experimentálne neistoty nie sú zahrnuté v obrázku, kvôli logaritmickej mierke (neistoty sú približne desatiny rádu, t.j. príliš malé na zobrazenie).

Tabuľka 4: Hodnoty teoretických polčasov rozpadu pre ^{189}At. I - hodnoty podľa Poenaru 2006; II, III - hodnoty podľa Qi 2009, II koeficienty pre α rozpad (prvý riadok), resp. emisiu klastrov (druhý riadok), III zmiešané koeficienty pre α rozpad aj emisiu p^+.

	$T_{1/2}$[s] (I)	$T_{1/2}$[s] (II)	$T_{1/2}$[s] (III)
α rozpad	1.623	2.135	1.446
Emisia p^+	$8.3\ 10^3$	$1.76\ 10^{-2}$	$1.81\ 10^2$

Vetviace pomery pre jednotlivé polčasy protónovej emisie vypočítané podľa predchádzajúcej úvahy (s polčasom α rozpadu $T_{1/2,\alpha} = 1.8$ s, určenom ako priemer polčasov z teor. modelov) sú v Tabuľke 5

Tabuľka 5: Vetviace pomery pre α rozpad vzhľadom na polčas protónovej emisie podľa: I - Poenaru 2006; II, III - Qi 2009, hodnoty koeficientov príslušne pre emisiu klastrov, zmiešané pre emisiu klastrov/α rozpad.

	I	II	III
b_α	0.999783	$9.68\ 10^{-3}$	0.9902

$$b_\alpha = \frac{T_{1/2,p}}{T_{1/2,p} + T_{1/2,\alpha}}$$

6 Diskusia

α rozpad

Aplikovali sme teoretické modely polčasov rozpadov na α rozpad, protónovú emisiu a emisiu ťažších jadier - klastrov. Pri α rozpade sme získali dobrú zhodu s experimentom, pozorovali sme efekt zmeny parity pri rozpade ^{213}Bi, ktorý spôsobuje zmenu polčasu rozpadu oproti teoretickým hodnotám o 2-3 rády ($HF_{exp} = 264$). Podobný nárast HF vidíme pri ^{261}Bh, s $HF \sim 20-40$. Tento nárast by mal byť podľa časti 1.4 spôsobený rôznymi spinmi materského a dcérskeho jadra, so zachovaním jeho smeru (pre $Q_\alpha > 10.16$ MeV). Avšak [Heßberger et al., 2010] uvádza, že základný stav ^{261}Bh je $5/2^-$ a prechody na akýkoľvek stav ^{257}Db vykazujú $HF > 100$, okrem prechodu na stav $5/2^-$, ktorý je však preferovaný a preto by mal mať $HF < 5$. Možno teda predpokladať, že hodnota $Q_\alpha = 10.5$ MeV z [NNDC, 2018], je nesprávna. S $Q_\alpha = 10.1$ MeV (ktorá sedí s experimentálnymi hodnotami z [Heßberger et al., 2010]), je z teoretických modelov (4) $HF = 1-4$ (experimentálny HF pre takúto Q hodnotu je $\approx 3.5-4.6$).

Emisia klastrov

Z obrázku 5 vidno, že jednotlivé modely sa od experimentálnych hodnôt líšia najviac o dva rády, čo je s ohľadom na celkovo dlhý polčas emisie klastrov (viac ako 10^{20} s) dobrá presnosť.
Na rozdiel od α rozpadu, sme analyzovali klastrový rozpad len pre párno - párne izotopy, takže materské aj dcérske jadro by mali mať spin-paritu 0^+. Rovnako sú párno - párne aj emitované jadrá, takže akékoľvek rozdiely medzi experimentálnym a teoretickým parciálnym polčasom rozpadu by mali byť spôsobené samotnými modelmi. Experimentálne boli pozorované aj klastrové rozpady nepárno - párnych jadier, tie sme však v tejto práci nezahrnuli.

Protónová emisia

Z obrázku 6 je badateľný prudký pokles HF medzi ^{155}Ta a ^{160}Re. Tento pokles môže byť spôsobený efektom uzatvorenej neutrónovej pre $N = 82$. Podobný pokles vidíme medzi ^{185}Bi a ^{197}Fr, avšak tu je uzatvorená protónová vrstva $Z = 82$. Dôvod tohoto poklesu však môže byť spôsobený tým, že HF je dolný limit (zelené šípky) pre dané izotopy (^{197}Fr a ^{199}Fr). Pre experimentálne pozorované α rozpady týchto izotopov (~ 40 eventov pre ^{199}Fr; pre ^{197}Fr bol tento izotop pozorovaný cez jeden rozpadový α reťazec, [Kalaninová et al., 2013]), nebol pozorovaný ani jeden protónový rozpad. Preto sme určili dolný limit $HF_{^{199}\mathrm{Fr}} = 1/40$ a $HF_{^{197}\mathrm{Fr}} = 1$, v skutočnosti môže byť tento pomer omnoho vyšší - polčas rozpadu bude nižší.

Celkovo sa dá vidieť určitý systematický posun modelu II oproti ostatným dvom modelom (3-4 rády). Tento posun môže byť spôsobený tým, že koeficienty II z tabuľky 2 sú určené pre emisiu klastrov, t.j. jadrá násobne väčšie ako je α častica. Preto pri aplikovaní na emisiu protónu dochádza k väčšej odchýlke oproti III, ktorý je určený aj pre α rozpad.

^{189}At

Porovnaním módov rozpadu okolitých izotopov vidíme, že α rozpad je dominantným rozpadom v tejto oblasti ($b_\alpha \sim 1$). Preto je dôvod predpokladať, že hodnoty z tabuľky 5 sú správne len pre modely I a III. Z týchto vetviacich pomerov by mal byť celkový polčas rozpadu tohto izotopu

$$T_{1/2}^{^{189}\mathrm{At}} \approx 1.8 \pm 0.3 \text{ s}$$

7 Záver

V práci sme analyzovali 3 rôzne modely na výpočet polčasov rozpadov atómových jadier. Prvý model, určený len na výpočet polčasu α rozpadu, bol publikovaný v [Poenaru et al., 1980], úprava modelu a nové koeficienty boli publikované v [Poenaru et al., 2006]. Druhý model, všeobecnejšie určený aj na výpočet polčasov rozpadov emisiou ťažších jadier - klastrov, bol prezentovaný v [Poenaru et al., 2006]. Tretí model, podobne ako druhý použiteľný na výpočet polčasu rozpadov klastrovou emisiou, publikoval [Qi et al., 2009]. Všetky tieto modely sú primárne určené na polčas α rozpadu, pri ktorom vykázali dobrú presnosť (pre párno-párne jadrá bol $HF \approx 0$, pre iné jadrá modely nebrali do úvahy efekty nespárovaných nukleónov a pod.). Aplikáciou týchto modelov na emisiu klastrov a protónovú emisiu sme takisto overili ich spoľahlivosť v tejto oblasti. Pri emisii klastrov boli modely presné, odchýlky maximálne do 2 rádov sú pri parciálnom polčase týchto rozpadov zvyčajne akceptovateľné. Pri protónovej emisii sme po-

zorovali efekt uzatvorených vrstiev či už protónov alebo neutrónov. Nakoniec sme predpovedali vlastnosti (polčas rozpadu a vetviaci pomer) dosiaľ nesyntetizovaného ^{189}At.

Poďakovanie

Chcem sa poďakovať môjmu školiteľovi doc. Mgr. Stanislavovi Antalicovi, PhD. za odborné vedenie a ochotu zodpovedať akékoľvek otázky.

Literatúra

[Bonetti and Guglielmetti, 2007] Bonetti, R. and Guglielmetti, A. (2007). *Romanian Reports in Physics*, 59. 301.

[Geiger and Nuttall, 1911] Geiger, H. and Nuttall, J. (1911). *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 22(130).

[Heßberger et al., 2010] Heßberger, F. P., Antalic, S., Ackermann, D., Heinz, S., Hofmann, S., Khuyagbaatar, J., Kindler, B., Kojouharov, I., Lommel, B., and Mann, R. (2010). *European Physical Journal A*, 43. 175-180.

[Hofmann et al., 1982] Hofmann, S., Reisdorf, W., Münzenberg, G., Heßberger, F. P., Schneider, J. R. H., and Armbruster, P. (1982). *Zeitschrift für Physik A Atoms and Nuclei*, 305. 111-123.

[Kalaninová et al., 2013] Kalaninová, Z., Andreyev, A. N., Antalic, S., Heßberger, F. P., Ackermann, D., Ande, B., Drummond, M. C., Hofmann, S., Huyse, M., Kindler, B., Lane, J. F. W., Liberati, V., Lommel, B., Page, R. D., Rapisarda, E., Sandhu, K., Thornthwaite, A., Saro, S., and Duppen, P. V. (2013). *PHYSICAL REVIEW C*, 87. 044335.

[Loveland et al., 2006] Loveland, W., Morrisey, D. J., and Seaborg, G. T. (2006). John Wiley and Sons, Inc., Hoboken, New Jersey.

[NNDC, 2018] NNDC (2018). National Nuclear Data Center. http://www.nndc.bnl.gov/.

[Poenaru et al., 1980] Poenaru, D. N., Ivascu, M., and Mazilu, D. (1980). *Journal de Physique Lettres*, 41. 589-590.

[Poenaru et al., 2006] Poenaru, D. N., Plonski, I.-H., and Greiner, W. (2006). *PHYSICAL REVIEW C*, 74. 014312.

[Qi et al., 2009] Qi, C., Xu, F. R., Liotta, R. J., Wyss, R., Zhang, M. Y., Asawatangtrakuldee, C., and Hu, D. (2009). *PHYSICAL REVIEW C*, 80. 044326.

[Sandulescu et al., 1980] Sandulescu, A., Poenaru, D. N., and Greiner, W. (1980). *Soviet Journal of Particles and Nuclei*, 11.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 156–162
ISBN 978-8081470882, © 2018 Justína Nováková

Upgrade ALICE TPC

Justína Nováková[1*]

Školiteľ: RNDr. Miroslav Pikna, PhD.[1†]

Katedra jadrovej a subjadrovej fyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt: Experiment ALICE na LHC v CERNe bol špeciálne navrhnutý na štúdium interakcie relativistických ťažkých iónov s cieľom vytvoriť a študovať kvark-gluónovú plazmu (QGP). Po ukončení základných analýz QGP sa má experiment v ďalšom období zaoberať štúdiom procesov s nižšími účinnými prierezmi prebiehajúcich v QGP, čo však pre dosiahnutie vyhovujúcej štatistiky vyžaduje zvýšenie početnosti zrážok v detektore aspoň desaťnásobne. Za týmto účelom je pripravovaný upgrade detektora ALICE.

Zvýšená záťaž však predstavuje výzvu pre viaceré súčasti tohto detekčného systému. Zrýchliť časovo-projekčnú komoru (TPC) ako hlavný trekovací a zároveň najpomalší detektor ALICE si vyžaduje jednak zvýšenie efektivity elektroniky, ako aj rýchlosti elektrónov a kladných iónov v driftovom plyne. Východiskom sa zdajú byť plynné zmesi pozostávajúce z inertného plynu s prímesou CF_4, kde driftové rýchlosti elektrónov dosahujú až trojnásobne väčšie hodnoty, avšak o driftových rýchlostiach kladných iónov v týchto plynoch nachádzame v literatúre len málo údajov.

Táto práca sa zaoberá meraním driftových rýchlostí a počítaním mobilít kladných iónov v zmesiach s CF_4 pomocou aparatúry s driftovou komorou a digitálnym osciloskopom. Zmerané boli v zmesiach s nosnými plynmi Ar, Ne a He. Tieto merania ukázali, že na rozdiel od elektrónov, sú mobility kladných iónov porovnateľné s mobilitami v iných prímesiach (CH_4, CO_2) a závislé najmä od hmotnosti nosného plynu.

Kľúčové slová: ALICE TPC, driftová rýchlosť, mobilita, QGP

1 Úvod

1.1 Fyzikálna motivácia

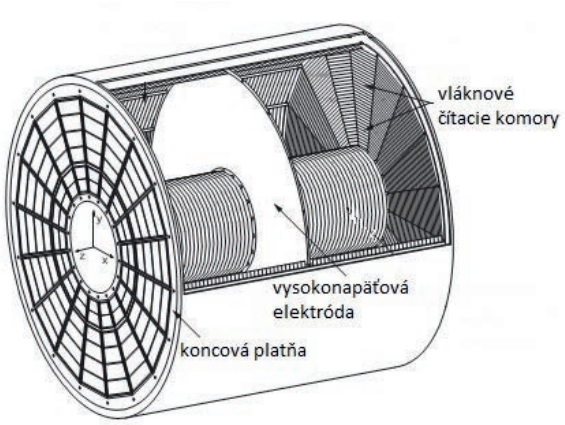
Experiment ALICE sa zaoberá fyzikou kvark-gluónovej plazmy (ďalej QGP), ktorá vzniká zrážkami ťažkých iónov pri relativistických rýchlostiach. V dôsledku zrážky je na krátky okamih vytvorené prostredie s vysokou hustotou a teplotou, v ktorom sa jednotlivé elementárne častice správajú neviazane. Veľmi rýchlo sa však toto prostredie schladí a preváži silná interakcia, vytvoriac tak hadróny a iné ťažšie častice. V prvej fáze experimentu ALICE (RUN1) bolo fyzikálnou úlohou študovať základné vlastnosti a procesy prebiehajúce v QGP. Dostatočná štatistika je v tomto prípade dosiahnutá pri hustote zrážok 500 event/s, čo predstavuje približne 1 nb^{-1} integrovanej luminozity [Molnar and The ALICE Collaboration, 2015].

Pre druhú fázu experimentu ALICE (RUN2) je plánované hlbšie preskúmanie zriedkavých procesov v QGP, akými sú napríklad termalizácia hadrónov, produkcia termálnych fotónov, či štúdium ľahkých dileptónov. Vzhľadom k nízkym účinným prierezom týchto procesov je nutné výrazne zvýšiť hustotu zrážok, na hodnoty 5 000 až 15 000 event/s, aby mohla byť nabratá dostatočná štatistika. Zároveň s frekvenciou zrážok je potrebné zvýšiť rýchlosť jednotlivých detektorov experimentu ALICE – pritom skupina KJFB FMFI UK, v rámci ktorej bol tento príspevok vypracovaný, je zapojená do kolaborácie pre upgrade časovo-projekčnej komory (ďalej TPC). Zrýchlenie detektora znamená okrem zvýšenia rýchlosti elektroniky aj urýchlenie zberu produkovaného náboja, aby nedochádzalo k zahlcovaniu aktívneho priestoru detektora.

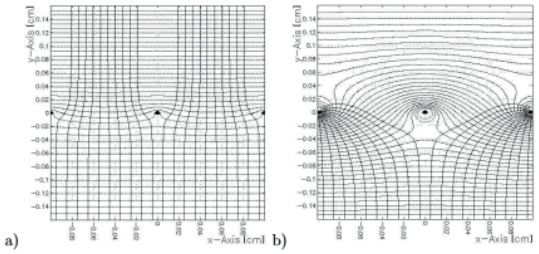
1.2 Princíp pohybu náboja v TPC

Po prechode ionizujúcej častice cez driftový priestor detektora a vytvorení ionizačnej stopy driftujú primárne elektróny ku koncovým platniam (Obr. 1), ktoré sú osadené mnohovláknovými proporcionálnymi komorami (MWPC), kde sa zosilnia a vytvoria elektrický signál na padovej rovine. Zásadným problémom ale zostáva kladný náboj v celom objeme detektora, ktorý je o tri rády pomalší než elektróny. Pochádza jednak z primárnej ionizácie v driftovom priestore TPC, pričom tento je neutralizovaný na stredovej vysokonapäťovej katódovej platni. Druhým, intenzívnejším zdrojom kladných iónov je

*justina.novakova@trojsten.sk
†miroslav.pikna@fmph.uniba.sk



Obr. 1: *Zjednodušená schéma detektora* TPC *na experimente* ALICE. *[The ALICE Collaboration, 2014]*



Obr. 2: *Simulácia driftových čiar kladných iónov v okolí vrátovacej mriežky. (a) Vrátovacia mriežka je otvorená, na vláknach je rovnaký potenciál. (b) Vrátovacia mriežka je zatvorená, na vláknach je striedavo* 45 V *a* −45 V. *[Mormann et al., 2004]*

proces plynového zosilnenia primárnych elektrónov nad anódovými vláknami mnohovláknových proporcionálnych počítačov. Tento kladný náboj je vychytávaný čiastočne vrstvou katódových vlákien a tie ióny, ktoré cez katódovú mriežku prejdú, sú zachytené vrátovacou mriežkou.

Primárnou funkciou vrátovacej mriežky je izolovanie MWPC od nezaujímavých eventov, ktoré v driftovom priestore TPC vytvoria signál a zbytočne by sa zosilnili v koncových platniach, čo by spôsobilo výrazné opotrebenie detektora. Mimo toho po zosilnení zaujímavého eventu pomáha zabrániť driftu kladného náboja späť do driftového priestoru. Princíp tejto mriežky spočíva v zmene potenciálov medzi susednými vláknami, viď. Obr. 2.

Doba potrebná na zozbieranie signálu z celého objemu detektora predstavuje v súčasnej TPC približne $T \approx 100$ µs. To pri početnosti eventov 500 event/s predstavuje otvorenie mriežky na 5 % celkového času, teda 95 % času je mriežka zatvorená na zber náboja. Prechod početnosti na ≈ 10 000 event/s znamená, že vrátovacia mriežka je otvorená 100 % času a kladný náboj môže voľne driftovať späť do aktívneho objemu detektora. Z tohto hľadiska je potrebné pre RUN2 zaviesť systém kontinuálneho zberu kladných iónov.

Urýchlenie elektrónov v driftovom priestore a tým aj zrýchlenie zberu tohto náboja je možné len prostredníctvom zmeny pracovného plynu na zmesi s vyššími driftovými rýchlosťami. V tomto smere predstavujú zmesi so zhášačom CF_4 sľubnú alternatívu – dochádza k zvýšeniu driftovej rýchlosti z 2,5 cm/µs v zmesiach s CO_2 až na 13 cm/µs. [Christophorou et al., 1993] Avšak driftové rýchlosti kladných iónov v týchto zmesiach predstavujú dosiaľ nepremerané parametre.

1.3 Driftová rýchlosť a mobilita

Driftovú rýchlosť častice definujeme ako vzdialenosť v danom plyne, ktorú častica prejde za jednotku času. Teda naopak, ak poznáme vzdialenosť L [cm] a meriame čas t [s], môžeme napísať

$$K_{\text{drift}} = \frac{L}{t} \tag{1}$$

Musíme ale brať do úvahy aj termálny pohyb častíc, preto je nutné tieto hodnoty normalizovať na tlak p [Torr] a teplotu T [K] pri danom meraní. Preto tento vzťah upravujeme nasledovne:

$$K_0 = K_{\text{drift}} \frac{273.15}{T} \frac{p}{760} \tag{2}$$

kde K_0 je normalizovaná driftová rýchlosť v cm/s.

Mobilita častice je driftová rýchlosť normovaná na intenzitu elektrického poľa E [V/cm], v ktorom sa častica pohybuje:

$$\mu = \frac{K_0}{E} \tag{3}$$

Ak teda zobrazíme body $K_0 = f(E)$ a fitujeme ich priamkou, smernica tejto priamky predstavuje mobilitu v danom plyne.

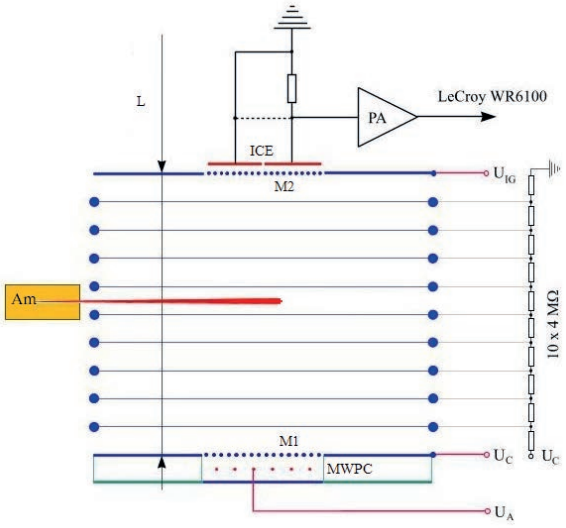
2 Meranie driftových rýchlostí kladných iónov

Skupina KJFB FMFI UK sa v rámci kolaborácie ALICE TPC zaoberá analýzou driftových rýchlostí kladných iónov v rôznych zmesiach plynov.

2.1 Schéma a princíp fungovania experimentálneho zariadenia

Schématický náčrt driftovej komory, s ktorou pracujeme, je na Obr.: 3. Pozostáva z driftového priestoru meniteľnej dĺžky L, ktorý je ohraničený dvomi mriežkami. V driftovom priestore je udržované homogénne elektrické pole, ktoré zaisťujú prstence v rozostupoch 5 mm, napojené na odporový delič.

Vo vzdialenosti 3 mm pod mriežkou v spodnej časti komory (M1) sa nachádza mnohovláknová proporcionálna komôrka (MWPC). Táto slúži na vytváranie oblaku kladného priestorového náboja zosilnením primárnych elektrónov. Anódové vlákna tejto komôrky sú umiestnené vo vzájomnej vzdialenosti 2,5 mm a ich hrúbka je 20 µm. Vo vrchnej časti driftového priestoru, 1,5 mm za druhou mriežkou (M2) je umiestnená zberná elektróda iónov (ICE). Signály z oboch elektród (MWPC a ICE) sú zaznamenané na osciloskope LECROY WAVERUNNER 6100A.



Obr. 3: *Schéma experimentálnej komory vyrobenej na KJFB za účelom merania driftových rýchlostí kladných iónov v plynných zmesiach. Použitý žiarič* 60 keV γ*je umiestnený mimo komory.*

Princíp práce komory spočíva v implantácii kolimovaného zväzku γ kvánt rádioaktívneho žiariča ^{241}Am o energii 60 keV okienkom detektora približne do stredu komôrky. Tieto γ interagujú s pracovným plynom prostredníctvom fotoefektu, čo zapríčiní vznik elektrón-iónových párov, kde elektróny majú energiu 60 keV a dobeh $1-2$ mm.

Elektróny predriftujú pod v plyvom elektrického poľa k rovine anódových vlákien MWPC na spodku komory, kde sa zosilnia prostredníctvom ionizácie. Všetky elektróny sú následne rekombinované na anódových vláknach a zostane tu oblak kladného náboja, ktorý driftuje smerom k M1, čím na nej indukuje napäťový impulz. Tento impulz je bipolárny, a jeho priebeh závisí od vzájomnej polohy ťažiska oblaku kladných iónov a mriežky, pričom prechádza nulou práve v okamihu, keď je ťažisko na úrovni mriežky. Tento bod pokladáme za štart signál pre meranie doby driftu iónov.

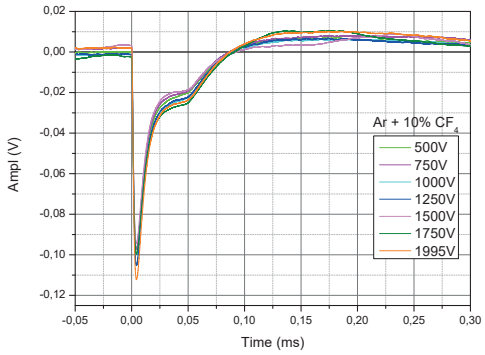
Po prechode cez M1 vstúpi oblak iónov do driftového priestoru s homogénnym elektrickým poľom a pod jeho vplyvom sa pohybuje smerom ku M2 na vrchu komory. M2 je uzemnená, čím elektrostaticky oddeľuje ICE od zvyšku komory, preto sa záznam napäťového impulzu na ICE objaví až v momente, keď čelo oblaku prejde cez M2. Maximum tohoto impulzu nazývame stop signál doby driftu iónov. Odčítaním času medzi štart a stop signálom dostaneme čas Δt vstupujúci do vzťahu pre driftovú rýchlosť.

2.2 Pracovný záznam z osciloskopu

Proces vytvorenia primárneho signálu, jeho zosilnenie a záznam štart a stop signálu nazývame event. Každý event je trigerovaný impulzom z anódového vlákna MWPC. Nakoľko amplitúda získaná z každého eventu je malá, na úrovni šumov, prebieha meranie za pomoci funkcie osciloskopu nazývanej priemerovanie (angl. averaging). Výsledný signál je potom sumáciou kriviek z ≈ 1000 eventov, pričom táto funkcia potláča šumy, ktoré v čase prichádzajú náhodne a sumáciou sa zvýraznia len pravidelne prichádzajúce impulzy štart a stop signálu.

Na Obr. 4 vidíme priemerovaný štart signál M1 z osciloskopu. Prechod nulou nastáva jasne okolo bodu $T = 0{,}1$ µs a pre rôzne intenzity elektrického poľa sa mení len málo, čo je v zhode s našimi očakávaniami, nakoľko rýchlosť primárnych elektrónov k anódovému vláknu je na úrovni µs, a preto na ms škále nevidno rozdiely ich rýchlostí pri zmene elektrického poľa. Posun tejto hodnoty nastáva pri zmene pracovného plynu, napríklad pre He zmesi je tento čas $T = 0{,}06$ µs.

Na Obr. 5 sú zobrazené štart aj stop signály v zmesi $Ar + CF_4$ v pomere 90 : 10. Vidíme, že so zmenšovaním intenzity elektrického poľa v driftovom priestore dochádza ku vzďaľovaniu vrcholu stop signálu od štart impulzu, a zároveň dochádza k znižovaniu

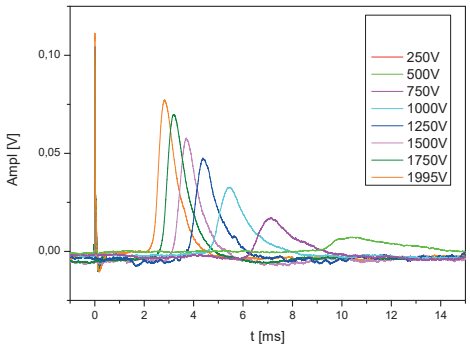


Obr. 4: *Štart signál z mriežky M1 priemerovaný osciloskopom pre rôzne intenzity elektrického poľa v zmesi* $\mathrm{Ar} + 10\ \%\mathrm{CF_4}$.

jeho amplitúdy a zväčšovaniu jeho šírky.

Toto správanie je logické, keďže amplitúda signálu je priamo závislá od veľkosti prúdu generovaného oblakom iónov. Ten je tým väčší, čím je väčšia driftová rýchlosť iónov a tá je úmerná intenzite elektrického poľa v driftovom priestore. Rozširovanie signálu je spôsobené efektom difúzie v driftovom priestore počas presunu oblaku kladných iónov od M1 ku M2. V dôsledku pružných zrážok s atómami pracovného plynu sa tento oblak rozpína v priestore, takže čím je dlhšia doba driftu, tým väčšmi ióny difundujú, a tým je výsledný signál, ktorý príde na ICE širší.

Pre signál s $E = 250$ V je amplitúda stop signálu takmer na úrovni šumov a vo veľkom časovom odstupe oproti ostatným meraniam, preto sme tento signál v Obr. 5 neuviedli.



Obr. 5: *Príklad priebehu štart a stop signálu z osciloskopu v zmesi* $\mathrm{Ar} + \mathrm{CF_4}$ *v pomere* 90 *:* 10.

Nedostatkom osciloskopového výstupu je nemožnosť určenia chyby merania. Výsledný signál, ktorý dostaneme na osciloskope je sumáciou signálov z jednotlivých eventov. Tie sú totiž na úrovni šumu, ktorý sa však prostredníctvom sumácie vzájomne odčíta.

2.3 Výsledky

Vyššie uvedeným spôsobom sme premerali zmesi v rôznych pomeroch nosných plynov a zhášačov. V nasledujúcej tabuľke sú základné vlastnosti týchto plynov.

Plyn	MIP [e/cm]	ρ [g/L]
Ar	85	1,67
Ne	45	0,853
He	8	0,166
CO_2	90	1,87
CH_4	100	0,668
CF_4	100	3,72

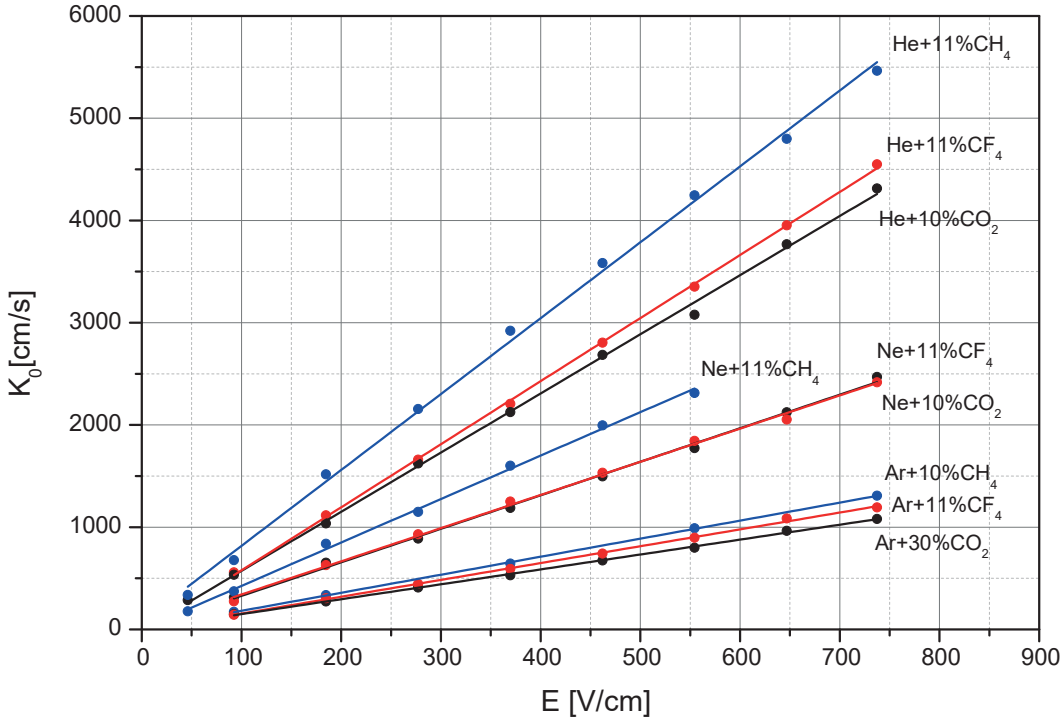
Tabuľka 1: *Počet primárnych elektrónov vyprodukovaných minimálne ionizujúcou časticou na centimetri dráhy a hustota plynov, ktoré sme používali v našich meraniach. [Garabatos, 2013] [**?**]*

Zaujímali sme sa pritom najmä o zmesi s CF_4. Výsledky z niektorých meraní s približne rovnakými koncentráciami zhášacieho plynu pre všetky tri nosné plyny vidíme na Obr. 6. Hodnoty smerníc priamok preložených nameranými bodmi závislostí z Obr. 6 predstavuje mobilitu kladných iónov pre meranú zmes (Tab. 2).

Nosný plyn	Prímes	μ [$\mathrm{cm^2/(Vs)}$]
Ar	11 % CF_4	1.65 ± 0.025
	10 % CH_4	1.76 ± 0.017
	30 % CO_2	1.45 ± 0.019
Ne	10 % CO_2	3.28 ± 0.062
	11 % CF_4	3.24 ± 0.062
	11 % CH_4	4.25 ± 0.088
He	10 % CO_2	5.78 ± 0.08
	11 % CF_4	6.17 ± 0.047
	11 % CH_4	7.42 ± 0.12

Tabuľka 2: *Mobility kladných iónov v zmesiach nosných plynov* Ar, Ne, He *s prímesami* CO_2, CH_4 *a* CF_4.

Vidíme, že v Ar sa driftová rýchlosť s intenzitou poľa výrazne nemení, a zároveň vidno len malé zmeny pre rôzne zhášače. V prípade Ne je najrýchlejšou zmesou $\mathrm{Ne} + \mathrm{CH_4}$ a medzi CO_2 a CF_4 nie je



Obr. 6: *Závislosti driftovej rýchlosti od intenzity elektrického poľa pre* Ar, Ne, He *s prímesami* CO_2 *(čierna),* CH_4 *(modrá),* CF_4 *(červená).*

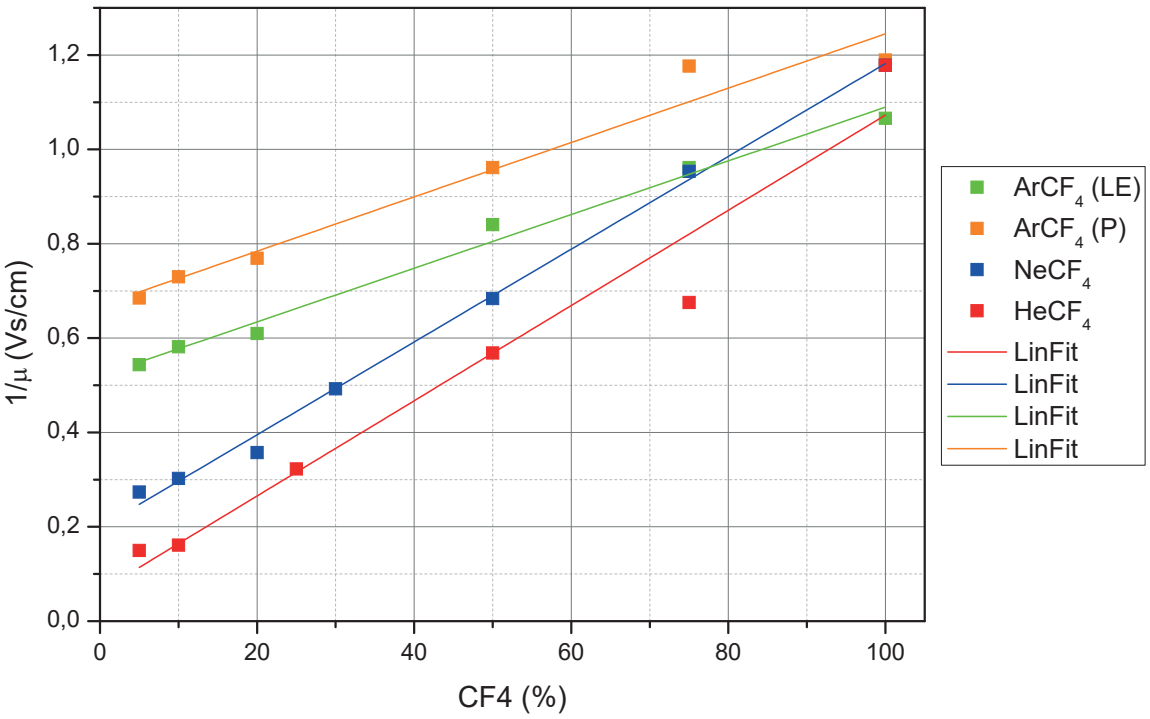
skoro žiaden rozdiel v driftovej rýchlosti. Najlepšie sa javia výsledky pre He, kde ale opäť CF_4 v zmesi dáva podobné výsledky ako CO_2, a metán opäť predstavuje výrazne vyššie hodnoty driftových rýchlostí kladných iónov.

Zároveň z týchto meraní dobre vidíme, že kladné ióny sa pohybujú v plyne tým rýchlejšie, čím je tento ľahší. Na Obr. 7 vidíme priebeh obrátenej hodnoty mobility K v závislosti od koncentrácie CF_4 v danom plyne.

Plyn	a	b
Ar [P]	0.665 ± 0.028	0.005 ± 0.0005
Ar [LE]	0.564 ± 0.029	0.005 ± 0.0005
Ne	0.198 ± 0.014	0.001 ± 0.0003
He	0.063 ± 0.061	0.01 ± 0.001

Tabuľka 3: *Parametre lineárneho fitu programu* ORIGIN *rovnicou* $1/\mu = a + bx$ *pre body z grafu na Obr. 7, pričom* x *predstavuje koncentráciu* CF_4 *v nosnom plyne.*

Pre Ar vidíme dve krivky, P predstavuje hodnoty stop signálu brané z píku a LE hodnoty z nábehovej hrany (angl. leading edge). Tieto hodnoty sú navzájom posunuté o konštantu a vidíme, že smernice fitov (Tab. 3) týchto dvoch datasetov sú totožné. V ostatných meraniach sme vždy brali do úvahy len dáta z píku, nakoľko to predstavuje moment, kedy cez mriežku prejde ťažisko oblaku kladných iónov. Avšak pri porovnávaní našich meraní s inými pracovnými skupinami sme zistili, že naše výsledky mobilít sú permanentne menšie. Ukázalo sa ale, že to je s najvyššou pravdepodobnosťou dôsledok toho, že iné pracovné skupiny pokladajú za smerodajnú hodnotu z nábehovej hrany. Nie je možné to však preveriť, keďže táto informácia nie je pri hodntotách uvádzaná. Ďalej vidíme, že mobilita kladných iónov v zmesiach s Ne aj He reaguje veľmi podobne, avšak He prejavuje väčšie výkyvy zobrazovanej hodnoty pre vysoké koncentrácie CF_4.



Obr. 7: *Priebeh obrátenej hodnoty mobility v závislosti od koncentrácie* CH_4 *v* Ar, Ne *a* He. *Posledný bod priamky pre* He *nevidno, nakoľko ju prekrývajú ďalšie dva body s rovnakou hodnotou.*

3 Závery a perspektívy

Vyššie sme uviedli výsledky merania driftových rýchlostí rôznych plynových zmesí. Z nich jasne vyplýva, že prímesi CF_4, CO_2 a CH_4 nemajú na driftovú rýchlosť kladných iónov v zmesi výrazný vplyv. Zároveň sa ukazuje, že najväčšmi na driftovú rýchlosť pôsobí hmotnosť, a teda aj hustota nosného plynu v komore.

Čím je plyn ľahší, tým menej energie ióny pri prechode cezeň stratia, a tým rýchlejšie sa cez neho propagujú. Takéto plyny majú ale veľmi nízke MIP, teda primárny signál je slabý, čo nie je do veľkej TPC vhodné. Rovnako je pri použití ľahkých plynov problém udržať v komore stabilné podmienky čistoty, tlaku a teploty. Z týchto dôvodov dosiahnutie dostatočne rýchleho zberu kladného náboja nebude možné len zmenou pracovného plynu a bude potrebné zaviesť iný mechanizmus – nový spôsob zberu náboja, či presné korekcie nehomogenít elektrostatického poľa, vzniknutých hromadením ionizácie.

Problém súčasnej meracej aparatúry spočíva v potrebe priemerovania signálov v osciloskope. Signály z jediného eventu nie sú dostatočne intenzívne, stratia sa v šumoch a vidíme ich až vďaka priemerovaniu. V takomto prípade nie je možné analyzovať chybu, ktorej sme sa pri meraní dopustili, a ktorou je každý event zaťažený. Východiskom by mohlo byť použitie UV lasera Nd:YAG na generovanie ionizačnej stopy. Predbežné merania ukázali, že laser vyprodukuje ≈ 100 krát intenzívnejšiu stopu ako pôvodný žiarič ^{241}Am v rovnakom plyne. Táto skutočnosť by nám umožnila merať čas každého eventu od štart po stop signál, vyniesť ich do histogramu a následne stanoviť aj chybu tohoto merania. Toto predstavuje súčasnú výzvu pre pracovnú skupinu KJFB FMFI UK.

Literatúra

[Christophorou et al., 1993] Christophorou, L. G. et al. (1993). Fast gas mixtures for gas-filled particle de-

tectors. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A*, 324:113–126.

[Garabatos, 2013] Garabatos, C. (2013). Gas considerations.

[Molnar and The ALICE Collaboration, 2015] Molnar, L. and The ALICE Collaboration (2015). Upgrade and physics perspective of ALICE at the LHC. *Journal of Physics: Conference Series*, 589.

[Mormann et al., 2004] Mormann, D., Breskin, A., Chechik, R., and Bloch, D. (2004). Evaluation and reduction of ion back-flow in multi-gem detectors. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometerss, Detectors and Associated Equipment*, 516:315–326.

[The ALICE Collaboration, 2014] The ALICE Collaboration (2014). Technical design report for the upgrade of the ALICE time projection chamber. page 175.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 163
ISBN 978-8081470882, © 2018 Miroslav Macko

Merania kvality depozície ^{207}Bi v kalibračných zdrojoch pre SuperNEMO experiment (rozšírený abstrakt)

Miroslav Macko[1,2,3*]

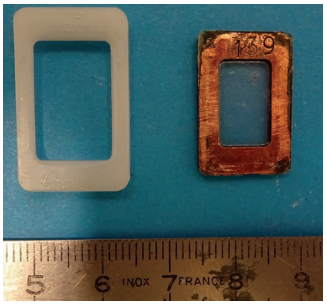
Školiteľ: Ivan Štekl[2] a Fabrice Piquemal[4,5]

[1] Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská dolina F1, 842 48 Bratislava
[2] Ústav technické a experimentální fyziky, ČVUT v Praze, 12800 Praha, Česká Republika
[3] Université de Bordeaux, 351 cours de la Libération, 33405 Talence Cedex, Francúzsko
[4] CENBG, Université de Bordeaux, CNRS/IN2P3, F-33175 Gradignan, Francúzsko
[5] Laboratoire Souterrain de Modane, F-73500 Modane, Francúzsko

SuperNEMO experiment

SuperNEMO (Neutrino Ettore Majorana Observatory) patrí do novej generácie experimentov na hľadanie bezneutrínového dvojitého beta rozpadu ($0\nu\beta\beta$) [Arnold et al., 2010].

Štandardné $0\nu\beta\beta$ experimenty sú zamerané na čo najpresnejšie experimentálne určenie kinetických energií dvoch elektrónov vylietavajúcich z rozpadu, zatiaľ čo hlavnou devízou projektu SuperNEMO je dodatočná topologická rekonštrukcia udalostí $0\nu\beta\beta$ rozpadu. Po inaugurácii prvého (z 20 plánovaných) modulu - demonštrátora - koncom roku 2017 sa prvé dáta očakávajú už tento rok. Demonštrátor bude pozorovať takmer 7 kg ^{82}Se vo forme tenkých fólií.



Obr. 1: Zdroj číslo 139. Naľavo sa nachádza ukážka bielej plastovej obálky, ktorá bola nalepená na niektorých exemplároch zdrojov.

Kalibračné ^{207}Bi zdroje

Kalibrácia demonštrátora bude prebiehať v pravidelných cykloch počas behu experimentu. Kalibračné bodové zdroje ^{207}Bi budú umiestnené na presne určených pozíciách vnútri detektora.

Použité zdroje tvoria dve vrstvy priesvitnej fólie, medzi ktoré je nadeponovaná kvapka s roztokom ^{207}Bi. Takáto fólia je spevnená radiačne čistým medeným rámčekom (Obrázok 1).

Presnosť kalibrácie SuperNEMO demonštrátora a následne aj ním nameraných dát je závislá aj od neistoty s akou vieme určiť, či je kvapka ^{207}Bi nadeponovaná presne v strede rámčeka. Voľným okom táto bodka nie je rozoznateľná. V predkladanej práci preto boli použité Timepix pixelové detektory [Llopart et al., 2007] poskytnuté z ÚTEF ČVUT v Prahe.

Ciele

Hlavným cieľom tejto práce bolo systematicky vyvinúť meraciu metódu, ktorá by zoradila merané zdroje od najlepších po najhoršie na základe presnosti depozicie kvapky ^{207}Bi v strede rámčeka. Túto metódu som následne aplikoval v meraniach v podzemnom laboratóriu LSM (Laboratoire Souterrain de Modane) vo Francúzsku. Na základe vzdialenosti depozície (r) kvapky ^{207}Bi od stredu kovového rámčeka bolo 49 zdrojov rozdelených do troch základných kvalitatívnych skupín: najlepšie (r < 0,5 mm), dobré (0,5 mm < r < 1 mm), zlé (1 mm < r). Výsledky práce budú kolaboráciou využité ako kritérium výberu najkvalitnejších zdrojov.

Literatúra

[Arnold et al., 2010] Arnold, R. et al. (2010). *The European Physical Journal C*, 70(4):927–943.

[Llopart et al., 2007] Llopart, X. et al. (2007). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 581(1):485 – 494. VCI 2007.

*Miroslav.Macko@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 164
ISBN 978-8081470882, © 2018 Pavol Mošať

Spontaneous fission of rutherfordium isotopes - total kinetic energies (Extended Abstract)

Pavol Mošať[1]*

Supervisor: Boris Andel[1]†

[1] Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Spontaneous fission (SF) is a decay mode with large impact on the stability of nuclei in the transfermium region. These isotopes are stabilized mainly by microscopic effects [1]. Systematic studies of SF properties allow us to understand these effects and determine the production possibilities for the heaviest nuclei. Up to now, only a few results (often based on limited statistics of SF events) with measured total kinetic energy (TKE) were obtained for rutherfordium ($Z = 104$) isotopes [2, 3, 4, 5]. We collected several hundreds of SF events for ^{255,256,258}Rf produced in the fusion-evaporation reactions ^{50}Ti + ^{207,208}Pb and ^{50}Ti + ^{209}Bi performed at GSI Darmstadt, using the velocity filter SHIP. The crucial task for the evaluation of $\langle$TKE$\rangle$ using Si detectors is the correction of deficit in measured energies. There are two main effects influencing the TKE measurements, discussed in previous studies performed at SHIP [6]. First, the energy calibration based on α-decay energies is not valid for fission fragments due to the pulse-height defect (see e.g. [7]), resulting in an energy deficit of more than 10%. The second effect is a dependence of the detected TKE on the implantation depth of evaporation residues into the detector. In order to find the energy correction, we performed TKE measurements for ^{252}No with well known $\langle$TKE$\rangle$ = 194.3 MeV [3] at six different implantation depths. Our observations proved the strong non-linear saturation-like dependence of detected TKE on implantation depth [8]. The correction to energy deficit at given implantation depth was determined as a difference of the reference $\langle$TKE$\rangle$ of 194.3 MeV and the value from experimental fit (Fig. 1) as

$$\Delta E = (194.3 - \langle TKE \rangle_{fit})\,\mathrm{MeV} \qquad (1)$$

Corrected $\langle$TKE$\rangle$ values for ^{255,256,258}Rf are summarized in Tab.1 and compared to values from previous studies. The results are in a good agreement which supports the validity of our correction method.

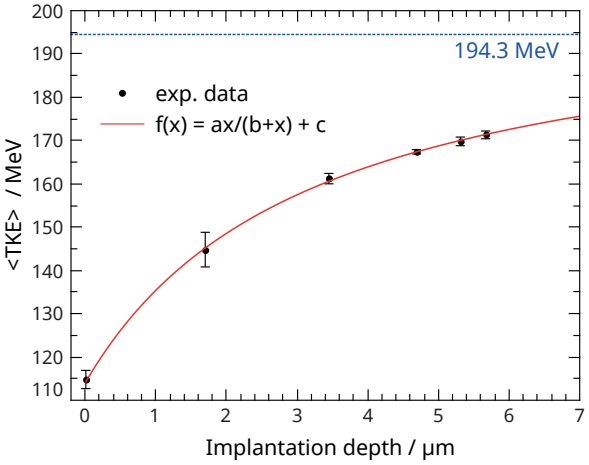


Figure 1: $\langle$TKE$\rangle$ from the SF of ^{252}No vs. implantation depth of evaporation residues in the detector. Blue dashed line: $\langle$TKE$\rangle$ = 194.3 MeV of ^{252}No from [3]. Red full line: saturation-growth fit.

Isotope	$\langle TKE \rangle_{exp}$ [MeV]	$\langle TKE \rangle_{ref}$ [MeV]	Ref.
^{255}Rf	199.5 ± 2.7	199 ± 3	[4]
^{256}Rf	198.7 ± 2.8	198.9 ± 4.4	[2]
^{258}Rf	198.2 ± 3.0	197.6 ± 1.1	[2]

Table 1: In the table columns, from left to right, isotope, $\langle$TKE$\rangle$ evaluated in this work, reference value of $\langle$TKE$\rangle$ and corresponding references are stated.

References

[1] S. G. Nilsson, et al., *Nuclear Physics A* **131**, 1 (1969).
[2] J. F. Wild, et al., *J. Alloy. Compd.* **213**, 86 (1994).
[3] E. K. Hulet, *Phys. At. Nucl.* **57**, 1099 (1994).
[4] S. Antalic, et al., *Eur. Phys. J. A* **51**, 41 (2015).
[5] A. I. Svirikhin, et al., *Phys. Part. Nucl. Lett.* **13**, 480 (2016).
[6] K. Nishio, et al., *AIP Conf. Proc.* **891**, 71 (2007).
[7] B.D. Wilkins, et al., *Nucl. Instrum. Methods* **92**, 381 (1971).
[8] P. Mosat, et al., *Acta phys. pol. B* **49**, 605 (2018).

*pavol.mosat@fmph.uniba.sk
†boris.andel@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 165
ISBN 978-8081470882, © 2018 Lukáš Fajt

Time calibrations of the GVD neutrino telescope (Extended Abstract)

Lukáš Fajt[1,2*]

Supervisor: prof. RNDr.Fedor Šimkovic, CSc.[1,2,3†]

[1] Department of Nuclear Physics and Biophysics, FMFI UK, Mlynská Dolina F1, 842 48 Bratislava, Slovakia
[2] Institute of Experimental and Applied Physics, CTU in Prague, Horská 3a/22, 128 00 Prague, Czech Republic
[3] Joint Institute for Nuclear Research, Joliot-Curie 6, 141 980 Dubna, Russia

Despite the fact that the main goal of the neutrino telescopes, to prove the existence of the astrophysical neutrinos, was already achieved in 2013 by the IceCube experiment ([Aartsen et al., 2013]), their potential sources which can accelerate these mysterious particles to ultra-high energies which are significantly exceeding energies which can be reached by humankind still remain undiscovered. Some of these questions could be in the next few years answered by the Gigaton Volume Detector (GVD) neutrino telescope.

Gigaton Volume Detector

The GVD is installed in the largest freshwater lake Baikal at 1 366 m depth, 3.6 km from the shore. The basic detection element of the GVD is an Optical Module (OM) consisting of 17-inch transparent pressure-resistant glass sphere, 10-inch Hamamatsu PMT R7081-100, and electronics. Signals from 12 OMs are processed with 12-bit 12 channel 200 MHz FADC. The largest independent unit of the GVD is a cluster. Every cluster consists of 8 strings (1 central + 7 peripheral) of 525 m length with 36 OMs on every string. The detector itself is still under construction, however the first three clusters (864 OMs) were already installed in the last three years and are currently taking data.

The GVD is a 3D array of light-sensitive OMs which can detect light created through Cherenkov effect by charged particles created in Charge Current (CC) interactions of neutrinos with nuclei in the water. The individual optical photons are recorded by OMs in the precisely measured times which enables us to reconstruct the incoming direction of the neutrino. The desired ns precision together with relatively high number of channels ($\sim$ thousands) make the time calibration procedure a very challenging task.

Time Calibrations

Even a small uncertainty in the time of detection can influence significantly the precision of the particles tracks reconstruction. The detector GVD was designed with several calibration systems which enables to calibrate the detector by more independent procedures providing very important cross-checking of obtained calibration parameters. Every OM is equipped with two built-in LEDs which can illuminate many upper neighboring OMs and thus can compare expected and measured time of light detection to obtain calibration time shifts for every OM.

With built-in LEDs the two independent time calibration methods were performed (dT_{TST} and dT_{LED}) [Fajt et al., 2017]) and the obtained time calibration parameters were compared. The combined precision for the first 576 OMs is $\sigma_T = 2.35$ ns which is a significant improvement in comparison with the previously used calibration procedures however the next goal is to reach one ns boundary. The next-order effects like: Time Walk Effect, Sampling Effect, etc. which could improve the obtained precision are under study. Moreover the study of the time stability of the time calibration was performed with very satisfying results (less than 0.3 ns in 6 months).

Acknowledgment

This research is supported by the Grants of Comenius University in Bratislava, Slovakia UK/393/2016, UK/398/2017, by the program OP VVV of the Czech Ministry of Education, Youth and Sports CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_013/0001733.

References

[Aartsen et al., 2013] Aartsen, M. G. et al. (2013). Evidence for High-Energy Extraterrestrial Neutrinos at the IceCube Detector. *Science*, 342:1242856.

[Fajt et al., 2017] Fajt, L. et al. (2017). Baikal-GVD: Time calibrations in 2016. PoS (ICRC2017) 1036.

*Lukas.Fajt@uniba.sk
†Fedor.Simkovic@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 166
ISBN 978-8081470882, © 2018 Miloš Doktor

Možnosti stanovenia koncentrácie Al pomocou PIGE metódy

Miloš Doktor[1]*
Školiteľ: Miroslav Ješkovský[2]‡

[1] FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2] KFJB, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Na KFJB sa dlhodobo monitorujú rádioaktívne izotopy prvkov v atmosfére. Okrem rádioaktívnych prvkov, sa v atmosfére nachádzajú aj ďalšie prvky, ktoré môžu mať negatívny vplyv na živé organizmy. Posledné štúdie naznačujú, že k týmto prvkom patrí aj Al.

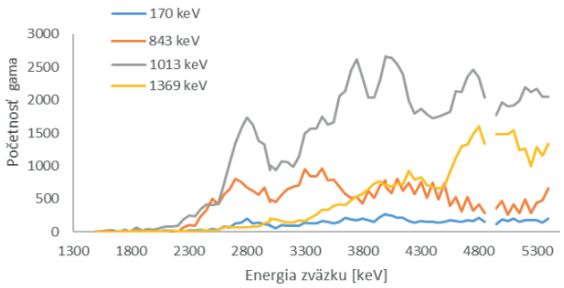
Keďže hliník vyvoláva rôzne zdravotné problémy, je potrebné poznať jeho koncentráciu v atmosfére, pôde a vodách. Do tela sa dostáva orálne, inhalačne, dermálne alebo intravenózne.

Zvýšené množstvo hliníka v ľudskom organizme môže viesť k poruche uvoľňovania hormónov štítnej žľazy. Medzinárodná agentúra pre výskum rakoviny ho síce neklasifikuje ako karcinogénnu látku, jeho výrobu už ale vníma ako rakovinotvornú pre ľudí. Nebezpečný je aj pre pacientov podstupujúcich dialýzu, pripisuje sa mu aj rozvoj Alzheimerovej choroby a ďalších neurodegeneratívnych ľudských ochorení [Horváthová, 2014].

Práve preto bola vyvinutá metodika na meranie Al v atmosférickom aerosóle pomocou PIGE analýzy.

Urýchlené protóny namierené na vzorku môžu excitovať terčová jadrá tak, že nastane emisia gama kvánt. Energia daných gama kvánt je daná atómovou štruktúrou prvkov, pre všetky prvky je charakteristická a jedinečná, vďaka čomu je možná následná prvková analýza. [Nastasi et. al., 2015]

PIGE analýza prebiehala na tandemovom urýchľovači Pelletron, ktorý sa nachádza v laboratóriu CENTA využívajúc BEGe detektor. Na analýzu sme využívali nepružné zrážky protónov v reakciách $^{27}Al(p,p'\gamma)^{27}Al$ s emisiou 844 keV a 1014 keV gama kvánt, prípadne reakcie $^{27}Al(p,\alpha\gamma)^{24}Mg$ s emisiou 1369 keV kvánt. V práci sme sa zamerali na stanovenie Al v tenkých vzorkách, kedy môžeme zanedbať energetické straty protónu vo vzorke.



Obr. 1: Výťažok gama kvánt z reakcií protónov s atómami Al

Keďže produkcia registrovaných gama kvánt závisí od energie protónu, boli merané jednotlivé výťažky z nepružných zrážok na 7 µm Al fólii v rozsahu energii 1,5 – 5,5 MeV pre urýchlené protóny krokom 50 keV. Tieto výťažky sú dôležité na optimálne zvolenie energie protónov a ich ďalšie použitie pri analýze atmosférických aerosólov.

Literatúra

[Horváthová, 2014] Horváthová Trúchla, K. (2014). *Hodnotenie rizika z expozície hliníkom v SR*, Stanovisko, Úrad verejného zdravotníctva SR,

[Nastasti et al., 2015] Nastasti, M., Mayer, J. W., a Wang, Y. (1992). Fundamentals and Applications. *Ion Beam Analysis*.

* milos.doktor11@gmail.com
‡ m.jeskovsky@gmail.com

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 167
ISBN 978-8081470882, © 2018 Dominik Babál

Monte Carlo simulácia produkcie top-kvarkových párov na experimente CDF (rozšírený abstrakt)

Dominik Babál[1]*

Školiteľ: Pavol Bartoš[1]†

[1]Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

CDF (Collider Detector at Fermilab) spolu s detektorom D0 boli hlavnými detektormi na urýchľovači Tevatron. Zrejme najväčším úspechom experimentov na Tevatrone je objav najťažšej častice Štandardného modelu - top kvarku v roku 1995 [Abe et al., 1995, Abachi et al., 1995].

Na rekonštrukciu hmotnosti top kvarku možno použiť viacero metód, pričom jednou z najznámejších je aj nami použitá metóda maticového elementu (ME), ktorej jedinečnosť spočíva v priamom prepojení medzi teóriou a experimentálnou rekonštrukciou prípadov. Hlavnou výhodou ME metódy je, že niekoľko neznámych parametrov, či už teoretických (popisujúcich fyzikálne procesy) alebo experimentálnych (popisujúcich odozvu detektora) môže byť zistených pri jednom meraní, čo v konečnom dôsledku znamená zredukovanie štatistickej neistoty výsledku. Metóda je založená na výpočte pravdepodobnosti, že prípad, reprezentovaný vektorom detekovaných parametrov $\vec{y}$ pri uvažovanej hypotetickej hodnote hmotnosti top kvarku m_t a posunu jetovej energetickej škály Δ_{JES} (m_t a Δ_{JES} sú neznáme parametre), bude pochádzať zo signálu ($t\bar{t}$ pár) - $P_{sig}(\vec{y}|m_t,\Delta_{JES})$ resp. z pozadia ($W+4\,jety$ pozadie) - $P_{W+4jety}(\vec{y}|\Delta_{JES})$. Potom funkcia hustoty pravdepodobnosti pre daný prípad je:

$$P_{event}(\vec{y}|m_t,\Delta_{JES}) = A(\vec{y})[fP_{sig}(\vec{y}|m_t,\Delta_{JES}) + (1-f)P_{W+4jety}(\vec{y}|\Delta_{JES})] \quad (1)$$

kde f je frakcia prípadov predstavujúca signál a $A(\vec{y})$ je akcpetancia prípadov. V najjednoduchšej forme môže byť integrál popisujúci hustotu pravdepodobnosti v Rov. 1 vyjadrený nasledovne:

$$P_{event}(\vec{y}|m_t,\Delta_{JES}) = \int |\mathscr{M}(m_t,\vec{x})|^2 W(\vec{y}|\vec{x},\Delta_{JES})P(\vec{x})d\vec{x} \quad (2)$$

kde $|\mathscr{M}(m_t,\vec{x})|^2$ predstavuje kvadrát maticového elementu pre $t\bar{t}$ proces v leptón+jetovom kanále, teda teoretický poznatok, zatiaľ čo $W(\vec{y}|\vec{x},\Delta_{JES})$ zodpovedá experimentálnej informácii, konkrétne pravdepodobnosti toho, že štvorhybnosti vzniknutých partónov a leptónu $\vec{x}$ budú v detektore zaznamenané ako $\vec{y}$ (tzv. transfer funkcie). $P(\vec{x})$ predstavuje počiatočné distribúcie veličín v $\vec{x}$. Hľadanú hodnotu parametra m_t možno získať minimalizáciou $-\ln L_{sample}$, kde L_{sample} je vierohodnosť vzorky N prípadov, ktorá je daná vzťahom:

$$L_{sample}(\vec{Y}|m_t,\Delta_{JES}) = \sum_{i=1}^{N} P_{event}(\vec{y}_i|m_t,\Delta_{JES}) \quad (3)$$

kde $\vec{Y}$ reprezentuje priestor nameraných veličín pre každú časticu eventu. Podrobnosti o tejto metóde je možné nájsť v predchádzajúcej verzii tejto analýzy na menšej štatistike v [The CDF Collaboration, 2009].

Táto práca je zameraná na výpočet spomínanej akceptancie v závislosti od parametrov m_t resp. Δ_{JES} pre signál a pozadie. Z dôvodu, že štandardný generátor vo fyzike vysokých energii, PYTHIA (resp. ALPGEN pre pozadie), neposkytuje kompletnú informáciu o kinematických veličinách častíc, ktoré sú potrebné pre transfer funkcie, je nutné vyvinúť primitívny generátor prípadov signálu a pozadia a na ne aplikovať selekčné kritériá. Na základe počtu prípadov spĺňajúcich tieto kritériá ohodnotíme akceptanciu vygenerovaných prípadov v závislosti od spomínaných parametrov.

Literatúra

[Abachi et al., 1995] Abachi, S. et al. (1995). Observation of the top quark. *Phys. Rev. Lett.*, 74:2632–2637.

[Abe et al., 1995] Abe, F. et al. (1995). Observation of top quark production in $\bar{p}p$ collisions. *Phys. Rev. Lett.*, 74:2626–2631.

[The CDF Collaboration, 2009] The CDF Collaboration (September 2009). Top Mass Measurement in the Lepton + Jets Channel Using a Matrix Element Method with Quasi-Monte Carlo Integration and in situ Jet Calibration with 4.3 fb^{-1}. *CDF public note 9880.*

*dominikbabal@gmail.com

†pavol.bartos@cern.ch

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 168
ISBN 978-8081470882, © 2018 Eliška Eckerová

Baikal GVD - Double pulse detection (Extended Abstract)

Eliška Eckerová[1*]

Supervisor: Mgr. Lukáš Fajt[1†]
[1] Department of Nuclear Physics and Biophysics, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Baikal GVD

Baikal GVD is a large-scale neutrino telescope built at the lakebed in the world's deepest freshwater lake Baikal. The detector detects a Cherenkov radiation of the secondary particles created in the charged current or neutral current interactions of the neutrinos in the close vicinity of the detector volume.

According to the number of particles which are passing through the instrumented volume we distinguish two types of detected pulses - Single Pulses (SP) and multiple peak shaped waveforms - Double Pulses (DP).

Thanks to separation of these two kinds of waveforms we can better recognize one muon tracks originated in charged current interactions of muon neutrino from muon bunches - muons created in collision of primary cosmic ray particle with upper layer of atmosphere. These bunches of muons form the greatest contribution to background events. Further, it can improve muon track reconstruction.

Moreover, the ability to distinguish between aforementioned types of waveforms is also considered as the best way to identify the astrophysical tau neutrino. Astrophysical tau neutrino interacting through charged current interaction with matter creates tau lepton. Due to relatively short lifetime, the tau lepton decays to muon or electron within volume instrumented by telescope. This interaction and subsequent decay of tau lepton are identified by typical DP signature.

These reasons and the fact that current implemented pulse extraction algorithm treats every pulse as a SP, development of double pulse detection algorithm can have significant impact on ongoing observations.

Double pulse detection algorithm

According to previous precise analysis of experimental data we have developed and implemented three independent methods for DP detection.

The first method is based on the numerical derivations of pulse waveforms. Position, where the sign of derivation is changed from negative value to positive value is marked as DP. Disadvantage of this method is that such a pattern can be also caused by the noise variations at the pedestal level.

As consequence we added two upgrades to this algorithm. The first improvement is usage of Moving average (MA) instead of raw waveform amplitudes. MA takes certain number of values of waveform. This number is called Moving Average Window (MAW). Then it counts average value from values inside MAW. This average value replaces amplitude value from the middle of taken amplitude values. Then the next amplitude sample is added to MAW and the firstly added one is removed and the new average is calculated and so on. If the size of MAW is chosen carefully, the majority of DPs created by noise of electronic devices is wiped out. We also implement the second improvement which is applied after DPs are determined by derivation method. According to previous analyses certain threshold is set and amplitude values of the first and the second peak which are under this threshold are not treated as DPs.

Next technique which we implemented is method based on the charge versus amplitude ratio. Previous precise analysis of experimental data showed that SP waveform's amplitude and charge are linearly dependent and exact values of coefficients of this equation were determined. The DPs can be with this method tagged easily since they do not follow the same dependence for the charge versus amplitude ratio.

The last method which we have developed so far is based on the knowledge of the analytical function for SP. Preceding analyses proved that SPs can be very well approximated by the Gumbel function. For fitting waveforms we use this function with three free parameters – maximum, width of peak and position of peak. The most crucial factor for proper functioning of this algorithm is setting right initial conditions. Subsequently chi square divided by number of degrees of freedom is evaluated for every waveform. We expect that this value is bigger for DPs than for SPs because of choice of analytical function. According to preceding analyses certain threshold is set and waveforms are sorted.

*eliska.eckerova@gmail.com
†lukas.fajt@uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 169
ISBN 978-8081470882, © 2018 Zuzana Bardačová

Detector BaikalTop (Extended Abstract)

Zuzana Bardačová*

Supervisor: Mgr. Lukáš Fajt†

FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Cosmic rays

Cosmic rays are high-energy, mostly charged particles striking the Earth's atmosphere from the outer space. After collisions with air molecules, they produce cascades of the secondary particles, called extensive air showers. The most of the secondaries consists of photons, electrons, hadrons and muons [Putze, 2006]. The theoretical as well as experimental knowledge of the secondary air showers is of vital importance for the neutrino telescopes, such as Baikal-GVD and Icecube which are trying to detect astrophysical neutrinos.

CORSIKA

The CORSIKA (COsmic Ray SImulations for KAscade) is a program for simulations of the secondary air showers induced by primary cosmic rays. The CORSIKA gives us access to the basic characteristics (such as energy, type and arrival direction) of primary as well as secondary particles. All the simulated data are processed with our newly developed C++ program.

The energy spectrum of primary cosmic rays (we performed simulations for a proton) may extend from 1 GeV up to 10^{18} eV with little deviations from a constant power law:

$$\frac{dN(E)}{E} \propto E^{-\gamma} \tag{1}$$

where γ takes value 2.7. The flux of cosmic rays rapidly falls off as the energy increases. For instance, the primary proton with an energy of 10^{16} eV induces the air shower from which about 10^5 secondary particles reach the ground level (63.6% photons, 18.6% muons, 17.4% electrons and 0.4% hadrons). The first interaction typically occurs at the altitude between 10 - 40 km. The cosmic rays arrive almost uniformly from all directions of the celestial sphere as consequence that they are continually deflected by magnetic fields. Secondary muons are not significantly deviated from the shower axis (direction of the primary particle's velocity vector). For the observations large detection areas are needed, because the secondary particles spread over an area of several km^2. The CORSIKA simulations together with our analysis software can serve as an effective tool to interpret real problems in cosmic rays physics.

BaikalTop

The future ongoing extension of the Baikal-GVD experiment would be possible detector BaikalTop. It would be composed of an array of scintillators located at the frozen lake's surface directly above Baikal-GVD. The BaikalTop can serve as veto for Baikal-GVD and verify accuracy of reconstruction results, also can be utilized as an independent detector for studying the secondary air showers. By varying the BaikalTop's parameters (number of scintillators, distance between scintillators and the whole configuration of the detector) we tried to optimize the detector's behaviour, especially its efficiency.

The constant number of scintillators (especially 36) were arranged in square, triangle and hexagon grid with variable distance between them (in range from 10 m to 100 m with a step size of 10 m). Showers that hit 3 or more scintillators are referred as detected showers, because from three hit scintillators we can reconstruct arrival direction of the primary particle. The detector efficiency was defined as the ratio of detected showers and all the showers. The results showed that the efficiency is essentially same for all the configurations and rapidly decreases with increasing distance (for 10 m about 40 %, but for 50 m almost 5 %). But we still try to find arrangement of the detector which will yield much more higher efficiency. Further improvement of the BaikalTop can boost total detecting possibilities of GVD.

References

[Putze, 2006] Putze, A. (2006). Propagation of cosmic rays in the earth's atmosphere.

*zuzanabardacova@gmail.com
†lukas.fajt@uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 170
ISBN 978-8081470882, © 2018 Daniel Suchý

Štúdium početnosti promptných neutrónov zo štiepenia ^{248}Cm (rozšírený abstrakt)

Daniel Suchý*

Školiteľ: Pavol Mošať†

Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Spontánne štiepenie jadier

Od roku 1940, kedy bolo prvý krát zaznamenané spontánne štiepenie (SF) na jadre ^{238}U [Flerov and Petrzhak, 1940], bolo objavených viac ako 100 izotopov, ktoré sa spontánne štiepia.

SF je typom jadrovej premeny, pri ktorej sa jadro delí na dve ľahšie jadrá - fragmenty. Vo všeobecnosti je štiepenie jadier umožnené energetickou výhodnosťou, fragmenty majú väčšiu energiu na nukleón, ako malo pôvodné jadro. Tento proces prebieha tunelovaním cez tzv. štiepnu bariéru. Štiepenie nastáva, Keď sa jadro deformuje za tzv. saddle point, teda prechodový stav, kedy je zmena Coulombovskej energie rovná zmene povrchovej energie. Tento proces je už nezvratný, odpudivé Coulombovské sily prevážia, jadro sa ďalej deformuje a dochádza k štiepeniu. Vzniknuté fragmenty sú v excitovanom stave, pričom excitačná energia je daná rozdielom Q hodnoty štiepenia a kinetických energií fragmentov. Takmer okamžite sa v rámci deexcitácie uvoľní niekoľko promptných(okamžitých) neutrónov, neskôr sa fragment deexcituje emisiou gama kvánt.

Pre ľahšie izotopy môžme očakávať nižšiu početnosť promptných neutrónov na rozpad. Napríklad pri štiepení ^{235}U sa priemerne emituje $\sim 2,4$ promptných neutrónov. Avšak pre ťažšie jadrá konkrétne ^{298}114 je predpokladaná početnosť dokonca až ~ 7 [Loveland et al., 2006].

Rýchlostný filter SHELS

SHELS (Separator for Heavy ELement Spectroscopy) [Popeko et al., 2015] slúži na separáciu produktov reakcie úplnej fúzie, ktorých štiepenie chceme neskôr študovať.

Po odfiltrovaní vyprodukovaných jadier od primárneho zväzku, sú jadrá implantované do Si detektora, kde sa sleduje ich štiepenie. Okolo Si detektora je systém netrónových detektorov - proporcionálnych počítačov obsahujúcich ^{3}He, v ktorých po záchyte neutrónu dochádza k reakcii n + ^{3}He $\rightarrow$ ^{3}H + p.

Detekčný systém sme testovali umiestnením vzorky ^{248}Cm medzi dva Si detektory, ktoré sme vložili do systému neutrónových detektorov. Analýzou dát z detektorov systému SHELS získame potrebné informácie o SF a početnosti promptných neutrónov emitovaných pri SF.

Analýza dát

Dáta sú zložené z eventov zaznamenaných Si detektormi (FTop, ATop, FBot, ABot) a neutrónovými detektormi (Ne). V rámci Si detektorov rozlišujeme signály od alfa častíc (ATop, ABot) a štiepnych fragmentov (FTop, FBot). V každom evente (štiepnom aj neutrónovom) máme informácie o čase, kedy nastal, amplitúde signálu z detektora, číslo detekora a pod.

V rámci analýzy hľadáme časové korelácie medzi štiepením a neutrónmi. Fragmenty sa po rozštiepení pohybujú opačnými smermi, takže pre konkrétne štiepenie pozorujeme dva koincidenčné signály z Top a Bot detektorov. Pre zjednodušenie analýzy však používame ako štiepny event iba signál z Top detektora. Dôležité sú reťazce eventov typu FTop-Ne-Ne-..., pričom maximálny čas medzi zaznamenaným signálom FTop a nasledujúcim Ne je 128 μs (zodpovedá promptným neutrónom).

Výstupom analyzačného programu je závislosť početnosti detekovaných promtných neutrónov na jedno štiepenie.

Literatúra

[Flerov and Petrzhak, 1940] Flerov, G. N. and Petrzhak, K. A. (1940). *Phys. Rev.*, 58. 89.

[Loveland et al., 2006] Loveland, W. D., Morrissey, D. J., and Seaborg, G. T. (2006). *Modern nuclear chemistry*. John Wiley & Sons.

[Popeko et al., 2015] Popeko, A., Yeremin, A., Malyshev, O., Svirikhin, A., and Isaev, A. (2015). Shels - separator for heavy element spectroscopy. *Preprint submitted to NIMB_EMIS2015*.

*suchy.daniel@gmail.com
†Pavol.Mosat@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 171–181
ISBN 978-8081470882, © 2018 Natália Ružičková

Temporal processes in photonic structures

Natália Ružičková*

Supervisor: Peter Markoš†

Department of Experimental Physics, Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, Comenius University Mlynská dolina 842 48 Bratislava

Abstract: In this work, we analyze the applicability of FDTD (Finite-Difference Time-Domain) open source software MEEP for simulations of electromagnetic processes and visualization of temporal processes taking place in two-dimensional periodic photonic structures. We examine the usability, benefits and limits of using MEEP for obtaining particular characteristics of photonic structures, such as transmission spectra or resonant modes and for visualization of propagation of fields and electromagnetic modes. In many problems in photonics, visualization helps to understand the relevant phenomena. By introducing spatial periodicity in photonic structures, some rather unintuitive and interesting processes take place, therefore we decided to present and explain a few such examples, in particular, one and multiple rows of linear chains of cylinders periodic in one direction. Two localizations of a source were used, enabling observation of modes excited by an incident wave as well as modes bound to the structure excited from within.

Keywords: photonic structure, resonances, FDTD, meep

1 Introduction

Propagation of electromagnetic waves is determined by four Maxwell equations [1]. These can be solved analytically for very few special cases, one of them being plane waves in homogeneous isotropic media free of charge and currents. However, finding exact solutions to scattering and propagation in various other structures is very difficult or impossible. Therefore, numerical simulations are used to understand and examine such processes [2], [3].

Typical photonic structures are optical waveguides - structures that enable signal propagation only in specified directions or along a specific path. From practical applications, a well known example of a waveguide is an optical fibre. In this case, the underlying principle is total internal reflection from the fibre's edges. Due to periodicity, a linear chain of dielectric cylinders exhibits similar properties of waveguiding in certain frequency ranges. We will investigate propagation of electromagnetic waves in such waveguides made from periodic arrangement of dielectric cylinders.

*ruzickova43@uniba.sk
†peter.markos@fmph.uniba.sk

2 Theoretical background

In homogeneous electromagnetic media characterised by relative permittivity ε and permeability μ, one of the solutions to Maxwell equations [1] in media free of charges and currents are plane waves:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E_0}\, e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \tag{1}$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H_0}\, e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \tag{2}$$

characterised by the field amplitudes $\mathbf{E_0}, \mathbf{H_0}$, frequency ω and the wave vector $\mathbf{k}$. We will restrict ourselves to linear, dispersionless media where $\mu = 1$. Then, the dispersion relation $\omega(\mathbf{k})$ takes the form [1]:

$$(\frac{\omega}{c})^2 \varepsilon = |\mathbf{k}|^2. \tag{3}$$

The line defined by (3) is called the light line and states lying above the light line in $\omega(\mathbf{k})$ plots are said to lie in the light cone of the respective environment.

Although the relationship between ω and $\mathbf{k}$ (3) for plane waves is simple, dispersion relation are, in general, more complex.

In particular, the spatial periodicity is reflected in the periodicity of fields. Bloch's theorem [2], [4] quantifies this notion:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{u_q}(\mathbf{r})\, e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \tag{4}$$

$$\mathbf{u_q}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = \mathbf{u_q}(\mathbf{r}) \tag{5}$$

where $\mathbf{E}$ is electric intensity vector, $\mathbf{R}$ any lattice vector, $\mathbf{u_q}(\mathbf{r}$ is a spatially periodic function of position and $\mathbf{q}$ is the wave vector. For one dimensional systems, q is directly connected to the wavelength as [4]

$$q = \frac{2\pi}{\lambda} \tag{6}$$

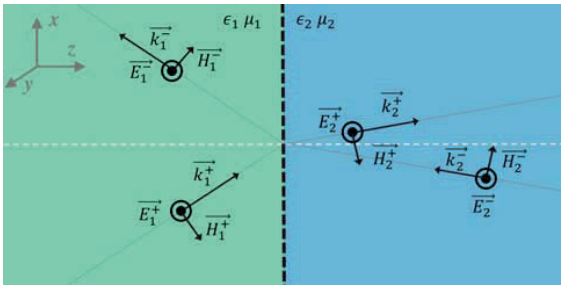


Figure 1: Incidence of a TE polarised wave on interface between two dielectrics, $\varepsilon_1 > \varepsilon_2$. $k = |\mathbf{k}|$ is the wave vector length and $k_\parallel$ is the component parallel with the interface, conserved trough the boundary.

In two and three dimensional systems, components of $\mathbf{q}$ stand for the wave vector's $\mathbf{k}$ components in the dimension where the structure is spatially periodic. Wavelength is then determined by $|\mathbf{k}|$. The dispersion relation then describes $\omega(\mathbf{q})$, or more precisely, $\omega(\mathbf{k})$.

2.1 Index guiding

Although the phenomenon of index guiding is more complex, the principle behind the optical fibre waveguide mentioned above can be explained by ray optics. Namely, by total internal reflection briefly discussed below.

The wave vector of a wave incident on an interface of two dielectric media (Fig. 1) can be expressed as $\mathbf{k_1} = (k_\parallel, k_{1\perp}) = k_1(\cos\theta_1, \sin\theta_1)$. From the boundary conditions derived from Maxwell's equations [1], $k_\parallel$ is conserved through the boundary and $k_|$ is subject to Snell's law. Total internal reflection occurs for large incidence angles $\theta_1 > \theta_{1crit} = \arcsin\sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}}$.

States lying outside the light cone of environment 2 have $k_\parallel > |\mathbf{k}_1|$. That means the wave can't propagate in environment 1 and fields are exponentially decaying with distance from the interface. Waves incident under angle bigger than critical are totally internally reflected and can not escape to the surroundings - the waves are index guided.

2.2 Leaky and Guided Modes

Generally, there are two types of modes in photonic structures: *leaky* and *guided* modes (Fig. 2).

Leaky modes couple with a wave incident from outside of the structure, meaning they can be excited by a source positioned outside of the structure. These

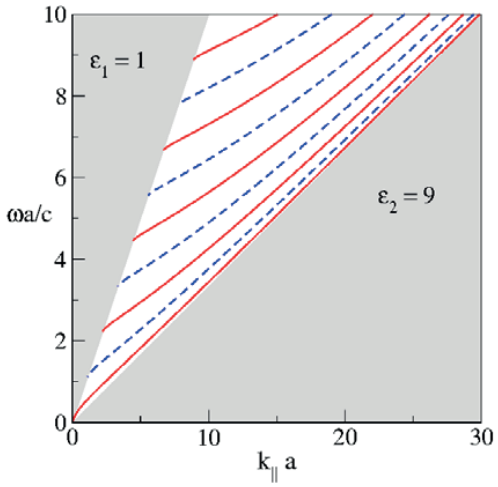


Figure 2: Illustration of modes in a plate of glass of thickness a and relatively high $\varepsilon = 9$ surrounded by air $\varepsilon = 1$. Lines lying below the light line of air are guided modes while extend states above the light line can exist in both media. Guided modes are discrete bands due to finite thickness of the plate. Red lines denote even and blue lines odd guided modes. [4]

modes are called leaky because they radiate energy to the environment and thus have a finite lifetime.

Unlike leaky modes, guided modes do not couple with waves incident from the surrounding environment and can be excited either by an evanescent wave or by a source positioned inside the structure. These modes are not allowed to propagate in the surrounding medium (i.e. lie outside the medium's light cone) and therefore are lossless and have infinite lifetime. Guided modes are essentially modes bound to the structure.

Figure 2 depicts the dispersion relation of a plate of glass with finite thickness a in one direction and extending to infinity in other two. Above the light cone of the surrounding environment (air), states of all frequencies and wavelengths can propagate in the glass plate and extend to air.

States not allowed to propagate in air due to total internal reflection from the interface lie below the light line. Due to finite thickness of the plate, fields in the plate are bound in one direction and only states with discrete values of $k_\perp$ are localised. Therefore, the spectrum below the light line or air has a band structure. These bads are examples of guided modes and such plate of glass can serve as a waveguide for these modes.

A linear chain of cylinders discussed below (sec-

tion 4.1) can serve as a waveguide for signal of certain frequencies corresponding to the chain's guided modes.

2.3 Resonances

As will be seen in following sections, we will be concerned with resonance excited in photonic structure by an external source - when the wave produced by the source excites one of structure's eigenmodes. Excited guided modes and leaky modes of large lifetimes can be observed long after the source has stopped radiating.

For a line of cylinders, we recognise two types of resonance: *Farbry-Pérot* and *Fano* resonance.

Fabry-Pérot resonance pattern is, for example, the transmission spectrum of a thin dielectric layer of width l (e.g. the above mentioned plate of glass, $l = a$). Transmission equals 1 when rays reflected from the two boundaries interfere destructively in front of the plate and no light is reflected. The condition for maximum transmission is

$$l = \frac{\lambda}{2} n \tag{7}$$

where n is an integer, l is the layer width and $\lambda = \frac{2\pi}{|\mathbf{k}|}$ is wavelength. Fabry-Pérot resonance pattern is visible also in the transmission spectrum of a line of cylinders and field patterns in the cylinders correspond to the zeroth and first eigenmode of a cylinder.

The Fano resonance results from interference of the incident electromagnetic wave with excited leaky mode of the structure [3], [5] [6]. Fano resonance pattern is recognised as a narrow transmission minimum and maximum in close proximity to each other. For a line of cylinders, it occurs when the second and higher eigenmodes of the structure are excited.

2.4 Numerical Methods

Numerical simulations are a powerful tool in various fields of research. In photonics, numerical approach is particularly preferred because Maxwell equations can be simulated precisely and effectively. When using correct numerical strategies, numerical solutions agree well with experiment and computational photonics can substitute classical experiments and make optimization much more effective.

Two basics approaches are used:

- Frequency-Domain simulations (FD)
- Time-Domain simulations (TD)

2.4.1 Time-Domain simulations

This approach is based on computing fields at each time step at finite number of points in space. The result are fields as a function of time and position. Band structures, transmission and reflection spectra can be obtained by Fourier transformation of fields, but due to finite time of simulation, results are not as accurate as obtained by FD simulations. Apart from that, TD simulations are useful for understanding temporal processes and their time scales as well as for visualizing fields in time.

One group of TD simulations are Finite-difference TD simulations (FDTD). In finite difference methods, discretization of space is very important. For electromagnetic fields, Yee lattice is used. [7] Another obstacle is the finite computational cell. Therefore, either periodic or highly absorbing boundaries are implemented. The former are used for large periodic systems or systems periodic in a certain direction. The latter eliminate reflections from the boundaries and substitute infinite free space beyond the computational cell.

FD simulations are widely used and results have been obtained for huge variety of structures. Therefore we will focus on TD simulations instead and will examine temporal processes and visualise them for better comprehension and intuitive insight. Reliable FDTD free software, MEEP [8], has already been developed, so rather than trying to build simulations from first principles, we will focus on working with MEEP in Scheme environment, examine its functionalities and use it for studying various interesting processes.

3 MEEP

MIT Electromagnetic Equation Propagation (MEEP) [8] is an open-source free software developed at MIT for simulating electromagnetic fields propagation in electromagnetic systems via the FDTD numerical method briefly described in previous section.

Important functionalities MEEP provides are [8]:

- evolution of electric and magnetic fields in time and space
- visualisation of fields in electromagnetic media
- transmission and reflection spectra
- resonant modes, their frequencies and other parameters

3.1 Units

MEEP uses dimensionless unit system: $\varepsilon_0 = \mu_0 = c = 1$. Exploiting the scale-invariance of Maxwell equations, all lengths are defined with respect to a characteristic length scale in the system, say a, serving as system's unit of distance and in case of periodic structures the spatial period. At the same time, a is also a unit of time as $c = 1$, meaning frequency f scales as $\frac{1}{a}$. Therefore, in MEEP units, $f = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{T}$, λ being the wavelength and T the optical period (both in units of a).

3.2 Scheme User Interface

There are multiple user interfaces available for MEEP: Scheme, C++ and Python. We were working with the Scheme interface, therefore all subsequent sections refer to it.

In this section we briefly summarise the work-flow and mention only few functions exposed by the Scheme interface. A detailed list and description of majority of functions is available at [9].

The work-flow is quite intuitive and resembles building an experiment:

1. specification of coordinates and geometry: $\varepsilon(\mathbf{r})$ and parameters of computational cell
2. setting periodic boundaries and/or absorbing boundary layers on the edges of the computational cell
3. setting types and parameters of current sources of electromagnetic fields
4. optionally setting flux regions where field fluxes will be computed throughout the run
5. initializing run functions which time-step the simulation

Each step will be briefly described in following subsections.

3.2.1 Computational cell and Geometry

At first, dimensions of the computational cell `geometry-lattice` and thus dimensionality of the problem are defined. All our examples were performed in 2D, the computational cell being the *xy* plane.

MEEP allows for choice of coordinates, Cartesian or cylindrical. However, visualization seems to be possible only in Cartesian coordinates, that being the reason that all of our examples were simulated using Cartesian coordinates. For simpler geometries, MEEP provides pre-defined `geometric-objects` such as `block, cylinder, ellipsoid` or `cone`. These objects and the `default-material` make up the electromagnetic structure of the computational cell. For arbitrary $\varepsilon(\mathbf{r})$, one can import a HDF5 file specifying the structure. For structures composed of unit cells or of many individual objects, utilities as `geometric-object-duplicates` or `geometric-objects-lattice-duplicates` are suitable instead of a loop-like function.

Important parameter to set is the spatial `resolution`, which needs to be adjusted according to the smallest wavelength in the structure, so that the discretisation is smooth enough in the whole cell. Improper resolution can lead to quantitatively and even qualitatively wrong results, as will be shown later.

Computational time can be significantly reduced by exploiting symmetries of the system - mirror or rotational.

3.2.2 Boundaries and boundary layers

We used two types of boundaries: *absorbing* for simulating open space beyond the computational cell and *periodic* for periodic structures extending to infinity in one direction. Absorbing boundaries are of two types: perfectly matched layers `pml-layers` and an adiabatic `absorber`. The former are widely used and generally work well for homogeneous electromagnetic media in the direction of the layer width while the latter are more effective when PMLs fail, for example in periodic structures and photonic crystals [10], [11].

3.2.3 Sources

Sources of electromagnetic waves in MEEP are current sources. Unlike "hard" sources, current sources don't specify electric and magnetic field amplitudes

directly, because they depend on the geometry [9]. Various types of current sources are pre-defined. The two types used in our examples are:

- `continuous-src` a source proportional to $e^{-i\omega t}$ used for generating waves at a single frequency ω in the limit of infinite times, therefore while turning on and off, waves of different frequencies are emitted as well.

- `gaussian-src` source emitting approximately a Gaussian pulse. The broader the desired frequency range of emitted waves, the longer the source runs. Simulations including very narrow-width sources can therefore take quite long.

3.2.4 Run and step functions

Actual run and time-stepping of the simulation is done by the run functions. Run functions can be combined and launched one after another while the system is still evolving. `run-until` performs a certain number of time steps (length of which is dependent on the `resolution`). Time-stepping can be finished when a particular condition is fulfilled, for example sources are off (`run-sources`) or, additionally, fields at a chosen point have decayed by a specified rate (`stop-when-fields-decayed` condition).

Several step-functions are pre-defined in MEEP, such as `output-epsilon` or `output-mu` which output the electromagnetic medium structure initiated at the beginning. Particularly useful is the `output-png` step-function which outputs a picture with depicted specified field components. Similarly, electromagnetic energy in a specified volume can be obtained in desired time intervals.

3.2.5 Field and Energy fluxes

Before initialisation of the run, `flux-region`s (if any) must be defined. Flux regions in `X` or `Y` direction are usually lines in 2D of planes in 3D. `weight` of the fields crossing the plane can be specified accounting for flux of fields in a certain direction, as flux-regions themselves can not be rotated.

During the run, fields over time are computed in the `flux-region`s and subsequently, MEEP is able to Fourier transform the fields and compute the Poynting vector as a function of frequency $S(\omega)$ in a specified frequency range. After the run, `output-fluxes` displays the fluxes.

To obtain transmission or reflection spectra, the simulation needs to be run twice: once with the medium of interest and the second time without the geometry, as a reference run. The ration of the two fluxes then carries the information about scattering, transmission and reflection properties of the structure.

Although it seems practical to run a short current pulse and then compute the fluxes at each frequency, such results are not always accurate. Only a flux ratio from a certain interval around the centre source frequency yields a relevant result. Therefore to obtain accurate results, it may be necessary to run the simulation with a `continuous-src` separately at each frequency, as will be shown later.

3.2.6 Resonant modes

One of the step functions which can be run `after-sources` is `harminv` analysis. Harminv collects data from a given field component at a given point and when the run is finished, it outputs detected modes in a specified frequency range. Fields are obtained as decomposition of the given field component into Fourier series in the frequency range. Harminv outputs the amplitudes from Fourier series and the mode's lifetime (quality factor).

Apart from the above mentioned functions and methods, MEEP offers much more, among them computations in dispersive media, near-to-far field spectra or an implemented frequency-domain solver despite MEEP being FDTD based [8]. Detailed analysis and description of MEEP as well as its comparison to other FDTD platform has been worked out in [12].

4 Applications

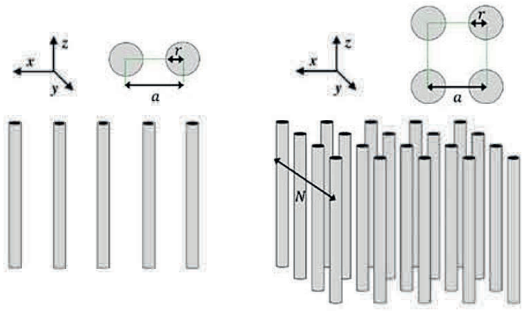
4.1 Linear chain of cylinders

First application we present is a single linear chain of cylinders extending in x direction (Fig. 3 (a)). Cylinders are infinitely high along z direction. An infinite plane source was positioned parallel to the cylinder chain in the upper half of the cell, emitting TM polarised waves:

$$\mathbf{E} = (0,0,E_z) \tag{8}$$

$$\mathbf{H} = (H_x,0,0) \tag{9}$$

$$\mathbf{k} = (0,k_y,0) \tag{10}$$



(a) Linear chain of dielectric cylinders of radius r. a is the lattice constant.

(b) N rows of parallel chains of cylinders of radius r forming a square lattice with lattice constant a.

Figure 3: Schematic structure of (a) linear chain of cylinders, (b) $N = 24$ rows of cylinders. Cylinders are infinite along z axis, the structure is periodic along x and finite in y direction. [13]

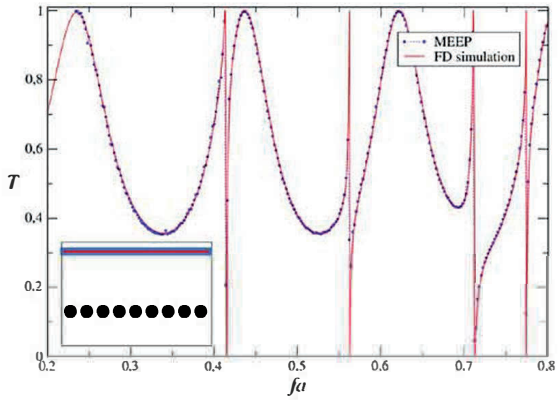


Figure 4: Transmission as a function of frequency for a single line of cylinders: $r = 0.4a$, $\varepsilon = 12$. Comparison of results obtained by FD simulation (red) [3] and with MEEP (blue). Structure and source positions are scatched in lower left corner.

Continuous translational symmetry of this setup along z axis makes the problem two-dimensional. The unit computational cell of width a with Bloch-periodic horizontal boundaries contains a single cylinder or radius $0.4a$ and $\varepsilon = 12$. For visualisation purposes, computational cells with more cylinders along x axis were used (Fig. 5 - Fig. 7).

4.1.1 Transmission spectrum

Infinite plain flux region parallel with the cylinder chain and source was positioned at the bottom of the computational cell, opposite to the source. Transmission was computed as the ratio of fluxes in cells with and without the chain (discussed in section 3.2.5). Each point was obtained from a single run using a continuous (single frequency) source (described in section 3.2.3).

Pattern observed on Fig. 4 is a combination of the expected Fabry-Pérot and Fano resonances excited by a normally incident wave. When the source frequency is close to an eigenstate of the chain of cylinders so that the amplitude of the waves the structure emits is comparable to those emitted by the source, resonances as defined in section 2.3 occur. Resonant frequencies of a linear cylinder chain are essentially the same as of a single cylinder, as shown in [3]. The difference is, however, in eigenstates' lifetimes, which tend to be higher for a cylinder chain.

Electric field in the whole computational cell in the third Fano resonance is visualised in Figure 5. Surprisingly, although field pattern inside the cylinders is very similar for both frequencies, in one case ($f = 0.710$), interference of field emitted by the sources with the field radiated by the resonating cylinders results in maximum transmission and in case of slightly higher frequency ($f = 0.713$), transmission is nearly zero. Frequencies differ by less than 0.5% proving that Fano resonances are very narrow.

Simulation had to be running sufficiently long (around 5000 MEEP time units) for the transition states become negligible (Fig. 6). Duration of the transition state of exciting the structure depends on the lifetime of the corresponding eigenmode. The longer the simulation time, the closer the transmission resembles Fano resonance.

Even more importantly, resolution must be varied with frequency to ensure smooth enough discretisation (around 30 points per wavelength in a cylinder). With defaults resolution of $10\frac{1}{a}$, qualitatively wrong result was obtained for frequencies above $fa = 0.7$ - resonances were not observed and the pattern differed from the results of Fig.4 considerably (Fig. 6).

4.1.2 Leaky and Guided modes

As mentioned in sections 2.3 and 4.1.1, resonances occur near eigenmodes of a structure, in this case of eigenmodes of individual cylinder. In Fig. 7, leaky modes excited in Fano resonance were visualised using MEEP. Fields in the all figures correspond to times where sources were off. It can be seen that although electric field amplitude is highest inside

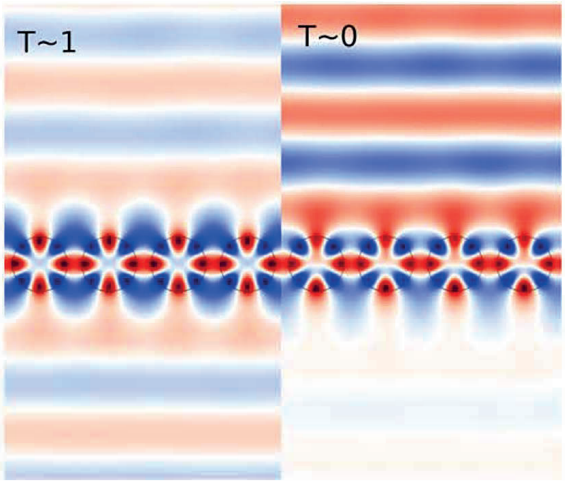


Figure 5: E_z field form $fa = 0.710$ (left) and $fa = 0.713$ (right) near Fano resonance. In red regions $E_z > 0$ while in blue $E_z < 0$. Transmission is near its maximum (minimum) due to constructive (destructive) interference of cylinder and source fields under the cylinder chain.

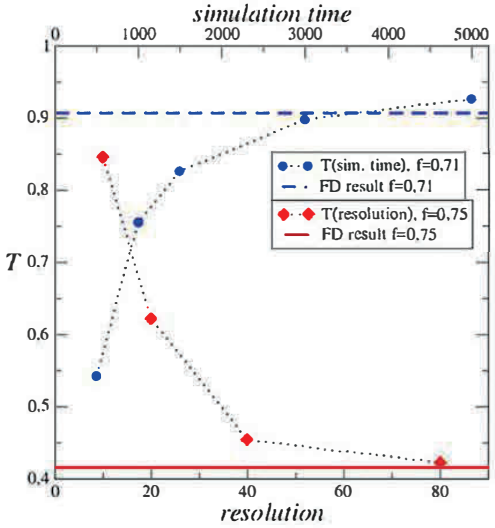


Figure 6: Dependence of transmission on resolution (red) and simulation time (blue). Solid and dashed line, are results obtained by FD simulation from [3] for the respective frequencies. Resolution of $80\frac{1}{a}$ corresponds to roughly 30 points per wavelength while resolution of $10\frac{1}{a}$ to less than 4.

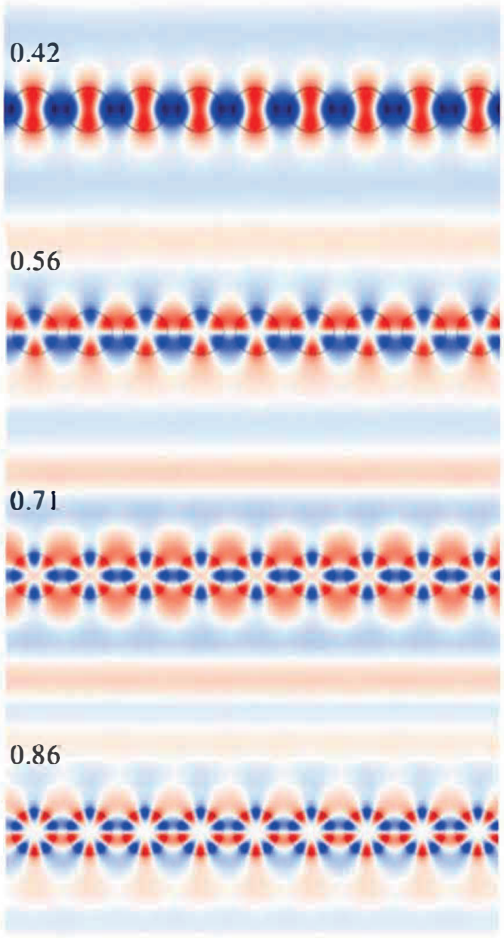


Figure 7: Leaky modes corresponding to Fano resonance of Fig. 4. A plane source was positioned above the structure, as in Fig. 4 and boundaries along x direction were periodic while in y direction absorbing boundary layers were placed. Each mode corresponds to a different field pattern inside the cylinder (different eigenmode) and represents a different band.

the cylinders, energy is radiated to the surrounding medium. Note that only even modes with $q = 0$ (infinite wavelength along the chain) can be excited by a normally incident wave. Field patterns of adjacent cylinders are identical.

Apart from $q \neq 0$ modes, guided modes, by definition, can not be excited with the setup of Fig. 4. Examples of such modes are depicted in Fig. 8. Guided modes were excited by a point source positioned inside the centre cylinder. In this simulation, we used finite number of cylinders (N=31) and absorbing boundaries on all sides of the cell.

Guided modes depicted in Fig. 8 have wave vector

$q = \frac{\pi}{a}$, meaning that, according to (4),

$$E_z(r+a) = E_z(r)\,e^{i\pi} = -E_z(r). \qquad (11)$$

In other words, two adjacent cylinders have the same field patterns but of opposite magnitude.

Reflection from the chain ends causes the electric field amplitude to vary along the chain like a standing wave. In the limit of an infinitely long chain, the field amplitude, as the function $u_q(r)$ in (5), is independent of $R = na$, n being an integer.

4.2 Multiple rows of cylinders

The other application (Fig. 3 (b)) discussed in this work is a structure consisting of 24 rows of linear chains of cylinders, as those discussed in section 4.1.1. Each row has thickness a which is also the lattice constant of this 2D structure. Chains are aligned so that cylinders form a square lattice. To obtain the transmission spectrum of 24 cylinder rows (Fig. 9 and visualise particular modes (Fig. 10, Fig. 11), a plane source was positioned in front of the structure. A unit computational cell of width a includes 24 cylinders of radius $0.4a$ and $\varepsilon = 12$ aligned vertically. Horizontal boundaries are periodic while vertical are absorbing. Although finite in y direction, structure and thus the fields (according to (4) exhibit similar behaviour as media periodic in y direction. Therefore, `absorber` boundary layers were used instead of `pml-layer`, as described in section 3.2.2.

4.2.1 Transmission spectrum

Figure 9 represents the transmission spectrum through 24 rows of cylinders. When non-zero, transmission oscillates due to reflection from the 24 cylinder rows, analogically to an array of thin dielectric layers of varying refractive index. When reflected rays interfere constructively, transmission through the structure approaches zero. Frequencies of modes allowed to propagate inside the structure form bands (Fig. 10) and intervals of zero transmission are called band gaps. Multiple rows of linear chains of cylinders essentially form a 2D photonic crystal of finite length in one direction [4] [2]. The structure therefore exhibits similar behaviour as a finite 2D photonic crystal, one of them being the band structure of the spectrum. When examined more closely, transmission peaks creating so called F-band ([3]) in gaps near Fano resonance frequencies can be observed.

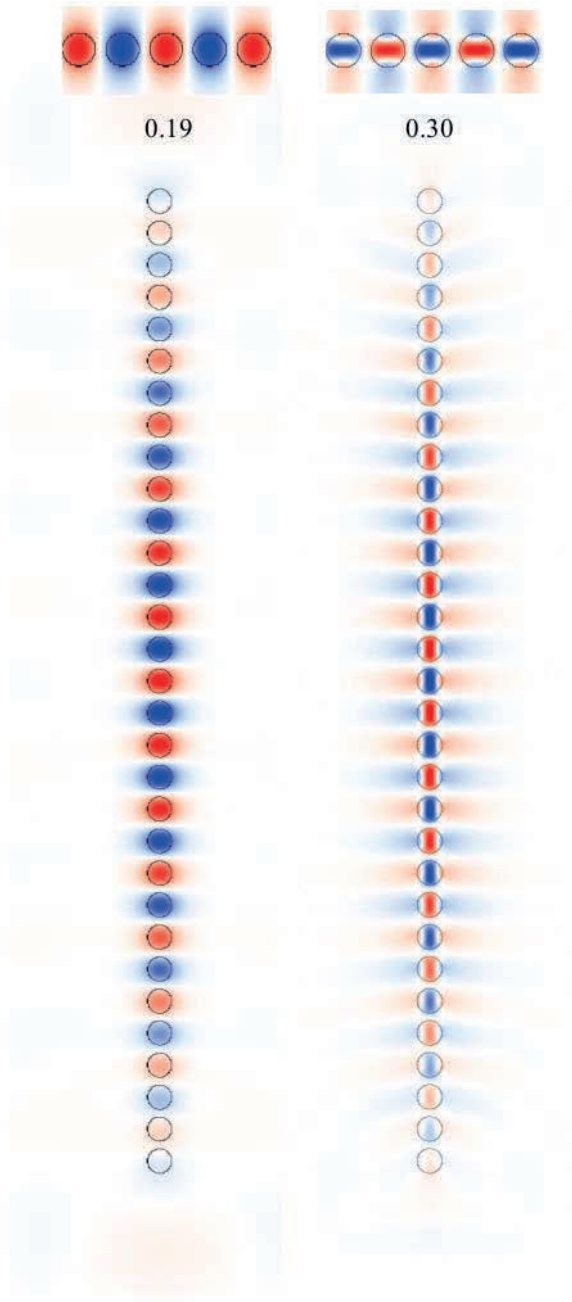


Figure 8: Two guided modes for a linear chain of 31 cylinders. Modes lie in the two lowest bands with states below the light line. It can be seen that both modes have $q = \frac{\pi}{a}$, as two adjacent cylinders have same field patterns but fields have opposite signs. The electric field is localised in the structure and decays quickly with distance from the chain. Due to finite length of the chain, the field amplitudes are not independent of position but form a standing wave with antinodes at the chain's ends. The end cylinders radiate like point sources of small amplitude.

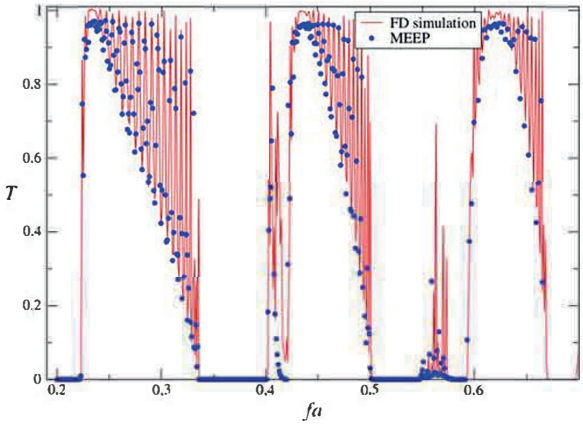


Figure 9: Transmission as a function of source frequency. Results computed in MEEP (blue points) and FD method (red line) [3]. Oscillations are due to reflection from finite number of cylinder rows. Band gaps appear between bands of states allowed to propagate trough the structure. In band gaps between P-bands, F-bands appear near 2nd and higher eigenmode frequencies of a cylinder.

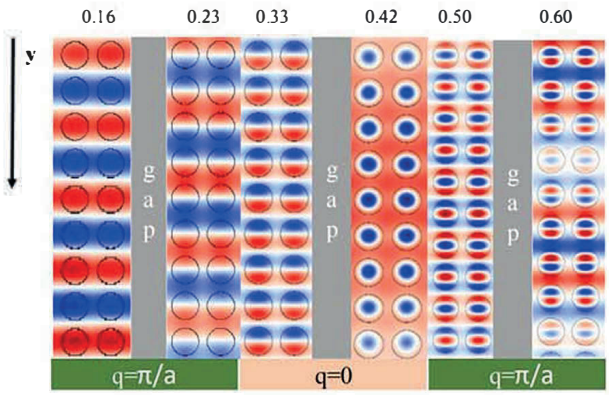


Figure 10: Electric field patterns of two columns of cylinders on band edges. Fields in the same band have similar pattern inside cylinders but differ in q while modes on edges of a particular gap have the same wavelength but differ in the field arrangement.

Figure 9 also shows comparison of results obtained by MEEP to those computed with frequency-domain methods in [3]. Although the agreement is not perfect, FDTD results describe the transmission spectrum satisfyingly well. We suspect that the fact that transmission in FDTD spectrum does not reach one is due to imperfect absorption by the boundary layer due to periodicity in y direction. This issue was referred to in section 3.2.2.

4.3 Field patterns

In Fig. 10, fields on band edges are visualised. It can be seen that for two modes on different edges of a gap, $\mathbf{q} = (0, q)$ and thus the wavelength is identical but field patterns are different. Near the first band gap, for example, the mode of lower frequency $f = 0.16$ has the electric field localised mostly in the cylinders of higher ε. That, according to the electromagnetic variational principle ([2]), is the preferred state of all possible field arrangements for $q = \frac{\pi}{a}$ and therefore has the lowest frequency. The mode on the upper edge of the gap, though having the same wavelength, must have different field arrangement (less favourable, in principle) and therefore has a higher frequency. The electric field is localised also between the cylinder rows, in vacuum of low ε, and zero in the centre of the cylinder.

By increasing the frequency from $f = 0.23$ to $f = 0.33$ and moving upwards in the second band, the field pattern in individual cylinder rows stays essentially the same while modes' q and wavelength change. Wave vector of the $f = 0.33$ mode, on the upper edge of the second band and in proximity of the second band gap, is $q = 0$.

For any odd band, the mode on the lower edge of the band (upper edge of a band gap) has $q = 0$ and infinite wavelength while the mode lying on the upper band edge (lower edge of a higher band gap) has $q = \frac{\pi}{a}$ and wavelength equals $2a$. For even bands, its the opposite: modes on the lower band edge have $q = \frac{\pi}{a}$ and on the upper band edge $q = 0$.

Figure 11 (a) shows the three lowest Fano resonances in 24 rows of cylinders. Field patterns of individual cylinders resemble those of Fig. 7. Due to finite number of rows, standing waves along y axis form in the structure and the electric field amplitude can be seen to vary with row position. The electric field distribution in F-bands changes in a similar manner as in bands described above (periodic P-bands). The bands near Fano resonances are, however, quite narrow and field patterns vary more rapidly with frequency than P-bands.

Figure 11 (b) shows how deep the electric field penetrates the structure. Mode's frequency lies near the middle of a band gap.

5 Conclusions

In this work we briefly described FDTD simulation platform MEEP [8] developed at MIT and applied it to simulate processes in sample periodic photonic

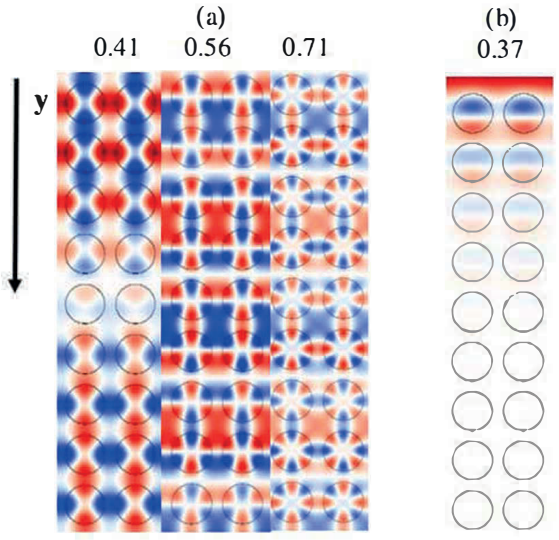


Figure 11: Electric field patterns of two columns of cylinders in (a) Fano resonance (b) band gap. (a) Field patterns in individual cylinders resemble Fano resonance in cylinder chain (Fig. 7), as expected. Modes differ in q, which is nonzero in this figure. (b) Electric field in a band gap penetrates only few rows into the structure. First nine out of the total 24 rows are shown.

structures (Fig. 3): a linear chain of dielectric cylinders in section 4.1 and 24 lines of such cylinder chains in section 4.2. We focused on transmission spectra of these structures as well as on electric field patterns of various modes excited by a source positioned either outside or inside the structure.

One of the main aims of this work was to examine the usability of MEEP and compare the results to those obtained by a frequency-domain (FD) simulation. From comparison of transmission spectra for both structures (Fig. 4, Fig. 9) we conclude that given the right parameters, namely sufficient resolution and computation time (Fig. 6), correlation between results obtained with MEEP and an FD method [3] for a single cylinder chain was almost perfect. Although the correlation was slightly worse in case of 24 rows of cylinders, probably due to imperfect absorption boundary layers, results qualitatively agreed and majority of points differed by less than 5% from the FD result.

Benefits of MEEP and FDTD methods in general are above all simple visualisation of fields at any time, enabling studying of temporal processes as well as field patterns is stationary states. MEEP is equipped with high quality and easily usable graphic output procedures which make visualisation of fields simple and pictures obtained are clear and demonstrative. Making use of these tools, we managed to visualise field patterns for various modes, in particular, we focused on Fano-resonance leaky modes (Fig. 7) and guided modes (Fig. 8) in a single row of cylinders and on field arrangement on P-band edges (Fig. 10) as well as field patterns of F-bands (Fig. 11) in 24 rows of dielectric cylinders.

Visualisation of field patterns can provide insight into underlying principles. For example, an interesting relevance was that field patterns inside cylinders depicted in Fig. 5 are seemingly identical but interfering with an incident wave of the same frequency, they result in extreme difference in transmission trough the chain.

Moreover, lifetimes of particular guided and leaky modes can be examines by studying field patterns and time dependences of their amplitudes after sources were turned off. It can be seen that leaky modes of Fig 7 radiate energy and if observed long enough, most energy dissipates. For guided modes, on the other hand, field decays quickly with distance from the structure. Fano resonances discussed in section 4.1 had relatively large lifetimes and were seen long after the sources were off in contrast to the zeroth and first eigenmode corresponding to Fabry-Pérot resonances, which could not be seen at all after sources stopped radiating.

Apart from that, physical origin of band gaps, which can be a phenomenon difficult to comprehend, may be intuitively understood from studying field patterns, for example those in Fig. 10. Fields of two orthogonal modes of the same wavelength have to be arranged differently in the periodic structure. One of the arrangements is more favourable than the other, meaning each of these modes carries different energy and therefore is of different frequency. The frequency interval in between is a band gap.

To conclude, although FDTD methods may not overcome FD methods in calculation of transmission spectra or band diagrams, the biggest benefit is easy visualisation. We believe that visualisation of such processes can be extremely useful for better and deeper understanding of often rather unintuitive phenomena taking place in simple as well as more complex photonic structures. Apart from that, MEEP can serve as an educational tool for getting familiar with processes in periodic and other photonic structures and for developing physical intuition.

Acknowledgments

The author would like to thank her supervisor for valuable explanations, guidance and patience without which this work could not have been done.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-15-0496 and by the Agency VEGA under the contract No. 1/0108/17.

References

[1] MALÝ, P. *Optika*, Second Edition.
Praha: *Karolinum*, (2013), ISBN 978-80-246-2246-0.

[2] JOANNOPOULOS, J. D. ET AL. *Photonic Crystals: Molding the flow of light*, Second Edition.
Princeton University Press, (2008)
ISBN 978-0-691-12456-8.

[3] MARKOŠ, P. *Fano resonances and band structures of two-dimensional photonic structures*
Phys. Rev. A, Vol. **92** (2015)

[4] MARKOŠ, P. *Fotonické kryštály a metamateriály*.
Košice: *ÚEF SAV*, (2013).
ISBN: 978-80-89656-04-2.

[5] KONG, X. ET AL. *Fano Resonance in High-Permittivity Objects*
InTech (2017), DOI: 10.5772/intechopen.70518

[6] MIROSHNICHENKO, A. ET AL. *Fano resonances in nanoscale structures*
Rev. Mod. Phys., Vol. **82**, 2257 (2010)

[7] YEE, K. S. *Numerical Solutions of Initial Boundary Value Problems Involving Maxwell's Equations in Isotropic Media*
IEEE Transactions on Antennas and Propagation, Vol. **14**, 3 (1966)

[8] MEEP (MIT Electromagnetic Equation Propagation)
`https://meep.readthedocs.io/en/latest/`

[9] MEEP Scheme User Interface
`https://meep.readthedocs.io/en/latest/Scheme_User_Interface/`

[10] JOHNSON, S. G. *Notes on Perfectly Matched Layers (PMLs)*
`http://math.mit.edu/~stevenj/18.369/pml.pdf` (2010)

[11] OOSKIO A.F, JOHNSON, S.G. ET AL. *The failure of perfectly matched layers, and towards their redemption by adiabatic absorbers* Optics Express, Vol. **16**, 15, pp. 11376-11392 (2008)

[12] OOSKIO A.F, JOHNSON, S.G. ET AL. *Meep: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method* Computer Physics Communications, Vol. **181**, 3, pp. 687–702 (2010)

[13] MARKOŠ, P. *unpublished*

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 182–194
ISBN 978-8081470882, © 2018 Ján Šubjak

Výskum exoplanéty HAT-P-37 b

Ján Šubjak[1*]
Školiteľ: Štefan Gajdoš[1+]

[1]Katedra matematiky, fyziky a informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

Práca sa zaoberá rozsiahlym výskumom exoplanéty HAT-P-37 b. Tento systém bol vybratý ako veľmi vhodný na prezentovanie možností, ktoré nám poskytujú metódy extrasolárnych planetárnych tranzitov a radiálnych rýchlosti. Systém sa nachádza v súhvezdí Draka a so svojimi parametrami je výborný objekt na pozorovania z observatória AGO Modra, ktoré sme vykonali na 60cm ďalekohľade. Pre ďalšie použitie sme z dát svetelnej krivky odstránili trendy a určili prvé parametre systému, konkrétne polomer planéty, inklináciu jej dráhy a čas stredu tranzitu. V dátach svetelnej krivky je rozpoznateľné lokálne zjasnenie v spodnej časti tranzitu, ktoré je možné fyzikálne interpretovať prechodom planéty popred tmavú škvrnu na hviezde. Prehľadali sme v databáze pozorovania tohto objektu od iných astronómov a v jednom našli podobný jav. K našim, aj nájdeným dátam sme modelovali svetelnú krivku aj so škvrnou a vyvodili príslušné závery, ako aj možnú rotačnú periódu hviezdy. Pomocou voľne dostupných dát radiálnych rýchlostí sme pre tento systém určili excentricitu dráhy a s pomocou už skôr vypočítanej inklinácie aj hmotnosť planéty. Všetky vypočítané parametre sme porovnali s katalógovými hodnotami. Údaje o polomere a hmotnosti planéty sme následne vniesli do "Mass-Radius" diagramu a odtiaľ odvodili informácie o zložení exoplanéty. Nakoniec sme vyvodili možný záver o prítomnosti druhej tranzitujúcej planéty v tomto systéme a v závere zhrnuli ďalšie plány.

Kľúčové slová: exoplanéta, tranzit, svetelná krivka, radiálne rýchlosti, bootstrapping

* subjak2@uniba.sk
+ stefan.gajdos@fmph.uniba.sk

1 Úvod

HAT-P-37 je hviezda hlavnej postupnosti spektrálneho typu G, známa tiež ako žltý trpaslík. Vo vnútri hviezd tohto typu prebieha spaľovanie vodíka na hélium p-p cyklom. Po vyčerpaní väčšiny vodíka v jadre sa z tohto typu stáva červený obor. Medzi spektrálny typ G patrí aj naše Slnko a táto hviezda je mu vo svojich parametroch podobná. Jej teplota dosahuje *5500±100K* a vek sa odhaduje na *3,6±2,2Gyr*. Hmotnosť hviezdy je *0,929±0,043* M_{Sun} a polomer *0,877±0,044* R_{Sun}. Hviezda je vzdialená *411±26 pc* a nachádza sa v súhvezdí Draka. Jasnosť hviezdy je *13,23mag*, trvanie tranzitu *139,8 min* a veľkosť poklesu jasnosti počas tranzitu *0,0204mag*. Perióda obehu planéty je *2,797 dňa*. [Bakos G. A. 2012] Pozorovanie bolo vykonané 11.06.2017. Nebol použitý filter a expozičná doba bola nastavená na 40s. Snímky boli skalibrované pomocou dark, bias a flat field snímok.

2 Použité metódy

2.1 Metóda tranzitov exoplanét

Princíp metódy tranzitov exoplanét spočíva v tom, že disk planéty prejde z pohľadu pozorovateľa popred disk hviezdy. Zakryje nám časť hviezdneho disku, čo pozorujeme ako pokles jasnosti hviezdy. Tá sa môže meniť aj z iných dôvodov, ale tranzit je špecifický svojim tvarom svetelnej krivky. Pre maximálnu stratu svetelného toku počas tranzitu platí

$$\delta_T = k^2 \left[1 - \frac{I_P(t_T)}{I_\odot}\right] \quad (1)$$

Ak môžeme zanedbať intenzitu planéty oproti hviezde, rovnica prejde na tvar

$$\delta_T = k^2, \quad k = \frac{R_P}{R_\odot} \qquad (2)$$

Čas tranzitu s periódou obehu planéty sa vyjadrí ako

$$T_C = \frac{P}{\pi} sin^{-1}\left(\frac{R_\odot\sqrt{(1+k)^2-b^2}}{a\,sinI}\right) \qquad (3)$$

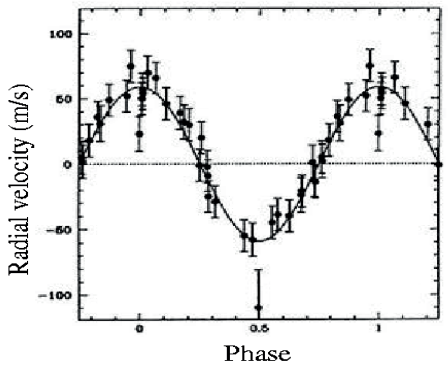
Z krivky tranzitu je teda možné určiť polomer planéty a z tretej rovnice aj inklinácia *I*.

2.2 Metóda radiálnych rýchlostí

Táto metóda je založená na jave s názvom Dopplerov efekt. Vplyvom pohybu hviezdy sa vlnová dĺžka vysielaného vlnenia smerom k pozorovateľovi skracuje, ak sa zdroj približuje (modrý posun), alebo predlžuje, ak sa zdroj vzďaľuje (červený posun). Ak teda hviezda koná orbitálny pohyb kvôli vplyvu planéty, potom sa hviezda striedavo približuje a vzďaľuje. To sa prejaví Dopplerovým efektom. Hviezdy však vysielajú elektromagnetické vlnenie v širokom rozsahu vlnových dĺžok, preto je potrebný nejaký záchytný bod, ktorý sa pri rôznych pozorovaniach nemení a vďaka nemu spozorujeme prípadný posun vplyvom efektu. Tento bod poskytujú chemické prvky v atmosfére. Tie absorbujú alebo emitujú žiarenie na určitých konkrétnych vlnových dĺžkach, čo sa prejaví na výslednom farebnom spektre hviezdy. Pozorovaním časovej zmeny tohto spektra tak dokážem určiť, či sa hviezda približuje, vzďaľuje alebo nekoná žiadny orbitálny pohyb. Preto sú potrebné citlivé spektroskopy, ktoré umožňujú merať radiálne rýchlosti. V prípade orbitálneho pohybu dostaneme aj informácie o tomto systéme, periódu obehu planéty, excentricitu, alebo vzdialenosť od materskej hviezdy. Z pohybu dvoch telies po elipsách s rovnakým ťažiskom a rovnakou excentricitou sa dá odvodiť vzťah pre radiálnu rýchlosť hmotnejšej hviezdy. Pre tu platí:

$$v = \sqrt{\frac{G}{(m_1+m_2)a(1-e^2)}}\, m_2 sini(\cos(\omega + f) + e\cos\omega) \qquad (4)$$

Vo vzťahu vystupuje $m_2 sin(i)$, nakoľko však nepoznáme inklináciu, nedokážeme vypočítať samotnú hmotnosť planéty, výpočtom dostaneme len jej spodné ohraničenie. Preto je potrebné inklináciu určiť z tranzitu.



Obr. 1: Ilustrácia krivky radiálnych rýchlostí

4. Odstránenie trendov z dát

Dáta svetelnej krivky môžu byť ovplyvnené systematickými neistotami, z ktorých sú najdominantnejšie dve:

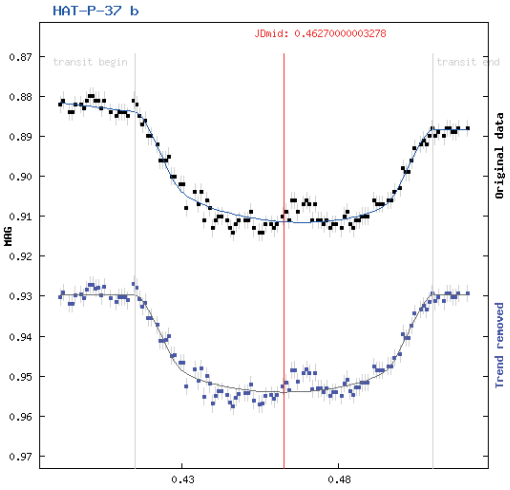
- trendy spôsobené vzdušnou hmotou, ktoré vytvárajú rozdiel vo farbe hviezd medzi pozorovanou hviezdou a referenčnými hviezdami
- trendy spôsobené vychýlením polárnej osi teleskopu na ekvatoriálnej (rovníkovej) montáži, čo spôsobuje malú rotáciu obrazu a produkuje štatisticky korelovaný šum, keď sa hviezdne pole pohybuje cez nedokonalý flat field

Druhý efekt závisí na presnom umiestnení polárnej osi a to často nebýva tak presné, ako na najmodernejších observatóriách, kde je typicky tiež menší pomer signál k šumu vo flat field snímkach. Taktiež tieto observatóriá sú umiestnené vo vyšších nadmorských výškach a preto sú vystavené slabším účinkom absorpcie a účinkom vzdušnej hmoty. V našom prípade sa v pozorovaniach prejavujú najmä trendy spôsobené vzdušnou hmotou. Je preto potrebné z dát odstrániť tieto trendy. Tento proces sme vykonali v Exoplanet Transit Database, kde boli dáta jasnosti hviezdy modelované funkciou:

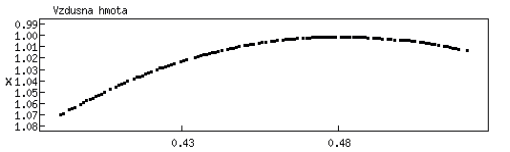
$$m(t_i) = A - 2.5logF(z[t_i,t_0,D,b],p,c_1) + B(t_i - t_{mean}) + C(t_i - t_{mean})^2 \qquad (5)$$

kde $F(z[t_i,t_0,D,b],p,c_1)$ je relatívny pokles toku od hviezdy počas tranzitu. Predpokladá

sa aproximácia, kde planéta je oveľa menšia ako hviezda $p \leq 0,2$. z je relatívna projekčná separácia planéty od hviezdy (ich stredov). Okrajové stemnenie je vyjadrené lineárnym vzťahom s koeficientom $c_1=0,5$. Trajektória sa modeluje ako rovná čiara cez hviezdny disk s impaktným parametrom $b = \frac{acosI}{R_\odot}$. Ide teda o aproximáciu pre kruhovú orbitu. Najbližšie priblíženie je v čase t_0 a dĺžka tranzitu je D. Premenné A, B, C opisujú systematické trendy v dátach. Nie je použitá žiadna explicitná oprava zakrivenia vzdušnej hmoty, pretože vo väčšine prípadov postačuje všeobecný polynóm druhého stupňa. Najlepšia funkcia je nájdená pomocou Levenberg-Marquardtovho algoritmu (Price et al. 1992). Algoritmus vyžaduje počiatočné hodnoty parametrov a parciálne derivácie fitovacej funkcie. Počiatočné parametre sa berú z literatúry a všetky parciálne derivácie sú počítané analyticky, až na $\frac{\partial F}{\partial z}, \frac{\partial F}{\partial p}, \frac{\partial F}{\partial c_1}$, ktoré sú počítané numericky použitím Riddersovej metódy. Použitie ETD nie je najlepší spôsob, ako odstrániť z dát tieto trendy, ale je jednoduchý, časovo nenáročný a pre väčšinu prípadov dostatočný. Odstránenie trendov je znázornené na *Obr. 2* spolu s krivkou vzdušnej masy na *Obr. 3*.



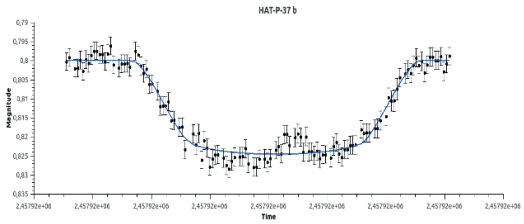
Obr. 2: Svetelná krivka pred a po odstránení trendov



Obr. 3: Tvar krivky vzdušnej hmoty

5. Výsledky

Svetelná krivka nájdená pomocou kódu JKTEBOP je znázornená na *Obr. 4*. Použitý bol opäť odmocninový vzťah pre okrajové stemnenie a koeficienty sme určili z tabuliek podľa katalógových parametrov pre hviezdu. Povrchová gravitácia hviezdy je $\log g_\odot = 4,52 cgs$ [Bakos G. A. 2012]. Pre metalicitu bola použitá hodnota *0* a pre rýchlosť mikroturbulencií hodnota *2*, pretože väčšina koeficientov okrajového stemnenia je len pre tieto hodnoty parametrov. Výsledné parametre systému sú v *Tabuľke 1*.



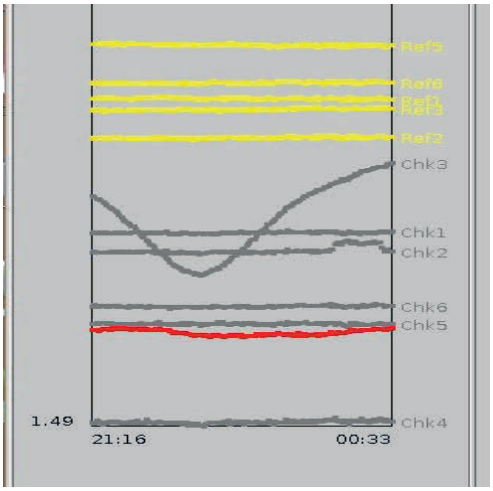
Obr. 4: Modelovaná svetelná krivka pomocou kódu JKTEBOP

	Šubjak	Katalógové hodnoty
Inklinácia	85,78±0,54°	86 ± 0,5°
Polomer HAT-P-37b	1,335±0,110 R_j	1,178 ± 0,077 R_J

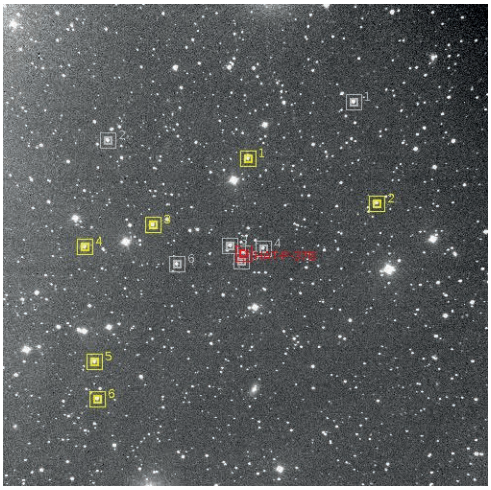
Tabuľka 1: Zistené parametre systému pomocou kódu JKTEBOP

Počas tranzitu došlo k lokálnemu zjasneniu tesne za stredom. Na overenie, či sa nejedná o systémovú chybu slúžia porovnávacie hviezdy. Ak by išlo o systémovú chybu, pozorovali by sme toto zjasnenie aj u iných hviezd. Ako je vidieť na *Obr. 5*, kde sú zobrazené krivky jasnosti objektu aj porovnávacích hviezd, tie sú relatívne konštantné. Výnimkou sú dve hviezdy. V prvom prípade (*Chk3*) ide o premennú hviezdu a v druhom prípade (*Chk2*) dochádza opäť k lokálnemu zjasneniu, ale v inom čase ako je zjasnenie na našom objekte. Po dodatočnej analýze sa ukázalo, že ide o horúci pixel vstupujúci a následne vyliezajúci z hviezdy. To je v zhode aj s tvarom tohto zjasnenia, s prudkým nárastom a poklesom jasnosti ako pixel vchádza resp. vychádza z hviezdy. Identifikačná mapka oblohy je

na *Obr. 6*. Tiež vidíme, že pozorovaný jav výrazne prevyšuje šum v dátach a že nie je skrytý v chybách pre jednotlivé snímky. Nič teda nenasvedčuje systémovú chybu.

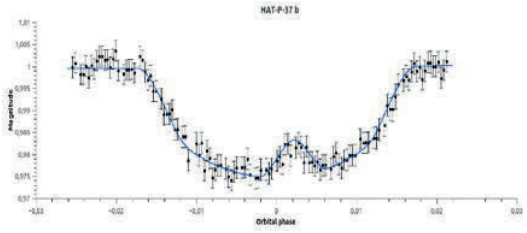


Obr. 5: Krivky jasností nášho objektu HAT-P-37 (červená), referenčných a porovnávacích hviezd

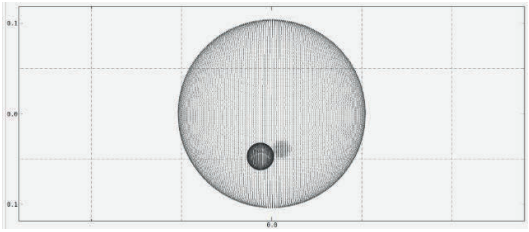


Obr. 6: Identifikačná mapka oblohy pre pozorovanie

Takéto zjasnenie sa najbežnejšie vysvetľuje prítomnosťou škvrny na pozorovanej hviezde a je ho možné vidieť vo viacerých pozorovaniach v databáze, nejde teda o nezvyčajný jav. Exoplanéta počas tranzitu prechádza popred takúto tmavú, menej jasnú oblasť, čo pozorujeme ako nárast jasnosti na svetelnej krivke. Rovnaké škvrny pozorujeme aj na Slnku a sú spôsobené silným magnetickým poľom stúpajúcim na povrch fotosféry, ktoré potláča konvekciu. Kvôli tomu má škvrna nižšiu teplotu ako okolitá fotosféra a javí sa tmavšia ako okolie. Životnosť škvŕn na Slnku je rádovo dni až mesiace. Ich životnosť vzrastá lineárne s maximálnym rozmerom podľa Gnevyshev-Waldmeierovho vzťahu. $A_0 = WT$, kde A_0 je maximálny rozmer škvrny, T je jej životnosť a $W = 10\ MSH\ day^{-1}$ (*MSH Micro Solar Hemisphere*). Podľa tohto vzťahu veľká väčšina škvŕn žije rádovo hodiny až dni a len veľmi málo z nich žije dlhšie. Škvrna bola modelovaná v softvéry Phoebe. Výsledky modelovania sú na *Obr. 7*, kde je znázornená nájdená svetelná krivka a grafické znázornenie na *Obr. 8*. Opäť bol použitý odmocninový vzťah pre okrajové stemnenie.



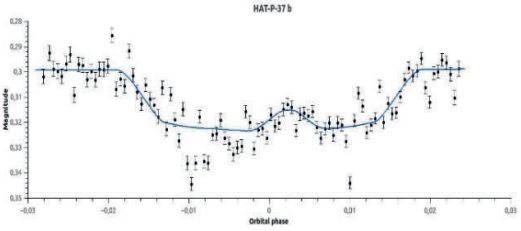
Obr. 7: Tvar svetelnej krivky so škvrnou modelovanou pomocou softvéru Phoebe



Obr. 8: Grafické znázornenie systému so škvrnou pomocou softvéru Phoebe

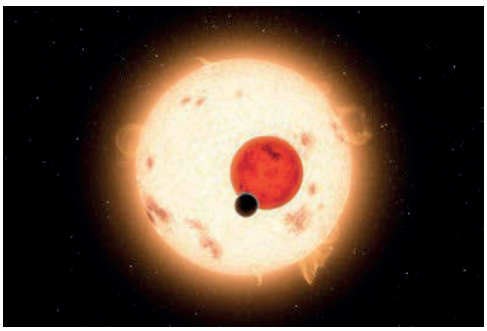
JKTEBOP kód je oveľa vhodnejší na určovanie parametrov systému a tie sú aj presnejšie. Tiež umožňuje počítanie chýb parametrov pomocou štatistickej metódy bootstrapping a má mnoho ďalších funkcií. Z výsledných parametrov a z *Obr. 4* sa dá usúdiť, že tvar svetelnej krivky a teda aj parametre systému sú výrazne ovplyvnené prítomnosťou zjasnenia v tranzite. Z toho dôvodu nie je vhodné ich ďalšie použitie. Výsledné parametre z pozorovania sú preto tie, určené v softvéry Phoebe. Pre polomer planéty to je *1,197* R_J a pre inklináciu *87,29°*. Keďže z jedného pozorovania škvrny nie je možné určiť žiadne dodatočné parametre

systému, kvôli možnosti nájdenia pozorovania tej istej škvrny od iných pozorovateľov sme prehľadali databázu ETD. Podobné zjasnenie bolo nájdené v približne o dva mesiace staršom pozorovaní Cliffa Kotnika z 14.04.2017. Aj keď tieto dáta majú o niečo horšiu kvalitu, na *Obr. 9* je zreteľne vidno zjasnenie na približne rovnakom mieste v tranzite ako v našom pozorovaní.



Obr. 9: Tvar svetelnej krivky so škvrnou od Cliffa Kotnika

Parametre, ktoré ovplyvňujú tvar zjasnenia na svetelnej krivke sú inklinácia, ktorá posúva planétu v y-novom smere a teda ovplyvňuje veľkosť prekrývajúcej plochy medzi planétou a škvrnou, taktiež poloha škvrny na hviezde v y-novom smere, ktorá má rovnaký efekt, polomer škvrny a nakoniec teplota škvrny, ktorá uvádza aká tmavá je škvrna. Čím je škvrna tmavšia, tým je zjasnenie výraznejšie. Preto je dôležitý fakt, že všetky tieto parametre sú pri oboch škvrnách rovnaké. Inými slovami, zjasnenie v Kotnikovom pozorovaní je dobre popísané parametrami, ktoré boli určené pri modelovaní nášho pozorovania. Vďaka tomu môžeme usudzovať, že ide pravdepodobne o rovnakú škvrnu a tieto pozorovania je možné použiť na výpočet periódy rotácie hviezdy. Rotačná perióda hviezdy má potom maximálnu hodnotu 61,54 dní, alebo jej zlomok $\frac{61,54}{2}$, $\frac{61,54}{3}$, atď. Keďže hviezda HAT-P-37 je rovnakého spektrálneho typu ako Slnko a aj ostatnými parametrami je mu podobná, je možné hľadať analógiu medzi pozorovanými škvrnami na Slnku, o ktorých máme dobrú predstavu a škvrnami na tejto hviezde. Zo škvŕn pozorovaných na Slnku vyplýva, že nie je pravdepodobné pozorovať rovnakú škvrnu po dobu 61,54 dní a navyše s rovnakými parametrami a súradnicami polohy na hviezde. Mohlo by však ísť o druhú tranzitujúcu planétu. Známa planéta vojde do tieňa neznámej planéty, ktorá obieha na vzdialenejšej orbite okolo hviezdy. To sa prejaví rovnako ako pri škvrne nárastom jasnosti v tranzite známej planéty. Ilustráciu tejto situácie môžeme vidieť na *Obr. 10*.



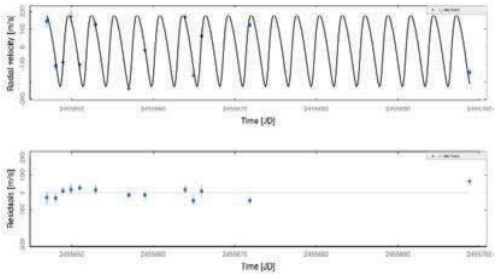
Obr. 10: Ilustrácia dvoch tranzitujúcich objektov

K výpočtu ďalších parametrov systému, konkrétne excentricity a hmotnosti planéty, bol použitý softvér Systemic Console 2 s voľne dostupnými dátami radiálnych rýchlostí pre tento objekt. Výsledné parametre sú v *Tabuľke 2*.

	Šubjak	Katalógové hodnoty
Excentricita orbity	0,234 ± 0,117	0,058 ± 0,038
Hmotnosť exoplanéty	1,295 ± 0,161 M_J	1,169 ± 0,103 M_J

Tabuľka 2: Zistené parametre systému z dát radiálnych rýchlostí

Z dát radiálnych rýchlosti je možné určiť aj periódu obehu, tú sme však fixovali na katalógovú, ktorá je presne určená z pozorovaných časov viacerých tranzitov. Dôvodom je, že dáta sú zaťažené neistotou a ich počet nie je dostatočný na jej presné určenie. Jej nefixovanie by teda malo vplyv na výsledné parametre. Nájdená krivka radiálnych rýchlostí je na *Obr. 11*.



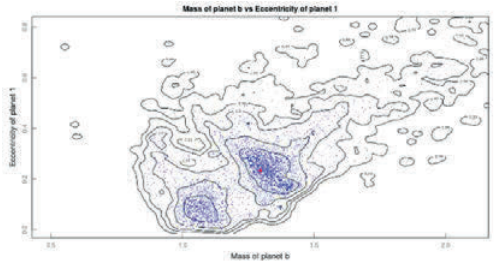
Obr. 11: Modelovaná krivka radiálnych rýchlostí pomocou softvéru Systemic Console 2

Z *Tabuľky 2* je vidieť, že naše výsledky sa výrazne líšia od katalógových hodnôt parametrov. Chyby v parametroch sú určené pomocou štatistickej metódy bootstrapping pre 10000 krokov. Pomocou tejto metódy boli spravené ďalšie analýzy parametrov. Na *Obr. 12* je vykreslených 1500 orbít. Pri vykreslení väčšieho počtu sa obrázok stáva neprehľadným. Sú na ňom rozpoznateľné dve zhustené oblasti, ktoré vyjadrujú dva najpravdepodobnejšie tvary orbity planéty.



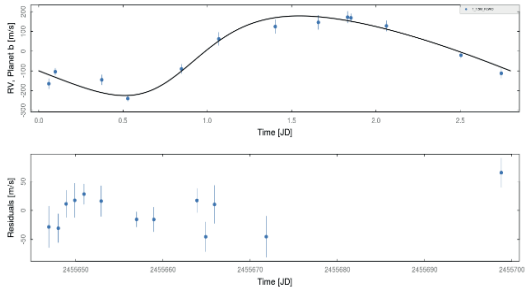
Obr. 12: Vykreslených 1500 orbít pomocou bootstrappingu

Ešte lepšie sú tieto zhustené oblasti viditeľné na *Obr. 13*, na ktorom je zobrazené rozloženie parametrov v parametrickom priestore, kde zhustenie vyjadruje zväčšenú pravdepodobnosť, že výsledné parametre ležia v danej oblasti.

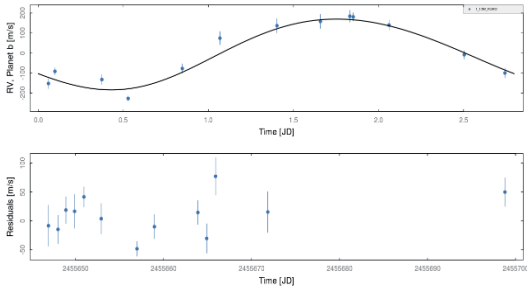


Obr. 13: Rozloženie excentricity a hmotnosti exoplanéty z bootstrappingu

Takáto situácia nastáva ojedinele a vyplýva z dát. Kvôli ich neistote a nedostatočnému počtu vznikla situácia, kedy je systém vhodne popísaný dvoma spôsobmi. Presne rovnaké dáta boli použité aj v článku spomínanom na začiatku kapitoly [Bakos G. A. 2012], ktorý udáva katalógové hodnoty parametrov pre tento systém. Čo je však zaujímavé, nijako sa v ňom nespomínajú tieto dve zhustenia a ich výsledok pre hmotnosť a excentricitu exoplanéty pochádza z druhého menšieho zhustenia. Ako prvé sme na porovnanie zostrojili novú krivku radiálnych rýchlostí, zodpovedajúcu fixovaným hodnotám parametrov z tohto článku. Z porovnania oboch výsledkov na *Obr. 14* a *Obr. 15* sú opäť viditeľné spomínané dva spôsoby, ktorými je možné popísať dáta.



Obr. 14: Naša krivka radiálnych rýchlosti získaná v softvéry Systemic Console 2



Obr. 15: Krivka radiálnych rýchlostí pri použití katalógových parametrov

Naša krivka radiálnych rýchlostí o niečo lepšie popisuje dáta, inými slovami chi-kvadrát preloženej funkcie je menší. Preto je aj toto zhustenie väčšie. Nakoniec ešte jedno porovnanie s článkom.

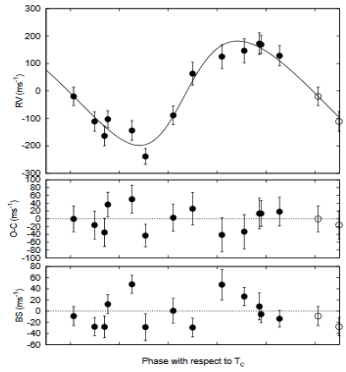
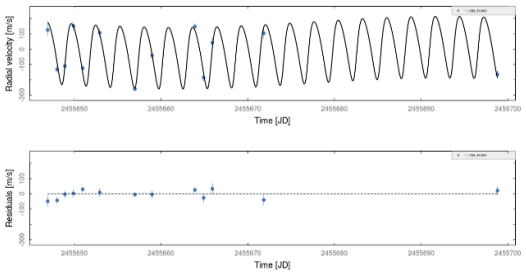


FIG. 5.— FLWO 1.5 m/TRES observations of HAT-P-37. The panels are as in Figure 2. The *S* index is not available for these observations. The parameters used in the best-fit model are given in Table 3.

Obr. 16: Krivka radiálnych rýchlostí z článku pre katalógové parametre

Na *Obr. 16* je krivka radiálnych rýchlostí z článku. Už na prvý pohľad táto krivka nezodpovedá excentricite *0,058*. Po pozornejšom porovnaní je dokonca vidieť, že je veľmi podobná, ak nie totožná, nami modelovanej krivke s excentricitou *0,234*. Parametre z článku sa teda nezhodujú s priloženou krivkou radiálnych rýchlostí. Tento článok teda nie je úplne v poriadku a sú potrebné dodatočné merania radiálnych rýchlostí na odstránenie dvoch zhustení a presné určenie parametrov. Vzhľadom na vznesený predpoklad na prítomnosť druhej planéty, je zaujímavé zistiť, aký vplyv by mala druhá planéta na krivku radiálnych rýchlostí a na výsledné parametre. Pre tento účel sme v softvéry Systemic Console 2 modelovali aj druhú planétu s periódou *61,54 dní* a k dátam určili krivku radiálnych rýchlostí hviezdy pod gravitačným vplyvom dvoch planét. Táto perióda je však len jedna z možných. Niektoré parametre boli fixované. Boli to obežné periódy oboch planét a excentricita druhej planéty. Perióda prvej planéty rovnako ako predtým na tabuľkovú hodnotu *2,7974 dňa* a perióda druhej na už spomínaných *61,5436 dní*. Excentricitu sme fixovali na 0, pretože inak vychádzali nepravdepodobné hodnoty v snahe čo najlepšie popísať dáta. Zistené parametre oboch planét sú v *Tabuľke 3* a nájdená krivka radiálnych rýchlostí na *Obr. 17*. Sľubných je viacero výsledkov. Prvý je, že chi-kvadrát preloženej krivky klesol z pôvodnej hodnoty *20,082* pre jednu planétu, na hodnotu *13,637* pre planéty dve.

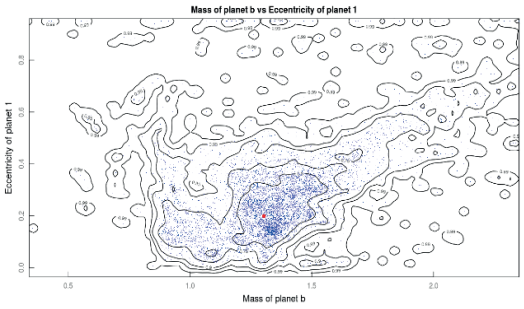


Obr. 17: Modelovaná krivka radiálnych rýchlosti pre dve planéty v systéme

	Planéta b	Planéta c
Hmotnosť	1,303 ± 0,186 M_J	0,666 ± 1,2 M_J
Excentricita orbity	0,199 ± 0,136	0 (fixovaná)

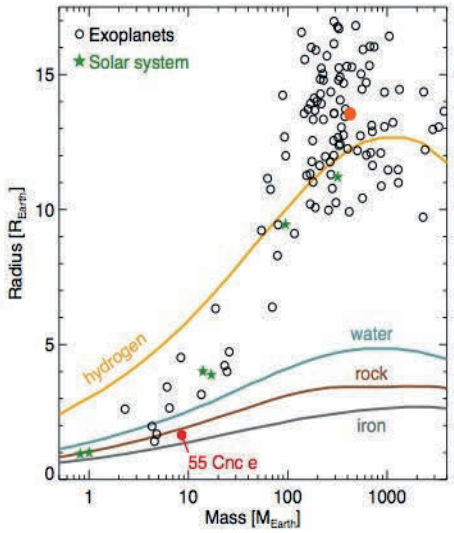
Tabuľka 3: Zistené parametre systému pre dve planéty z dát radiálnych rýchlostí

Druhý výsledok je, že ak spravíme rovnakú analýzu parametrov pomocou bootstrappingu ako predtým, pôvodné dve zhustenia zmiznú a vznikne jedno *Obr. 18*, čím sa vyrieši problém v dátach radiálnych rýchlostí. Napriek tomu, že nevieme presne určiť periódu druhej planéty, vďaka jej prítomnosti môžeme lepšie popísať dáta radiálnych rýchlostí, čo sme demonštrovali na perióde *61,54 dní*.



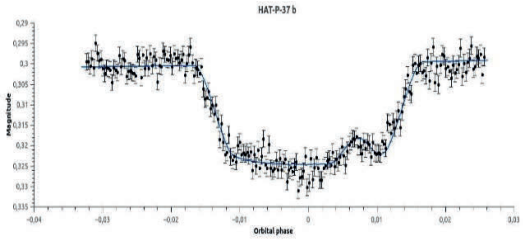
Obr. 18: Rozloženie excentricity a hmotnosti planéty b z bootstrappingu pre dve planéty

Z tranzitu bol určený polomer známej exoplanéty na *1,197* R_J a z krivky radiálnych rýchlostí hmotnosť na *1,295* M_J. Planétu je možné vložiť do „Mass-radius“ diagramu a zistiť nejaké informácie o jej zložení. Ako ukazuje *Obr. 19*, planéta patrí do skupiny horúcich Jupiterov a nachádza sa nad čiarou pre model čisto vodíkovej planéty v hydrostatickej rovnováhe, čo svedčí o nafúknutej atmosfére z dôvodu blízkej orbity okolo hviezdy. Veľký polomer u týchto exoplanét nie je úplne pochopený. Predpokladá sa, že blízka orbita okolo hviezdy, zvýšené žiarenie od hviezdy, zvýšená opacita atmosféry, alebo vnútorné vyžarovanie môžu súvisieť s nafúknutím atmosféry. Pozorovania ukazujú, že teplota exoplanéty je v korelácii s jej nafúknutým polomerom. Môžeme tiež predpokladať vysoké zastúpenie vodíka. Hustota exoplanéty je *1,0004±0,1244 g/cm*^{3}. Ako tabuľková hodnota sa uvádza hodnota *0,89 ± 0,19 g/cm*^{3}, ktorá je nižšia v dôsledku nižšej hmotnosti určenej z krivky radiálnych rýchlostí.

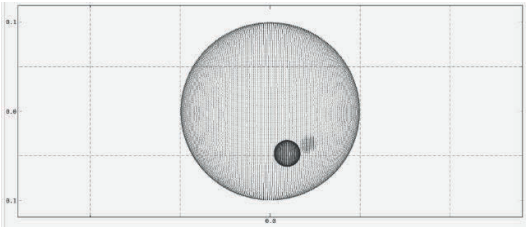


Obr. 19: Ukážka exoplanéty v „Mass-radius“ diagrame (oranžová farba)

15.10.2017 pribudlo v databáze nové pozorovanie od Marca Brettona. Použitý bol I filter a expozícia bola nastavená na 60s. Aj z jeho dát sme odstránili trendy a modelovali ich rovnako ako pri našom pozorovaní v softvéry Phoebe. Svetelná krivka je na *Obr. 20* a grafické znázornenie systému na *Obr. 21*.



Obr. 20: Tvar svetelnej krivky aj so škvrnou od Marca Brettona



Obr. 21: Grafické znázornenie systému so škvrnou u Marca Brettona

Zjasnenie počas tranzitu v Brettonovom pozorovaní je opäť dobre popísané parametrami, ktoré sme zistili pri modelovaní nášho pozorovania. Jediná zmena je pri x-vom posunutí škvrny, čo je spôsobené rotáciou hviezdy. Vďaka tomu môžeme usudzovať, že aj v tomto prípade ide pravdepodobne o rovnakú škvrnu ako predtým a toto pozorovanie je možné použiť na spresnenie periódy rotácie hviezdy. Zistené parametre oboch systémov a ich porovnanie s katalógovými hodnotami sú v *Tabuľke 4*.

	Šubjak	Bretton	Katalógové hodnoty
Inklinácia	87,29°	87,29°	86 ± 0,5°
Polomer exoplanéty	1,197 R_J	1,175 R_J	1,178 ± 0,077 R_J
Polomer škvrny (1 = polomer *)	0,094	0,094	...
Teplota škvrny (1 = teplota *)	0,6	0,6	...
Y-nová súradnica škvrny <0 – 3,1416>	1,914	1,914	...
X-ová súradnica škvrny <0 - 6,2832>	0,12	0,45	...

Tabuľka 4: Zistené parametre systémov so škvrnou pomocou softvéru Phoebe

Z dvoch pozorovaní tej istej škvrny je možné spresniť periódu rotácie hviezdy. Na presné určenie sú najlepšie pozorovania dvoch tranzitov po sebe, alebo aspoň v blízkej dobe. X-ové súradnice škvrny nadobúdajú hodnoty v intervale *0* až *6,2832*. Pre naše pozorovanie je x-ová súradnica *0,12*, teda zjasnenie bolo pozorované tesne za stredom tranzitu, čomu zodpovedá stred hviezdy a nulová hodnota x-ovej súradnice. Pre Brettonovo pozorovanie je hodnota *0,45*. Ich rozdiel je *0,33* a po predelení *6,2832* dostávame približne $\frac{1}{19}$. Rozdiel medzi pozorovanými x-vými súradnicami teda zodpovedá $\frac{1}{19}$ jednej rotácie hviezdy. Z porovnania dátumov a časov pozorovaní dokážeme tiež určiť, koľko obehov spravila exoplanéta v tomto časovom

intervale. Bolo ich 45. Vieme teda písať rovnicu

$$T\left(n+\frac{1}{19}\right)=45B \qquad (6),$$

kde T je perióda rotácie hviezdy a B je obežná perióda planéty. Vzťah vyjadruje, že za 45 period obehov planéty medzi týmito dvoma pozorovaniami, sa hviezda otočila n-krát plus 1/19, ktorá zodpovedá rozdielu v polohe škvrny, kde n je celé číslo. Druhú rovnica

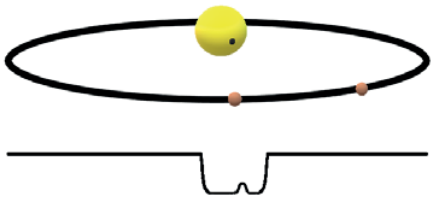
$$T=xB \qquad (7)$$

vyjadruje určitú viazanosť rotácie hviezdy. Inými slovami, kým planéta spraví x obehov s periódou B, hviezda sa otočí jedenkrát a x je opäť celé číslo. Táto podmienka vyplýva z toho, že na dvoch tranzitoch sa nachádza zjasnenie na tom istom mieste a rotačná perióda už bola zúžená na 61,54 dní alebo zlomky tejto hodnoty. Keďže perióda obehu je len 2,8 dňa premenná x je na pravej strane rovnosti. Po úprave týchto dvoch rovníc

$$n+\frac{1}{19}=\frac{45}{x} \qquad (8)$$

a keďže n aj x sú celé čísla ide o minimalizáciu daného výrazu. Perióda sa tak zúžila na dve možné: *61,54 dní* alebo *120,29 dní* a prienikom je výsledná hodnota *61,54 dní*. Predstavili sme si jedno z ďalších využití tranzitov exoplanét. V tomto prípade sme mali šťastie, že sme našli zjasnenia aj medzi pozorovaniami v databáze. Ide teda aj o demonštráciu výhod, ktoré predstavuje databáza exoplanét. Pre určenie rotačnej periódy sa po spozorovaní škvrny pozorujú hneď nasledujúce tranzity, kedy sa zjasnenie posúva v rámci tranzitu. My sme si zjasnenie všimli až po odstupe času a preto sme boli odkázaný na databázu.

Úplne iná situácia nastáva pre druhú planétu. Ak je nepravdepodobné pozorovať škvrnu o životnosti 2 mesiacov, pre 6 mesačné to platí mnohonásobne viac. Tak dlho žijúce škvrny sa na Slnku nepozorujú. Preto sa s ešte väčším významom naskytá otázka prítomnosti druhej planéty. Určená perióda 61,54 dní však neplatí pre planétu. Dôvodom je, že zatiaľ čo škvrna je pozorovateľná počas pohybu na celej pologuli hviezdy, planéta je iba malú časť orbity počas tranzitu. Preto je škvrna pozorovateľná niekoľko dní a planéta len niekoľko hodín. Pre lepšiu predstavu pomôže ilustrácia na *Obr. 22*. Vidíme dve zobrazené polohy planéty. Viac vpravo na orbite je znázornená planéta s obežnou periódou 61,54 dní, teda s rovnakou periódou ako je rotačná perióda hviezdy v prípade škvrny. Zatiaľ čo škvrna je pozorovateľná, vidíme že planéta je už dávno mimo tranzit. Druhá poloha planéty je tá, v ktorej pozorujeme tieň planéty na rovnakom mieste ako je škvrna a teda aj zjasnenie v tranzite bude na rovnakom mieste. Práve v tejto polohe by sa musela nachádzať planéta v Brettonovom pozorovaní.



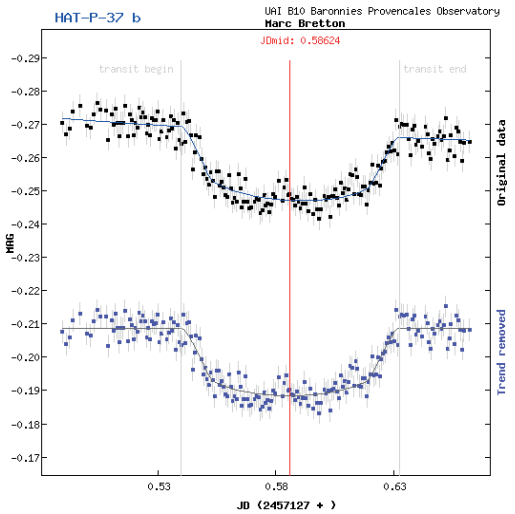
Obr. 22: Znázornenie planéty s rovnakou obežnou periódou ako rotácia hviezdy (vpravo) a planéty, ktorej zodpovedá tieň na hviezde (v strede)

Je teda možné zrátať si dĺžku, o ktorú sa posunie planéta na svojej orbite tak, aby jej tieň sedel s pozorovanými miestami zjasnenia v tranzitoch. Ako bolo spomenuté v prípade škvrny ide o posun o $\frac{1}{19}$ rotácie hviezdy. Z toho pre kolmý priemet do roviny pozorovateľa x

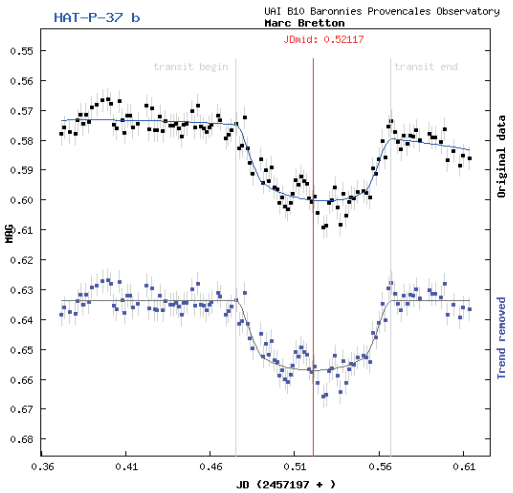
$$sin\alpha=\frac{x}{R_{\odot}} \qquad (9)$$

kde uhol α je spomínaná $\frac{1}{19}$ z 360° a $R_{\odot}$ je polomer hviezdy. x je vzdialenosť, ktorú musí prejsť planéta, aby sa jej tieň posunul do požadovanej polohy. Medzi našim a Brettonovým pozorovaním prešlo spomínaných 45 obehov známej planéty. Medzi našim a Kotnikovým, kedy bolo pozorované zjasnenie na rovnakom mieste, to bolo 22 obehov. To znamená, že aj po 44 obehoch by bolo pozorované zjasnenie na rovnakom mieste a teda k posunu došlo za jednu periódu 2,7974 dňa. Tiež musí platiť, že tento posun je $\frac{1}{22}$ celkovej orbity druhej planéty, keďže má platiť, že po 22 periódach musí súčet posunov vytvoriť celú orbitu. Podmienka $\frac{1}{22}$ celkovej orbity naznačuje, že musí ísť o veľmi blízku orbitu a teda aj krátku

periódu. Vzhľadom na zadané podmienky existujú dve možné periódy: *0,7* a *0,9 dňa*. Dôvodom prečo sú dve, sú hlavne neznáme parametre systému. Aby to bolo dobre objasnené, je nutné si spraviť miernu odbočku. Po podrobnom prehľadaní databázy niekoľko rokov dozadu, boli objavené ďalšie dva tranzity od Brettona na *Obr. 23* a *Obr. 24*, kde bolo viditeľné zjasnenie. Dátumy pozorovaní sú 27.5.2015 a 24.6.2015. Obe zjasnenia sú na približne rovnakom mieste a počas obdobia medzi nimi spravila známa planéta 25 obehov, čo zodpovedá 69,936 dňa. Oproti roku 2017 kedy medzi našim a Brettonovým pozorovaním prešlo 61,544 dňa ide o nárast. Medzi našim pozorovaním a pozorovaním z roku 2015 prešlo 719 dní, teda 257 obežných periód známej planéty. Je to však sedemnásobok hodnoty 65,364. To sa nachádza medzi hodnotami z roku 2015 a 2017, a ide o priemernú hodnotu. Takže to vyzerá, že sa perióda druhej planéty skracuje. Ešte si treba uvedomiť, ako by vyzerala svetelná krivka v prítomnosti druhej tranzitujúcej exoplanéty s krátkou periódou. Namiesto zjasnenia by bol pozorovaný pokles jasnosti uprostred tranzitu známej planéty, ako druhá planéta zakryje časť disku hviezdy, opätovný nárast jasnosti na hodnotu bez prítomnosti planéty, ako planéta zájde za známu planétu a nakoniec druhý pokles ako planéta vyjde z tieňa známej planéty. Niečo takéto je skutočne pozorované na *Obr. 23* a *Obr. 24* a vysvetlilo by to aj poklesy jasnosti pred nárastom v Kotnikovom pozorovaní a Brettonovom pozorovaní z roku 2017.



Obr. 23: Brettonové pozorovanie z ETD z roku 2015



Obr. 24: Brettonové pozorovanie z ETD z roku 2015

Malo by to však aj ďalší dôsledok overiteľný v databáze exoplanét. Pri *použitých metódach* bolo ukázané, že polomer planéty sa určuje priamo z hĺbky poklesu jasnosti v tranzite. To znamená, že v dôsledku dvoch poklesov (výsledný fit je posunutú ich vplyvom nadol) by mali v týchto pozorovaniach vychádzať väčšie hodnoty pre polomer známej planéty ako v pozorovaniach bez poklesov. Ide teda o dobrý spôsob, ako rozlíšiť medzi zjasnením, teda škvrnou a medzi poklesmi jasnosti, teda planétou. Skutočne sa pozoruje v týchto pozorovaniach nárast hodnôt pre polomer známej planéty, čo je vidieť v *Tabuľke 5* a to naznačuje prítomnosť druhého telesa v systéme. Do tabuľky boli vložené iba tie pozorovania, ktoré dosahujú dostatočnú presnosť na to, aby hĺbka poklesu bola dostatočne presne určená. Krivky z Obr. 23 a Obr. 24 neboli použité, pretože hĺbka očividne nezodpovedá koncu tranzitu. Boli teda použité len 3 pozorovania s poklesom/zjasnením z roku 2017. Priemerná hodnota pre polomer planéty je 1,303 R_{Jup} pre pozorovania s poklesom/zjasnením a 1,253 R_{Jup} pre pozorovania bez javu. Navyše v prípade škvrny by zjasnenie záviselo od použitého filtra, keďže v rôznych vlnových dĺžkach by veľkosť nárastu jasnosti variovala. U planéty by išlo stále o ten istý pokles jasnosti. Naše pozorovanie bolo bez použitého filtra a Brettonové z roku 2017 s filtrom I. Pri modelovaní tvaru svetelnej krivky sme dostali rovnaké parametre pre obe pozorovania. Ak by išlo o škvrnu, dalo by sa predpokladať, že

tieto parametre nebudú rovnaké z dôvodu použitia rôznych filtrov.

Ostatné pozorovania [R_{Jup}]	Pozorovania s poklesom/nárastom jasnosti [R_{Jup}]
1,294	1,289
1,250	1,307
1,263	1,312
1,250	
1,221	
1,250	
1,242	

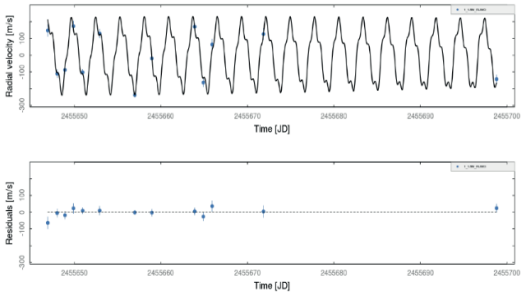
Tabuľka 5: Porovnanie výsledkov pre polomer z pozorovaní, kde bol viditeľný jav v tranzite a kde nebol

Skracovanie obežnej periódy planéty teda naznačuje eliptický tvar. A keďže rýchlosť planéty na eliptickej dráhe variuje s časom, $\frac{1}{22}$ orbity sa nedá určiť presne. Ak napríklad je tranzit niekde v blízkosti perihélia, rýchlosť je tu väčšia ako na zvyšku dráhy, čo by znamenalo, že tranzit predstavuje väčšiu časť orbity ako v prípade konštantnej rýchlosti. V prípade že je niekde v okolí afélia, rýchlosť je tu menšia a znamená to, že tranzit predstavuje menšiu časť. Preto sú dve možné periódy. Ich hodnoty a výsledné parametre sú v *Tabuľke 6*. Ako je vidieť v oboch prípadoch klesol aj chi-kvadrát preloženej funkcie z pôvodnej hodnoty *20,082* pre jednu planétu na hodnoty *8,144* a 6,553 pre planéty dve. Excentricity boli fixované na hodnotu 0. Naznačili sme, že by malo ísť o väčšiu hodnou a takáto hodnota by znížila aj chi-kvadrát, ale išlo by o jej tipovanie. Z toho dôvodu je na nule. Tiež výsledná hodnota pre periódu 0,703 je príliš vysoká. Musí ísť o periódu o niečo menšiu ako je $\frac{2,7974}{4}$, aby planéta za 2,7974 dňa spravila ešte kúsok z ďalšej orbity. Perióda druhej planéty však bola nastavená ako voľný parameter, za účelom nájdenia takej, ktorá by najlepšie popisovala dáta radiálnych rýchlosti. Rozdiel je až na treťom desatinnom mieste a pre druhú periódu 0,919 dňa leží dokonca v chybe pre tento parameter.

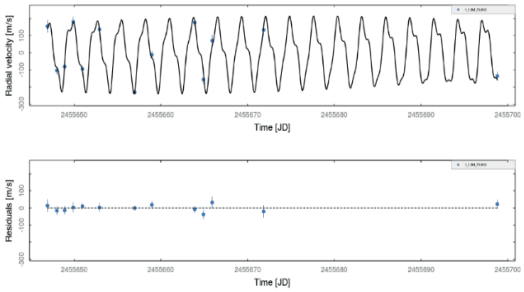
	Planéta b	Planéta c	Planéta b	Planéta c
Perióda [deň]	2,7974	0,703 ± 0,002	2,7974	0,919 ± 0,002
Hmotnosť [M_J]	1,33 ± 0,22	0,22 ± 0,12	1,23 ± 0,14	0,24 ± 0,12
Excentricita	0,20 ± 0,14	0 (fixovaná)	0,19 ± 0,11	0 (fixovaná)
Chi-kvadrát	8,144		6,553	

Tabuľka 6: Výsledné parametre systému pre dve možné periódy

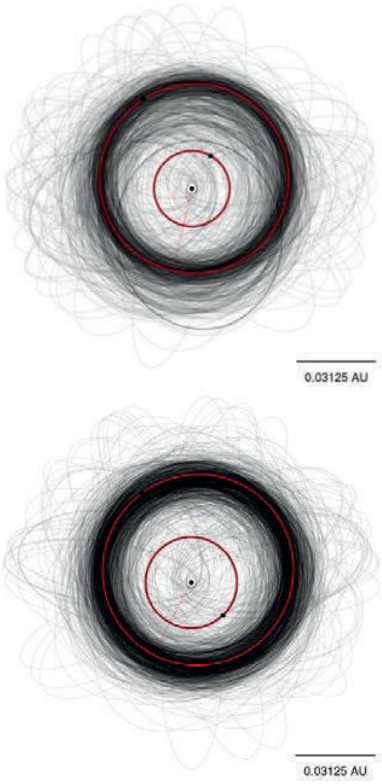
Na *Obr. 25* a *Obr. 26* sú zobrazené krivky radiálnych rýchlosti pre obe periódy, ktoré zodpovedajú určeným parametrom. Na *Obr. 27* sú potom znázornené výsledky získané pomocou bootstrappingu, konkrétne tvary orbít pre oba prípady. Už tu môžeme vidieť, že aj v týchto prípadoch pôvodne zhustenia zmizli a ostalo klasické jedno zhustenie. To je vidieť aj na Obr. *28* a *Obr. 29*, kde sú opäť zobrazené rozloženia parametrov v parametrickom priestore. Konkrétne hmotnosť a excentricita známej planéty a zhustené oblasti zodpovedajú väčšej pravdepodobnosti pre hodnoty parametrov z tejto oblasti.



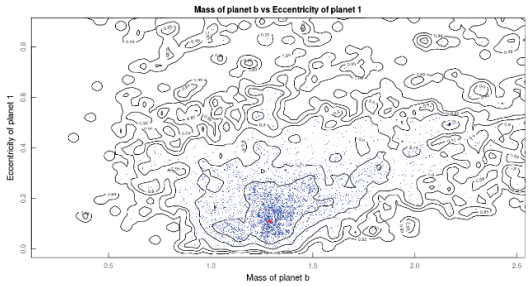
Obr. 25: Modelovaná krivka radiálnych rýchlostí pre periódu druhej planéty 0,703 dňa



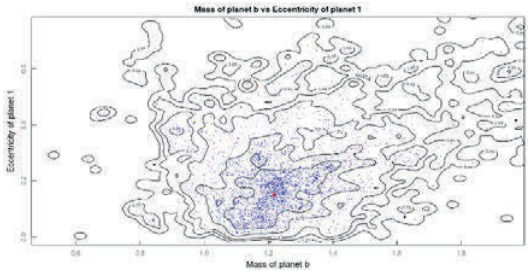
Obr. 26: Modelovaná krivka radiálnych rýchlostí pre periódu druhej planéty 0,919 dňa



Obr. 27: Vykreslených 1000 orbít pre periódu druhej planéty 0,703 dňa (hore) a 1500 orbít pre periódu druhej planéty 0,919 dňa (dole) z bootstrappingu

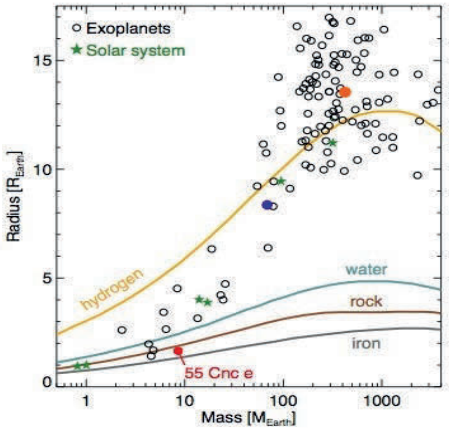


Obr. 28: Rozloženie excentricity a hmotnosti pre planétu b z bootstrappingu pre periódu druhej planéty 0,703 dňa



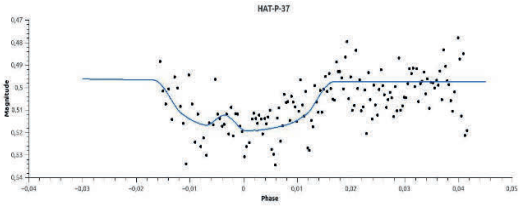
Obr. 29: Rozloženie excentricity a hmotnosti pre planétu b z bootstrappingu pre periódu druhej planéty 0,919 dňa

Na *Obr. 30* je znázornená druhá planéta v „Mass-Radius“ diagrame. Polomer bol určený z hĺbky dvoch poklesov v tranzite na približnú hodnotu 0,75 R_J. Planéta je len o niečo menšia ako Saturn. Je pozitívne, že ide o bežný typ planéty, ktorý sa pozoruje a nie o nejaký teoretický typ s nepozorovanými hodnotami hmotnosti a polomeru.



Obr. 30: Znázornenie oboch planét v „Mass-Radius“ diagrame

Dokážeme predpovedať tranzity, v ktorých by malo byť vidieť zjasnenie. Až takéto pozorovanie by potvrdilo naše predpovede. Takáto možnosť nastáva približne raz za 2 mesiace a zjasnenie je pozorovateľné viacero tranzitov po sebe. Za účelom ich pozorovania vznikla spolupráca s AVCR v Ondřejove, SAV v Tatranskej Lomnici a observatóriom našej fakulty AGO v Modre. Je veľa faktorov ovplyvňujúcich to, či sa môže pozorovať. Sú to napríklad: poloha objektu na oblohe, pozícia Mesiaca na oblohe, čas tranzitu, počasie a iné. Z týchto dôvodov bol pozorovaný len jeden tranzit a to 12.04.2018 v Tatrách. Bol použitý B filter. Ani toto pozorovanie však nebolo ideálne a zhoršovalo ho hlavne počasie. Šum v dátach bol príliš veľký, aby sa z neho dali robiť závery. To vidno na *Obr. 31*.



Obr. 31 Pozorovanie z 12.04.2018 s predpovedaným zjasnením počas tranzitu

Svetelná krivka zodpovedá predpovedi a aj to len v prípade, že neuvažujeme skracovanie periódy orbity. Väčší význam má pozorovať samostatný tranzit druhej planéty. Jej perióda je navyše dostatočne malá, takže zatiaľ čo je spoločný tranzit pozorovateľný len každé 2 mesiace, samostatný je pozorovateľný takmer denne. Z dôvodu neurčitosti periódy a možnému skracovaniu jej hodnoty budú najvhodnejšie celonočné pozorovania hviezdy s tým, že sa pokryje celá orbita planéty. Dokážeme však predpovedať jej približnú polohu a v niektorých nociach vieme pokryť obe možné periódy naraz, preto sú takéto noci najvhodnejšie na prvé pozorovanie.

7. Záver

Z metód extrasolárnych planetárnych tranzitov a radiálnych rýchlostí sme určili parametre systému HAT-P-37. V tranzite sme objavili zjasnenie, ktoré sme najskôr prisudzovali škvrne na hviezde. Dĺžka jej pozorovateľnosti, ako aj nemennosť jej parametrov nás priviedli k predpokladu možnej prítomnosti druhej planéty. S určenými periódami 0,703 resp. 0,919 dňa vieme vypočítať tranzity, v ktorých by malo byť v budúcnosti pozorovateľné zjasnenie. To by malo byť pozorovateľné počas niekoľkých tranzitov po sebe. Z prvého takéhoto pozorovania nie sme schopní robiť závery. Navyše sa ukázalo možné skracovanie periódy, vďaka čomu nie sme schopní robiť presné predpovede a vhodnejšie je pozorovanie samostatného tranzitu pomocou celonočných pozorovaní objektu. V súčasnosti vznikajú spolupráce za týmto účelom. Čo sa týka dát radiálnych rýchlostí, prezentovali sme viacero bodov, ktoré hovoria v prospech dvoch planét. Počet dát je však nedostatočný na presné určenie parametrov a to hlavne druhej planéty, ktorá nemá až taký výrazný vplyv na radiálny pohyb hviezdy ako prvá. Sú teda potrebné dáta s veľkou presnosťou. To sa odzrkadľuje v chybách parametrov. Z toho dôvodu je dôležité spraviť dodatočné merania radiálnych rýchlostí s dostatočnou presnosťou a rozšíriť tak dátový súbor. Aj na tomto bode sa pracuje. Je teda potrebná ďalšia práca na tomto systéme, ktorá môže potvrdiť naše predpoklady a presnejšie určí parametre systému.

Zdroje

[1] Seager, S. *Exoplanets.* Tucson: University of Arizona Press, 2010

[2] Guillot, T. *The composition of transiting giant extrasolar planets*, Physica Scripta, Volume 2008, T130

[3] Pejcha, O. *Exoplanets transit parameters from amateur-astronomers observations*, 2008 (http://var2.astro.cz/ETD/FitProcedureDescription-Pejcha2008.pdf)

[4] Bakos G. A. *HAT-P-34b-HAT-P-37b: Four Transiting Planets More Massive than Jupiter Orbiting Moderately Bright Stars*, The Astronomical Journal, Volume 144, Issue 1, article id. 19, 14 pp. (2012)

[5] Poddaný S. *How to use the Phoebe code to solve transiting exoplanet light curve*, Transiting Planets, Proceedings of the International Astronomical Union, IAU Symposium, Volume 253, p. 398-401 (2009)

[6] ETD - Exoplanet Transit Database (http://var2.astro.cz/ETD/)

[7] NASA Exoplanet Archive, Summary details for Amateur Light Curves (https://exoplanetarchive.ipac.caltech.edu/docs/datasethelp/AXA.html)

[8] Efron, B. and Tibshirani, R.J. (1993). *An Introduction to the Bootstrap*, Chapman & Hall, New York

[9] Price W. H., et al. 1992, Numerical Recipes in C

[10] Solanki S. K., *Sunspots: An overview*, The Astron Astrophys Rev (2003) 11: 153–286

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 195–207
ISBN 978-8081470882, © 2018 Martin Baláž

Numerical meteor simulation as a means of debiasing AMOS data

Bc. Martin Baláž*

Supervisor: doc. RNDr. Juraj Tóth, PhD.†

Department of Astronomy, Physics of the Earth, and Meteorology, FMPH, Comenius University, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstract: Deployment of multi-station video meteor networks presents a unique opportunity to measure the total mass flux of meteoroids impinging on the surface of the Earth. However, direct measurement of particle flux is not possible as the data are heavily distorted by selection bias. We present a method for debiasing the data using a simulation of meteoroid particles entering the atmosphere. The trajectory of each virtual meteoroid is tracked and after application of biases the resulting meteor observation is recorded. Once a sufficiently large dataset is obtained, statistical tests are performed and the distributions are compared to observational data from AMOS camera network. The entire procedure is repeated and the parameters of the simulation are gradually adjusted until best possible agreement with observational data is found.

Keywords: meteoroid, meteor, flux, observation, simulation

1 Introduction

This article is a comprehensive description of a simulation program developed for scientific investigation of meteoroid particles and is used in my master's thesis, "Determination of Total Meteoroid Flux in Millimetre to Metre Size Range" [Baláž, prep]. The thesis presents two distinct approaches to the problem of debiasing the observed meteor population and subsequent estimation of total meteoroid flux.

The first method is based on sequential identification and elimination of possible sources of bias. Each identified effect is measured and adequate corrections are applied to raw data. True mass flux and its standard deviation are then estimated.

In the second method, the entire population is simulated numerically and all considered sources of selection bias are applied to the dataset. In the next step, projections of the meteors are calculated as they would be observed from each of the ground stations of the AMOS camera network. The resulting dataset is then evaluated and tested statistically. The same statistics are calculated for the data obtained in real-world AMOS observations and compared. The parameters of the simulation are then adjusted and the whole dataset is re-generated repeatedly until best possible agreement with observational is found.

This submission outlines the theoretical background of the simulation and describes its reference implementation.

1.1 AMOS

Since 2007, the Department of Astronomy and Astrophysics of DAPEM FMPH CU operates a network of all-sky video cameras designed for long-term recording of meteors named AMOS [Tóth et al., 2015]. As of 2018, eight stations are in operation: four in Slovakia, two on Canary Islands and two in Chile.

Each station consists of a digital video camera, an image intensifier, a wide angle fish-eye lens and various auxiliary mechanical and electronic components effecting the reliable operation of the system. The sky is monitored constantly every night as long as meteorological conditions are favourable.

The field of view of the cameras is centered on zenith and measures approximately 180° by 140°. As the atmosphere at low altitudes is thick, light travelling to the camera from meteors visible near the horizon is significantly attenuated. Only very few meteors are outside the covered area and the resulting loss of overall detection ability is minimal.

The captured video sequences are processed by the UFOAnalyzerV2 software package. Objects that are not meteors, such as aeroplanes, satellite flares, flying insects and the like are iden-

*martin.balaz@trojsten.sk
†juraj.toth@fmph.uniba.sk

tified and discarded from the final data. Naturally, the processing software is not infallible and occasionally reports these objects as meteors, or conversely fails to identify a visible meteor. After a meteor is identified, the video sequence is stored and analyzed. Properties of the meteor are computed for every frame of the video sequence, such as its position on the sky, apparent velocity vector, brightness and angular speed. Various auxiliary data are stored as well.

Under excellent conditions, such as those on Canary Islands, each station is able to detect approximately 20,000 meteors per year. Multi-station observations are somewhat less frequent, with each pair of stations being able to correctly match about 8000 meteors every year. With two or more simultaneous observations from different locations it is possible to determine the geocentric and heliocentric velocity vectors and derive the original heliocentric orbit of the meteoroid particle.

1.2 Motivation

While data collected by AMOS are not particularly precise when compared to those recorded by high-resolution photographic cameras, the high sensitivity of the system and the long-term nature of its operation result in a large database of meteor records that can be used for statistical analyses.

Such extensive datasets are well suited for a multitude of tasks, such as identification of less prominent meteor showers or the determination of total flux of meteoroid particles impinging on the surface of the Earth. These are often much more difficult to accomplish using traditional methods.

As the system operates automatically, data are available in real time and may be used for monitoring of short-term meteor activity outbursts. Such data are highly valuable for space agencies and also contribute to our understanding of the dynamics of the Solar System.

The system is able to observe meteors with apparent magnitude down to 5^{m}. While there is no practical upper limit on brightness, very bright meteors are observed infrequently and thus are not very suitable for statistical analyses.

2 Physics of meteor flight

The development of the simulation begins with detailed understanding of the physics of meteor flight in the upper atmosphere. In the simulation we use the standard single-body model of meteor atmospheric flight conceived by Ernst Öpik [Öpik, 1958] and gradually improved by many others [Ceplecha et al., 1998].

The version used in the simulation is one of the simplest suitable models and as such should not be used for high-precision calculations, such as simulation of dark flight of meteorites or for precise determination of heliocentric orbits. Effects of fragmentation, heterogeneity of the particles and variations in chemical composition and physical properties are also not taken into the account.

2.1 Equations of motion

The motion of the meteoroid particle in the thermosphere is described by the following equations of motion. It is a set of interdependent differential equations which must be solved numerically.

2.1.1 Braking equation

The first important effect of atmosphere on the meteoroid particle upon its entry is the change of velocity, caused by collisions with atmospheric molecules in thermosphere. While the atmosphere exerts a multitude of forces on the entering meteoroid particle, they are dominated by the drag force, acting in the direction opposite to the meteoroid's velocity vector.

For small bodies at high velocities the influence of the Earth's gravity is negligible, as they ablate completely in a very short time. Forces with components perpendicular to the direction of the flight, such as aerodynamic lift or rocket effect caused by outgassing, can also be ignored. These assumptions are justified as long as we limit the simulation to small particles which do not survive the atmospheric entry, and only consider entry speeds much greater than the escape speed at any given altitude. Both conditions hold well for most meteoroid particles observed by intensified CCD cameras.

Thus, for the purpose of the simulation we assume that each meteoroid particle always moves

in a straight line and is only subject to deceleration caused by aerodynamic drag. We consider the standard form of the aerodynamic drag equation:

$$ma \equiv m\dot{v} = -\Gamma S \rho_{\text{air}} v^2, \tag{1}$$

where

- m is the instantaneous mass of the meteoroid particle (kg),
- Γ is the drag coefficient (dimensionless),
- S is the cross-sectional area of the particle in the plane perpendicular to its velocity vector (m^2),
- v is its speed relative to the surrounding medium (ms^{-1}).

Note that while Γ is said to represent the shape of the particle, it is not necessarily constant during the flight. It also depends on the properties of the particle's surface, its attitude and various properties of the environment, such as Reynolds number (the ratio of inertial and viscous forces acting on the fluid surrounding the particle), air density and pressure. Its typical values are on the order of unity. $\Gamma \approx 0.47$ corresponds to a spherical body in a flow with Reynolds number 10^4 [NASA, 2015]. Values between 0.4 and 0.8 are typical for real meteoroid particles.

We may express S in terms of a dimensionless coefficient of shape A, which is independent of the size of the particle; mass of the particle m and its (constant) density ρ. This means that explicitly calculating the cross-sectional area is no longer necessary during the simulation.

$$S = AV^{2/3} = \frac{Am^{2/3}}{\rho^{2/3}}, \tag{2}$$

where V denotes the particle's volume. After dividing by m and substituting for S, equation 1 takes the form

$$\dot{v} = -\frac{\Gamma A}{m^{1/3}\rho^{2/3}} \rho_{\text{air}} v^2. \tag{3}$$

If the atmosphere is calm, v is always equal to the magnitude of the particle's geocentric velocity $\vec{v}$. With meteors this assumption is well justified, since $v_{\text{air}} \ll v$. Finally, for the purposes of the integrator a small change of velocity $\text{d}v$ can be isolated:

$$\text{d}v = -\frac{\Gamma A \rho_{\text{air}} v^2}{m^{1/3}\rho^{2/3}} \text{d}t. \tag{4}$$

2.1.2 Equation of ablation

In the model we assume that all of the available kinetic energy is converted to thermal energy and used to evaporate the material of the particle. This approximation is justified as long as the specific heat of vaporization is much greater than the thermal capacity of surrounding air. The equation takes the form

$$\dot{m} = -\frac{\Lambda}{2Q} S \rho_{\text{air}} v^3, \tag{5}$$

where

- Λ is the heat transfer coefficient (dimensionless);
- Q is the specific enthalpy of vaporisation of meteoroid material ($\text{Jkg}^{-1} \equiv \text{m}^2\text{s}^{-2}$).

In real objects most of these quantities vary wildly on scales far smaller than the typical dimension of the particle. Naturally, such precision is meaningless in the simulation, so only constant values are considered. Either fixed mean values are used for the entire simulation, or each new particle is assigned a value randomly drawn from a pre-defined probability distribution.

Once again, for the numerical simulation we need to isolate the change of mass $\text{d}m$ in a small time interval $\text{d}t$:

$$\text{d}m = -\frac{\Lambda}{2Q} \frac{Am^{2/3}}{\rho^{2/3}} \rho_{\text{air}} v^3 \text{d}t. \tag{6}$$

2.1.3 Equation of luminance

In order to determine the apparent brightness of a simulated meteor, its absolute brightness must be calculated first. For the sake of simplicity we assume a constant fraction of total released energy is emitted as visible light, as opposed to energy lost to the atmosphere or consumed in heating and evaporating the body:

$$\Phi_e \propto \frac{\text{d}E_{\text{kin}}}{\text{d}t}. \tag{7}$$

where Φ_e denotes the total isotropic radiant flux over all visible wavelengths of the elecromagnetic spectrum.

The constant of proportionality is usually denoted τ and named luminous efficiency factor [Hill et al., 2005]. Most of the particle's kinetic energy is transformed to heat and ionization of atoms and only a very small fraction is emitted as visible light. Luminous efficiency is usually considered to be a function of speed and meteoroid material [Jones and Halliday, 2001]. Since we assume a homogeneous composition for each meteoroid, in each flight simulation τ is solely a function of speed and as such must be recomputed in every integration step. Its typical values are on the order of 10^{-2}.

[Jones and Halliday, 2001] defined the excitation coefficient ζ, which represents the sum of all excitation probabilities over collisions and obtained the following relationship between ζ and τ:

$$\tau = \frac{2\varepsilon\zeta}{mv^2}, \tag{8}$$

where ε is the mean excitation energy. For estimation of ζ we used a slightly improved version of the model compiled by [Hill et al., 2005]. To obtain the total flux of emitted visible light F_0, we take the time derivative of the particle's kinetic energy. Neglecting the second (deceleration) term yields the following equation of luminance:

$$F_0 = \tau(v)\frac{\Lambda}{4Q}\rho_{\text{air}}v^5. \tag{9}$$

With this knowledge we are able to calculate the total luminous power of the meteor and subsequently its absolute magnitude.

2.2 Supplementary quantities

In addition to the properties of the meteoroid particle itself, the simulator needs to know various properties of the environment or the observer.

2.2.1 Atmospheric density

The density of the air ρ_{air} appears in all of the above equations and must be calculated before any equations of motion can be solved. At the altitudes where meteors occur the standard isothermal approximation no longer holds.[1] Therefore it is necessary to use a more precise model.

High-order polynomial fitting atmospheric models, such as those found in [Braeunig, 2014] and [NOAA, NASA and USAF, 1976], are sufficiently precise, however, since air density must be calculated in every iteration of the integrator, their use is prohibitively expensive.

In order to reduce computation time we used a simple and fast tabular approximation of the NASA Mass-Spectrometer-Incoherent-Scatter Extended 1990 (MSIS-E-90) atmosphere model [Community Coordinated Modeling Center, 1990]. Values were tabulated by 1 km and interpolated by a piecewise exponential function. The results of this approximation differ from true values in the model less than one part in ten thousand, which greatly exceeds the required precision.

2.2.2 Coordinate transformations

To achieve highest precision Astropy's built-in `EarthLocation` class should be used. The positions are internally represented as three-dimensional Cartesian vectors. Human-readable output and altitude calculations are obtained after transforming the coordinates to the `WGS84` geoid.

However, computation time can be drastically reduced if the Earth is modelled as a sphere. Since flattening of the Earth spheroid is only approximately 1/298 [NIMA, 2000], this approximation does not result in significant errors compared to other simplifications we have already made. It should be noted that the error also depends on the distance between the meteor and the observer, which is always much less than the radius of the Earth; and the total error is thus negligible.

2.2.3 Angular speed

The calculation of perceived brightness also requires taking angular speed into account. Light from faster meteors is spread on a larger number of CCD pixels, lowering the signal-to-noise

[1] At 100 km, isothermal atmosphere overestimates density by a whole order of magnitude compared to the output of a high-precision model [Community Coordinated Modeling Center, 1990].

ratio and thus also the probability of a successful detection, see figure 1.

In the context of meteor motion, angular speed means the apparent length of the projection of the meteor's true velocity vector onto the celestial sphere. Let us denote this vector $\vec{v}$ and let $\vec{r}$ be the position of the meteoroid with respect to the observer. The projection onto a spherical sky can be represented as the projection onto a plane perpendicular to $\vec{r}$ and passing through the meteoroid, which we will denote $\mathrm{rej}_{\vec{r}}\vec{v}$.[2]

For any two vectors $\vec{r}$ and $\vec{v}$, $\vec{v}$ is the sum of its projection and rejection onto $\vec{r}$:

$$\mathrm{proj}_{\vec{r}}\vec{v} + \mathrm{rej}_{\vec{r}}\vec{v} = \vec{v}. \tag{10}$$

The projection vector can be obtained easily using dot product as

$$\mathrm{proj}_{\vec{r}}\vec{v} = \frac{\vec{r}\cdot\vec{v}}{r}\cdot\frac{\vec{r}}{r} = \frac{\vec{r}\cdot\vec{v}}{r^2}\vec{r}. \tag{11}$$

Putting these equations together we obtain the formula for apparent angular speed,

$$\omega = \frac{\left|\vec{v} - \frac{\vec{r}\cdot\vec{v}}{r^2}\vec{r}\right|}{r}. \tag{12}$$

3 Algorithm

With full knowledge of underlying equations, we may proceed to designing the simulation algorithm.

3.1 Generating the meteoroids

The first step of the simulation is to create the initial population of meteoroid particles entering the atmosphere. At this point, we pretend not to know anything about observers and are only concerned with physical representations of virtual meteoroid objects.

To reduce the size of the possible parameter space, we fixed the values of most parameters that are known [Hill et al., 2005] or can be determined experimentally, such as the

- heat transfer coefficient λ (0.5),
- specific heat of vaporizarion Q (8 $\mathrm{MJkg^{-1}}$),
- coefficient of shape (0.47).

[2]The projection of $\vec{v}$ onto the plane perpendicular to $\vec{r}$ is also called the rejection of $\vec{v}$ onto $\vec{r}$ [Perwass, 2008].

3.1.1 Initial masses

First of all the particles are assigned their initial mass. Meteor showers are typically described by the mass population index s. The differential spectrum of masses follows a power law:

$$N(m) = m^{-s}, \tag{13}$$

with typical values of s being 1.5–2.5. Since this distribution is divergent for $m \to 0$, we also need to establish the lower bound on meteor masses m_{min}. This requirement effectively yields a Pareto I distribution with s as the parameter of shape and m_{min} as the scale of the distribution. In real meteor showers the mass population index may vary slightly throughout the spectrum.

3.1.2 Initial positions

Each meteoroid particle is assigned a starting position within a predefined geographic area. Its precise bounds are not important and may be chosen somewhat arbitrarily, as long as several conditions hold:

- The entire sky visible from each station must be covered. Setting the bounds too close to the observers will result in less generated meteors in that direction, especially near the horizon. This would introduce undesirable skewing to the observed distribution.
- The total area should be as small as possible. If the area is too large, most meteors will be never registered after atmospheric extinction and other effects are applied, while the required computation time stays roughly the same as with registered meteors.
- The shape of the area should be simple. Sampling the source distribution should be a straightforward process.

Setting an artificial limit on the statistics, for instance requiring the altitude to be at least 15°, simplifies fulfilling these conditions significantly. The minimum required area is also easier to calculate this way.

Two simplest shapes are a spherical rectangle[3]

[3]By this we mean a true rectangle, ie. a figure with four right angles, bounded by two parallels and two meridians. "Spherical rectangle" usually refers to a shape whose four angles are equal, but necessarily larger than 90°.

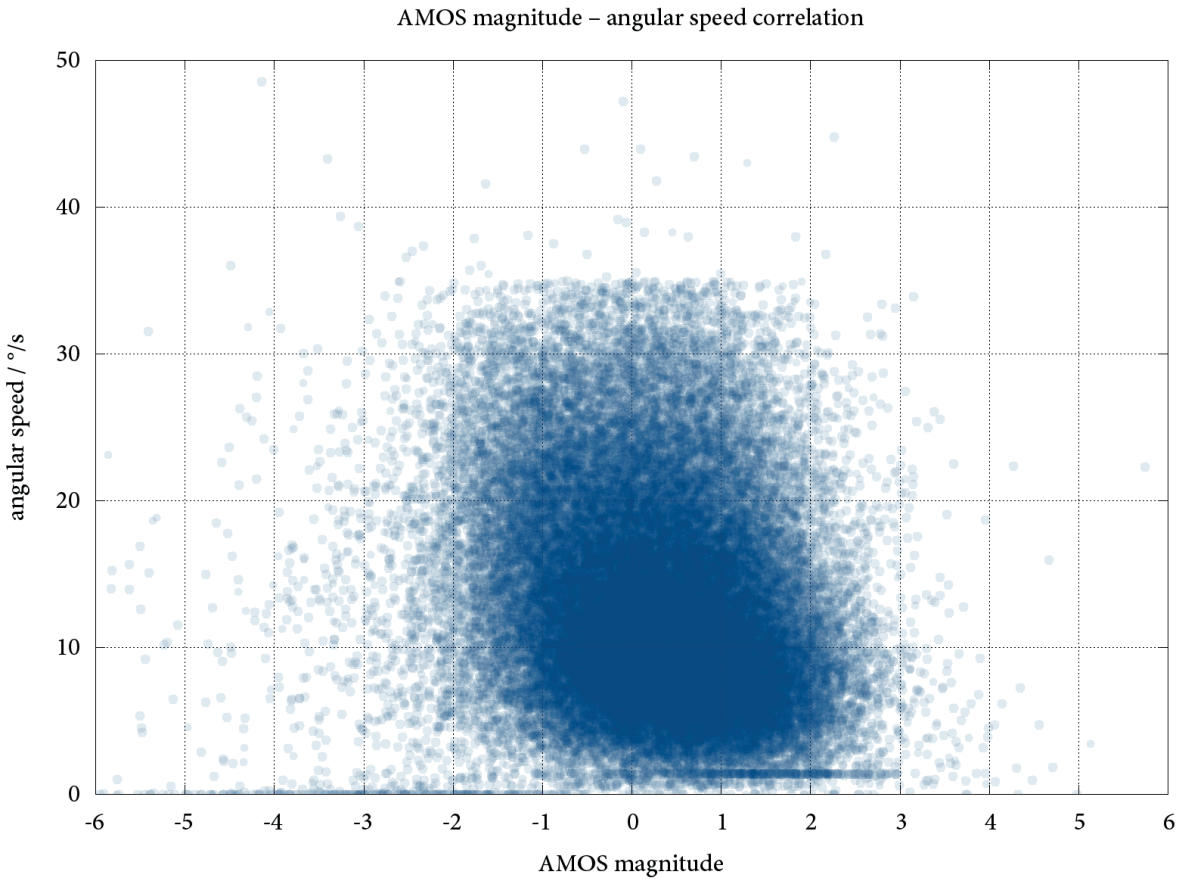


Figure 1: The plot of correlation between the apparent magnitude of the meteor and its maximal angular speed. Various selection bias are well visible: software discriminator cut-off at 35 $^{\circ}s^{-1}$, and false positives (satellites in low Earth orbit, a thick line at lower right). The weak correlation between angular speed and apparent magnitude can also be observed. Lack of bright meteors (left third of the graph) is mostly caused by their relative scarcity, while apparent low frequency of observations of dim meteors (right third of the graph) is explained by low sensitivity of the system. The plot was constructed from real-world AMOS data.

and a circle. A slight disadvantage of the rectangle is that the distribution cannot be sampled as two independent uniform distributions, since this would result in more meteoroids being generated at the side closer to the pole.

This excess can be described in terms of geographic latitude ϕ. On a spherical Earth the length of a parallel is equal to $R\cos\phi$: if meteoroid longitudes are sampled from a uniform distribution, the excess will be proportional to $\frac{1}{\cos\phi}$.

To correct the distribution and obtain a constant particle density on the entire covered surface, we might discard the excess meteoroids immediately. This can be achieved simply by accepting particles with probability p_a, proportional to the length of the intersection of the area and the parallel where the meteoroid was placed upon generation. With a spherical rectangle this probability is

$$p_a(\phi) = \cos\phi. \tag{14}$$

A slight performance increase can be achieved by normalizing the density to the length of the parallel closest to the equator. All meteoroids generated at this boundary will be accepted, resulting in less wasted computation time. Equa-

tion 14 then transforms to

$$p_a(\phi) = \frac{\cos\phi}{\cos\phi_0}, \tag{15}$$

where ϕ_0 is the latitude of the parallel closest to the equator.

For meteor showers we also need to include the effects of the altitude of the radiant. Higher altitudes (or conversely, lower zenith distances) result in a larger effective projection area. The effect is proportional to the sine of the radiant altitude.

Once again, we may solve this by accepting generated meteors with probability p_r, which varies with altitude of the radiant at the time of the atmospheric entry at the position of the meteor above the Earth's surface. Of course, it must be computed for each meteor independently.

$$p_r = \cos\theta_r, \tag{16}$$

where

- $\theta_r(\phi,\lambda,t)$ is the altitude of the radiant at the time of the entry,
- ϕ is the latitude of the meteoroid particle,
- λ is the longitude of the meteoroid particle,
- and t is the time of the entry.

The probability that a generated meteoroid will be accepted and simulated is determined by the product of probabilities 15 and 16.

3.1.3 Initial velocities

In the next step we need to assign the particles their initial velocities. There are two distinct approaches to this problem, depending on whether the program simulates a particular meteor shower or the sporadic background.

Simulating the sporadic background would be significantly more challenging. The apex, antapex and anthelion sources present different flux densities, which change with time and location. With meteor showers the situation is substantially simpler: all particles share a common parent body, which translates to a common radiant and similar atmospheric entry speeds. On the contrary, sporadic background exhibits a relatively constant average flux, while intensities of meteor showers vary considerably even on short time scales.

Naturally, the real observed distribution includes both sources simultaneously. In the simulation we only considered meteor showers with constant radiant with respect to the geocentric equatorial coordinate system. The transformation to an ECEF[4] coordinate system is fairly straightforward and already implemented in Astropy.

Note that while initial velocities of the particles in the simulation are not equal to their true geocentric velocities, as would be observed outside the gravitational influence of the Earth.

Simulations of sporadic background meteors are planned to be done later.

3.1.4 Atmospheric entry

Once the initial position and velocity are set, atmospheric entry may be simulated and recorded. In section 2 we obtained a system of interdependent differential equations, which can be solved numerically.

Two solvers have been evaluated. The semi-implicit Euler integrator is much easier to implement and requires significantly less time to evaluate one step, but requires a large number of steps to achieve sufficient precision.

A fourth-order Runge-Kutta solver is more precise but also more difficult to implement, especially since the mass of the meteoroid is changing during the simulation. Considerable effort has been made to ensure the solver produces correct results.

The frequency of the captured frames is equal to the frame rate of real AMOS cameras. In Slovakia, the frame rate is fixed at 15 frames per second. This does not necessarily equal the time step taken by the integrators, as multiple small steps may be taken between two successive frames. The interpolating steps are discarded and only 15 frames per second are selected for further analysis.

In practice, we found that the precision of RK4 integrator does not increase noticeably if integration step is set to less than 1/75 of a second; while

[4] Earth-Centered, Earth-Fixed – a terrestrial coordinate system, rotating with the Earth, as opposed to a nonrotating celestial coordinate system

computation time is still acceptable.

3.2 Processing the observations

In the next step each meteoroid is observed – its projection on the sky is computed for each of the observing stations, along with its apparent luminosity and other important properties as observed in each frame.

3.2.1 Calculation of projection

Meteor projections are computed independently for each observer. The geographic coordinates of the meteoroid are first transformed to an observer-centered altitude-azimuthal coordinate system. As a spherical Earth model is used, this is done easily by several matrix transforms. AMOS cameras display the sky in an equidistant polar projection: each degree of altitude is transformed to equal radial distance on the CCD. This simplifies plotting the observed meteors, as a 2D polar chart may be used without any further adjustments.

To establish the apparent brightness, luminous flux at the location of the observer is calculated. The total luminous power in each frame is divided by the area of the surface of a sphere with radius equal to the distance between the frame and the observer to obtain luminous flux in watts per square metre:

$$I_{\text{vac}} = \frac{F_0}{4\pi d^2}. \tag{17}$$

This value is further reduced by atmospheric extinction (see figure 2). Extinction is described in terms of relative air mass X, which is a dimensionless quantity that specifies the ratio of optical thickness in the direction of the observed object to the optical thickness in zenith:

$$X = \frac{\int\limits_{\text{observer}}^{\text{object}} \kappa(s)\rho_{\text{air}}(s)\mathrm{d}s}{\int\limits_{\text{observer}}^{\text{zenith}} \kappa(s)\rho_{\text{air}}(s)\mathrm{d}s}. \tag{18}$$

High precision air mass models have been developed, such as [Kasten and Young, 1989]. The decrease in brightness is exponential and the resulting observed luminosity is $e^{-\beta X}$ for some constant β. This constant must be determined experimentally. If we assume that the atmospheric effects make a meteor in zenith ($X = 1$) appear about 20 % dimmer, β must be equal to $-\ln(1-0.2) \approx 0.288$.

Putting all effects together we obtain the apparent brightness equation for the observer,

$$I = \frac{F_0}{4\pi d^2} e^{-\beta X}. \tag{19}$$

Finally, the apparent brightness should be converted to a visual magnitude. As the magnitude scale is logarithmic with base $10^{-2/5}$, the transformation may be written as

$$\begin{aligned} m &= -2.5 \log I \\ &= -2.5\,(\log A F_0 - 2\log d - \beta X \log e - \log 4\pi) \\ &= -2.5 \log A - 2.5 \log F_0 + 5 \log d + k_1 \beta X + k_2, \end{aligned} \tag{20}$$

where

- $k_1 = 2.5 \log e \approx 1.086$,
- $k_2 = 2.5 \log 4\pi \approx 2.75$
- and A is a conversion factor. Object with total luminous power A at a distance of 1 m in vacuum has an apparent brightness of 0^{m}. If we approximate the meteor spectrum with a solar one, the value of $-2.5 \log A$ translates to approximately –19.9.

3.2.2 Application of selection bias

After all natural effects have been applied and apparent position and magnitude have been computed, we need to simulate the instrumental effects, introduced by the detection apparatus.

Various sources of selection bias, such as the software detection ability, scintillation of the optical intensifier, vignetting etc. have to be accounted for. For further details refer to [Baláž, prep]. We assumed a sigmoid profile of the detection efficiency curve:

$$D(m) = \frac{f}{1 + e^{\frac{m-m_0}{\omega}}}. \tag{21}$$

where

- m_0 is the limiting magnitude, defined as the point where detection efficiency is equal to half of its maximum.

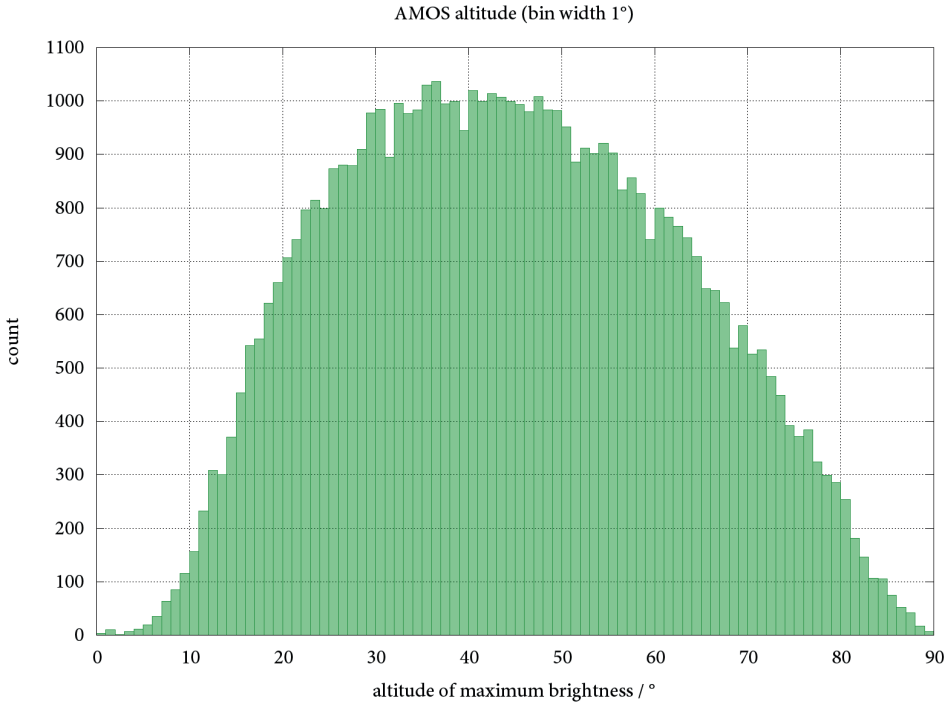


Figure 2: The plot of correlation between the altitude at the time of maximum brightness and the apparent magnitude of the meteor. There are few meteors near the zenith (90°) as the geometric are of the sky here gets progressively smaller. The lack of meteors near the horizon (0°) is explained by large values or air mass X. Light from most meteors is attenuated far beyond the detection limit. Again, this plot displays real AMOS data.

- ω denotes the width of the distribution. Small values correspond to a sharp detection efficiency falloff near the limiting magnitude.

- f is the fill factor: the upper limit of the system's detection ability. Random occurrences, such as discriminator failures, power outages and similar problems may prevent the detection even under otherwise perfect conditions. Thus even for very bright bolides detection is not always assured.

The exact shape of the detection efficiency profile was derived from observational data. In the dimmer part of the apparent luminosity spectrum (-2^{m}–5^{m}), two nights of simultaneous observations by two AMOS cameras and seven human observers were analyzed. Only meteors captured by human observers were taken into account. We investigated all visual meteor records and paired them with automated records by timestamp with one second precision. The fraction of meteors successfully captured by AMOS was recorded and plotted.

These data did not include any meteors brighter than -2^{m}. Bolide data were obtained from long-term simultaneous observations with AMOS cameras and photographic plates at AGO Modra. We asserted that the photographic plate is a perfect observer and searched for corresponding records in AMOS databases. Again, we ignored all AMOS reports of bolides that were not captured on photographic plates. The data were collected at AGO Modra between 2010 and 2016. AMOS registered 57 out of 67 bolides recorded on the plates.

After putting both data sources together we fitted the observed distribution with function 21.

4 Reference implementation

The described algorithm has been implemented and tested in a suite of scripts named Asmodeus.

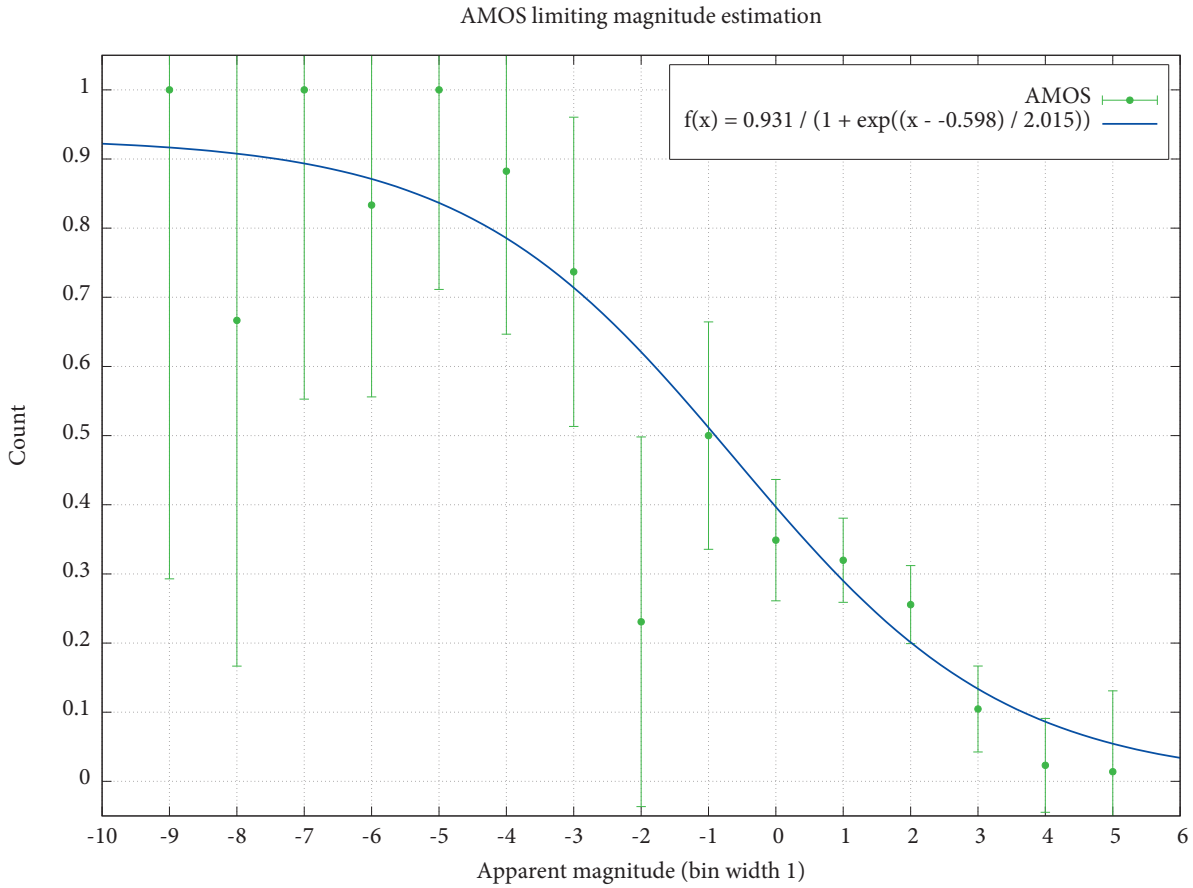


Figure 3: Detection efficiency falloff curve. Bin width 1^{m}, error bar size is $\frac{1}{\sqrt{N+1}}$, where N is the number of observed meteors in the bin. Limiting magnitude is $\mu \doteq -0.6$, falloff rate is $\omega \doteq 2$, and fill factor reaches over 93 %.

The name is a free acronym of All-sky Meteor Optical Detection Efficiency Simulator. Asmodeus is written in Python 3 and uses the Astropy library.

Asmodeus consists of a core and four front-end scripts built around it. Each of the scripts has a separate function. The scripts are usually chained: the output of one script is used as the input of the next one.

4.1 Models

As Python is an object-oriented language, it is useful to store data in structured objects. The simplest viable model consists of five classes:

4.1.1 `Observer`

This class stores data of a single AMOS camera station on the ground: its geographic coordinates and its altitude.

4.1.2 `Meteor`

The `Meteor` class describes the physical event of a meteoroid particle entering the Earth's atmosphere. It essentially consists a collection of `Frame`s. Initial properties of the meteoroid are also stored for the purpose of statistical evaluation in the last stage.

4.1.3 `Frame`

The `Frame` object stores properties of the meteoroid, such as position, velocity, mass, rate of

ablation, luminous power, etc.; at a given point in time. A `Frame` only stores objective physical data, and is completely observer-independent.

4.1.4 `Sighting`

This object describes a single sighting or observation of a given `Meteor` by one of the `Observer`s. As such, it stores positions in an observer-centered topocentric coordinate system, the apparent magnitude of the meteor as seen from the position of the camera, and so on.

4.1.5 `SightingFrame`

The `SightingFrame` is the observational counterpart of a `Frame`: it stores observer-specific information about the particle at a given time, such as its position on the sky, apparent angular speed, its apparent magnitude and so on. The link to the underlying `Frame` object is preserved, so that it is possible to display objective information related to the particle, such as its mass or luminous power.

4.2 Operation

Each script loads its configuration data from a common configuration file in `YAML` format. Certain parameters may be overridden using command-line arguments.

4.2.1 `asmodeus-generate.py`

The purpose of the first script is to generate and store a population of `Meteor` objects and their associated `Frame`s.

Each meteoroid particle is assigned a starting position within predefined geographic coordinates at a fixed altitude of 150 km, and a geocentric velocity vector in an Earth-Centered, Earth-Fixed reference frame. The motion of the particle is simulated and its properties are stored in a list of separate `Frame` objects, created in regular intervals in simulation time (typically 1/15 of a second).

The resulting objects are stored on disk using Python `pickle` module, which stores whole objects in machine-readable format. At this point, only a model of the physical reality has been computed without any knowledge of the observers.

4.2.2 `asmodeus-observe.py`

The second script loads the stored `Meteor` objects and computes the related `Sighting`s. For each `Frame` a corresponding `SightingFrame` is created. The observed apparent magnitude is calculated using equation 20.

Additionally, as only the brightest frame of each meteor will be included in the statistic, the script determines this frame and stores a reference to it alongside the `SightingFrame`s. Once apparent magnitude in the brightest frame is established, the meteor as a whole is accepted or rejected with probability $D(m)$, as calculated in equation 21.

4.2.3 `asmodeus-plot.py`

This script loads a Gnuplot template and creates a dataset-specific `.gp` file containing instructions for Gnuplot plotting software. Jinja2 Python module is used for template rendering.

The types of the visualisations are specified in the configuration file. The visualisations are created independently with the same settings for each of the observers. It is also possible to write new template files.

4.2.4 `asmodeus-analyze.py`

The last program loads the computed `Sighting`s and produces statistical analyses. These are most importantly histograms: the observed meteors are binned according to pre-selected criteria and the distribution of the investigated property is obtained, both in numerical format and as a graphical visualisation. These histograms will later be compared to actual observational data.

5 Conclusion and future plans

The reference implementation is fully functional and is able to simulate entering meteoroid particles under a wide range of conditions and produce sky plots for observers for any properties. Development of methods for statistical testing and comparisons with observational data is already underway. Various output examples are presented in figures 4, 5 and ??.

In the future, the system will be extended with support for generating meteors from sporadic

background, support for temporal variations of meteor shower activity, and the physical model of meteor flight will be upgraded to include the effects of vaporization and radiative cooling.

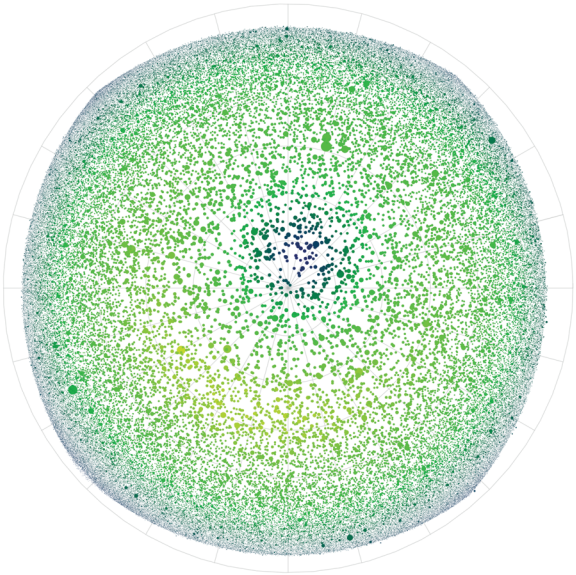


Figure 4: A dataset of 131072 virtual meteors as observed from AGO Modra. Only the brightest frame is displayed for every meteor. Size of the dots represents the maximum brightness. Brighter colours correspond to higher observed angular speeds: meteors close to the horizon are at large distances, while velocities of meteors observed near the radiant have small radial components. Angular speeds are generally highest 90° from the radiant.

Acknowledgments

This work has been supported by the special stipendium provided by FMPH CU (October 2017). Special thanks belong to doc. RNDr. Juraj Tóth, PhD., for countless hours spent in conversation about everything related to the topic; and to Mgr. Peter Vereš, PhD., for the interesting idea that has become the cornerstone of my thesis.

References

[Allen, 1976] Allen, C. W. (1976). Astrophysical Quantities. Athlone, London.

[Baláž, prep] Baláž, M. (in prep.). Determination of total meteoroid flux in millimetre to metre size range. Master's thesis, Comenius University in Bratislava, Bratislava, Slovakia.

[Braeunig, 2014] Braeunig, R. A. (2014). Atmospheric models.

[Ceplecha et al., 1998] Ceplecha, Z., Borovička, J., Elford, W. G., et al. (1998). Meteor phenomena and bodies. Space Science Reviews, 84:327–471.

[Clynch, 2006] Clynch, J. R. (2006). Earth coordinates.

[Community Coordinated Modeling Center, 1990] Community Coordinated Modeling Center (1990). MSIS-E-90 atmosphere model.

[Drolshagen and Kretschmer, 2015] Drolshagen, S. and Kretschmer, J. (2015). De-biasing CILBO meteor observations and the mass accumulation of the earth. Master's thesis, Carl von Ossietzky Universität Oldenburg, Oldenburg.

[Friichtenicht et al., 1968] Friichtenicht, J. F., Slattery, J. C., and Tagliaferri, E. (1968). A laboratory measurement of meteor luminous efficiency. Astrophysical Journal, 151:747. Bibcode 1968ApJ...151..747F.

[Hill et al., 2005] Hill, K. A., Rogers, L. A., and Hawkes, R. L. (2005). High geocentric velocity meteor ablation. Astronomy & Astrophysics, 444:615–624.

[Jones and Halliday, 2001] Jones, W. and Halliday, I. (2001). Effects of excitation and ionization in meteor trains. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 320:417–423. Bibcode 2001MNRAS.320..417J.

[Kasten and Young, 1989] Kasten, F. and Young, A. T. (1989). Revised optical air mass tables and approximation formula. Applied Optics, 28:4735–4738. Bibcode 1989ApOpt..28.4735K.

[NASA, 2015] NASA (2015). Drag of a sphere.

[NIMA, 2000] NIMA (2000). Department of defense world geodetic system 1984 (wgs84).

[NOAA, NASA and USAF, 1976] NOAA, NASA and USAF (1976). U. S. standard atmosphere.

[Perwass, 2008] Perwass, C. (2008). Geometric Algebra with Applications in Engineering. Springer Science & Business Media.

[Öpik, 1958] Öpik, E. J. (1958). Physics of meteor flight in the atmosphere. Interscience Publishers.

[Ray, 2002] Ray, S. F. (2002). Applied Photographic Optics, 3rd ed. Focal Press.

[Romig, 1965] Romig, M. F. (1965). Physics of meteor entry. AIAA Journal, 3(3):385–394.

[Tóth et al., 2015] Tóth, J. et al. (2015). All-sky Meteor Orbit System AMOS and preliminary analysis of three unusual meteor showers. Planetary and

Space Science, 118:102–106.

[Tufte, 2001] Tufte, E. R. (2001). The Visual Display of Quantitative Information (second edition). Graphics Press LLC, Cheshire, Connecticut.

[Turchak and Gritsevich, 2014] Turchak, L. I. and Gritsevich, M. I. (2014). Meteoroids interaction with the earth atmosphere. Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 44:15–28.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 208–215
ISBN 978-8081470882, © 2018 Martin Šugár

Katalóg zemetrasení pre výpočet seizmického ohrozenia územia Slovenska v hodnotách makroseizmickej intenzity

Martin Šugár[1]
Školiteľ: Róbert Kysel[1]

[1] Katedra astronómie, fyziky Zeme a meteorológie, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

Oblasť Slovenska je územím so strednou úrovňou seizmickej aktivity. Mapy seizmického ohrozenia územia Slovenska je potrebné pravidelne aktualizovať z dôvodu prítomnosti kritickej infraštruktúry a potrieb civilnej ochrany. Predchádzajúca pravdepodobnostná analýza seizmického ohrozenia územia Slovenska v hodnotách makroseizmickej intenzity bola vykonaná v rámci projektu GSHAP pred viac ako pätnástimi rokmi.

Kompilácia katalógu zemetrasení je prvým krokom pravdepodobnostnej analýzy seizmického ohrozenia. Katalóg zemetrasení je založený na údajoch z piatich národných katalógov a dvoch regionálnych katalógov. Spojením katalógov sme vytvorili tzv. predbežný katalóg. Z predbežného katalógu sme vylúčili všetky zemetrasenia s epicentrami nachádzajúcimi sa mimo seizmotektonického modelu SK2011 [Hók et al., 2016]. Určili sme primárny záznam a duplicitné záznamy a následne sme duplicitné záznamy odstránili. Katalóg sme homogenizovali na makroseizmickú intenzitu EMS - 98 a momentové magnitúdo. Pre určenie predtrasov, hlavných otrasov a dotrasov sme aplikovali metódu klastrov [Reasenberg, 1985] s tromi sadami vstupných parametrov. Pomocou kumulatívnej vizuálnej metódy a metódy štandardných odchýlok [Stepp, 1972] sme určili úplnosť katalógu pre rôzne intenzitné triedy.

Výsledný katalóg zemetrasení obsahuje 3720 záznamov v období rokov 350 – 2011.

Kľúčové slová: seizmické ohrozenie, makroseizmická intenzita, katalóg zemetrasení

Úvod

Keďže analýza seizmického ohrozenia sa opiera o rozbor historických zemetrasení a o prístrojovo zaznamenané zemetrasenia, katalóg zemetrasení je najdôležitejšou vstupnou databázou používanou pri výpočte.

V minulosti bolo vykonaných viacero analýz seizmického ohrozenia, ktorých výsledky zahŕňali aj územie Slovenska. Prvým z nich bol projekt GSHAP (Global Seismic Hazard Assessment Program) [Schenk et al., 2000], ktorého výsledkom boli mapy seizmického ohrozenia v dvoch rôznych charakteristikách: makroseizmickej intenzite a špičkovom zrýchlení, a to pre návratovú periódu 475 rokov.

Projekt SHARE [Wössner et al., 2015] bol ďalšou analýzou seizmického ohrozenia územia zahŕňajúceho aj Slovensko. Výstupom je mapa seizmického ohrozenia v hodnotách špičkového zrýchlenia, ktorá je momentálne najaktuálnejšou celoeurópskou mapou seizmického ohrozenia.

Významnou analýzou seizmického ohrozenia územia Slovenska je aj analýza vykonaná v rámci prípravy národnej prílohy k technickej norme EUROCODE8 [Kysel et al., 2014]. Výstupy tejto analýzy sú v hodnotách špičkového zrýchlenia pre návratovú periódu 475 rokov a v práci [Šugár, 2016] boli prevedené za pomoci konverzných rovníc na makroseizmickú intenzitu.

V príspevku sa zaoberáme spôsobom kompilácie a spracovania nového katalógu zemetrasení, ktorý bude použitý pre výpočet seizmického ohrozenia Slovenska v hodnotách makroseizmickej intenzity. Nevyhnutnými krokmi pri spracovaní katalógu zemetrasení sú homogenizácia, určenie predtrasov, hlavných otrasov a dotrasov a určenie úplnosti katalógu zemetrasení v čase.

1 Seizmické ohrozenie, analýza seizmického ohrozenia

Seizmické ohrozenie definujeme ako potenciál súboru javov spojených so zemetraseniami (okrem seizmického pohybu pôdu sú nimi napr. svahové

deformácie alebo tsunami) spôsobiť škody na prírode alebo majetku a/alebo straty na ľudských životoch. Je nevyhnutné zdôrazniť, že samotný potenciál neznamená, že ku škodám naozaj dôjde.

Analýza seizmického ohrozenia je definovaná ako kvantifikácia charakteristiky seizmického ohrozenia (napr. špičkového zrýchlenia alebo makroseizmickej intenzity) na danej záujmovej oblasti.

Najčastejšie sa používajú dva prístupy k analýze seizmického ohrozenia – deterministický a pravdepodobnostný. Základný rozdiel medzi týmito dvoma prístupmi spočíva v tom, že deterministický prístup používa tzv. najhorší možný scenár, ktorý spočíva v určení maximálneho potenciálneho zemetrasenia a jeho vplyvu na záujmovú lokalitu, zatiaľ čo pravdepodobnostný prístup pracuje pomocou štatistických metód s mnohými scenármi.

Spoločným krokom v oboch prístupoch určenia seizmického ohrozenia je zostavenie seizmologickej, geologickej, geofyzikálnej a geotechnickej databázy. Seizmologická databáza dokumentuje údaje o historických a prístrojovo zaznamenaných zemetraseniach na záujmovej oblasti, najmä dátum a čas zemetrasenia, polohu epicentra, hĺbku ohniska, veľkosť zemetrasenia. Najdôležitejšou súčasťou seizmologickej databázy je katalóg zemetrasení.

2 Katalóg zemetrasení pre územie Slovenska

Pre účely pravdepodobnostnej analýzy seizmického ohrozenia územia Slovenska sme skompilovali nový katalóg zemetrasení. Tento katalóg vznikol spracovaním siedmich už existujúcich katalógov:

- GFÚ SAV (elektronická verzia 2012) – územie Slovenska
- [Zsíros et al., 2000] – územie Maďarska
- GFÚ AV ČR (elektronická verzia 2012) – územie Českej republiky
- ACORN (2004) – regionálny katalóg pre Východné Alpy, Český masív a Západné Karpaty
- EMEC [Grünthal a Wahlström, 2012] – regionálny katalóg pre strednú, severnú a severozápadnú Európu
- ZAMG (elektronická verzia 2011) – územie Rakúska
- [Pagaczewski, 1972] – územie Poľska

Spojením uvedených katalógov sme vytvorili tzv. predbežný katalóg, ktorý pozostával z vyše 30 000 záznamov. Z katalógu sme vylúčili zemetrasenia s epicentrami nachádzajúcimi sa mimo seizmotektonického modelu SK2011 [Hók et al. 2016]. Zredukovaný katalóg obsahoval množstvo duplicitných záznamov, pretože to isté zemetrasenie mohlo byť obsiahnuté vo viacerých katalógoch. Preto sme katalóg manuálne skontrolovali a u duplicitných záznamov sme ponechali len jeden záznam – primárny, pričom prednosť sme dali záznamom z národných katalógov. Zvyšné duplicitné záznamy sme z predbežného katalógu vylúčili. Výsledný katalóg pozostáva z 3720 záznamov s makroseizmickými intenzitami medzi stupňami II a IX – X pre časový úsek rokov 350 – 2011.

3 Homogenizácia katalógu zemetrasení

Katalóg zemetrasení sme homogenizovali na jednotnú fyzikálnu veličinu určujúcu veľkosť zemetrasenia, momentové magnitúdo M_W. Momentové magnitúdo je charakteristikou zemetrasenia odvodenou priamo z fyzikálnych vlastností zemetrasenia, menovite modulu pevnosti v šmyku, porušenej časti plochy na zlome a priemerného sklzu.

Pre účely homogenizácie katalógu zemetrasení sme uvažovali, že údaje o makroseizmických intenzitách podľa stupnice EMS – 98 (Európska makroseizmická stupnica) sú ekvivalentné údajom o makroseizmických intenzitách podľa stupníc MSK – 64 (Medvedev - Sponheuer - Kárnik) a MCS (Mercalli - Cancani - Sieberg):

$$I_{0\,MCS} = I_{0\,MSK-64} = I_{0\,EMS-98}. \quad (1)$$

Pre konverziu epicentrálnej makroseizmickej intenzity na momentové magnitúdo M_W sme pre zemetrasenia, ktoré neobsahovali údaj o hĺbke ohniska, použili vzorec [Grünthal et al., 2009]:

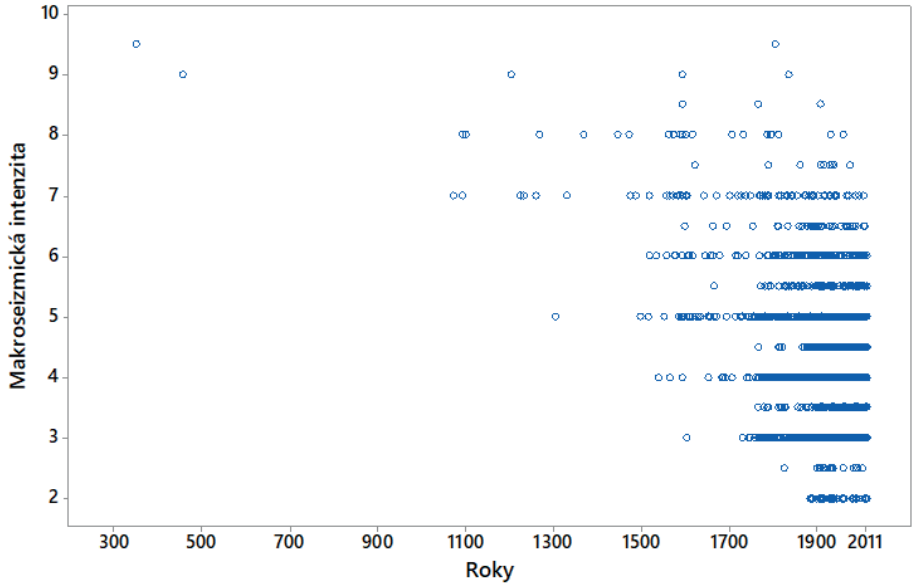
$$M_W = 0.682\, I_0 + 0.16. \quad (2)$$

Pre konverziu epicentrálnej makroseizmickej intenzity na momentové magnitúdo M_W sme pre

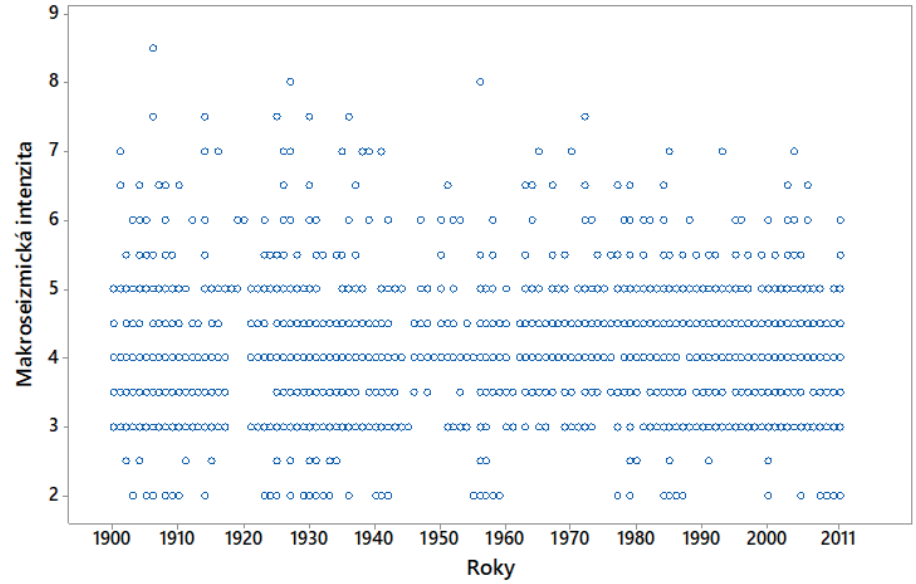
zemetrasenia s danou hĺbkou ohniska h (v km) použili vzorec [Grünthal et al., 2009]:

$$M_W = 0.667\, I_0 + 0.3\, \log_{10} h - 0.1. \qquad (3)$$

Časovo – intenzitné rozdelenie zemetrasení z homogenizovaného katalógu zemetrasení podľa času a intenzity je prezentované na Obr. 1 a 2. Ako možno vidieť, počet pozorovaných zemetrasení rapídne vzrástol v poslednom storočí. Tento fakt je spôsobený začiatkom systematického monitorovania zemetrasení.



Obr. 1: Časovo – intenzitné rozdelenie zemetrasení z homogenizovaného katalógu zemetrasení.



Obr. 2: Časovo – intenzitné rozdelenie zemetrasení z homogenizovaného katalógu zemetrasení po roku 1900.

4 Určenie predtrasov, hlavných otrasov a dotrasov

Pre určenie kategórie zemetrasenia, teda či sa jedná o predtras, hlavný otras alebo dotras, sme použili metódu klastrov [Reasenberg 1985]. Metóda klastrov spočíva v spájaní zemetrasení do tzv. klastrov, ktorých veľkosť exponenciálne narastá s počtom spracovaných zemetrasení.

Zemetrasenia sú spájané do klastrov podľa priestorových a časových interakčných zón. Priestorová interakčná zóna je určená hraničnou hodnotou [Molchan a Dmitrieva, 1992]:

$$\log d = 0.4\, M_0 - 1.943 + k, \qquad (4)$$

kde d je vzdialenosť v kilometroch a k je konštanta, ktorá je rovná 1, ak počítame vzdialenosť k najväčšiemu zemetraseniu klastra alebo 0, ak počítame vzdialenosť k poslednému zemetraseniu klastra.

Časová interakčná zóna je určená podľa Omoriho zákona, ktorý hovorí o poklese frekvencie dotrasov s narastajúcim časom od hlavného otrasu:

$$n(t) = \frac{k}{(c+t)^p}, \qquad (5)$$

kde k a c sú konštanty, ktoré sú rôzne pre rôzne sekvencie zemetrasení, t je čas, ktorý uplynul od hlavného otrasu a p je konštanta, ktorá charakterizuje časový pokles frekvencie dotrasov a má štandardne hodnotu 0,6 – 1,5.

Všetky takto spojené zemetrasenia vytvárajú jeden klaster. Najväčšie zemetrasenie v klastri je označené ako hlavný otras, zvyšné zemetrasenia sú rozdelené na predtrasy a dotrasy.

Reasenbergov algoritmus je často používaným nástrojom na určenie predtrasov, hlavných otrasov a dotrasov v analýze seizmického ohrozenia. Tento algoritmus závisí od viacerých parametrov. Prehľad najpoužívanejších sád parametrov pre Reasenbergov algoritmus je v Tab. 1 [van Stiphout et al., 2012].

Parameter	Standard	Min	Max
τ_{min} (dni)	1	0,5	2,5
τ_{max} (dni)	10	3	15
p_1	0,95	0,9	0,99
x_k	0,5	0	1
x_{meff}	1,5	1,6	1,8
r_{fact}	10	5	20

Tab. 1: Prehľad najpoužívanejších sád parametrov pre Reasenbergov algoritmus.

Parametre τ_{min} a τ_{max} charakterizujú minimálny, resp. maximálny čas, v ktorom hľadáme s pravdepodobnosťou p_1 v katalógu nasledujúce zemetrasenie klastra. Tieto tri parametre vystupujú vo vzťahu:

$$\tau = -\ln(1-p_1)\, t/10^{2(\Delta M-1)/3}, \qquad (6)$$

pričom uvažujeme konštantu poklesu v Omoriho zákone $p = 1$ a $\Delta M = M_{mainshock} - x_{meff}$, kde x_{meff} označuje minimálne uvažované magnitúdo pre katalóg zemetrasení. V klastroch minimálne výpočtové magnitúdo x_{meff} býva zvýšené o faktor x_k, ktorý závisí od najväčšieho zemetrasenia v klastri. Parameter r_{fact} označuje počet polomerov trhlín, ktoré obkolesujú každé zemetrasenie, u ktorého uvažujeme jeho zaradenie do už existujúceho klastra.

Výsledky použitia metódy klastrov - počty predtrasov, hlavných otrasov a dotrasov sú v Tab. 2.

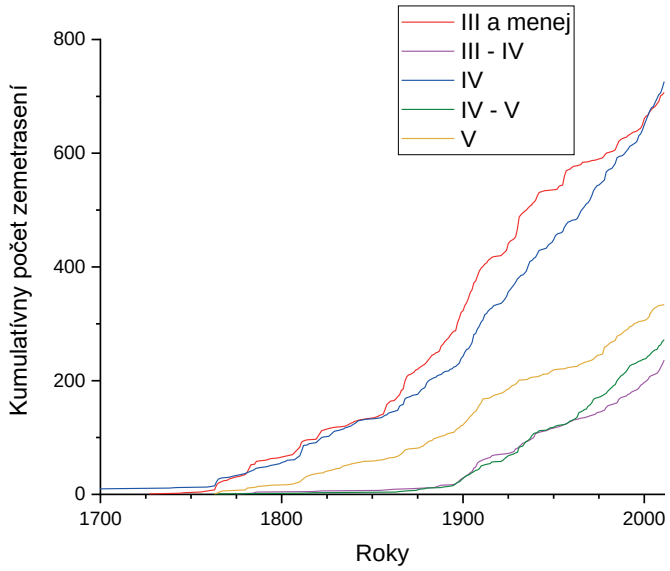
Sada parametrov	Standard	Min	Max
Predtrasy	180	138	169
Hlavné otrasy	2655	3152	2527
Dotrasy	885	430	1024

Tab. 2: Výsledky použitia metódy klastrov pre tri rôzne sady parametrov.

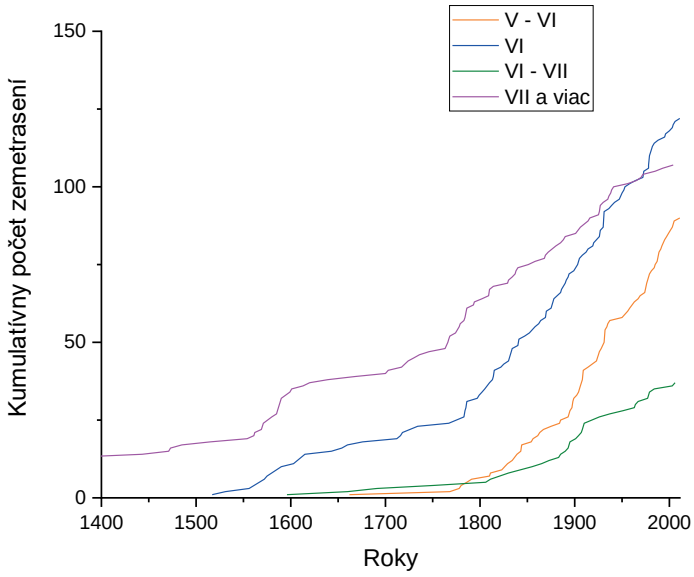
5 Určenie úplnosti katalógu zemetrasení v čase

Z viacerých dôvodov sú historické a aj inštrumentálne záznamy o zemetraseniach neúplné v čase. Najvýznamnejším dôvodom je ten, že v minulosti neboli slabšie zemetrasenia zaznamenané. Je preto dôležité v rámci analýzy seizmického ohrozenia zohľadniť tento fakt. Na určenie úplnosti katalógu zemetrasení v čase sme použili dve najpoužívanejšie metódy – kumulatívnu

vizuálnu metódu [Tinti a Mulargia, 1985] a metódu štandardných odchýlok [Stepp, 1972]. Pre účely určenia úplnosti katalógu v čase sme rozdelili zemetrasenia z katalógu do deviatich intenzitných tried: III a menej, III – IV, IV, IV – V, V, V – VI, VI, VI – VII a VII a viac. Princípom kumulatívnej vizuálnej metódy je grafické znázornenie závislosti kumulatívneho počtu zemetrasení v rámci jednej intenzitnej triedy od času. Posledný lineárny úsek na krivke indikuje stabilnú seizmickú aktivitu, teda spodnú hranicu časového obdobia v ktorom považujeme katalóg zemetrasení za úplný. Výsledky kumulatívnej vizuálnej metódy pre sadu parametrov Reasenberg Standard sú na Obr. 3 a Obr. 4.



Obr. 3: Výsledky kumulatívnej vizuálnej metódy pre sadu parametrov Reasenberg Standard pre intenzitné triedy III a menej až V.



Obr. 4: Výsledky kumulatívnej vizuálnej metódy pre sadu parametrov Reasenberg Standard pre intenzitné triedy V – VI až VII a viac.

Metóda štandardných odchýlok je ďalšou používanou metódou na určenie úplnosti katalógu zemetrasení v čase. Metóda vychádza z poznatku, že sekvenciu zemetrasení je možné uvažovať ako Poissonovo rozdelenie. Zemetrasenia v katalógu sú rozdelené do intenzitných tried a pre každú z tried je určená stredná hodnota výskytu zemetrasenia.

Odhad strednej hodnoty výskytu zemetrasenia vypočítame ako

$$\lambda = \left(\frac{1}{n}\right) \sum_{i=1}^{n} k_i, \tag{7}$$

kde k_1, k_2, ..., k_n je počet zemetrasení v časovom intervale a n je počet časových intervalov.

Štandardnú odchýlku tohto odhadu potom určíme ako

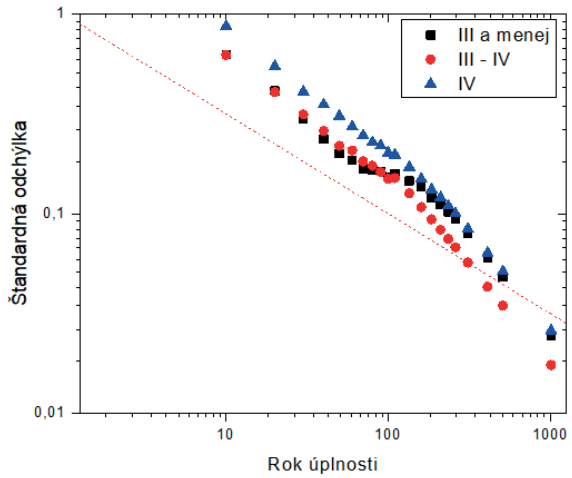
$$\sigma_\lambda^2 = \frac{\lambda}{n}. \tag{8}$$

Ak uvažujeme, že dĺžka časového interval je jeden rok, dostaneme štandardnú odchýlku odhadu rovnú

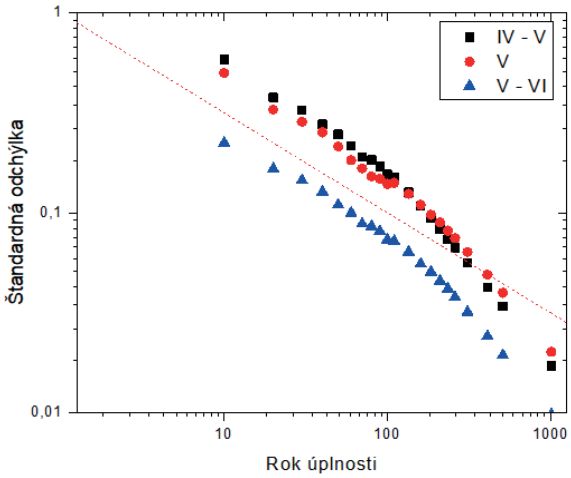
$$\sigma_\lambda = \sqrt{\frac{\lambda}{T}}. \tag{9}$$

V prípade úplného katalógu zemetrasení je stredná hodnota λ konštantná a štandardná odchýlka σ_λ má priebeh zodpovedajúci $1/\sqrt{T}$. Štandardná odchýlka odhadu strednej hodnoty výskytu zemetrasenia je potom znázornená ako funkcia času a jej nevychýlenie od priebehu funkcie $1/\sqrt{T}$ znázorňuje časový úsek, do ktorého považujeme katalóg zemetrasení za úplný.

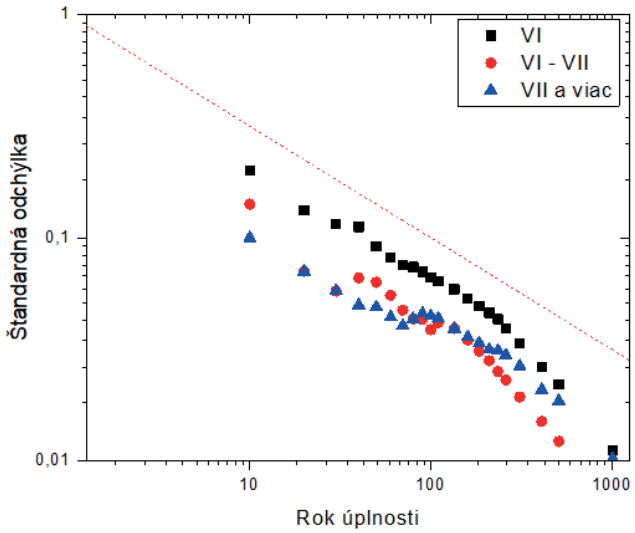
Výsledky metódy štandardných odchýlok pre rovnaké intenzitné triedy ako v prípade kumulatívnej vizuálnej metódy sú na Obr. 5 až Obr. 7. Rok úplnosti je určovaný od roku 2011, teda roku posledného záznamu kompilovaného katalógu zemetrasení.



Obr. 5: Výsledky metódy štandardných odchýlok pre sadu parametrov Reasenberg Standard pre intenzitné triedy III a menej až IV.



Obr. 6: Výsledky metódy štandardných odchýlok pre sadu parametrov Reasenberg Standard pre intenzitné triedy IV - V až V - VI.



Obr. 7: Výsledky metódy štandardných odchýlok pre sadu parametrov Reasenberg Standard pre intenzitné triedy VI až VII a viac.

Porovnanie výsledkov získaných pomocou kumulatívnej vizuálnej metódy a metódy štandardných odchýlok je v Tab. 3. Je zrejmé, že výsledky určenia úplnosti katalógu pomocou oboch metód sú porovnateľné.

Intenzitná trieda	Metóda štandardných odchýlok		Kumulatívna vizuálna metóda		Počet zemetrasení v intenzitnej triede
	Roky úplnosti	Počet zemetrasení	Roky úplnosti	Počet zemetrasení	
III a menej	100	307	80	238	695
III – IV	110	207	110	207	236
IV	110	482	110	482	725
IV – V	110	244	110	244	272
V	135	249	160	272	372
V – VI	135	67	160	73	90
VI	235	98	220	91	122
VI – VII	160	28	180	30	36
VII a viac	310	67	310	67	107

Tab. 3: Porovnanie výsledkov kumulatívnej vizuálnej metódy a metódy štandardných odchýlok pre katalóg zemetrasení spracovaný metódou klastrov s použitím parametrov Reasenberg Standard. Roky úplnosti sú určované od roku 2011.

Diskusia a záver

Kompiláciou siedmich dostupných katalógov zemetrasení sme vytvorili katalóg zemetrasení pre určenie seizmického ohrozenia územia Slovenska v hodnotách makroseizmickej intenzity, ktorý obsahuje 3720 zemetrasení v období rokov 350 – 2011. Jednotlivé zemetrasenia obsiahnuté v katalógu zemetrasení boli za pomoci metódy klastrov rozdelené na predtrasy, hlavné otrasy a dotrasy. Úplnosť katalógu v čase, časový úsek, v ktorom môžeme seizmickú aktivitu považovať za stacionárnu, sme určili pomocou kumulatívnej vizuálnej metódy a metódy štandardných odchýlok. Je možné konštatovať, že výsledky oboch metód sú v dobrej zhode, preto nie je potrebné pri výpočte seizmického ohrozenia uvažovať vetvenie v logickom strome.

Literatúra

[ACORN, 2004] ACORN, 2004. Catalogue of Earthquakes in the Region of the Alps - Western Carpathians - Bohemian Massif for the period from 1267 to 2004. Computer File. Vienna (Central Institute for Meteorology and Geodynamics, Department of Geophysics) - Brno (Institute of Physics of the Earth, University Brno).

[Grünthal a Wahlström, 2012] Grünthal, G. a Wahlström, R., 2012. The European-Mediterranean Earthquake Catalogue (EMEC) for the last millennium. *Journal of Seismology*, 16, 535 – 570.

[Grünthal et al., 2009] Grünthal, G., Wahlström, R., Stromeyer, D., 2009. The unified catalogue of earthquakes in central, northern, and northwestern Europe (CENEC) – updated and expanded to the last millennium. *J. Seismol.* 13, 517 - 541.

[Hók et al,. 2016] Hók, J., Kysel, R., Kováč, M., Moczo, P., Kristek, J., Kristeková, M., Šujan, M., 2016. A seismic source zone model for the seismic hazard assessment of Slovakia. *Geologica Carpathica*, 67, 273 - 288.

[Kysel,, 2014] Kysel, R., 2014. Seizmické ohrozenie územia Slovenska. Rigorózna práca. FMFI UK. 106 strán.

[Molchan a Dmitrieva, 1992] Molchan, G. a Dmitrieva, O., 1992. Aftershock identification: methods and new approaches, *Geophys. J. Int.*, 109, 501 - 516.

[Pagaczewski, 1972] Pagaczewski, J., 1972. Catalogue of the earthquakes in Poland in 1000 - 1970 years. Publications of the Institute of Geophysics, Polish Academy of Sciences, 51, 2 - 36.

[Reasenberg, 1985] Reasenberg, P., 1985. Second – order moment of central California seismicity, 1969-82, *J. Geophys. Res.*, 90, 5479 - 5495.

[Schenk et al., 2000] Schenk, V., Schenková, Z., Kottnauer, P., Guterch, B., Labák, P., 2000. Earthquake hazard for the Czech Republic, Poland and Slovakia - contribution to the ILC/IASPEI Global seismic hazard assessment program. Natural Hazards. 21, 331 – 345.

[Stepp, 1972] Stepp, J. C., 1972. Analysis of completeness of the earthquake sample in the Puget sound area and its effect on statistical estimates of earthquake hazard. In International Conference on Microzonation, II, 897 – 909.

[Šugár, 2016] Šugár, M., 2016. Analýza seizmického ohrozenia územia Slovenska v hodnotách makroseizmickej intenzity. Bakalárska práca. FMFI UK. 55 strán.

[Tinti a Mulargia, 1985] Tinti S. a Mulargia, F., 1985. Completeness analysis of a seismic catalog. *Ann Geophys.* 3, 407 - 414.

[van Stiphout et al., 2012] van Stiphout, T., J. Zhuang, a D. Marsan, 2012. Seismicity declustering, Community Online Resource for Statistical Seismicity Analysis, doi: 10.5078/corssa-52382934. Dostupné online na: www.corssa.org

[Wössner et al., 2015] Wössner, J., Danciu, L., Giardini, D., Crowley, H., Cotton, F., Grünthal, G., Valensise, G., Arvidsson, R., Basili, R., Demircioglu, M., Hiemer, S., Meletti, C., Musson, R., Rovida, A., Sesetyan, K., Stucchi, M, a SHARE konzorcium, 2015. The 2013 European Seismic Hazard Model: key components and results. *Bulletin Earthquake Engineering.* 13, 3553 – 3596.

[Zsíros et al., 1986] Zsíros, T., Mónus, P., Tóth, L., 1988. Hungarian earthquake catalogue (456 - 1986). Geodetic and Geophysical Research Institute, Hungarian Academy of Sciences, Budapest.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 216–220
ISBN 978-8081470882, © 2018 Adam Hložný

Dirac equation in non-commutative quantum theory

Adam Hložný[1*]

Supervisor: Peter Prešnajder[1†]

Department of theoretical physics, FMPH UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstract: We present one possible approach of constructing non-commutative quantum theory of (free) spin $\frac{1}{2}$ particle. We build on the fact, that *Poincaré algebra is sub-algebra of* $su(2,2)$. We can thus use the oscillator representation of $su(2,2)$ to build representation of Poincaré algebra. During the process, we find that just the fundamental representation does not suffice, since it is impossible to define massive theory. This is due to the fact that *Casimir element* $\hat{m}^2 = \hat{p}_\mu \hat{p}^\mu$ of representation of Poincaré algebra is equal to zero. The same situation arises for the anti-fundamental representation: $\tilde{m}^2 = \tilde{p}_\mu \tilde{p}^\mu = 0$. This phenomenon is not at all uncommon, one encounters it when dealing with the (spinor) representations of Lorentz algebra - it is not possible to have massive theory of just left-handed or right-handed fermions. Solution to this is analogous to the Lorentz algebra case - we take direct sum of fundamental and anti-fundamental representation. This is the fundamental representation of $spin(4,2)$ algebra (or $so(4,2)$, since these two are isomorphic and $Spin(4,2)$ is double cover of $SO(4,2)$ at the group level). It is needless to say, that the final momentum operator P_μ is then given as $\hat{p}_\mu + \tilde{p}_\mu$. To construct (field or just "first quantized") theory of fermions *it is necessary to introduce Dirac operator*. We define the operator in P-representation and then examine eigenvalue problem to obtain a solution for free fermions.

Keywords: NCQM, Dirac operator, $spin(4,2)$, $su(2,2)$

1 Introduction

It is well known fact that current well established theory of fundamental interactions, quatum field theory, fails to describe gravity since it is non-renormalizable. Lack of advances in qft approach to quantum gravity led to development of different approaches such as string theory and non-commutative geommetry - both of them often combined together.

Aspiring non-commutative theories often start by defining Dirac equation since one can learn a lot about underlying geometry by studying solutions of this equation. We will not be different, our aim is to define Lorentz-invariant Dirac equation and investigate solutions to the free one and hopefully investigate some phenomena of interacting one later.

Our approach stands on the fact, that $su(2,2)$ algebra contains Poincare algebra as sub-algebra. To obtain massive theory, we have to take direct sum of two $su(2,2)$ representations, namely fundamental and anti-fundamental, which turns out to be the fundamental representation of $spin(4,2)$ algebra. Our approach relies on the oscillator representations of $su(2,2)$ (see [Kováčik and Prešnajder, 2018b] or [Gunaydin et al., 1999]).

1.1 NCQM overview

In this work we will not constrain ourselves to the specific non-commutative model, since our considerations are more general. Typically, non-commutativity (or fuzziness) is introduced as non-commutativity forced to coordinate functions (for example see [Galikova and Presnajder, 2013]):

$$[x_a, x_b] = i\theta_{ab} \tag{1}$$

which in turn leads to non-commutativity of the algebra of functions(since they are functions of coordinates) and uncertainty relations for them as well. Different commutation relations define, of course, different geometries (one can regard choice of θ_{ab} together with the quantization procedure as the definition of the theory). Common example of a fuzzy space (with "fuzzy" Dirac operator) is fuzzy sphere or it's variations, see for example [Grosse and Presnajder, 1995].

For non-commutative theory to have any meaning, we shall introduce non-commutative functions. This is done by using two pairs of annihilation and creation operators a_i and a'^i. Recall that:

$$\begin{aligned} [a_i, a_j^\dagger] &= [a'^i, a_j'^\dagger] = \delta_{ij} \\ & \quad [a_i, a'_j] = 0. \end{aligned} \tag{2}$$

*hlozny2@uniba.sk
†presnajder@fmph.uniba.sk

Hilbert space then consists of normal-ordered states of the form:

$$\Psi = \Psi\left(a, a^{\dagger}, a', a'^{\dagger}\right)$$

And more precisely:

$$\Psi = \sum C_{mnij} C'_{opkl} \left(a_1^{\dagger}\right)^m \left(a_2^{\dagger}\right)^n \left(a_1'^{\dagger}\right)^o \left(a_2'^{\dagger}\right)^p \times \times (a_1)^i (a_2)^j (a'_1)^k (a'_2)^l \quad (3)$$

where a_α and a'_α are two pairs of annihilation (together with corresponding creation) operators. We additionally put one constraint for Ψ: it has to have the same number of annihilation and creation operators (of the same kind) - this effectively reduces one degree of freedom from coefficients C and C'.

2 spin(4,2), su(2,2) and their operator realization

2.1 Review of Poincaré algebra

Recall (see [Weinberg, 2005]) that for the Poincaré group generators following commutation relations hold:

$$[J_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk} J_k \quad (4)$$
$$[J_i, K_j] = i\varepsilon_{ijk} K_k \quad (5)$$
$$[K_i, K_j] = -i\varepsilon_{ijk} J_k \quad (6)$$
$$[J_i, P_j] = i\varepsilon_{ijk} P_k \quad (7)$$
$$[K_i, P_j] = i\delta_{ij} P_0 \quad (8)$$
$$[J_i, P_0] = i[P_i, P_0] = 0 \quad (9)$$
$$[K_i, P_0] = iP_i, \quad (10)$$

where J_i, K_i are generators of rotations and boosts respectively. P_μ is the generator of translations, four-vector and can be considered as the momentum operator (given the right representation).

2.2 spin(4,2) and su(2,2)

Importance of the $su(2,2)$ for this work lies in the fact, that it contains Poincaré algebra as an subalgebra. $su(2,2)$ algebra in fundamental representation is given by following matrices:

$$S_{ij} = \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}\begin{pmatrix} \sigma_k & 0 \\ 0 & \sigma_k \end{pmatrix}, \qquad S_{k4} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \sigma_k & 0 \\ 0 & -\sigma_k \end{pmatrix},$$
$$S_{k5} = \frac{i}{2}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}, \qquad S_{45} = \frac{i}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$
$$S_{0k} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ -\sigma_k & 0 \end{pmatrix}, \qquad S_{04} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix},$$
$$S_{05} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Where $i, j, k = 1..3$ and σ_i are Pauli matrices.

Now where can one see the Poincaré group? Eagle-eyed reader should have already spotted that S_{ij} are generators of rotations. Boost matrices and generators of translations (momentum) are more intricate. One can straightforwardly (calculating commutators) verify that S_{0k} correspond to boosts and $S_{\mu 5} - S_{\mu 4}$ correspond to translation generators, let's call them p_μ.

Let's briefly discuss the anti-fundamental (dual) representation of $su(2,2)$ denoted as S'_{ab}. For dual (matrix) representation of any Lie algebra holds that $\rho^\star(g) = -\rho^T(g)$ where g is an element of Lie algebra. It then follows that $S_{a5} = -S'_{a5}$. These representations are inequivalent. From anti-fundamental representation we choose Poincaré generators in the same manner as in the fundamental representation and so $p'_\mu = S'_{\mu 5} - S'_{\mu 4}$. As it has already been mentioned, we will take $S \oplus S'$ for our considerations. This is, however, the fundamental representation of conformal algebra of Minkowski space $so(4,2)$ or in other words $spin(4,2)$. We will discuss the latter.

We can write down an element of the fundamental representation of $spin(4,2)$ as:

$$\Sigma_{ab} = \begin{pmatrix} S_{ab} & \\ & S'_{ab} \end{pmatrix} \quad (12)$$

where S_{ab} and S'_{ab} denote fundamental and anti-fundamental representation of $su(2,2)$. This is very analogous to situation when one constructs spinor representation of Lorentz group. One can roughly say that $su(2,2)$ is to $so(4,2)$ (or $spin(4,2)$) what $sl(2,\mathbf{C})$ is to $so(3,1)$.

Now we construct the oscillator representation of $su(2,2)$ (and also $spin(4,2)$ as consequence). Define operators on NC states $\hat{a}_i$, $\hat{a}_i^+$, $\hat{b}_i$, $\hat{a}_i^+$ for $i = 1,2$ as:

$$\begin{aligned} \hat{a}_i\Psi &= a_i\Psi \\ \hat{b}_i\Psi &= \Psi a_i \end{aligned} \quad (13)$$

and analogously for $+$ operators. We do not use $\dagger$ notation here, because we do not address whether a_i^+ is adjoint to a_i, since it is not necessary for our considerations. Commutation relations for these operators are:

$$\left[\hat{a}_i, \hat{a}_j^+\right] = -\left[\hat{b}_i, \hat{b}_j^+\right] = \delta_{ij}. \quad (14)$$

Now we can arrange these operators into quadruple(s):

$$\hat{A}^T = (\hat{a}_1, \hat{a}_2, \hat{b}_1, \hat{b}_2)\,,\ \hat{A}^+ = (\hat{a}_1^+, \hat{a}_2^+, \hat{b}_1^+, \hat{b}_2^+)\,. \quad (15)$$

And for oscillator representation we can write:

$$\hat{S}_{ab} \ = \ \hat{A}^+ \Gamma S_{ab} \hat{A} \quad a,b = 0..5 \quad (16)$$

where $\Gamma = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ is 4×4 matrix with 1 and -1 being 2×2 matrices.

This (or similar) approach can be seen for example in [Kováčik and Prešnajder, 2018b] or [Gunaydin et al., 1999], we build mostly on the first one.

To construct the oscillator realization S_{ab} of S'_{ab} we proceed very similarly. We now use the second pair of a/c operators a' and $a'^\dagger$ introduced in (2). Operators $\hat{b}_i$ and $\hat{b}_i^+$ are defined for a'^i and $a_i'^\dagger$ in the same manner as operators in (13). There is one difference in the operator realization for $\tilde{S}_{ab}$- Γ matrix has now swapped position to ensure that representation is dual:

$$\tilde{S}_{ab} = \tilde{A}^+ S'_{ab} \Gamma \tilde{A} \quad a,b = 0..5 \quad (17)$$

where $\tilde{A}$ and $\tilde{A}^+$ are:

$$\tilde{A}^T = (\tilde{a}_1, \tilde{a}_2, \tilde{b}_1, \tilde{b}_2)\,,\ \tilde{A}^+ = (\tilde{a}_1^+, \tilde{a}_2^+, \tilde{b}_1^+, \tilde{b}_2^+)\,. \quad (18)$$

Remark: These considerations also make clear, why we defined NC wave functions with two pairs of annihilation and creation operators. The first pair a_i corresponds to fundamental representation and the second pair a'_i corresponds to anti-fundamental representation. This makes the direct sum structure very visible.

3 Momentum operator

3.1 Definition

Since we need oscillator representation of $spin\,(4,2)$ on NC wave functions (or fields, if one deals with the field theory) we can define two "small" momentum operators $\hat{p}_\mu$ and $\tilde{p}_\mu$ from translation generators of fundamental and anti-fundamental representations of $su\,(2,2)$:

$$\begin{aligned} \hat{p}_\mu &= \hat{S}_{\mu 5} - \hat{S}_{\mu 4} \\ \tilde{p}_\mu &= \tilde{S}_{\mu 5} - \tilde{S}_{\mu 4} \end{aligned} \quad (19)$$

It is lengthy, but straightforward, to prove that:

$$\hat{p}^\mu \hat{p_\mu} = \tilde{p}^\mu \tilde{p_\mu} = 0. \quad (20)$$

Once again analogy with the Lorentz group shows up - it is impossible to define the massive theory with just fundamental or anti-fundamental representation alone. In the case of Lorentz group we have massless left-handed or right-handed spinors, in our case of $spin\,(4,2)$ we have "left-handed" or "right-handed" twistors. Twistor is 4-dimensional analogue of spinor.

In the end, we use $\hat{p}_\mu$ and $\tilde{p}_\mu$ to construct momentum operator of the massive theory:

$$P_\mu = \hat{p}_\mu + \tilde{p}_\mu. \quad (21)$$

Since P_μ has been constructed from generators of translations it is also generator of translations. From the fact, that p_μ and p'_μ are also 4-vectors, P_μ is 4-vector too. Let's define operator of mass M as $M^2 = P^\mu P_\mu$. Simplifying $\left(\hat{p}_\mu + \tilde{p}_\mu\right)\left(\hat{p}^\mu + \tilde{p}^\mu\right)$ we get:

$$M^2 = 2\hat{p}_\mu \tilde{p}^\mu \quad (22)$$

and thus M has, of course, the same eigenfunctions as P_μ.

3.2 Eigenvalue problem for momentum operator

In addition to solve the eigen-problem for spinors as in commutative case, we have to find eigenfunctions of the momentum operator (momentum in NC Dirac equation is operator on NC states) if we want to find eigenfunctions of the Dirac operator. We need to do that just for $\hat{p}_0$ and $\tilde{p}_0$. This is justified by the fact, that we we can consider states with zero three-momentum and then boost them in the right direction to obtain the solution for any three-momentum.

Since NC states posses direct sum structure and in addition $[a_1, a_2] = [a'_1, a'_2] = 0$ holds, together with assumption of normal ordering of NC states and equal number of annihilation and creation operators, we can introduce ansatz:

$$\Phi = \phi_1\left(N_1\right)\phi_2\left(N_2\right)\phi'_1\left(N'_1\right)\phi'_2\left(N'_2\right) \quad (23)$$

where $N_1 = a_1^\dagger a_1$, $N_2 = a_2^\dagger a_2$ and analogously for N'_i. ϕ_i and ϕ'_i are normally ordered.

Now we approach just for ϕ_1. This is without loss of generality, considering that the task is the same for

ϕ_2 and ϕ_i' - it is merely just interchange of symbols. $\hat{p}_0$ acts on ϕ_1 as:

$$\hat{p}_0\Phi = -\frac{1}{4}\left[a_1^+,[a_1,\phi_1]\right] \tag{24}$$

and we want to solve:

$$\hat{p}_0\Phi = E\Phi. \tag{25}$$

Considering the fact that commutators act as derivatives (by "erasing" a/c operators) this equation can be rewritten into differential form:

$$-x\chi''(x)+\chi'(x) = 4E\chi(x). \tag{26}$$

This equation has the solution:

$$\chi(x) = C_1 x J_0\left(4\sqrt{Ex}\right) + C_2 x Y_0\left(4\sqrt{Ex}\right) \tag{27}$$

where J_0 and Y_0 are bessel functions of the first and second type. The full operator solution is then:

$$\Psi\left(N_1,N_2,N_1',N_2'\right) = \chi(N_1)\chi(N_2)\chi\left(N_1'\right)\chi\left(N_2'\right) \tag{28}$$

where we take χ as normally ordered (we omit normal ordering sign for practical reasons).

4 Non-commutative Dirac operator

4.1 Dirac operator and Dirac equation

Recall that the Dirac operator in Minkowski space is $\gamma_\mu\partial^\mu$ and then the Dirac equation:

$$(i\gamma_\mu\partial^\mu - m)\psi(x) = 0 \tag{29}$$

and fourier-transforming the equation we get:

$$(\gamma_\mu p^\mu - m)\psi(p) = 0 \tag{30}$$

this is the form that non-commutative version shall take too (with p_μ, however, being an operator). Dirac equation is typically solved in a following way:

1. We begin with (30)
2. take ansatz $u(p)^T = (u_1,u_2)$ and solve for u_1, u_2
3. write solution in symmetric form $u(p) = \begin{pmatrix} \sqrt{p\cdot\sigma}\zeta \\ \sqrt{p\cdot\bar{\sigma}}\zeta \end{pmatrix}$

where ζ is two-componnent spinor.

4.2 Non-commutative version

We introduce the Dirac equation right in p-representation in the similar way as in the commutative theory - we have no choice but ordinary gamma matrices since we want spin $\frac{1}{2}$ Lorentz invariant equation.

$$\left(\gamma^\mu P_\mu - M\right)\Psi_p = 0. \tag{31}$$

Taking $M\Psi_p = m\Psi_p$ and $P_\mu\Psi_p = p_\mu\Psi_p$, where components of bi-spinor Ψ_p are boosted solutions from the (28). So in the end, solution to the Dirac equation should have the same form with one difference - components of the spinor ζ are non-commutative functions, namely eigen-functions from (28).

5 Conclusions

We constructed representation of the Poincaré group on NC wave functions from representation of the $spin(4,2)$ algebra. We defined the momentum operator, examined it's spectrum and used it to construct the NC Dirac operator. NC Dirac operator has the same spinor form as the ordinary one but internally on the level of functions is non-commutative. Outline of the future work include introduction of gauge symmetry and adding interaction into the operator.

Acknowledgments

This work would not be possible without Peter Prešnajder, his patience, enormous knowledge and clever ideas.

References

[Chaichian et al., 2004] Chaichian, M., Kulish, P. P., Nishijima, K., and Tureanu, A. (2004). On a Lorentz-invariant interpretation of noncommutative space-time and its implications on noncommutative QFT. *Phys. Lett.*, B604:98–102.

[Galikova and Presnajder, 2013] Galikova, V. and Presnajder, P. (2013). Coulomb problem in NC quantum mechanics: Exact solution and non-perturbative aspects.

[Grosse and Presnajder, 1995] Grosse, H. and Presnajder, P. (1995). The Dirac operator on the fuzzy sphere. *Lett. Math. Phys.*, 33:171–182.

[Gunaydin et al., 1999] Gunaydin, M., Minic, D., and Zagermann, M. (1999). Novel supermultiplets of SU(2,2—4) and the AdS(5) / CFT(4) duality. *Nucl. Phys.*, B544:737–758.

[Hall, 2003] Hall, B. (2003). *Lie Groups, Lie Algebras, and Representations*. Springer.

[Kováčik and Prešnajder, 2018a] Kováčik, S. and Prešnajder, P. (2018a). Magnetic monopoles and symmetries in noncommutative space. *J. Phys. Conf. Ser.*, 965(1):012024.

[Kováčik and Prešnajder, 2018b] Kováčik, S. and Prešnajder, P. (2018b). Magnetic monopoles in noncommutative quantum mechanics 2.

[Mack and Todorov, 1969] Mack, G. and Todorov, I. (1969). Irreducibility of the ladder representations of u(2,2) when restricted to the poincare subgroup. *J. Math. Phys.*, 10:2078–2085.

[Peskin and Schroeder, 1995] Peskin, M. E. and Schroeder, D. V. (1995). *An Introduction to quantum field theory*. Addison-Wesley, Reading, USA.

[Weinberg, 2005] Weinberg, S. (2005). *The Quantum theory of fields. Vol. 1: Foundations*. Cambridge University Press.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 221
ISBN 978-8081470882, © 2018 Pavol Matlovič

Na-rich meteor spectra as tracers of rare near-Earth meteoroids (Extended Abstract)

Pavol Matlovič[1]*

Supervisor: Juraj Tóth[1]†

[1]Katedra astronómie, fyziky Zeme a meteorológie, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

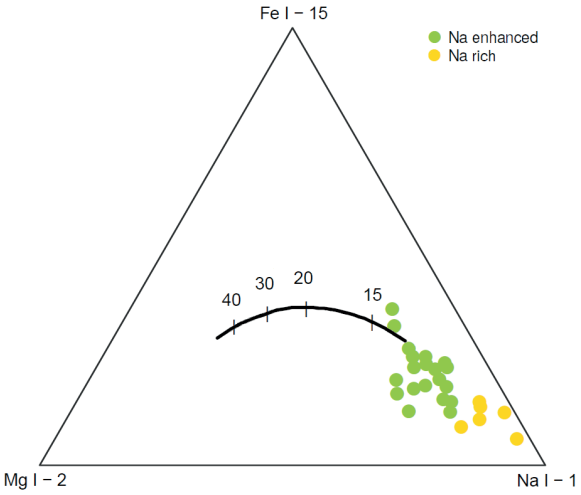


Figure 1: Spectral classification of Na-enhanced and Na-rich meteoroids. Solid curve represents expected range characteristic for CI chondritic composition, relative on meteor speed in km s^{-1}

Several meteors have been detected showing sodium rich emission spectra, very low velocities and long luminous trails. Following the spectral classification (Fig. 1) based on relative intensities of Na I (representing volatile part of meteoroid composition), Mg I (silicates) and Fe I (metals and silicates), the detected ratios in these bodies differ from those found in Solar System's most abundant chondritic and cometary meteoroids [Borovička et al., 2005].

Multi-station observations of the spectral All-sky Meteor Orbit System (AMOS-Spec) at AGO Modra, Slovakia and La Palma, Canary Islands have been used to study the nature and origin of these bodies. Precise astrometric and spectral reduction methods yielded comprehensive set of parameters for each examined meteoroid.

It was found that two spectral groups of Na-enhanced and Na-rich meteoroids can be distinguished by overall distinct properties. Na-enhanced meteoroids can be further divided into two groups: fragile bodies (type C1/IIIA, $\delta_g \approx 2.0$ g cm^{-3}) originating in short-period or dormant comets and stronger stony meteoroids (A/I) related to smaller Apollo-type near-Earth asteroids (NEAs).

The most exotic group are the Na-rich meteoroids with spectra dominated by Na and in some cases atypical emission of Ca lines and FeO bands. They exhibit high material strengths (A-ast/I) and specific fragmentation patterns including separation into like-sized debris under dynamic pressures below 0.2 MPa. The effect of low excitation of the Na line (2.1 eV) in slower meteors below 20 km s^{-1} was identified as partial cause of the Na dominance in bodies of likely normal chondritic composition. In this case, the detected enhancement of Na can be used as a tracer of asteroidal NEO origin of incoming meteoroids.

Nevertheless, small population of Na-rich bodies is believed to be associated with peculiar composition related to residual meteoroid populations. Based on the detected spectral features in combination with orbital and structural properties, we propose two possible interpretations of the origin of these bodies:

- Composition rich in low-anorthosite plagioclase minerals, suggesting relation to ejected martian or lunar material [Papike, 1998].
- Composition related to differentiated C-type or D-type asteroids. This also follows the recent discovery of large amounts sodium carbonates on Ceres [de Sanctis et al., 2016].

References

[Borovička et al., 2005] Borovička, J., Koten, P., Spurný, P., Boček, J., and Štork, R. (2005). A survey of meteor spectra and orbits: evidence for three populations of Na-free meteoroids. *Icarus*, 174:15–30.

[de Sanctis et al., 2016] de Sanctis, M. C., Raponi, A., Ammannito, E., Ciarniello, M., Toplis, M. J., et al. (2016). Bright carbonate deposits as evidence of aqueous alteration on (1) Ceres. *Nature*, 536:54–57.

[Papike, 1998] Papike, J. J. (1998). *Planetary materials*, volume 36. Mineralogical Society of America.

*matlovic@fmph.uniba.sk
†juraj.toth@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 222–229
ISBN 978-8081470882, © 2018 Paula Budzáková

Extrahovanie lokálnych príznakov z 3D mračien bodov

Paula Budzáková*

Školiteľ: Elena Šikudová†

Katedra aplikovanej informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt: V posledných rokoch sa výskumy v oblasti počítačového videnia zameriavali na extrahovanie príznakov z 3D priestoru, ktoré je veľmi populárne. V článku sme zhrnuli vybrané metódy extrahujúce lokálne príznaky z objektov v podobe mračna bodov a mnohouholníkovej siete. Cieľom článku je teoretické priblíženie vybraných metód a hodnotenie vybraných 3D detektorov a deskriptorov pracujúcich na mračne bodov. Vykonali sme experimentálne hodnotenie z hľadiska opakovateľnosti, robustnosti a výpočtovej efektívnosti jednotlivých metód s použitím známej databázy. V závere článku sme dosiahnuté výsledky zhrnuli a popísali pomocou grafov vhľadom na jednotlivé testované vlastnosti metód.

Kľúčové slová: 3D detektor, 3D deskriptor, mračno bodov, extrahovanie príznakov

1 Úvod

Výskum v oblasti 3D reprezentácií a spracovania rapídne rastie. Postupom času bolo navrhnutých veľké množstvo zariadení na snímanie reálnych objektov vo forme RGBD dát alebo mračien bodov, ktoré je možné transformovať do vizuálnejšej i prijateľnejšej podoby, do mnohouholníkovej siete. V počítačovom videní sa množstvo výskumníkov z celého sveta venuje rôznym typom 3D dát, pre plnohodnotné použitie jednotlivých princípov a algoritmov navrhnutých pre 2D obrazy aj v 3D reprezentáciách.

1.1 3D reprezentácia

V prostredí počítačových programov sa využíva niekoľko typov zobrazení trojrozmerných objektov. Najčastejšie dva spôsoby zobrazenia, ktoré sa využívajú v praxi, sú:

- zobrazenie súvislého povrchu tvoreného trojuholníkovou sieťou
- nespojitý spôsob zobrazenia pomocou mračien bodov.

V počítačovej grafike sa 3D modely najčastejšie reprezentujú pomocou triangulácie, ktorej výsledkom je 2D alebo 3D sieť tvorená bodmi a hranami medzi nimi. Základným prvkom 3D spojitého zobrazovania modelov je polygón - *mnohouholník*. Mnohouholníková sieť je veľmi jednoduchá a nevyžaduje si žiadnu hlbšiu analýzu objektov a dosiahneme ju aproximovaním povrchu objektu množstvom mnohouholníkov. Najjednoduchším a najvhodnejším pre reprezentáciu modelov sú trojuholníky.

Termín mračno bodov sa používa na opis množiny bodov v danom priestore. Mračno bodov môžeme považovať za dátovú štruktúru na reprezentáciu súboru multidimenzionálnych bodov. Vzniká rôznymi meracími technikami, buď ako priamy výsledok merania laserovým skenerom, optickým skenerom alebo ako výstup z digitálnej fotogrametrie. Výsledný súbor bodov z oboch metód je z hľadiska obsahu prakticky totožný, popisuje hustou množinou bodov nepravidelný povrch skenovaného objektu alebo scény. Jednotlivé body v súbore sú popísané svojimi priestorovými 3D súradnicami a základnou textúrou povrchu. Body môžu obsahovať aj množstvo iných informácií, ako farbu, informáciu o intenzite, orientáciu, škálu alebo klasifikačný príznak skenera.

V praxi nie je nutné dodržiavať postupnosť prechodu od zosnímaných objektov, vo forme mračien bodov, k súvislému zobrazovaniu objektu pomocou trojuholníkovej siete. Sú to dve samostatné reprezentácie trojrozmernej reality používané pre rôzne oblasti aplikácie. Pre prezentačné účely je vhodnejšia mnohouholníková alebo trojuholníková sieť. Pri prácach v technických aplikáciách je častejšie využívaný matematický model vo forme mračna bodov.

1.2 3D lokálne príznaky

Ak chceme preniesť myšlienku lokálnych príznakov z 2D snímok na dáta vo forme 3D mračna bodov, ako lokálny príznak môžeme vyhodnotiť 3D oblasti odlišujúce sa od ich susedného okolia. Rovnako ako v obrazoch, aj v 3D dátach môže byť takáto zmena spôsobená zmenou vzhľadu lokálnej 3D štruktúry. Lokálne vlastnosti preto zvyčajne zodpovedajú rohom alebo

*paula.budzakova@fmph.uniba.sk
†sikudova@fmph.uniba.sk

škvrnám v priestore. Na extrahovanie takýchto príznakov z 3D mračien bodov sa vo všeobecnosti používa prístup využívajúci priestorovú geometriu, no pri použití hĺbkových kamier alebo zariadenia Kinect môžu byť informácie reprezentované aj v RGBD dátach obsahujúcich farebné obrazy a hĺbkovú informáciu, ktorá je rozmiestnená v pravidelnej 2D mriežke so šachovitým vzorom. Ak sa metódy extrahujúce príznaky spoliehajú na hĺbkové informácie zo spracovávaných dát, ide o metódy *2,5D extrakcie lokálnych príznakov* [Weinmann, 2016].

Podobne ako pri lokálnych príznakoch v obraze, extrakcia 3D lokálnych príznakov zvyčajne pozostáva z dvoch fáz, *detekcie* kľúčových bodov a *deskripcie* detegovaných bodov a ich okolia vo forme príznakov.

2 Existujúce metódy

V práci sme preskúmali nájdené existujúce metódy na extrakciu lokálnych príznakov z 3D mračna bodov. Existujúce metódy detekcie a deskripcie zaujímavých bodov v 3D priestore sme analyzovali samostatne.

2.1 Metódy detekcie zaujímavých bodov v 3D priestore

Metódy detekcie zaujímavých bodov pre 3D objekty musia mať požadované vlastnosti, ako invariantnosť k afinným transformáciám, robustnosť voči šumu, ktorý môže vzniknúť počas snímania objektu alebo robustnosť voči rôznym teseláciám objektu. Vo všeobecnosti sme skúmané detektory rozdelili na detektory s pevnou škálou susedného okolia a na detektory s adaptívnou škálou susedného okolia. Ich všeobecná štruktúra je rovnaká. Základným krokom, spoločným pre obe kategórie, je výber zaujímavých bodov ako lokálnych extrémov merania významnosti, ktorej definícia určuje robustnosť a opakovateľnosť detektora určením druhu 3D štruktúr vybraných detektorom. Detektory s pevným susedným okolím detegujú zaujímavé body v špecifickej konštantnej škále, ktorá je poskytnutá ako parameter algoritmu. Štruktúra detektorov s adaptívnou škálou zahŕňa vytvorenie škálového priestoru definovaného na povrchu objektu.

Detektor Harris3D [Pratikakis et al., 2010] vychádza z práce autorov Harrisa a Stephensa [Harris and Stephens, 1988], ktorí navrhli 2D detektor zaujímavých bodov využívajúci deriváciu šedotónového obrazu. Pri dátach v 3D priestore nastáva problém výpočtu derivácií z dôvodu ľubovoľnej topológie dát. Na zvládnutie tohto problému autori navrhnutej 3D verzie [Pratikakis et al., 2010] využívajú prístup navrhnutý v [Głomb, 2009], ktorý je základom pre navrhnutie dostatočne robustného detektora pre 3D objekty.

SIFT3D [Flint et al., 2007], podobne ako Harris3D, vychádza z pôvodného 2D deskriptora SIFT [Lowe, 2004], ktorý na vyhľadávanie zaujímavých bodov využíva škálovú pyramídu tvorenú z rozdielov Gaussianov DoG. Algoritmus pre 3D dáta používa na detekciu zaujímavých bodov 3D verziu Hessovej matice.

Detektor LSP [Chen and Bhanu, 2007] je príkladom prístupu založenom na meraní bodových významností, ktoré sú určené podľa tvarového indexu daného vrchola založeného na maximálnom a minimálnom zakrivení vrchola. Meranie významností môže detegovať zaujímavé body, ktoré sú rozmiestnené pomerne rovnomerne na povrchu. Vyhýbajú sa veľmi rovinným oblastiam a zameriavajú sa na veľmi vyčnievajúce alebo konvexné oblasti, pričom detektor vyberá aj slabšie charakterizované zóny, čo vo veľkej miere môže negatívne ovplyvniť opakovateľnosť detektora.

Detektor ISS3D [Zhong, 2009] je založený na meraní lokálnych vzdialeností alebo hustoty bodov. Využíva lokálne minimá z kovariančnej matice pozostávajúcich z bodov, ktoré patria podpornej oblasti. Používa veľkosť najmenšej vlastnej hodnoty, ako lokálne minimum, ktoré zahŕňa body s veľkými odchýlkami v každom hlavnom smere a pomer medzi dvoma po sebe nasledujúcimi vlastnými hodnotami pre vylúčenie podobných bodov.

Detektor NARF [Steder et al., 2011] pracuje na hĺbkových obrazoch vytvorených z ľubovoľných mračien bodov alebo na jednotlivých snímkach videa, ktoré obsahuje pohyblivý objekt prezentovaný vo forme mračna bodov. Proces detekcie kľúčových bodov je najdôležitejšou súčasťou deskriptora pre následné, čo najsprávnejšie príznakové párovanie. V deskriptore NARF musia byť kľúčové body schopné obnoviť informácie týkajúce sa hraníc objektov a povrchu, pre čo najvyššiu robustnosť metódy. Detektor potrebuje rozoznať hranicu objektov z rôznych uhlov pohľadu na scénu. Z toho dôvodu v [Steder et al., 2011] určili 3 druhy rôznych bodov, ktoré sú zaujímavé pre detekciu, a to body na hranici objektu, body v pozadí susediace s hranicou objektu a interpolované body medzi hranicou objektu a jej tie-

ňom.

2.2 Metódy deskripcie zaujímavých bodov v 3D priestore

Metódy 3D lokálnych deskriptorov boli konštruované tak, aby opísali, a tak zakódovali informácie o skúmanom lokálnom povrchu. Mnoho algoritmov využíva na reprezentovanie rôznych charakteristík lokálneho povrchu histogramy, ktoré opisujú analyzovaný lokálny povrch pomocou geometrických alebo topologických meraní. Na základe toho skúmané 3D deskriptory rozdeľujeme do dvoch skupín deskriptorov:

- **3D deskriptory založené na histograme priestorovej distribúcie:** opisujú povrch okolo zaujímavého bodu generovaním histogramov podľa priestorových rozložení, napríklad súradníc bodov na povrchu.
- **3D deskriptory založené na histogramoch geometrických atribútov:** opisujú povrch okolo zaujímavého bodu generovaním histogramov podľa geometrických atribútov bodov na povrchu, ako normála povrchu alebo zakrivenie.

Deskriptor 3DSC [Frome et al., 2004] bol navrhnutý ako rozšírenie 2D deskriptora Shape Contexts [Belongie et al., 2002] do trojdimenzionálneho priestoru. 3DSC používa na konštrukciu lokálnej referenčnej osi LRA normálu plochy n v zaujímavom bode p. Sférická mriežka je umiestnená na zaujímavom bode, ktorý tvorí jej stred, pričom severný pól mriežky je zarovnaný s normálou plochy n. Podporná oblasť je rozdelená do niekoľkých tried, logaritmicky pozdĺž radiálnych rozmerov a lineárne pozdĺž azimutových a výškových rozmerov sférickej mriežky. Logaritmické rozdelenie robí deskriptor robustnejší voči deformáciám tvaru s meniacou sa vzdialenosťou od zaujímavého bodu. 3DSC deskriptor je generovaný počítaním váženého počtu bodov, ktoré spadajú do každej triedy 3D sférickej mriežky. Výsledný deskriptor má rozmer $d_r * d_a * d_e$, kde d_r, d_a a d_e sú v uvedenom poradí deskriptory tried pozdĺž radiálnej, azimutovej a výškovej osi.

Deskriptor USC [Tombari et al., 2010a] bol navrhnutý na základe analýzy 3DSC deskriptora, ktorá ukázala, že slabým bodom techniky 3DSC je nedostatok opakovateľnosti lokálnej referenčnej osi LRA s negatívnymi dôsledkami z hľadiska výkonnosti a presnosti. USC predstavuje rozšírenie 3DSC, ktoré zabraňuje počítaniu viacerých deskriptorov na viacerých rotáciách s rozdielnym azimutovým smerom pre jeden zaujímavý bod. Navrhli jedinečný a jednoznačný LRF, ktorý môže priniesť nielen opakovateľnú os normály, ale aj jedinečný pár smerov ležiacich v dotykovej rovine.

Pre reprezentovanie lokálnych príznakov, ktoré opisujú základné vlastnosti povrchu modelu v danom bode, bol navrhnutý deskriptor PFH [Rusu et al., 2009]. Ich výpočet je založený na kombinácii určitých geometrických vzťahov v susednom okolí zaujímavého bodu, ktoré zahŕňajú súradnice 3D bodov a odhadované normály povrchu, ktoré sú predĺžené pre použitie zakrivenia a momentových invariantov druhého rádu.

Výpočtová zložitosť deskriptora PFH pre dané mračno bodov P s n bodmi je $O(n*k^2)$, kde k je počet susedov pre každý zaujímavý bod p v P. Pre aplikácie v reálnom čase môže výpočet PFH pri husto nahromadených bodoch predstavovať jednu z hlavných prekážok. Z toho dôvodu [Rusu et al., 2009] navrhli optimalizáciu deskriptora PFH, ktorá znižuje výpočtovú zložitosť algoritmu na $O(n*k)$.

Deskriptor SHOT [Tombari et al., 2010b] bol navrhnutý na základe inšpirácie metódou SIFT [Lowe, 2004]. Rovnako ako väčšina deskriptorov, aj SHOT deskriptor pracuje s detegovanými bodmi na dátach z rôznych 3D senzorov, ako LIDAR alebo Kinect. Deskriptor SHOT zakóduje histogramy normál bodov v susednom okolí zaujímavého bodu, ktoré sú reprezentatívnejšie ako lokálna štruktúra povrchu v porovnaní s jednoduchými 3D súradnicami. Použitie histogramov prináša filtračný efekt potrebný pre dosiahnutie robustnosti na šum.

Postupom krátkeho času autorom nevyhovoval deskriptor, ktorý extrahuje príznaky histogramom orientácií a signatúrou tvaru. Navrhli deskriptor CSHOT [Tombari et al., 2011] ktorý zlepšuje presnosť rozpoznávania v prostredí, v ktorom je prítomná oklúzia alebo iné rušenie, kombináciou histogramov normálového a textúrneho merania. CSHOT je založený na deskriptore SHOT, využívajúci dekompozíciu vlastných hodnôt kovariančnej matice okolo zaujímavého bodu.

3 Testovanie

V našej práci sme testovali časť spomenutých detektorov a deskriptorov, ktoré pracujú na dátach reprezentovaných pomocou mračien bodov. Pre správne

vyhodnotenie experimentov sme sa zamerali na skúmanie jednotlivých vlastností pri detektoroch a deskriptoroch.

3.1 Metodológia testovania

Najdôležitejšou vlastnosťou detektora zaujímavých bodov je jeho **absolútna** a **relatívna opakovateľnosť**. Táto vlastnosť predstavuje schopnosť detektora nájsť rovnaký súbor zaujímavých bodov na rozdielnych príkladoch daného objektu. Jednotlivé rozdiely môžu byť spôsobené zašumením objektu, zmenou pohľadu na daný objekt, čiastočnými oklúziami alebo chýbajúcimi častami objektu, alebo aj rôznymi kombináciami spomenutých zmien. Opakovateľnosť detektora je skúmaná podobne ako pri hodnotení 2D detektorov. Detegovaný zaujímavý bod sa považuje za opakovateľný, ak vzdialenosť od najbližšieho suseda v množine zaujímavých bodov extrahovaných zo scény je menšia ako zvolený prah ε

$$\|R_{hl}k_h^i + t_{hl} - k_l^j\| < \varepsilon \tag{1}$$

kde k_l^j predstavuje najbližšieho suseda v množine zaujímavých bodov, R_{hl} je rotácia a t_{hl} je translácia skúmaného zaujímavého bodu k_h^i podľa ground truth a ε predstavuje zvolenú prahovú hodnotu. Absolútna opakovateľnosť je definovaná ako

$$r_{abs} = |RK_{hl}| \tag{2}$$

zatiaľ čo relatívna opakovateľnosť je definovaná ako

$$r = \frac{|RK_{hl}|}{|K_{hl}|} \tag{3}$$

kde K_{hl} predstavuje všetky zaujímavé body detegované na modeli.

Najčastejšie skúmanou a veľmi dôležitou vlastnosťou deskriptora je jeho **robustnosť**. Robustnosť deskriptora predstavuje odolnosť jeho výkonu voči rôznym vplyvom rušenia, ako šum, chyby lokalizácie zaujímavých bodov, oklúzia a mnoho iných. Pre analyzovanie robustnosti vybraných deskriptorov vhľadom na oklúziu je oklúzia vypočítaná v lokálnom okolí každého zaujímavého bodu objektu alebo scény. V [Mian et al., 2006] sa celková oklúzia vypočítava pre každý objekt, ktorý je prítomný v scéne. Oklúzia je vypočítaná pre každé lokálne okolie zaujímavého bodu z dôvodu skúmania robustnosti vlastností deskriptora nedefinovaných na celom povrchu objektu, ale len v skúmanom lokálnom okolí bodu. Na základe vypočítanej oklúzie sú zaujímavé body v scéne následne klasifikované a rozdelené do niekoľkých rôznych skupín. Na robustnosť deskriptora môže vplývať aj použitý druh detektora. Vysoká robustnosť deskriptora môže byť spôsobená správnym zvolením detektora a pri jeho zámene môže robustnosť deskriptora výrazne klesnúť. Pre analyzovanie robustnosti deskriptora, bez vplyvu algoritmov detektorov, je možné vytvoriť experiment, v ktorom zaujímavé body z každej scény alebo objektu sú náhodne vybrané bez predchádzajúcej detekcie zaujímavých bodov. Korešpondujúce body, identifikované ako zaujímavé, sú extrahované pomocou známej transformácie medzi scénou a modelom.

Pri hodnotení výkonnosti deskriptorov je vhodné posudzovať aj výkonnosť vybraných deskriptorov v kombinácii s rôznymi detektormi 3D zaujímavých bodov. Za účelom testovania rôznych kombinácií je preukázanie vplyvu rôznych typov detektorov na výkon deskriptorov. Na detekciu zaujímavých bodov je používaný jednotný detektor pri každej množine testovaných deskriptorov. Výkon každej kombinácie je rovnako ako opisnosť meraná pomocou citlivosti a presnosti testovania. Hlavným cieľom je preskúmať celkovú výkonnosť deskriptorov v kombinácii s rôznymi 3D detektormi.

Pre dobrú výkonnosť detektora a deskriptora na rôzne veľkých množinách údajov je nutné, aby bol detektor a deskriptor invariantný na škálovanie, čiže aby disponoval so škálovateľnou vlastnosťou. Testovanie výkonnosti detektorov a deskriptorov vzhľadom na škálovateľnosť prebieha na rôzne veľkých objektoch a scénach.

Poslednou skúmanou vlastnosťou pri detektoroch aj pri deskriptoroch je *výpočtová efektívnosť*. Požadovaný čas na detegovanie zaujímavých bodov je vypočítaný na niekoľkých objektoch alebo scénach s rôznou hustotou bodov. Pre určenie efektívnosti detektora je vypočítaný priemerný čas vykonania detekcie zaujímavých bodov. Pri metódach deskriptorov je vypočítaný priemerný čas výpočtu z niekoľkých scén. Keďže výpočtový čas metód súvisí s počtom detegovaných bodov v podpornej oblasti, na vytvorenie vektora príznakov je vypočítaný s ohľadom na rôzne počty bodov.

3.2 Point Cloud Library

Testovanie vybraných detektorov a deskriptorov bolo realizované v programovacom jazyku C++ s použi-

tím knižnice *Point Cloud Library*, ďalej ako PCL [Rusu and Cousins, 2011]. Z algoritmickej perspektívy knižnica zahŕňa množstvo algoritmov 3D spracovania, ktoré pracujú na mračnách bodov, vrátane filtrovania, príznakovej extrakcie, rekonštrukcie povrchu, registrácie a segmentácie. Tieto algoritmy môžu byť použité napríklad na filtráciu odľahlých bodov v zašumených dátach, segmentáciu relevantných častí scény, detekciu zaujímavých bodov a výpočet deskriptorov na rozpoznanie objektov na základe ich geometrického vzhľadu, alebo na vytváranie povrchových mračien bodov a následne ich vizualizáciu. Každá sada algoritmov je definovaná prostredníctvom základných tried, ktoré sa pokúšajú integrovať všetky bežné funkcie používané v celom postupe spracovania, a tak udržiavať implementáciu aktuálnych algoritmov kompaktnú a čistú.

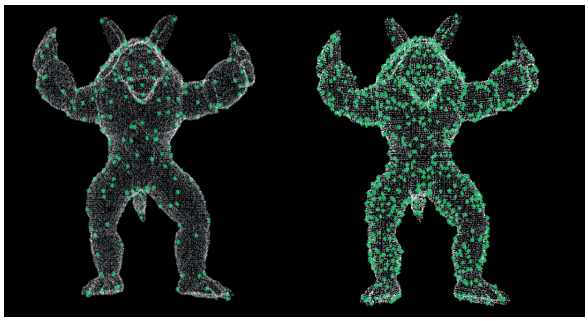
4 Analýza a výsledky

Na testovanie analyzovaných metód sme použili databázu [Levoy et al., 2005], ktorá obsahuje nasnímané 3D objekty často využívané pri testovaní extrakcie 3D lokálnych príznakov vo vedeckej literatúre. Každý objekt je snímaný z viacerých pohľadov, a tak máme k dispozícii veľké množstvo dát vzhľadom na jeden objekt. Pri testovaní detektorov sa zameriavame na detekciu zaujímavých bodov na jednotlivých objektoch, ktoré sú pri tomto type testovania úplne dostačujúce, ako vidíme na obrázku 1 Na testovanie vybraných deskriptorov sme použili scény, ktoré obsahovali jednotlivé vysegmentované objekty. Keďže vybrané deskriptory sme testovali pomocou párovania príznakov objektov a objektov v scéne, kombinácia scén a objektov bola nutná.

Pri testovaní detektorov sme sa zamerali na štyri detektory, a to Harris3D, SIFT3D, ISS3D a detektor NARF. Pre každý detektor sú zaujímavé body detegované z modelu a zo scény mračien bodov bez zmeny parametrov jednotlivých metód.

Opakovateľnosť detektora sme testovali aj na upravených dátach pomocou škálovania. Jednotlivé testovacie sady sme naškálovali na základe štyroch rozdielnych škál $6, 9, 12, 15 * \text{rozlíšenie scény}$, na ktoré sme následne spustili detekciu zaujímavých bodov. Jednotlivé škály sme zvolili na základe študovaných vedeckých článkov pre potreby tejto práce.

Nasledujúce grafy na obrázku 2 predstavujú výsledky relatívnej a absolútnej opakovateľnosti pri objektoch a scénach v rôznych škálach. Správnosť porovnania výsledkov je zabezpečená spoločnými parametrami všetkých detektorov v knižnici PCL, ktoré sme pri testovaní nijako nemenili.



Obr. 1: Detekcia zaujímavých bodov detektormi Harris3D (vľavo) a ISS3D (vpravo).

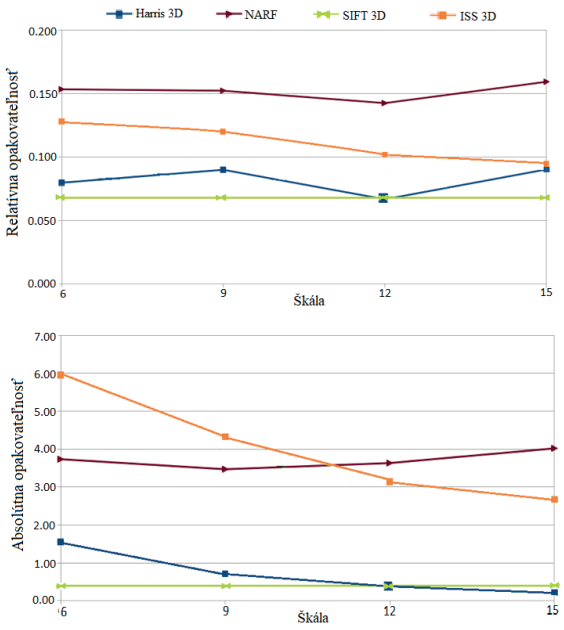
Pri vyhodnotení výsledkov relatívnej opakovateľnosti jednoznačne najlepšiu relatívnu opakovateľnosť medzi štvoricou detektorov dosahuje detektor NARF. Najhoršie výsledky dosahuje detektor SIFT3D, ktorý dosahuje relatívnu opakovateľnosť identickú na všetkých testovaných škálach. Detektor Harris3D dosahuje pri škále 12 rovnaké výsledky ako SIFT3D, pri ostatných škálach je o niečo lepší.

Najlepšiu absolútnu opakovateľnosť pri škále 6 a 9 dosahuje detektor ISS3D, no pri škálach 12 a 15 klesá. Naopak, detektor NARF pri škálach 12 a 15 stúpa, a tak pri týchto dvoch zväčšeniach dosahuje lepšie výsledky oproti ISS3D. Harris3D a SIFT3D dosahujú oproti spomínaným detektorom oveľa menšiu absolútnu opakovateľnosť bez ohľadu na zmeny škálovania. Dôležitou vlastnosťou každej metódy je výpočtová efektívnosť, ktorú sme testovali pomocou detekcie zaujímavých bodov na objektoch s rôznym počtom a zároveň aj hustotou bodov v mračne. Taktiež sme chceli otestovať, či väčšie množstvo dát jednotlivé časy výpočtu nejako ovplyvní alebo nie.

Detektor	Harris3D	NARF	SIFT3D	ISS3D
Priemerný čas	28,019 s	**2,516 s**	9,891 s	20,362 s

Tabuľka 1: Priemerný výpočtový čas testovaných detektorov v sekundách.

V tabuľke 1 sú uvedené priemerné časy výpočtov testovaných detektorov. Najlepšiu výpočtovú efektívnosť dosahuje detektor NARF, najhoršiu zo štvorice testovaných detektorov detektor Harris3D. Zvyšujúci počet a hustota bodov v mračne efektívnosť detektorov nijako neovplyvnili a každý detektor dokázal de-



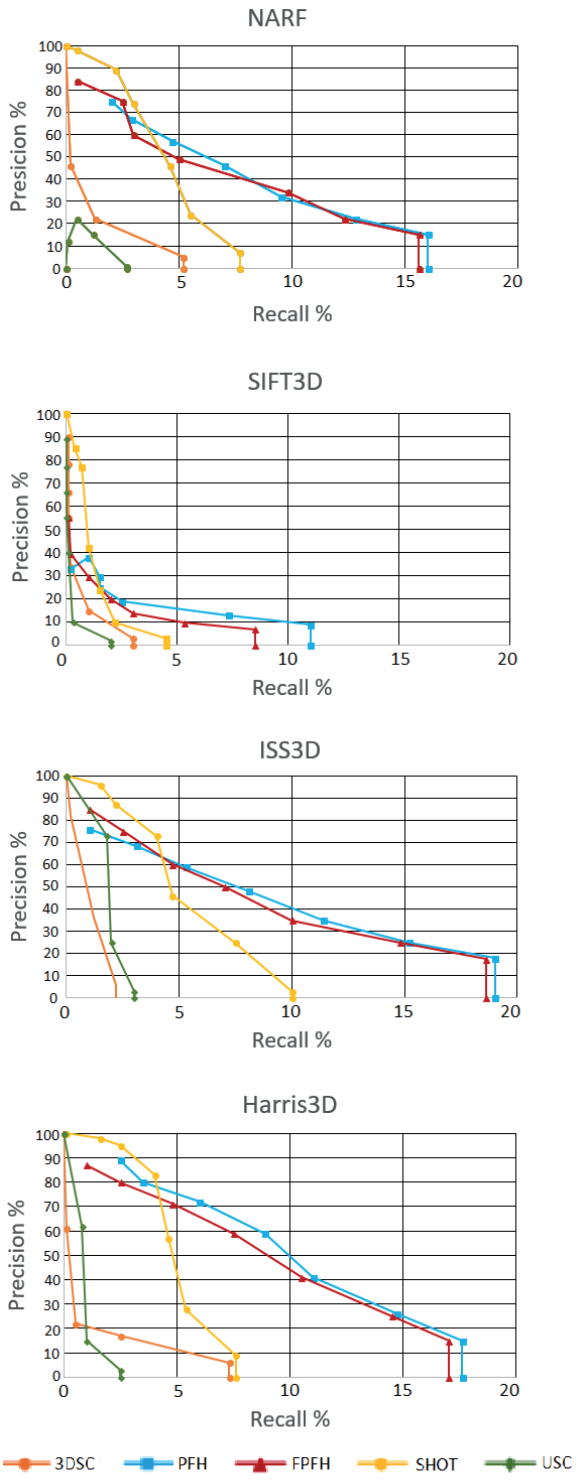
Obr. 2: Výsledky relatívnej (hore) a absolútnej (dole) opakovateľnosti testovaných detektorov.

tegovať zaujímavé body na početnejšom objekte za rovnaký čas, ako pri objekte s menším počtom bodov.

Pri testovaní deskriptorov sme na testovanie zvolili deskriptory 3DSC, PFH, FPFH, SHOT a USC. S cieľom preukázať vplyv detektora na výkon jednotlivých deskriptorov sme testovali štyri rôzne kombinácie s detektormi (SIFT3D, Harris3D, NARF, ISS3D) na rovnakých dátach. Testy prebiehali prvotnou detekciou zaujímavých bodov na testovaných modeloch a scénach. Po detekcii zaujímavých bodov nasledovalo párovanie príznakov pre vytvorenie grafov citlivosti a presnosti zobrazených na obrázku 3.

Celková výkonnosť deskriptorov spolu s detektorom SIFT3D je najnižšia v porovnaní s výsledkami, ktoré sme dosiahli v kombináciách s detektormi Harris3D, ISS3D a NARF. Detektor SIFT3D pri testovaní detektorov mal zo všetkých štyroch detektorov najhoršie výsledky, relatívne nízku opakovateľnosť výsledných zaujímavých bodov, čo vplýva na nízke výsledky pri párovaní príznakov. Vzhľadom na tieto výsledky môžeme vyhodnotiť, že zvolenie vhodnej metódy na detekciu zaujímavých bodov môže zvýšiť výkon párovania príznakov.

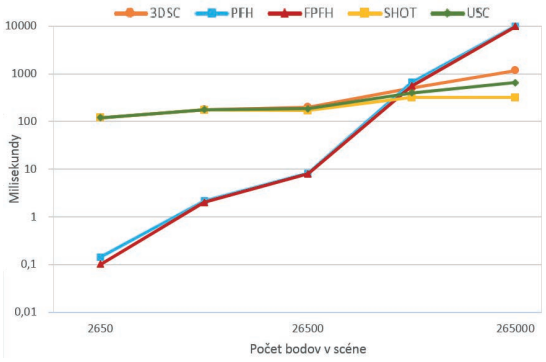
Pri kombináciách s detektorom Harris3D a ISS3D je celkový výkon porovnateľný, čo je spôsobené po-



Obr. 3: Výkon testovaných deskriptorov v kombinácií s testovanými detektormi.

dobným výkonom pri detekcii zaujímavých bodov. V kombinácii deskriptorov s detektorom NARF dosa-

hujeme lepšie výsledky, až na deskriptor USC, ktorý pri tejto kombinácii dosahuje horšie výsledky v porovnaní s ďalšími troma kombináciami. Úroveň výkonnosti deskriptorov pri detektoroch ISS3D, Harris3D a NARF je v porovnaní veľmi podobná, až na kombinácie s detektorom SIFT3D, ktoré dosahovali nižší výkon.



Obr. 4: Graf priemerných časov výpočtov potrebných na popísanie rôzneho počtu zaujímavých bodov.

Výpočtová efektívnosť nás zaujímala aj pri vybranej množine testovaných deskriptorov. Testovanie prebiehalo na objektoch a scénach s rôznym počtom detegovaných zaujímavých bodov. Výsledné výpočtové časy pri jednotlivých testoch deskriptorov sme pre lepšiu prehľadnosť spriemerovali. Výsledné priemery pri rôznych počtoch zaujímavých bodov sme znázornili pomocou grafu na obrázku 4 v milisekundách.

Pri malom počte zaujímavých bodov sa najlepšie výpočtovo efektívny javí deskriptor PFH a jeho rýchlejšia modifikácia FPFH. Výpočtový čas tých dvoch deskriptorov je skoro identický. Ďalšia trojica testovaných dekriptorov 3DSC,USC a SHOT mali oproti PFH a FPFH pri menšom počte bodov oveľa vyšší čas výpočtu, no pri vyššom počte zaujímavých bodov ich dokázali opísať rýchlejšie. Pri tejto množine deskriptorov je náročné zvoliť jednoznačný najefektívnejší deskriptor. Ak by sme chceli predísť dlhším časovým výpočtom, pri vyššom počte bodov na úkor zvýšenia času výpočtu pri malých hodnotách, za výpočtovo najefektívnejší deskriptor by sme zvolili deskriptor z trojice 3DSC, USC a SHOT.

5 Záver

V teoretickej časti sme predstavili metódy na detekciu a deskripciu príznakov objektov reprezentovaných pomocou mračna bodov. Pri praktickom testovaní sme zvolili detektory SIFT3D, Harris3D, NARF a ISS3D, ktoré sme následne použili na overenie výkonnosti deskriptorov 3DSC, PFH, FPFH, SHOT a USC. V prvej časti testovania nás zaujímala relatívna a absolútna opakovateľnosť bodov a výpočtová efektívnosť detektorov NARF, SIFT3D, ISS3D a Harris3D. Pri testovaní deskriptorov sme vytvorili rôzne kombinácie testovaných detektorov s deskriptormi 3DSC, PFH, FPFH, SHOT a USC, s cieľom preukázať vplyv zvoleného detektora na výkon deskripcie. Súbor testov sme vyhodnocovali do štyroch množín, vzhľadom na použitý detektor. Práca splnila očakávaný cieľ, na základe teoretických poznatkov sme rozlíšili metódy pomocou algoritmických odlišností a s využitím praktického testovania sme dospeli k výsledkom, ktoré môžeme využiť pri budúcom výskume.

Literatúra

[Belongie et al., 2002] Belongie, S., Malik, J., and Puzicha, J. (2002). Shape matching and object recognition using shape contexts. *IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence*, 24(4):509–522.

[Chen and Bhanu, 2007] Chen, H. and Bhanu, B. (2007). 3d free-form object recognition in range images using local surface patches. *Pattern Recognition Letters*, 28(10):1252–1262.

[Flint et al., 2007] Flint, A., Dick, A., and Van Den Hengel, A. (2007). Thrift: Local 3d structure recognition. In *Digital Image Computing Techniques and Applications, 9th Biennial Conference of the Australian Pattern Recognition Society on*, pages 182–188. IEEE.

[Frome et al., 2004] Frome, A., Huber, D., Kolluri, R., Bülow, T., and Malik, J. (2004). Recognizing objects in range data using regional point descriptors. *Computer vision-ECCV 2004*, pages 224–237.

[Głomb, 2009] Głomb, P. (2009). Detection of interest points on 3d data: Extending the harris operator. In *Computer Recognition Systems 3*, pages 103–111. Springer.

[Harris and Stephens, 1988] Harris, C. and Stephens, M. (1988). A combined corner and edge detector. In *Alvey vision conference*, volume 15, pages 10–5244. Manchester, UK.

[Levoy et al., 2005] Levoy, M., Gerth, J., Curless, B., and Pull, K. (2005). The stanford 3d scanning repository. *URL http://www-graphics. stanford. edu/data/3dscanrep*.

[Lowe, 2004] Lowe, D. G. (2004). Distinctive image features from scale-invariant keypoints. *International*

journal of computer vision, 60(2):91–110.

[Mian et al., 2006] Mian, A. S., Bennamoun, M., and Owens, R. (2006). Three-dimensional model-based object recognition and segmentation in cluttered scenes. *IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence*, 28(10):1584–1601.

[Pratikakis et al., 2010] Pratikakis, I., Spagnuolo, M., Theoharis, T., and Veltkamp, R. (2010). A robust 3d interest points detector based on harris operator. In *Eurographics workshop on 3D object retrieval*, volume 5.

[Rusu et al., 2009] Rusu, R. B., Blodow, N., and Beetz, M. (2009). Fast point feature histograms (fpfh) for 3d registration. In *Robotics and Automation, 2009. ICRA'09. IEEE International Conference on*, pages 3212–3217. IEEE.

[Rusu and Cousins, 2011] Rusu, R. B. and Cousins, S. (2011). 3d is here: Point cloud library (pcl). In *Robotics and automation (ICRA), 2011 IEEE International Conference on*, pages 1–4. IEEE.

[Steder et al., 2011] Steder, B., Rusu, R. B., Konolige, K., and Burgard, W. (2011). Point feature extraction on 3d range scans taking into account object boundaries. In *Robotics and automation (icra), 2011 ieee international conference on*, pages 2601–2608. IEEE.

[Tombari et al., 2010a] Tombari, F., Salti, S., and Di Stefano, L. (2010a). Unique shape context for 3d data description.

[Tombari et al., 2010b] Tombari, F., Salti, S., and Di Stefano, L. (2010b). Unique signatures of histograms for local surface description. In *European conference on computer vision*, pages 356–369. Springer.

[Tombari et al., 2011] Tombari, F., Salti, S., and Di Stefano, L. (2011). A combined texture-shape descriptor for enhanced 3d feature matching. In *Image Processing (ICIP), 2011 18th IEEE International Conference on*, pages 809–812. IEEE.

[Weinmann, 2016] Weinmann, M. (2016). Reconstruction and analysis of 3d scenes. *Springer International Publishing, Cham. doi*, 10:978–3.

[Zhong, 2009] Zhong, Y. (2009). Intrinsic shape signatures: A shape descriptor for 3d object recognition. In *Computer Vision Workshops (ICCV Workshops), 2009 IEEE 12th International Conference on*, pages 689–696. IEEE.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 230–239
ISBN 978-8081470882, © 2018 Michal Hradečný

Vyhľadávanie konkrétnej osoby vo videu podľa vizuálneho vzoru

Michal Hradečný*

Školiteľ: Zuzana Černeková†

Katedra aplikovanej informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt: Tento článok sa venuje problematike rozpoznávania ľudí na základe detegovanej tváre a natrénovaného klasifikátora s extrahovanými príznakmi. Popisuje proces rozpoznávania človeka porovnaním jeho tváre s databázou tvárí. Tento proces zahŕňa najmä problém detekcie tváre a extrahovanie príznakov s najvyššou informačnou hodnotou. V článku je otestovaných viacero možných modelov pre obidva tieto problémy a porovnanie ich výsledkov.

Kľúčové slová: rozpoznávanie, matlab, detekcia, klasifikátor, príznaky

Úvod

Rozpoznávanie tvárí pomocou počítačových aplikácií je v dnešnej digitalizovanej dobe, kde na každom kroku na ľudí striehne na stenách kamera čoraz aktuálnejšia téma. Typické využitie takýchto aplikácií je v bezpečnostných systémoch. Z digitálneho obrázka alebo videa sa dajú identifikovať alebo verifikovať osoby na základe porovnania čŕt ich tváre s dostupnou databázou ľudí a ich tvárí.

Takéto systémy majú veľký rozsah využitia. Môžeme sa s nimi bežne stretnúť pri cestovaní na letiskách alebo hraničných priechodoch, na porovnávanie tvárí s fotografiami v ich cestovných pasoch alebo vodičských preukazoch, pri vchodoch do štadiónov, či dokonca na zabránenie volebných podvodov. Kým rozpoznávanie osôb má veľké využitie v bezpečnostných systémoch na identifikáciu potenciálnych zločincov či teroristov, jeho využitie nekončí len pri bezpečnosti. V poslednej dobe sa začali takéto systémy využívať aj v komerčnej sfére života. Napríklad v mobilných telefónoch na ich odomknutie pomocou prednej kamery, v digitálnych kamerách na zameranie a odmeranie osvetlenia tváre, či na kontrolu dochádzky v práci. Aplikácie na rozpoznávanie tvárí osôb majú však svoje problémy a nie sú vždy presné. Občas priradia nesprávnu osobu z databázy k nasnímanej osobe a veľký problém spočíva taktiež v otočení , poprípade osvetlení tváre na snímkach.

*ze.tor@hotmail.com
†zuzana.cernekova@fmph.uniba.sk

Rozpoznávanie tváre (face recognition) je podtrieda rozsiahlejšieho odboru rozpoznávania objektov (object recognition) a v mnohých prípadoch používa rovnaké metódy výpočtov.

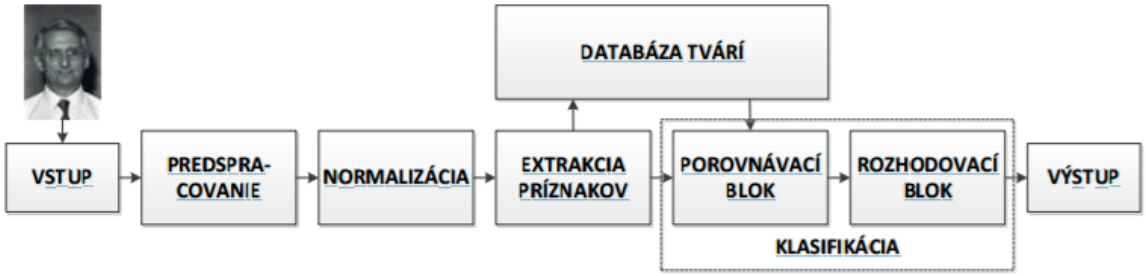
1 Proces rozpoznávania

Rozpoznávanie tvárí je zložitý proces, ktorý sa skladá z viacerých podprocesov. Na dosiahnutie efektívneho systému rozpoznávania treba všetky tieto podprocesy riešiť. Jednotlivé procesy sa dajú rozdeliť do blokov a vytvoriť model, ktorý je znázornený na obrázku Obr.1.

1.1 Model rozpoznávania tvárí

Opis blokov modelu rozpoznávania tvárí [Ban, 2014]:

- Vstup - Vstupný obrázok s tvárou osoby na identifikáciu alebo verifikáciu.
- Predspracovanie – využíva sa, ak je potrebné vstupné dáta špeciálne upraviť pre rozpoznávací systém, napr. detekcia tváre v obraze, odstránenie šumu alebo vrátenie vstupných dát a žiadosť o opätovné zosnímanie. Vstupom je zosnímaná tvár a výstupom je upravený obraz.
- Normalizácia – Normalizácia tváre, spočíva napríklad v úprave pozície a natočenia tváre alebo zmene v škálovaní.
- Extrakcia príznakov – extrahuje charakteristiky s najvyššou informačnou hodnotou; výstupom je vektor príznakov. Pri trénovaní systému sa tieto vektory ukladajú do databázy, pri rozpoznávaní postupuje tento vektor do ďalšieho - porovnávacieho bloku.
- Porovnávací blok – porovnáva vstupný vektor príznakov s vektormi uloženými v databáze, na základe určenej klasifikačnej metódy.
- Rozhodovací blok – na základe predošlých výpočtov určí (alebo overí) identitu vstupnej



Obr. 1: Model rozpoznávania tvárí

osoby, prípadne zamietne vstupnú osobu, ak sa v danom systéme nenachádza.

- Výstup – výstupné zariadenie, napr. displej, zobrazí výsledok rozpoznávania - identita alebo záznam vstupnej osoby, prípadne zamietnutie.

2 Detekcia tváre

Predtým než budeme môcť rozhodnúť či sa na obrázku nachádza niektorá osoba z databázy, musíme byť najprv schopný nájsť všetky tváre na obrázku, ktoré chceme porovnávať (poprípade určiť, či sa na obrázku vôbec nejaká tvár nachádza). Na tento účel existuje viacero možných algoritmov.

2.1 Viola-Jones

Jedným z najpoužívanejších je algoritmus Viola-Jones [Viola and Jones, 2001], ktorý slúži primárne na detegovanie frontálnych tvárí na obrázku, ale dá sa natrénovať na detegovanie rôznych objektov (napr. hľadanie horných častí tela, či nosov, očí). Viola-Jones využíva podobnosť ľudských tvárí na ich detegovanie [Boda and Priyadarsini, 2016]. Napríklad okolie očí býva tmavšie ako lícne kosti, alebo nos býva svetlejší ako okolie očí. Tieto príznaky ľudskej tváre sú reprezentované v takzvaných Haarovych príznakoch, znázornené na Obr. 2 a Obr. 3. Hodnota príznaku v Haarovych príznakoch je vypočítaná ako suma pixlov v svetlej časti odpočítaná od sumy pixlov v tmavej časti štvoruholníka.

Nevýhodou algoritmu Viola-Jones je, že kvôli jednoduchosti Haarovych príznakov je nespoľahlivý v nekontrolovaných podmienkach, kde tvár je v rôznych pózach a natočeniach, alebo je nezvyčajne osvetlená. Tento detektor poskytuje vysokú rýchlosť



Obr. 2: Haarov príznak, ktorý sa podobá okoliu očí aplikovaný na obrázok



Obr. 3: Haarov príznak, ktorý sa podobá nosu aplikovaný na obrázok

detekcie (často používaný v real-time systémoch detekcie), ale iba priemernú presnosť detekcie.

2.2 Neurónové siete

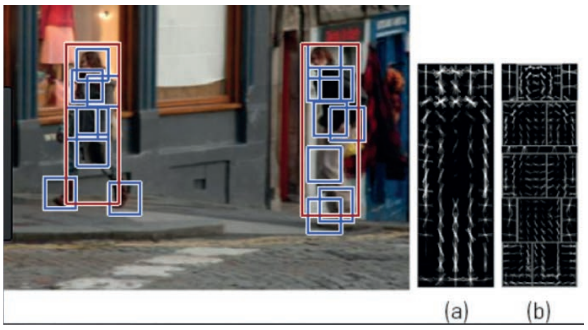
Ďalšia možnosť nájdenia tváre v obrázku zahŕňa využitie konvolučných neurónových sietí (Convolutional Neural Network - CNN) [Taigman et al., 2014]. Tieto neurónové siete treba natrénovať trénovaciou množinou negatívnych trénovacích prvkov a množinou tvárí osôb v rôznych pózach a natočeniach. Platí, že čím väčšia je trénovacia množina neurónových sietí, tým väčšia je ich presnosť. To je aj ich nevýhoda, keďže na vytvorenie efektívnej neurónovej siete je potrebné mať veľké množstvo (niekoľko tisíc) prvkov v trénovacej množine. Z tohto dôvodu sme sa neurónovými sieťami podrobnejšie nezaobe-

rali. Vďaka širokým možnostiam natrénovania neurónovej siete, je možné lepšie detegovať aj tváre vo väčších natočeniach a s rôznymi grimasami na tvári. Obidva spomenuté spôsoby detegovania tváre využívajú takzvanú kaskádovú architektúru (Cascade architecture). Úlohou tejto architektúry je znížiť výpočtovú náročnosť daných algoritmov , využitím rozdelenia obrázku na subregióny. Tieto regióny sú skúmané na nižších rozlíšeniach alebo slabších klasifikátoroch, aby mohli byť rýchlo odpísané ak tam určite nie je tvár. V každej ďalšej fáze sa subregióny, ktoré postúpili ako potenciálna tvár, skúmajú vo vyšších rozlíšeniach / silnejších klasifikátoroch a odmietajú sa ďalšie subregióny. Nakoniec zostanú len regióny s tvárou.

2.3 Deformable parts model (DPM)

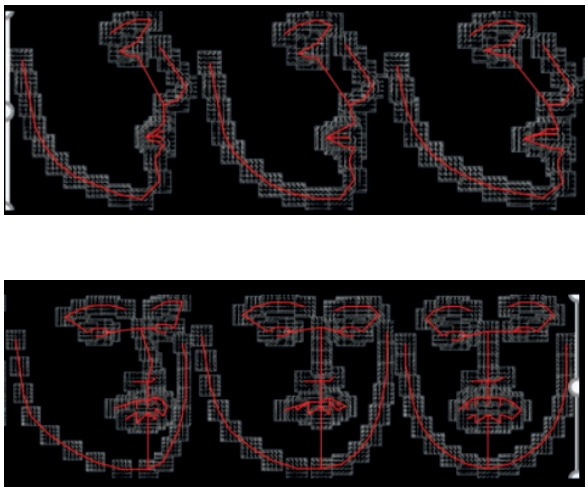
Vďaka jeho silným výsledkom detekcie sa DPM model presadil ako de-facto štandard generickej detekcie objektov [Mathias et al., 2014]. DPM predpokladá, že objekt sa skladá z viacerých jeho častí. Detektor najprv nájde zhodu s celým objektom a potom používa model jeho častí na upravenie výsledku, ako znázornené na Obr. 4 [Zhu and Ramanan, 2012].

Vďaka princípu deformovateľnosti jednotlivých častí objektu vie DPM model identifikovať aj čiastočne zakryté alebo zmenené objekty. Obr. 5 znázorňuje model deformovateľných častí ľudskej tváre, ktorý nemá problém identifikovať tvár ani s rôznymi výrazmi tváre a grimasami.



Obr. 4: Princíp DPM modelu s HOG príznakmi

DPM detektor nie je známy pre svoju rýchlosť. Jeho prednosťou však je schopnosť identifikovať zložité objekty.



Obr. 5: DPM model tváre v rôznych natočeniach s HOG príznakmi

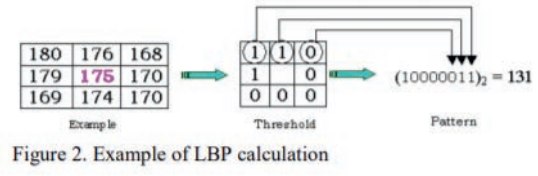
3 Extrahovanie príznakov

Vo väčšine odborných článkov a literatúre zameranej na rozpoznávanie ľudských tvárí sa autori venujú hlavne extrakcii príznakov a ich následnému porovnávaniu. Extrakcia vhodných príznakov je jedna zo základných úloh rozpoznávania tvárí. Pre zjednodušenie celého procesu, ale aj výpočtovej a časovej náročnosti, je snahou vybrať (extrahovať) iba najvýznamnejšie charakteristiky, resp. dáta s najvyššou informačnou hodnotou – tzv. príznaky.

3.1 Local Binary Pattern (LBP)

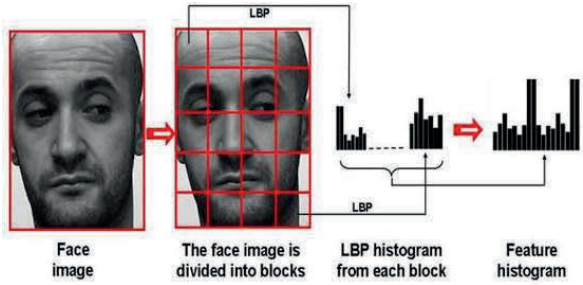
Local Binary Pattern (LBP) príznaky dosahujú dobre výsledky v rôznych aplikáciách. Používajú sa napríklad na klasifikáciu textúry a segmentáciu, alebo kontrolu povrchu. Originálny LBP operátor priraďuje hodnoty pixlom obrázkov na základe porovnávania hodnoty stredného pixlu s jeho 3x3 okolím. Výsledkom tohto porovnania je binárny výsledok 1 ak je hodnota väčšia ako stredný pixel alebo 0 ak je menšia. Obr 6. zobrazuje kalkuláciu LBP príznakov [Rahim et al., 2013].

Lokálne primitíva, ktoré sú kodifikované týmito príznakmi môžu predstavovať rôzne zaoblené rohy, ploché oblasti a podobne. LBP operátor sa dá prispôsobiť na rôzne veľkosti susedných oblastí okrem 3x3. Každý obrázok tváre sa dá chápať ako kompozícia micro-vzorcov, ktoré sa dajú efektívne detegovať pomocou LBP operátora. Na zakódovanie informácii o týchto vzorcoch v tvári je tento obrázok roz-



Obr. 6: Ukážka LBP kalkulácie

delený na M malých neprekrývajúcich sa regiónov. LBP histogram extrahovaný z každého z týchto regiónov je potom spojený do jedného priestorovo rozšíreného histogramu. Výsledný histogram reprezentuje lokálnu textúru a celkový tvar tváre. Tento proces je zobrazený na obrázku 7.



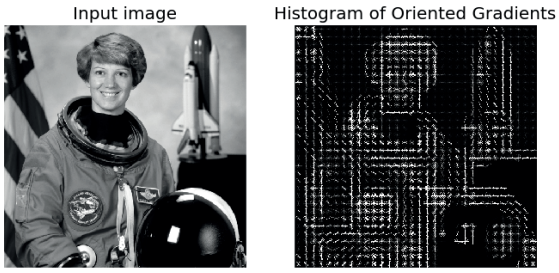
Obr. 7: Reprezentácia tváre pomocou LBP

3.2 Histogram orientovaných gradientov (HOG)

HOG algoritmus je založený na myšlienke, že tvar a výzor lokálnych objektov v obrázku sa dá opísať distribúciou intenzít gradientov. Gradient je vektor definovaný dvoma premennými: smer a magnitúda. Tieto dve premenné majú iný výpočet, ale obidve sú vypočítané pomocou procesu konvolúcie. Smer gradientu je kolmý k smeru rohov. Magnitúda gradientu obsahuje informáciu o sile rohu (intenzita pixlov v danom regióne je výrazne rozdielna od okolitých pixlov). Obrázok je rozdelený na malé spojené regióny, tkz. bunky (cells). Pre pixle v každom z týchto buniek je vytvorený histogram smeru gradientov. Deskriptor je vytvorený zlúčením všetkých týchto histogramov.

Keďže HOG deskriptor sa počíta na lokálnych bunkách, je invariantný voči geometrickým a fotometrickým transformáciám, okrem zmenám v orientácii objektu.

HOG deskriptor sa dá použiť pre rozpoznávanie objektov tým, že sa poskytne algoritmom strojového učenia ako príznakový vektor. HOG príznaky sa používajú najmä v spojení s tkz. Support vector machines (SVM) klasifikátorom. HOG príznaky sú zobrazené na obrázku 8.



Obr. 8: Reprezentácia osoby pomocou HOG

3.3 Eigenfaces

Eigenfaces je názov pre prístup k rozpoznávaniu tvárí, ktorý je založený na zachytení rozdielov medzi množinou obrázkov tvárí a použití tejto informácie na zakódovanie a porovnávanie jednotlivých tvárí holistickým spôsobom (na rozdiel od spôsobov založených na porovnávaní príznakov alebo regiónov obrázkov). Eigenfaces sú hlavné komponenty (principal components) distribúcie tvárí, respektíve eigenvektory kovariančnej matice množiny obrázkov tvárí. Obrázok s N pixelmi je reprezentovaný ako bod (alebo vektor) v N-rozmernom priestore. Eigenfaces prístup je mnohými považovaný za prvú funkčnú technológiu rozpoznávania tvárí. Často sa používa ako základná porovnávacia metóda, na demonštrovanie minimálnej výkonnosti očakávanej od podobných systémov.

Princíp Eigenfaces algoritmu je založený na dvoch úlohách:

1. Extrahuj najrelevantnejšie informácie o tvári, ktoré môžu ale nemusia byť podobné ľudskej intuícii o hlavných príznakoch tváre ako oči, nos a pery. Jedným spôsobom ako to dosiahnuť je zachytenie štatistickej variácie medzi obrázkami tvárí.

2. Reprezentuj obrázok tváre efektívne. Na redukovanie výpočtovej náročnosti a priestorovej komplexnosti môže byť každý obrázok tváre reprezentovaný použitím malej množiny parametrov (príznaky, ktoré sú na každej tvári rovnaké, alebo ich výpovedná hodnota je veľmi malá sú zahodené).

Eigenfaces sa dajú chápať ako množina príznakov, ktoré charakterizujú globálnu variáciu medzi obrázkami tvárí. Potom je každá tvár aproximovaná použitím podmnožín z eigenfaces, ktoré sú spojené s najväčšími hodnotami (eigenvalues). Tieto príznaky zahŕňajú najviac variácie v tréningovej množine obrázkov.

Obrázok 9: Ľavý obrázok v hornom riadku predstavuje priemernú tvár z trénovacej množiny, ďalšie dve obrázky v hornom riadku sú eigenfaces s najvyšším hodnotením. Druhý riadok predstavuje tri najhoršie hodnotené eigenfaces (majú najmenšiu hodnotu eigenvalue).

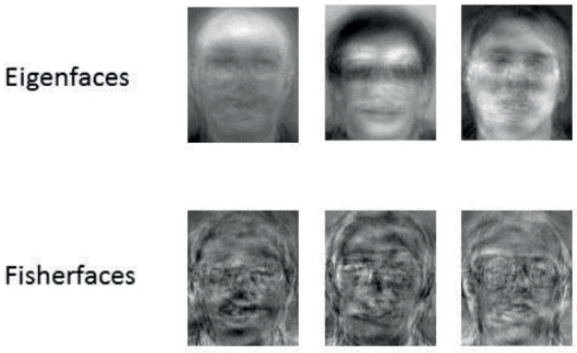


Obr. 9: Ukážka eigenfaces

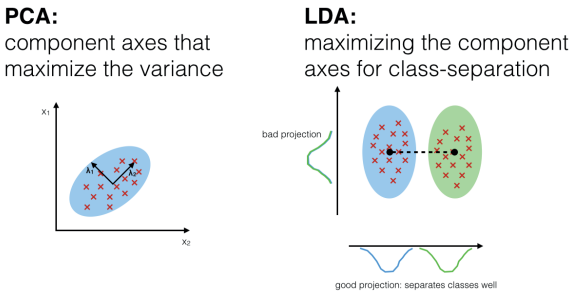
3.4 Fisherfaces

Kľúčový problém v počítačovom videní, rozpoznávaní obrazcov a strojovom učení spočíva vo vhodnom reprezentovaní dát pre vybraný problém. Jeden spôsob ako reprezentovať vstupné dáta je nájsť podpriestor, ktorý reprezentuje najviac variácie v dátach. Tento podpriestor sa dá získať použitím procedúry s názvom Principal Components Analysis (PCA). Aplikovaním na množinu obrázkov tvárí, PCA vracia množinu premenných s názvom eigenfaces. Tento spôsob reprezentovania dát zaisťuje, že variácia dát je zachovaná a zároveň eliminuje nepotrebné existujúce korelácie medzi originálnymi príznakmi vzorových vektorov.

Ak je úlohou klasifikácia namiesto reprezentácie, je vhodnejšie nájsť podpriestor, ktorý mapuje vzorové vektory rovnakej triedy na jednom mieste príznakovej reprezentácie a vzorové vektory ostatných tried čo najďalej od seba. Techniky na dosiahnutie takéhoto usporiadania sa nazývajú diskriminačné analýzy (discriminant analysis). Najznámejšia takáto technika sa nazýva lineárna diskriminačná analýza (LDA). Keď sa použije LDA (Obr. 11) na reprezentáciu podpriestoru množiny obrázkov tvárí, výsledné bázové vektory (basis vectors) popisujúce daný priestor sa nazývajú Fisherfaces (Obr. 10).



Obr. 10: Porovnanie eigenfaces a fisherfaces

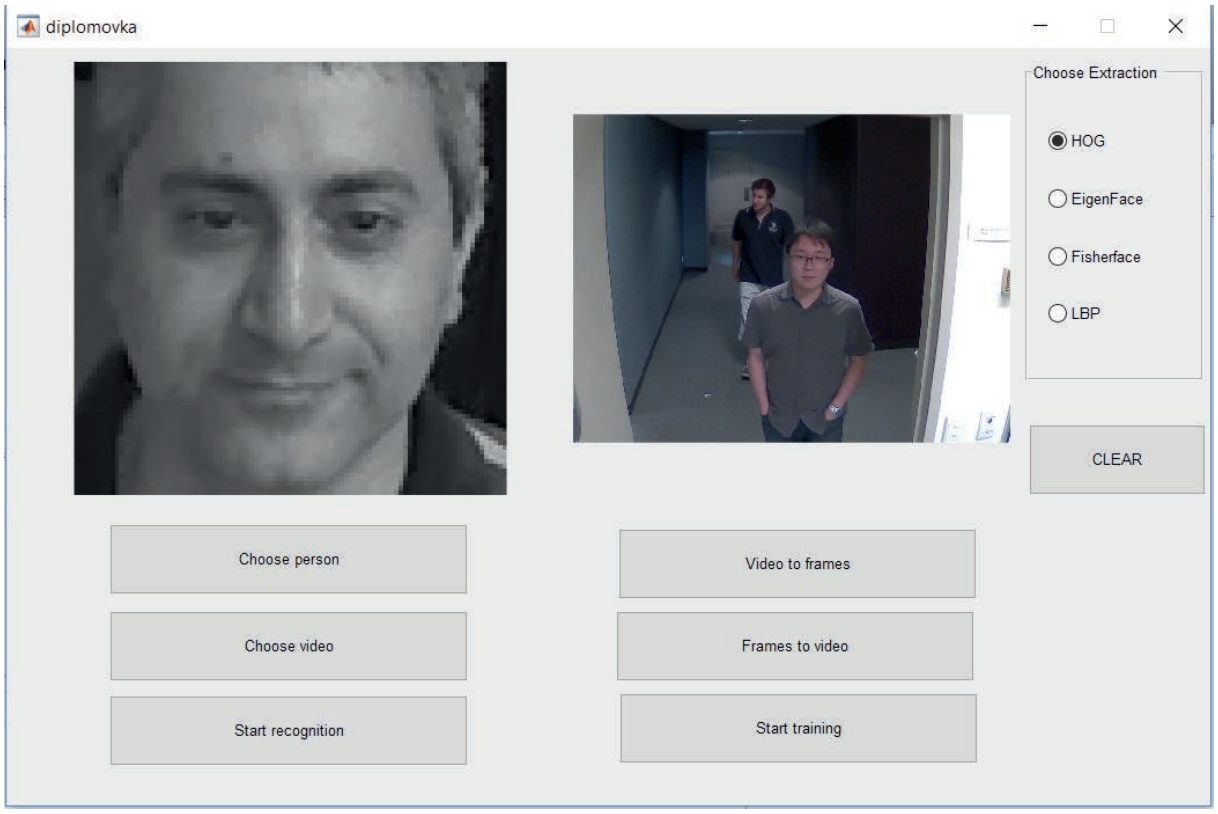


Obr. 11: Rozdiel medzi PCA (eigenfaces) a LDA (fisherfaces) rozdelením priestoru

4 Návrh používateľského rozhrania (GUI)

Rozpis funkcionality používateľského rozhrania na Obr. 12.

- Choose person - Výber hľadanej osoby (dialóg)
- Choose video - Výber videa, v ktorom má algoritmus hľadať vybranú osobu (dialóg)
- Start recognition - Spustí vyhľadávanie vybranej osoby vo vybranom videu.



Obr. 12: Používateľské rozhranie

- Video to frames - Konverzia a uloženie vybraného videa na snímky do vytvoreného priečinka (dialóg)
- Frames to video - Konverzia a uloženie vybraného priečinka snímok na video do vytvoreného priečinka (dialóg)
- Start training - Spustí natrénovanie klasifikátora podľa vybraného spôsobu extrahovania príznakov.
- Choose Extraction - Zaklikávaci box možností extrahovania príznakov
- Clear - vyčistenie a zatvorenie všetkých axis a figures (vygenerovaných obrázkov)
- Ľavý obrázok - profil hľadanej osoby
- Pravý obrázok - snímky z vybraného videa

4.1 Postup algoritmu rozpoznávania

1. Výber databázy osôb na natrénovanie klasifikátora.
2. Výber spôsobu extrahovania príznakov z detegovaných tvárí osôb z dostupných možností (LBP, HOG, Fisherface, Eigenface, SURF,...).
3. Natrénovanie klasifikátora
4. Výber hľadanej osoby
5. Výber videa, v ktorom má algoritmus hľadať vybranú osobu
6. Prechádzanie snímok videa a detegovanie tvárí pomocou zvoleného detektora.
7. Extrahovanie príznakov z detegovaných tvárí pomocou spôsobu zvoleného v kroku 2.
8. Predikcia detegovaného človeka pomocou natrénovaného klasifikátora.

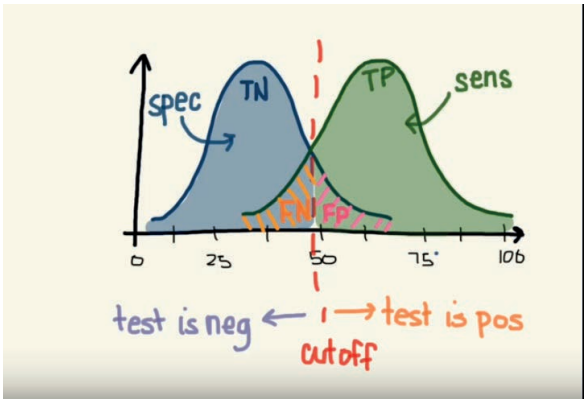
9. Ak nie je detegovaná hľadaná osoba, prechádzajú sa ďalšie snímky. Ak je detegovaná hľadaná osoba, kontroluje sa správnosť detekcie (nachádza sa hľadaná osoba aj v nasledujúcich snímkach?)

10. Ak sa hľadaná osoba nájde a prejde kontrolou správnosti detekcie, algoritmus sa zastaví a vyhodí pozitívny výsledok hľadania. Inak vyhodí na konci negatívny výsledok hľadania.

5 Meranie presnosti

V štatistike, meranie diagnostickej schopnosti binárneho klasifikačného systému sa znázorňuje pomocou tzv. ROC krivky (Receiver operating characteristic curve). Táto krivka ukazuje vzťah medzi špecifikáciou a senzitivitou daného testu alebo detektoru pre všetky prístupné hodnoty prahu (Obr. 13).

- tp - true positive (v realite je výskyt pozitívny a test našiel správne pozitívny)
- tn - true negative (v realite je výskyt negatívny a test našiel správne negatívny)
- fp - false positive(v realite je výskyt negatívny a test našiel nesprávne pozitívny)
- fn - false negative(v realite je výskyt pozitívny a test našiel nesprávne negatívny)



Obr. 13: Sensitivy a Specificity

Sensitivity (Recall):

$$\frac{tp}{tp+fn} = Sensitivity \tag{1}$$

False negative rate (FNR):

$$\frac{fn}{tp+fn} = FNR \tag{2}$$

Alebo

$$FNR = 1 - Sensitivity \tag{3}$$

Sensitivity a False negative rate sú komplement jeden druhého, keďže obidve merania záležia na pozitívnych výskytoch v binárnych meraniach (človek je chorý, objekt sa nachádza na fotke, ...).

Tým pádom súčet Sensitivity a False negative rate dáva dokopy 1 alebo 100 percent.

$$Sensitivity + FNR = 1 \tag{4}$$

Specificity:

$$\frac{tn}{tn+fp} = Specificity \tag{5}$$

False positive rate (FPR):

$$\frac{fp}{tn+fp} = FPR \tag{6}$$

Alebo

$$FPR = 1 - Specificity \tag{7}$$

Podobne ako Sensitivity a False negative rate, Specificity a False positive rate sú taktiež kompliment jeden druhého. Obidve merania záležia na negatívnych výskytoch v binárnych meraniach (človek nie je chorý, objekt sa nenachádza na fotke, ...).

Tým pádom súčet Specificity a False positive rate dáva dokopy 1 alebo 100 percent.

$$Specificity + FPR = 1 \tag{8}$$

6 Výsledky testovania

6.1 Testovacia databáza

Na otestovanie efektívnosti vytvorenej aplikácie na vyhľadávanie konkrétnej osoby na videu je potrebné mať k dispozícii dostatočne veľkú testovaciu databázu. Databáza by mala obsahovať obrázky tvárí osôb nafotených spredu, ako aj z rôznych uhlov. Taktiež je treba mať k dispozícii dostatočne veľkú vzorku videí, v ktorých sa nachádzajú nafotené osoby z databázy. Na testovanie výsledkov bola použitá jedna takáto voľne dostupná videodatabáza, ktorá sa

nazýva ChokePoint Dataset [Wong et al., 2011]. Obsahuje videozáznamy z chodieb pracoviska v 3 rôznych uhloch v dvoch lokalitách. Táto databáza simuluje reálne kamerové systémy na pracoviskách.

Obrázky tvárí osôb majú rozmer 96x96 pixlov a sú v čiernobielom PGM formáte. Snímky z kamier majú rozmer 800x600 pixlov a sú v JPG formáte.

6.2 Detekcia pomocou Viola-Jones

Testované na testovacej množine 100 obrázkov(framov). Celkové výsledky testovania detekcie pomocou Viola-Jones sú znázornené v tabuľke 1. Priemerná rýchlosť detekcie tvárí vo framoch na testovacej množine 100 framov je 0.3256 sekúnd. Ukážka výsledku detegovania pomocou Viola-Jones detektora je vidieť na Obr. 14.

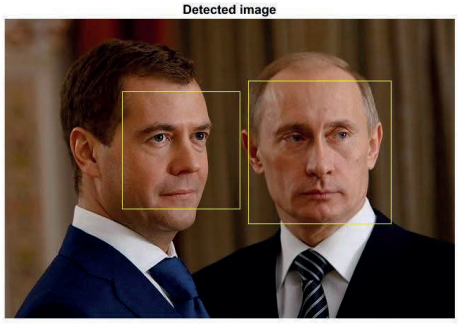
Sensitivity: 0.96

Specificity: 0.62

False positive rate (FPR): 0.38

False negative rate (FNR): 0.04

Viola-Jones má veľmi rýchly čas výpočtu iba 0.3256 sekundy na jednu snímku. Tým sa zaraďuje medzi algoritmy, ktoré by sa dali použiť aj pri real-time systémoch detekcie. Má však pomerne vysokú hodnotu False positive rate, čiže nachádza veľa tvárí aj tam, kde sa žiadne nenachádzajú. False negative rate má však na vybranej testovacej množine veľmi dobrý, iba 0.04. Dokázal tým pádom úspešne detegovať takmer všetky tváre. Je však treba poznamenať, že vybraných 100 testovacích obrázkov obsahovalo tváre nasnímané z kamerového systému väčšinou pod uhlom menším ako 40 stupňov. Dá sa predpokladať, že pri väčších uhloch by boli výsledky horšie.



Obr. 14: Ukážka Viola-Jones detekcie

6.3 Výsledky Deformable parts model (DPM) detekcie

Testované na testovacej množine 100 obrázkov(framov). Celkové výsledky testovania detekcie pomocou DPM sú znázornené v tabuľke 2. Priemerná rýchlosť detekcie tvárí vo framoch na testovacej množine 100 framov je 20.438 sekúnd. Ukážka výsledku detegovania pomocou DPM detektora je vidieť na Obr. 15.

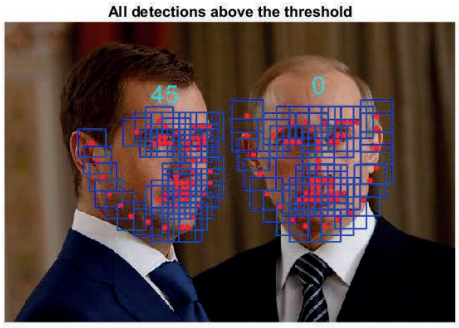
Sensitivity: 0.908

Specificity: 1

False positive rate (FPR): 0

False negative rate (FNR): 0.092

DPM má veľmi pomalý čas výpočtu 20.438 sekundy na jednu snímku. Vďaka vstavanému a nastaviteľnému prahu (thresholdu) detekcie má nulový False positive rate, čiže nemá žiadne false positive detekcie. False negative rate má na vybranej testovacej množine veľmi dobrý, iba 0.092. Dokázal tým pádom úspešne detegovať takmer všetky tváre. Napriek lepším výsledkom než má Viola-Jones algoritmus, som sa rozhodol pri testovaní ďalších fáz pre Viola-Jones algoritmus. Dôvodom je, že Viola-Jones má dostatočnú presnosť detekcie pre kamerové systémy, pri ktorých sa dá predpokladať, že osoba je nasnímaná pod 0 až 40 stupňovom uhle a zároveň je nepomerne rýchlejší.



Obr. 15: Ukážka DPM detekcie

6.4 Porovnanie výsledkov

Porovnanie výsledkov rozpoznávania osôb pre rôzne typy príznakov a klasifikátorov sú znázornené na obr. 16. Spomedzi testovaných spôsobov extrahovania príznakov sa iba LBP príznaky ukázali byť ne-

Tabuľka 1: Tabuľka ROC Viola-Jones

		Reality		
		Not found	Found	
Test	Not found	TN = 18	FN = 4	
	Found	FP = 11	TP = 94	
Total		Total negative = 29	Total positive = 98	
	Sensitivity = 0.96	Specificity = 0.62	False positive rate = 0.38	False negative rate = 0.04

Tabuľka 2: Tabuľka ROC DPM

		Reality		
		Not found	Found	
Test	Not found	TN = 20	FN = 9	
	Found	FP = 0	TP = 89	
Total		Total negative = 20	Total positive = 98	
	Sensitivity = 0.908	Specificity = 1.0	False positive rate = 0	False negative rate = 0.092

vhodné na riešenie daného problému vyhľadávania osôb podľa tvárí. Najlepšie výsledky na testovacej množine boli dosiahnuté použitím HOG príznakov v kombinácii s SVM aj KNN klasifikátorom. LBP príznaky mali najhorší výsledok v kombinácii s obidvoma klasifikátormi. Testovaný bol lineárny SVM klasifikátor. KNN klasifikátor bol testovaný pre hodnoty k = 1,3,5,10. Najlepšie výsledky boli dosiahnuté pre k=5 a k=1, pričom rozdiel medzi týmito dvoma hodnotami bol minimálny. Vo finálnej verzii aplikácie a taktiež pri testovaní výsledkov bol použitý KNN klasifikátor s hodnotou k=1, kvôli jeho rýchlosti výpočtu a dobrým výsledkom predikcie.

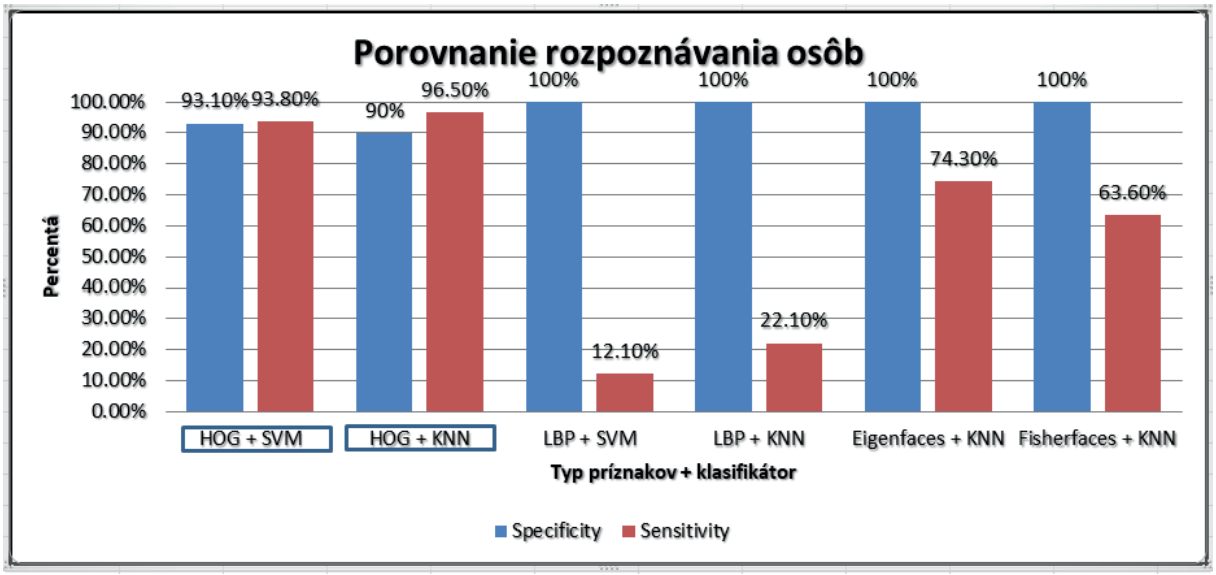
Porovnanie priemerných rýchlosti výpočtu testovaných metód extrahovania príznakov a klasifikátorov sú znázornené na obr. **??**. Z výsledkov je vidno, že v priemere je extrahovanie príznakov z jednej detegovanej tváre veľkosti 96x96 pixlov rýchlejšie ako predikovanie osoby pomocou vyššie spomenutých klasifikátorov. Celkovo sa ako najpomalšia ukázala kombinácia HOG príznakov s SVM klasifikátorom. Najrýchlejší priemerný čas výpočtu mala naopak kombinácia Fisherface príznakov s KNN klasifikátorom. Všetky metódy však dosahovali celkovú priemernú rýchlosť extrahovania príznakov a predikcie osoby klasifikátorom menšiu ako 0.2 sekundy.

6.5 Záver

Podarilo sa nám úspešne implementovať rozpoznávanie osôb na ChokePoint databáze pomocou Viola-Jones detekcie tvárí a následnej normalizácii na rozmer a typ rovnaký, ako sa nachádza v databáze. Detekcia tvárí pomocou DPM modelu sa ukázala byť nevhodná z dôvodu rýchlosti jeho výpočtu. Predikcia osoby sa vykonáva porovnávaním príznakov získanými štyrmi rôznymi spôsobmi extrahovania. Sú to HOG, LBP, Fisherface a Eigenface príznaky. Tieto štyri spôsoby extrahovania boli vybrané na základe naštudovaných materiálov. Eigenface príznaky sú jedným zo štandardných metód rozpoznávania tvárí. Použitie fisherface príznakov slúži na porovnanie výsledkov predikcie zmenou rozdelenia priestoru pomocou LDA namiesto PCA. Predikcia pomocou HOG a LBP príznakov je experiment, či sa dajú efektívne rozpoznávať tváre aj pomocou jednoduchších metód, ktoré sa bežne používajú na rozpoznávanie objektov.

Rýchlosťou výpočtu boli všetky spôsoby extrahovania príznakov a predikcie klasifikátorom priemerne v rozmedzí 0.2 sekundy jeden od druhého. Zároveň mali všetky rýchlosť výpočtu menej ako 0.2 sekundy na jeden obrázok detegovanej tváre.

Rozpoznávanie osôb pomocou HOG, Fisherface a Eigenface príznakov a predikcie pomocou natrénovaného klasifikátora sú schopné rozpoznať konkrétneho človeka z testovaných videozáznamov. Základným predpokladom však je, že sa výzor hľadaných osôb výrazne nezmenil od ich výzoru na obrázkoch v testovacej množine. Jedine LBP príznaky sa ukázali byť nevhodné pre riešenie daného problému, bez ohľadu na použitý typ klasifikátora.



Obr. 16: Porovnanie výsledkov príznakov a klasifikátorov

Literatúra

[Ban, 2014] Ban, J. (2014). ROZPOZNÁVANIE ĽUDSKÝCH TVÁRÍ. volume 1, pages I–I. FEI.

[Boda and Priyadarsini, 2016] Boda, R. and Priyadarsini, M. J. P. (2016). Face detection and tracking using klt and viola jones. *ARPN Journal of Engineering and Applied Sciences*, 11(23):13472–13476.

[Mathias et al., 2014] Mathias, M., Benenson, R., Pedersoli, M., and Van Gool, L. (2014). Face detection without bells and whistles. In *European Conference on Computer Vision*, pages 720–735. Springer.

[Neeru and Kaur, 2016] Neeru, N. and Kaur, L. (2016). Modified sift descriptors for face recognition under different emotions. *Journal of Engineering*, 2016.

[Rahim et al., 2013] Rahim, M. A., Azam, M. S., Hossain, N., and Islam, M. R. (2013). Face recognition using local binary patterns (lbp). *Global Journal of Computer Science and Technology*.

[Taigman et al., 2014] Taigman, Y., Yang, M., Ranzato, M., and Wolf, L. (2014). Deepface: Closing the gap to human-level performance in face verification. In *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, pages 1701–1708.

[Viola and Jones, 2001] Viola, P. and Jones, M. (2001). Rapid object detection using a boosted cascade of simple features. In *Computer Vision and Pattern Recognition, 2001. CVPR 2001. Proceedings of the 2001 IEEE Computer Society Conference on*, volume 1, pages I–I. IEEE.

[Wong et al., 2011] Wong, Y., Chen, S., Mau, S., Sanderson, C., and Lovell, B. C. (2011). Patch-based probabilistic image quality assessment for face selection and improved video-based face recognition. In *IEEE Biometrics Workshop, Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR) Workshops*, pages 81–88. IEEE.

[Zhu and Ramanan, 2012] Zhu, X. and Ramanan, D. (2012). Face detection, pose estimation, and landmark localization in the wild. In *Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), 2012 IEEE Conference on*, pages 2879–2886. IEEE.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 240–241
ISBN 978-8081470882, © 2018 Miloslav Torda

Evaluation of Information-Theoretic Measures in Echo State Networks on the Edge of Stability (Extended Abstract)

Miloslav Torda[1*]

Supervisor: Igor Farkaš[2†]

[1] Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava
[2] Katedra aplikovanej informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Previous work has shown that information processing properties of echo state networks (ESNs) are optimized at the edge of chaos. Our works connects to and extends the work of [Boedecker et al., 2012] by taking a closer look at information measures in case of ESNs.

We have assumed an ESN model with a single input $u(t)$, $N = 100$ reservoir neurons, Q output neurons dependent on the task (120 units for the MC task, and a single unit for the prediction task). The update equations were given by $\mathbf{x}(t) = \tanh(\mathbf{w}^{\text{in}}u(t) + \mathbf{W}\mathbf{x}(t-1))$ and $\mathbf{y}(t) = \mathbf{W}^{\text{out}}\mathbf{x}(t)$. The output weight matrix was computed as $\mathbf{W}^{\text{out}} = \mathbf{U}\mathbf{X}^{+}$ where $\mathbf{U}$ is matrix of past inputs and $\mathbf{X}^{+}$ is the right Moore-Penrose pseudoinverse of $\mathbf{X}$.

We trained the ESNs defined in previous paragraphs to four tasks: 1. *Memory capacity (MC) task*. We measured the performance according to [Jaeger, 2001]. 2. *Prediction task* of 30th order NARMA time-series, Mackey-Glass (M-G) system, and the *x*-coordinate of the Lorenz system. The performance in the prediction tasks was measured by the Normalized Root Mean Square Error (NRMSE).

For measuring the directed information flow in the reservoir we used *Transfer entropy* (TE). The self-predictability of each neuron signal is measured by *Active information storage* (AIS). We implemented the information measure estimators based on k-NN search [Kraskov et al., 2004]. We wanted as much of the self-predictability of the target variable to condition out of the TE, therefore we used the method proposed by [Ragwitz and Kantz, 2002] based on locally constant predictors to optimize embedding length (k) and time delay (τ) parameters. For assessing the reservoir stability we estimated the maximum Lyapunov exponent (λ).

At first we examined the relationship between global values of TE and AIS as a function of λ in the reservoir. We varied the variance (σ) of the distribution from which the elements of $\mathbf{W}$ were drawn to get different modes of stability. The results, shown in Fig, 1, confirm that the information measures peak at the phase transition $\lambda \approx 0$. The performance peaks in the case of MC and NARMA near the critical point, but not so in Lorenz and M-G tasks. There seems to be a non-monotonous relationship between TE and λ. We determined the optimal embedding of the target variable. Results from the parameter search are shown in Fig. 2. The grid search gives also an insight into the complexity of reservoir neuron activation signals in different tasks and different stability modes, when we consider that the locally constant predictor is a predictor based on the Markov property. Finally we fixed one instance of the reservoir matrix and scaled its spectral radius (ρ) to three values in order to get three modes of stability i.e. unstable (unscaled), stable ($\rho = 0.6$), and close to criticality ($\rho = 0.95$). The results are presented in Fig. 3.

In conclusion, higher values of information measures do not mean better performance, it's heavily task dependent and has to be finely tuned to get the best results.

References

[Boedecker et al., 2012] Boedecker, J., Obst, O., Lizier, J. T., Mayer, N. M., and Asada, M. (2012). Information processing in echo state networks at the edge of chaos. *Theory in Biosciences*, 131:205213.

[Jaeger, 2001] Jaeger, H. (2001). Short term memory in echo state networks. GMD Report 152, German National Research Institute for Computer Science.

[Kraskov et al., 2004] Kraskov, A., Stögbauer, H., and Grassberger, P. (2004). Estimating mutual information. *Physics Reviews E*, 69:066138.

[Ragwitz and Kantz, 2002] Ragwitz, M. and Kantz, H. (2002). Markov models from data by simple nonlinear time series predictors in delay embedding spaces. *Physics Reviews E*, 65:056201.

*torda.miloslav@gmail.com
†farkas@fmph.uniba.sk

Supplements

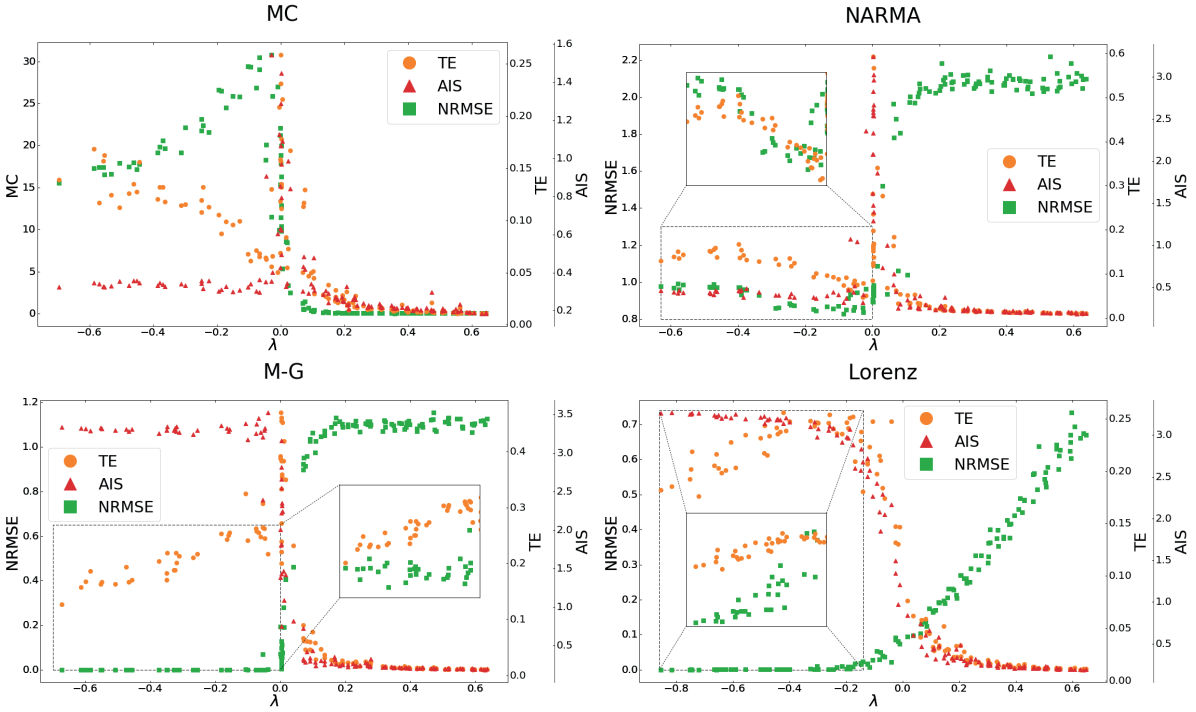


Figure 1: Average values of TE and AIS in the reservoir and the task performance as a function of λ.

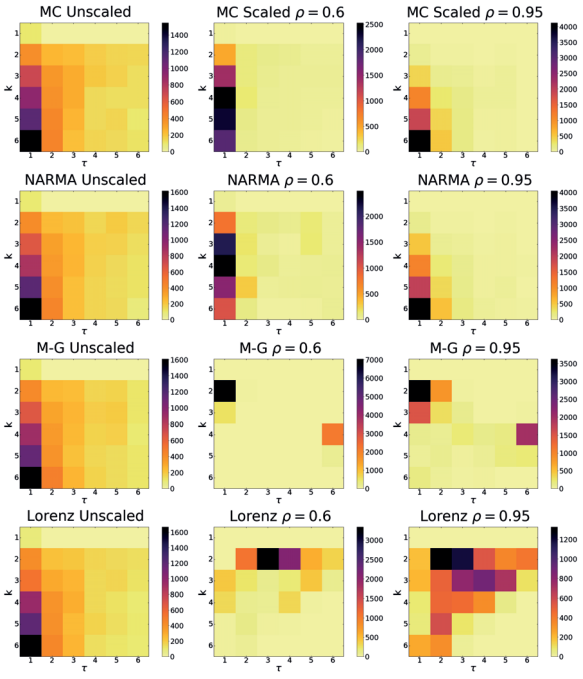


Figure 2: Parameter search of (k, τ) pairs (with k growing from the top on y-axis, τ is on x-axis starting from the left), for various scalings of the reservoir, in case of all four datasets (MC task, NARMA, M–G, Lorenz). Each cell denotes the number of occurrences when pair (k, τ) minimized the locally constant prediction error in individual signals of each unit.

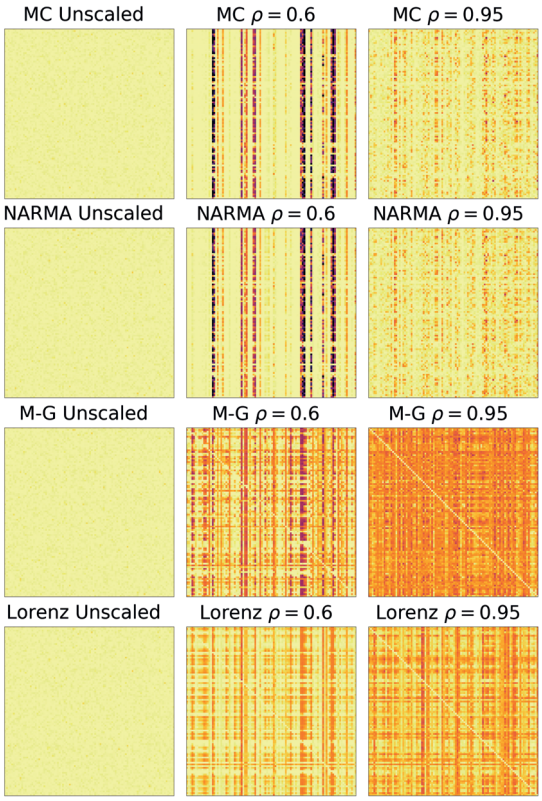


Figure 3: The matrices ($N \times N$) of TE values in the reservoir for three scalings (spectral radii), in four datasets. Rows of the matrix denote source units and columns denote target units.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 242
ISBN 978-8081470882, © 2018 Mário Lipovský

Approximate Abundance Histograms and Their Use for Genome Size Estimation* (Extended Abstract)

Mário Lipovský†

Supervisor: Broňa Brejová‡

Katedra informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

DNA sequencing data is typically a large collection of short strings called reads. We can summarize such data by computing a histogram of the number of occurrences of substrings of a fixed length k, referred to as k-mers.

Definition 1. *The k-mer abundance histogram is a sequence $f = f_1, f_2, f_3, \ldots f_m$, where f_i is the number of k-mers that occur in the input set exactly i times and m is the maximum observed abundance.*

Such histograms can be used for example to estimate the size of a genome without the need of the computationally demanding genome assembly.

To exactly compute k-mer abundance histogram, still, dozens of gigabytes are often required for storing hash tables or suffix arrays. In our work we study an existing tool, Kmerlight [Sivadasan et al., 2016], which is a streaming algorithm that uses multiple hash tables to compute approximate histograms $\hat{f} = \hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3, \ldots \hat{f}_m$ using only hundreds of megabytes.

From the experimental observations we discovered that Kmerlight's estimates of $\hat{f}_i$ are biased towards higher values. We identified the source of bias, and we proposed and tested a modification which successfully eliminated the bias. The comparison of the original Kmerlight and the modified Kmerlight is shown in Figure 1.

Our modified version of Kmerlight needs only one hash table[1] (compared to multiple tables in the original Kmerlight) and we believe that a more memory-efficient method of histogram approximation can be devised by further improvement of Kmerlight following our approach.

After disposing of the bias, we were able to precisely model the distribution of Kmerlight's errors with normal distribution for sufficiently high values of f_i. We also produced a quantitative estimate of variance $Var(\hat{f}_i)$ which can be used for parameter selection in practice.

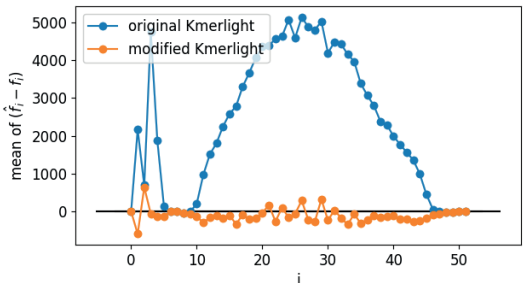


Figure 1: Mean errors of estimates $(\hat{f}_i - f_i)$ produced by original (blue) and modified (orange) Kmerlight in 300 trials. While the original Kmerlight overestimates f_i significantly in an average run, modified Kmerlight achieves $E(\hat{f}_i) \approx f_i$. The absolute error of 5 000 corresponds to approximately 5% relative error.

Finally, we used another tool, CovEst [Hozza et al., 2015], to compute genome size estimates with use of approximate histograms. Our experimental evaluation showed that although CovEst was designed to work with exact histograms, it can be also used with their approximate versions and achieve an estimation error of less than 1% for most of the tested simulated data sets. We also showed that estimates based on modified Kmerlight's histograms achieve lower mean errors than the estimates based on the original Kmerlight.

References

[Hozza et al., 2015] Hozza, M., Vinař, T., and Brejová, B. (2015). How Big is That Genome? Estimating Genome Size and Coverage from k-mer Abundance Spectra. In *String Processing and Information Retrieval (SPIRE)*, volume 9309 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 199–209, London, UK. Springer.

[Sivadasan et al., 2016] Sivadasan, N., Srinivasan, R., and Goyal, K. (2016). Kmerlight: fast and accurate k-mer abundance estimation. *CoRR*, abs/1609.05626.

*More extended version of this abstract was published at the ITAT 2017 confererence.

†mario@ksp.sk

‡brejova@dcs.fmph.uniba.sk

[1] If the count of all k-mers $F_0 = f_1 + f_n + \ldots + f_m$ is estimated in advance.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 243
ISBN 978-8081470882, © 2018 Andrej Baláž

Sequence based classification of bacteriophages (Extended Abstract)

Andrej Baláž[1*]

Supervisor: Jaroslav Budiš[1†]

[1] Department of Computer Science, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Introduction: Bacteriophages are viral particles that infect and replicate inside bacterial organisms. Since they are specific to a particular strain of bacteria, advances in their research could lead to novel means of targeted treatment without adverse effects on natural microbiome in patient's body. Moreover, this treatment could be effective against bacterial strains with antibiotic resistance. One of the main bottlenecks of bacteriophage research is inability to cultivate some of the phages due to missing information about their hosts. We aim to address this issue with our bioinformatics pipeline which can predict bacteriophage hosts from genomic sequence.

Materials and methods: We downloaded phage genomic sequences from publicly available databases. A total of 6277 records with information about bacterial hosts were obtained. We acquired functional elements (i.e., genes) from each genomic record using Prokka software[Seemann, 2014]. Records with host from eight most common bacterial genera were selected into new reduced dataset. This dataset was further divided into training set and testing set. Then we created clusters of similar genes using Markov Cluster Algorithm[Enright et al., 2002]. Functions were assigned to these clusters with Interproscan[Zdobnov and Apweiler, 2001]. Additionally, we created matrix where each row represented phage record and each column represented cluster. This matrix was filled with one, if particular phage contained gene from particular cluster, and zero otherwise. We reduced matrix with feature selection method removing all columns that were either one or zero in more than 99% of the samples. Resulting matrix contained 2787 phage records and 1818 distinct gene clusters. This matrix was used as input data to Decision Tree Classifier algorithm to create our predictive model.

Results: We created bioinformatics pipeline producing models for predicting phage hosts from genomic sequences. We evaluated our models on test dataset with 699 samples. Statistics from evaluation are presented in the Table (1). In addition, we can interpret importance of gene clusters for prediction from tree nodes.

genera	accuracy	false positive	false negative
arthrob	97.71%	1.57%	0.71%
escheri	97.13%	2.43%	0.42%
gordoni	92.56%	5.57%	1.85%
lactoco	97.28%	0.42%	2.28%
mycobac	98.14%	1.57%	0.28%
pseudom	98.14%	0.85%	1.00%
staphyl	97.99%	0.00%	2.00%
strepto	98.14%	0.28%	1.57%

Table 1: Evaluation of models

Limitations: Sequences used were mostly annotated only with one host. Despite high phage specificity, some phages can have multiple hosts. Also, relatively small number of phages are known to mankind. These facts can decrease applicability of our models when predicting insufficiently discovered phage genera.

Conclusions: Our pipeline has a potential to assist in discovery of novel phages and underlying mechanisms behind their functionality.

References

[Enright et al., 2002] Enright, A. J., Van Dongen, S., and Ouzounis, C. A. (2002). An efficient algorithm for large-scale detection of protein families. *Nucleic acids research*, 30(7):1575–1584.

[Seemann, 2014] Seemann, T. (2014). Prokka: rapid prokaryotic genome annotation. *Bioinformatics*, 30(14):2068–2069.

[Zdobnov and Apweiler, 2001] Zdobnov, E. M. and Apweiler, R. (2001). Interproscan–an integration platform for the signature-recognition methods in interpro. *Bioinformatics*, 17(9):847–848.

*andrejbalaz001@gmail.com
†jaroslav.budis@gmail.com

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 244
ISBN 978-8081470882, © 2018 Marek Šuppa, Ondrej Jariabka

GANmyIKEA vs. IKEAmyVAE: a journey towards the boundaries of generative landscape (Extended Abstract)

Marek Šuppa[2*] Ondrej Jariabka[2†]

Supervisor: Tomáš Vinář[1‡]

[1] Katedra aplikovanej informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2] Katedra informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

In this work we present a comparison of two generative unsupervised learning frameworks, Generative Adversarial Networks (GANs) and Variational Autoencoders (VAEs), on a specific use case: IKEA illustrations.

The dataset of IKEA illustrations this work makes use of has been semi-automatically extracted from IKEA instruction manuals, downloaded from the official IKEA website. The first stage semi-automatic pipeline converts the input PDF files into an image format that can be consumed by the second stage. This stage focuses on automatically extracting the biggest illustration in the input image and ignoring other parts (such as textual descriptions, which are fairly common in instruction manuals). In our case this pipeline has yielded a dataset of 1609 images.

The first generative model we tried is the so called "Vanilla" GAN introduced in [Goodfellow et al., 2014]. In simple terms, a GAN consists of a generator $G(z)$ which tries to generate generate data and a discriminator $D(X)$ which tries to distinguish whether its input X comes from the generator or the training data. The end result of a successful training is a generator capable of generating new samples which would be close to the training set.

Although this model did manage to produce an interesting-looking sample of new images, after a few hundred epoch the training procedure has collapsed to a single sample type and the model has effectively stopped to learn to generate new samples.

In order to counter this, we used a different model called Wasserstein GAN [Arjovsky et al., 2017], which alters the training procedure in order to increase its stability. A sample of images generated by this model after being trained for 5500 epochs on the aforementioned dataset can be seen in Figure 1.

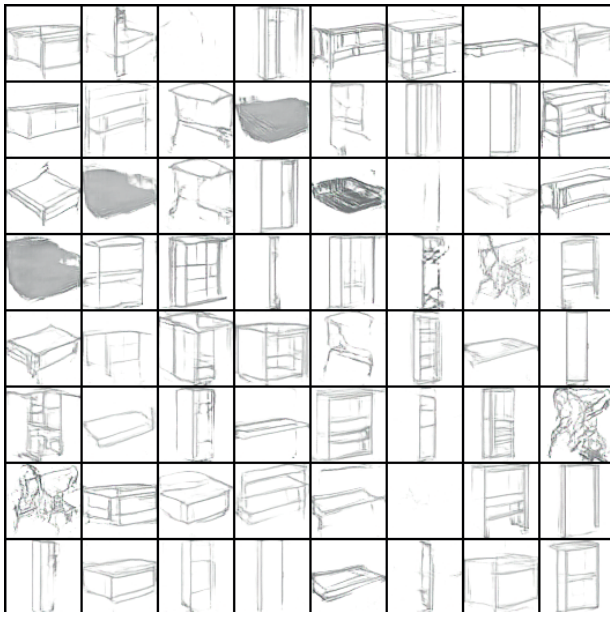


Figure 1: A sample of images generated by the Wasserstein GAN model.

Finally, we also tried a VAE model, which works on a different principle: it tries to model the underlying probability distribution of the data. Sadly, in our case the probability distribution seems to be so complicated that the generated samples seem to resemble an automatically generated Rorschach test, rather than automatically generated furniture.

References

[Arjovsky et al., 2017] Arjovsky, M., Chintala, S., and Bottou, L. (2017). Wasserstein gan. *arXiv preprint arXiv:1701.07875*.

[Goodfellow et al., 2014] Goodfellow, I., Pouget-Abadie, J., Mirza, M., Xu, B., Warde-Farley, D., Ozair, S., Courville, A., and Bengio, Y. (2014). Generative adversarial nets. In *Advances in neural information processing systems*, pages 2672–2680.

*suppa1@uniba.sk
†o.jariabka@gmail.com
‡tomas.vinar@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 245
ISBN 978-8081470882, © 2018 Klára Horváthová

Kognitívna náročnosť úloh súťaže iBobor (rozšírený abstrakt)

Klára Horváthová[1]*

Školiteľ: Karolína Mayerová[2]†

[1] Katedra aplikovanej informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2] Katedra základov a vyučovania informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Informatická súťaž iBobor je na Slovensku už viac ako 10 rokov. Zapájajú sa do nej žiaci zo základných a stredných škôl. Je rozdelená do vekových kategórií. Táto práca sa venuje najmladším vekovým kategóriám a to Drobci a Bobríci, čo sú žiaci vo veku 7-10 rokov. Súťaž pre túto vekovú kategóriu pozostáva z 12 otázok, z ktorých sú 4 ľahké, 4 stredne ťažké a 4 ťažké. Organizátorom súťaže sa často stáva, že neodhadnú náročnosť úloh správne, preto sme sa rozhodli skonštruovať rozhodovací strom, ktorý by vedel predikovať náročnosť úloh využitím dát z minulých ročníkov súťaže. Ako dôležité atribúty pre tvorbu učiaceho sa rozhodovacieho stromu sme využili novú kategorizáciu, ktorú navrhli autorky [Budinská et al., 2017].

Mierne upravenú kategorizáciu (pridaním hodnôt niektorým atribútom) pre tieto účely môžete vidieť v tabuľke 1.

Tabuľka 1: Hodnoty atribútov pre úlohy zo súťaže iBobor

Kategória	**Riešenie**	
L=Logické	Vy=Výrokové	G=Grafové
	O=Iné	P=Pattern
U=Užívateľské	Z=Základné	K=kombinované
A=Algoritmické	Po=Postupnosť	O=Iné
P=Programátorské	V=Vytváram	In=Interpretujem
Náročnosť	Ľahká	
	S=Stredná	
	T=Ťažká	
Pravidlá	D=Dané	
	In=Interpretujem	
Odpoveď	V=Vyberám	
	T=Tvorím	
Forma	P=Obrázok	
	T=Text	
	I=Interaktivna	
	P/T=Obrázok s textom	

Na predikciu obťažností sme využili základný algoritmus rozhodovacích stromov, ktorý sme testovali v opensourcovom programe RapidMiner[1]. Algoritmus ID3, ktorý *učí rozhodovacie stromy konštruovaním ich zhora nadol, začínajúc otázkou "ktorý atribút by mal byť testovaný v koreni stromu?"* [Mitchell, 1997] ID3 vyberá atribúty a ich deliace hodnoty na základe zisku informácie, ktorú rozdelenie (alebo rozdelenia) poskytnú. *Ïnformačný zisk je definovaný ako rozdiel medzi entrpiou originálneho segmentu a akumulovaných entropií výsledných rozdelených segemntov."* [Berson and Smith, 1997] 1

$$Zisk(S,A) \equiv Entropia(S) - \sum_{v \in Hodnoty(A)} \frac{|S_v|}{|S|} Entropia(S_v) \quad (1)$$

kde $Hodnoty(A)$ sú množina všetkých možných hodnôt pre artibút A a S_v je podmnožina S pre ktorú atribút A má hodnotu v (i.e., $S_v = \{s \in S | A(s) = v\}$). Aby sme znížili uprednostňovanie atribútov s viacerými hodnotami, ktoré nastáva pri výpočte *informačného zisku*, využili sme aj rozdeľovaciu metódu *pomer zisku*, ktorá berie do úvahy počet a veľkosť rozvetvenia stromu. Vypočíta sa ako pomer informačného zisku a vnútornej hodoty - teda entropie rozdelených segmentov.

Porovnanie presnosti týchto dvoch rozdeľovacích metód ukázalo, že na našej malej vzorke dát to vôbec neovplyvní výsledok.

Literatúra

[Berson and Smith, 1997] Berson, A. and Smith, S. J. (1997). *Data warehousing, data mining, and OLAP*. McGraw-Hill, Inc.

[Budinská et al., 2017] Budinská, L., Mayerová, K., and Veselovská, M. (2017). Bebras task analysis in category little beavers in slovakia. In *International Conference on Informatics in Schools: Situation, Evolution, and Perspectives*, pages 91–101. Springer.

[Mitchell, 1997] Mitchell, T. M. (1997). *Machine Learning*. McGraw-Hill, Inc.

*horvathova115@uniba.sk
†mayerova@fmph.uniba.sk

[1] https://rapidminer.com/

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 246
ISBN 978-8081470882, © 2018 Werner Krampl

Predikcia miery polymorfizmu zo sekvenačných dát (rozšírený abstrakt)

Werner Krampl[1*]

Školiteľ: Bronislava Brejová[1†]

[1] Katedra informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Súčasné technológie sekvenovania DNA generujú veľké množstvo krátkych reťazcov prečítaných zo spracovaného genómu nazývaných čítania. Polymorfná oblasť označuje časť genómu, ktorá obsahuje dva rôzne reťazce na rovnakej pozícií. Jedným z problémov, s ktorými sa súčasné metódy spracovania sekvenačných dát potýkajú, je aj detekcia polymorfných oblastí genómu. Častokrát ale nepotrebujeme poznať konkrétne polymorfné oblasti a stačí nám určiť ich približnú frekvenciu.

Predikciou parametrov genómu zo sekvenačných dát sa zaoberalo niekoľko autorov [Williams et al., 2013, Hozza et al., 2015]. Naša práca vychádza z modelov uvedených v poslednom článku. Zameriavame sa na rozšírenie týchto modelov o možnosť existencie polymorfných oblastí v genóme a tým rozšírenie použitia na diploidné organizmy akým sú napr. cicavce.

Základným prvkom modelu je *k-mer*, čo je podreťazec čítania, ktorý má dĺžku *k*. Vstupom pre optimalizačné modely je tzv. *spektrum výskytu rôznych k-merov*, teda histogram, ktorý pre každú triedu *i* obsahuje počet rôznych k-merov, ktoré majú práve *i* výskytov v čítaniach. Predikčný model sa optimalizáciou snaží určiť hodnoty parametrov, z ktorých vstupný histogram vznikol.

Náš model *EP (Errors and polymorphisms)* optimalizuje následné parametre:

- Pokrytie C - priemerný počet čítaní pokrývajúci jednu pozíciu v genóme
- Chybovosť ε - frekvencia chybne určených pozícií sekvenátorom v čítaniach
- Miera polymorfizmu γ

V našom modeli je frekvencia k-merov s j výskytmi daná vzťahom:

miera polymorfizmov								C = 16
0.064	99.72	99.53	99.66	99.65	99.89	99.75	99.93	99.47
0.032	99.92	99.73	99.87	99.99	99.96	99.94	99.33	99.52
0.016	99.63	99.87	99.60	99.34	99.30	99.70	99.82	99.21
0.008	99.75	99.99	99.80	99.60	99.58	99.96	99.92	99.97
0.004	99.89	99.94	99.85	99.81	99.78	99.87	99.97	98.46
0.002	99.35	99.98	99.85	99.89	99.11	99.93	99.94	99.87
0.001	98.94	99.98	99.94	99.86	99.03	97.20	99.99	97.36
0	99.97	99.98	97.90	99.98	99.97	99.95	99.95	99.86
	0	**0.001**	**0.002**	**0.004**	**0.008**	**0.016**	**0.032**	**0.064**
				miera chybovosti				

Obr. 1: **Priemer presnosti odhadu polymorfizmov** v percentách pre C = 16 a rôzne nastavenia generovaného počtu chýb a polymorfizmov.

$$p_j = (1-\gamma)\sum_{s=0}^{k}\alpha_{n,s}f(j;\lambda_s) + \gamma\sum_{s=0}^{k}\alpha_{p,s}f(j;\frac{\lambda_s}{2})$$

kde $\alpha_{n,s}$, resp. $\alpha_{p,s}$ označuje pravdepodobnosť výskytu k-meru s s chybami, f je Poissonovo rozdelenie pravdepodobnosti a λ_s je priemerné pokrytie.

Výsledná presnosť odhadu pokrytia C EP modelom pre simulované dáta s pokrytím C = 16 a rôznymi nastaveniami mier chybovosti a polymorfizmov je priemerne 99,70% a presnosť miery polymorfizmov je priemerne 99,63%.

V súčasnosti pracujeme na rozšírení EP modelu o možnosť opakovaného výskytu k-merov v genóme.

Literatúra

[Hozza et al., 2015] Hozza, M., Vinař, T., and Brejová, B. (2015). How big is that genome? estimating genome size and coverage from k-mer abundance spectra. *SPIRE 2015*, 10.1007:199–209.

[Williams et al., 2013] Williams et al., D. (2013). Rapid quantification of sequence repeats to resolve the size, structure and contents of bacterial genomes. *BMC Genomics*, 14.537.

*krampl3@uniba.sk
†brejova@dcs.fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 247–252
ISBN 978-8081470882, © 2018 Daniela Hansmanová

Vizualizácia modelov geometrických objektov v softvéri GeoGebra

Daniela Hansmanová[1]*
Školiteľ: Soňa Kudličková[2†]

[1,2] Katedra algebry, geometrie a didaktiky matematiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

K rozvíjaniu priestorovej predstavivosti sú potrebné modely geometrických telies ako dôležitá didaktická pomôcka. Práca sa zameriava na využitie softvéru GeoGebra na tvorbu názorných obrázkov geometrických telies pomocou stereoskopického zobrazenia – anaglyfu. Na prezeranie anaglyfických obrázkov priestorových objektov sú potrebné špeciálne okuliare, ktoré zabezpečia priestorový efekt z rovinného – anaglyfický priemet.

Vytvorené série anaglyfických obrázkov základných geometrických telies – hranola, ihlana, valca, kužeľa, gule – doplnené o vzájomné polohy priamky a roviny sú zamerané na podporu priestorového vnímania, priestorových vzťahov a priestorovej orientácie študentov. Anaglyfické obrázky sú v tlačenej forme a pomocou okuliarov čitateľné na papieri aj monitore počítača.

Softvér GeoGebra ponúka aj dynamickú prezentáciu anaglyfických obrázkov vhodných aj pre ilustráciu vybraných abstraktných pojmov v geometrii.

Kľúčové slová: priestorová predstavivosť, vizualizácia objektov, geometrické telesá, GeoGebra, anaglyf

1 Úvod

Výučba geometrie a grafický opis súvisiacich pojmov týkajúcich sa vzájomnej polohy geometrických útvarov v priestore si vyžaduje didaktické pomôcky. Takýmito didaktickými pomôckami sú modely, napríklad hotové učebné pomôcky, pomôcky „po ruke“, improvizované modely, dynamické modely a iné.

Všetky modely podporujú rozvíjanie priestorovej predstavivosti, ktorá je jednou z najdôležitejších schopností jedinca a je dôležité ju neustále budovať.

Ako uvádza Molnár [Molnár, 2009] priestorová predstavivosť je súhrn schopností týkajúcich sa reprodukčných i anticipačných, statických a dynamických predstáv o tvaroch, vlastnostiach a vzájomných vzťahoch medzi geometrickými útvarmi v priestore.

Problém s nedostatočnou priestorovou predstavivosťou sa prejavuje u mnohých študentov. K tomu, aby sme pomohli rozvíjať priestorovú predstavivosť, je potrebné ilustrovať teoretické i abstraktné pojmy didaktickými modelmi a pomôckami. Dôležité je, aby študenti porozumeli problematike, dokázali si priradiť rôzne vzťahy a polohy útvarov a získali zručnosti manipulácie s objektami. Hotové učebné pomôcky či improvizované modely nedokážu úplne reprezentovať vzájomné polohy a mnohé obrázky telies (ich priemety) v učebniciach neumožnia študentom hlbší náhľad do problematiky. Dokonca niektorí študenti si nedokážu uvedomiť, aký geometrický objekt ilustrácia reprezentuje. A tu prichádza GeoGebra s nástrojom 3D grafické príkazy, ktoré ponúkajú prezentácie priestorovej geometrie z rovinných priemetov [Kmeťová a Vitézová, 2015] .

Softvér GeoGebra umožňuje vizualizáciu priestorových súvislostí pomocou stereoskopických priemetov – anaglyfov v červenej a tyrkysovej farbe, ktoré po použití špeciálnych dvojfarebných okuliarov ponúkajú 3D informáciu. Použitie anaglyfov je vhodné najmä u študentov, ktorí si nedokážu z rovnobežného priemetu objektu, t.j. z klasického 2D obrázka vymodelovať v mysli pôvodný trojrozmerný objekt.

GeoGebra vygeneruje z klasického 2D obrázka v geometrickom okne dva farebne odlišné priemety – v červenej a tyrkysovej farbe. Každý z priemetov je určený pre pravé resp. ľavé oko pozorovateľa. Ak sa na získané priemety pozrieme špeciálnymi okuliarmi, dostaneme objekt s trojrozmerným efektom v čiernej farbe. Tento 3D efekt sa zachová po zväčšení a aj po premietnutí cez dataprojektor. Výhodou tohto postupu je, že modely sú v tlačenej farebnej forme, nezaberajú priestor a priestorový vnem telesa je u väčšiny používateľov lepší než ponúka klasický 2D obrázok.

Softvér GeoGebra ponúka aj vytvorenie dynamického modelu, ktorý umožní vidieť objekt z

* daniela.hansmanova@gmail.com
† Sona.Kudlickova@fmph.uniba.sk

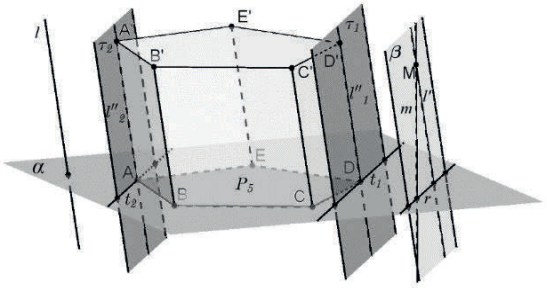
rôznych strán a tak ešte vylepšiť kvalitu priestorovej predstavivosti.

2 Práca v GeoGebre

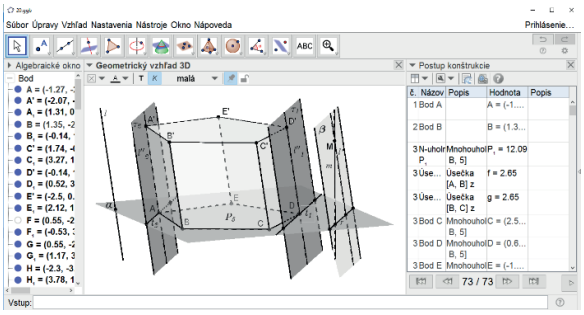
Počítačový softvér GeoGebra umožňuje používateľovi riešiť príklady dynamicky, ale i vizuálne reprezentovať riešenia matematických úloh. Tento softvér je zameraný na geometriu prepojenú s matematickou analýzou a algebrou, umožňuje vykresľovať grafy, telesá, tabuľky a iné. Geogebra je voľne dostupný softvér, ktorý vytvoril Markus Hohenwarter v roku 2001, používa sa pri výučbe na mnohých školách a je súčasťou rôznych vzdelávacích programov.

Softvér GeoGebra obsahuje viacero nastavení, pomocou ktorých si vieme vybrať prácu v rovine alebo v priestore, pričom zaznamenáva postup konštrukcie a kreslenie sa uskutočňuje prostredníctvom rôznych nástrojov a funkcií.

Grafické ilustrácie v práci sú vytvorené v GeoGebre. Aby sme mohli vytvoriť anaglyf vopred musíme vytvoriť klasický obrázok (obr. 1). Klasický obrázok je zostrojený v GeoGebre tak, ako sa nachádza v učebniciach k predmetu Matematika [Kubáček a kol, 2013] je vytvorený konštrukciou telesa (obr. 2) pomocou vstupných údajov – mnohouholníka, kružnice, priamky a ďalších nástrojov, ktoré GeoGebra ponúka.

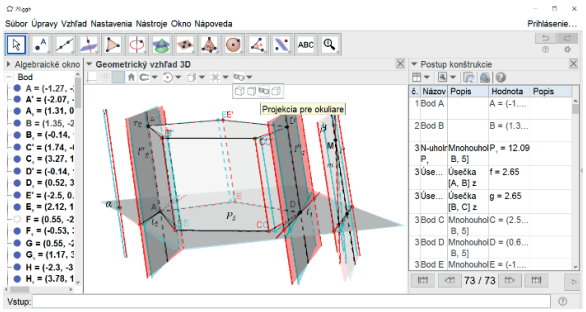


Obr. 1: Klasický obrázok



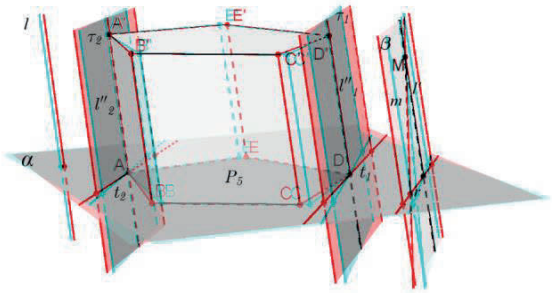
Obr. 2: Konštrukcia telesa v GeoGebre

Anaglyfický obrázok vznikne z klasického obrázka použitím nástroja *„Projekcia pre okuliare“* (obr. 3). Získané priemety sú v tyrkysovej a červenej farbe.



Obr. 3: Tvorba anaglyfu

Anaglyfický obrázok (obr. 4) po prezeraní špeciálnymi okuliarmi (obr. 5), ponúkne čierno – biely obraz a zvýrazní priestorovú informáciu o vzájomnej polohe objektov v priestore.



Obr. 4: Anaglyfický obrázok



Obr. 5: Okuliare pre anaglyfické obrázky

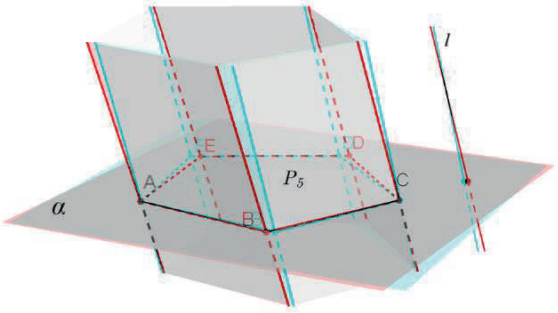
Pre správny priestorový vnem je nevyhnutné čítať anaglyfické obrázky pomocou špeciálnych okuliarov (obr. 5) na monitore počítača a použiť zväčšenie obrázkov.

3 Hranolová plocha, hranol

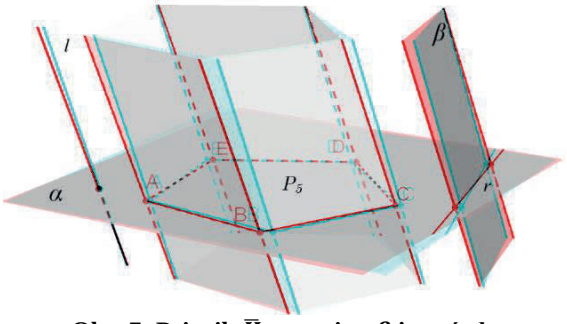
V tejto práci sú umiestnené anaglyfické obrázky vypracované na tému hranolová plocha, hranol, vzájomná poloha priamky/roviny a hranola, konštrukcia styčných rovín prechádzajúcich bodom a rovnobežných s danou priamkou z výučbového textu [Kudličková, Hansmanová, 2017] ktorý je určený najmä pre študentov deskriptívnej geometrie, ale aj pre študentov pedagogických kombinácií s matematikou v časti štúdia venovanom geometrii.

Anaglyfy pre tému Hranolová plocha, hranol:

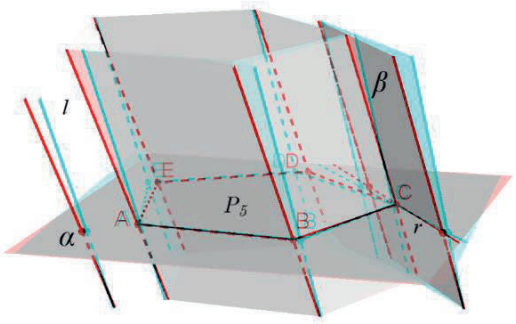
- Hranolová plocha $\bar{H}_5(P_5 \subset \alpha, l)$ – určená päťuholníkom $ABCDE$ v rovine α a priamkou l (obr. 6)
- Vzájomná poloha osnovovej roviny β a hranolovej plochy $\bar{H}_5$ (obr. 7, 8, 9, 10)
- Vzájomná poloha nie osnovovej priamky m a hranolovej plochy $\bar{H}_5$ (obr. 11, 12, 13, 14)
- Hranol (obr. 15)
- Hranoly v pedagogickej praxi (obr. 16, 17, 18, 19, 20, 21)
- Styčné roviny hranola prechádzajúce bodom M (obr. 22, 23, 25, 25)
- Styčné roviny hranola rovnobežné s danou priamkou m (obr. 26, 27, 28, 29)



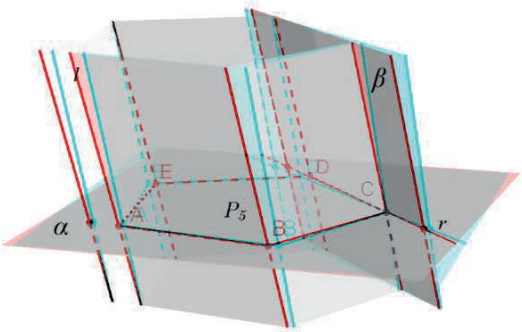
Obr. 6: Hranolová plocha $\bar{H}_5(P_5 \subset \alpha, l)$



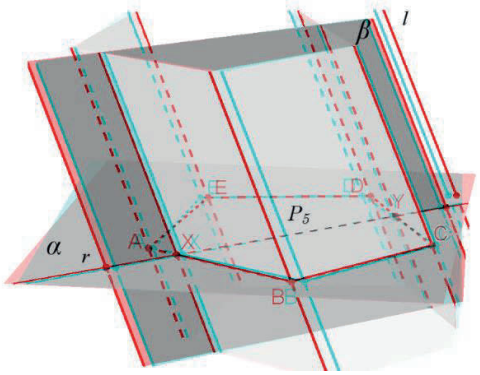
Obr. 7: Prienik $\bar{H}_5$ a roviny β je prázdny



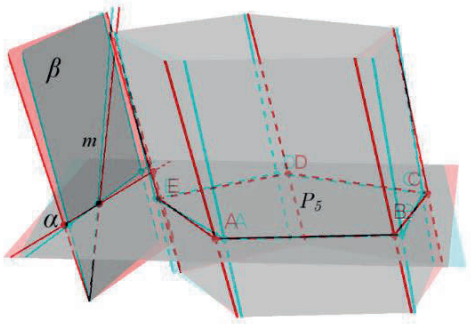
Obr. 8: Prienik $\bar{H}_5$ a roviny β je hrana



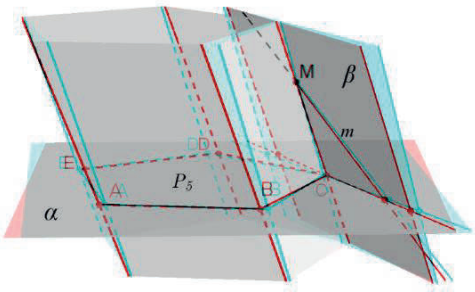
Obr. 9: Prienik $\bar{H}_5$ a roviny β je stena



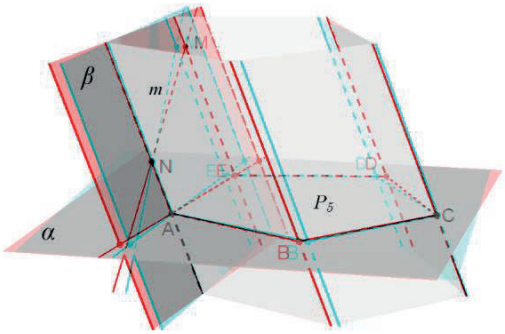
Obr. 10: Prienik $\bar{H}_5$ a roviny β sú dve priamky



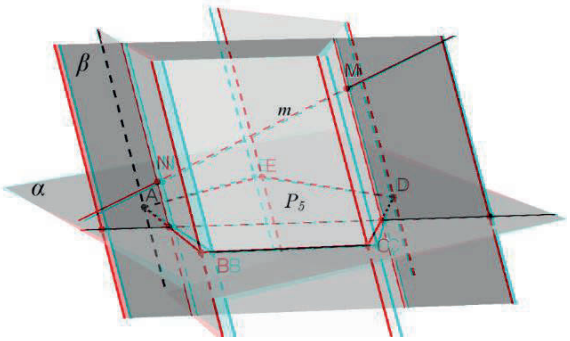
Obr. 11: Prienik $\bar{H}_5$ a priamky m je prázdny



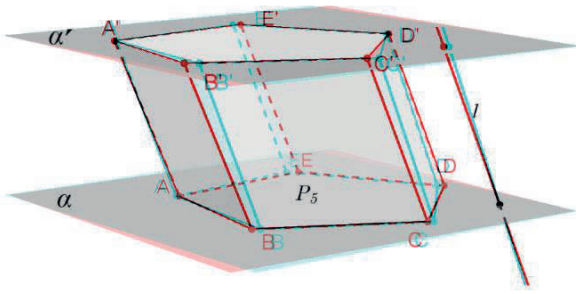
Obr. 12: Prienik $\bar{H}_5$ a priamky m je bod hrany



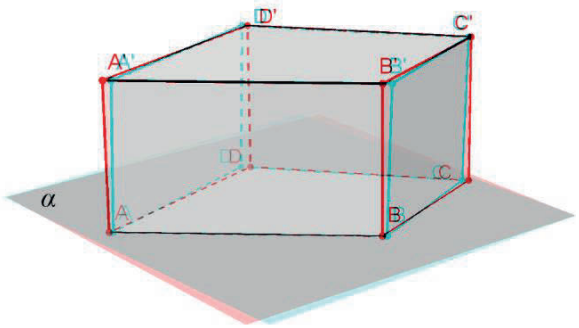
Obr. 13: Prienik $\bar{H}_5$ a priamky m je úsečka v stene



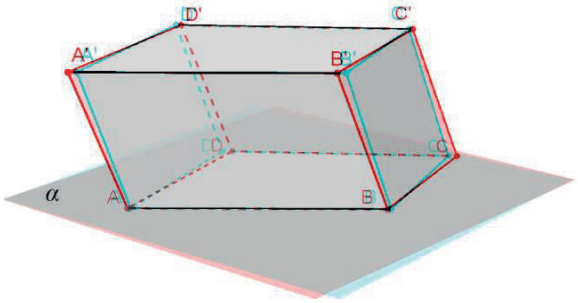
Obr. 14: Prienik $\bar{H}_5$ a priamky m sú dva body



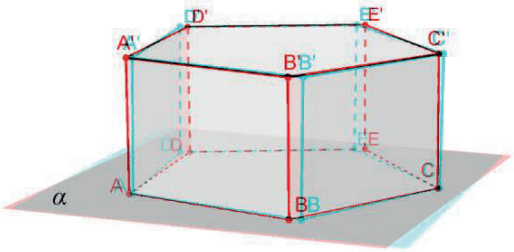
Obr. 15: Hranol



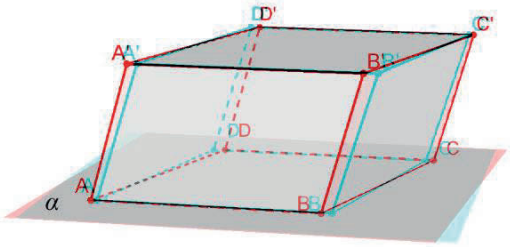
Obr. 16: Kolmý hranol



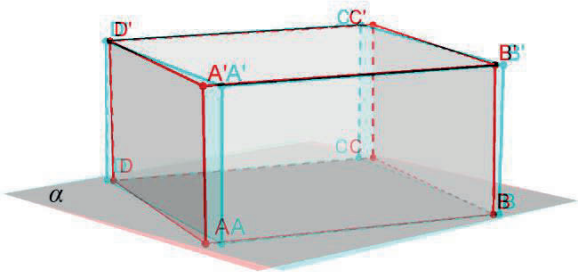
Obr. 17: Šikmý hranol



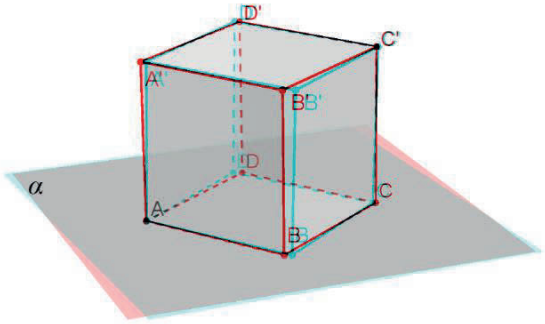
Obr. 18: Pravidelný päťboký hranol



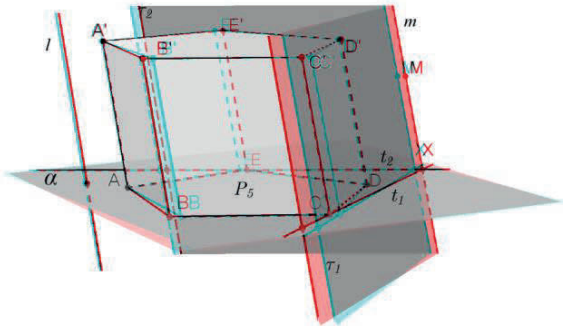
Obr. 19: Rovnobežnosten



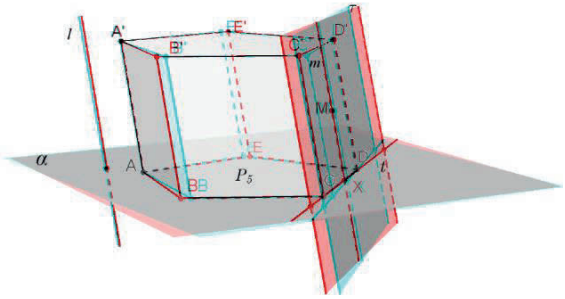
Obr. 20: Kváder



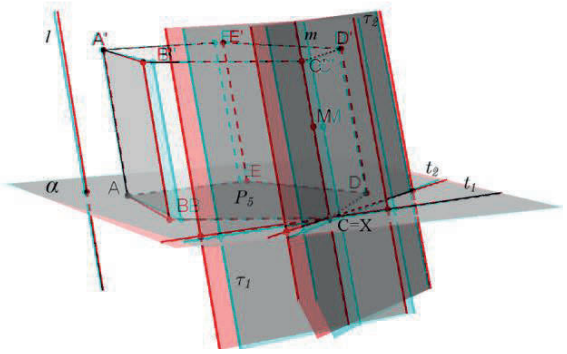
Obr. 21: Kocka



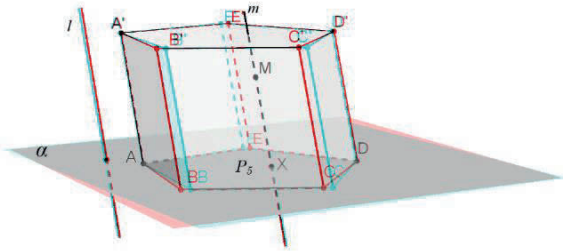
Obr. 22: Bod *M* je vonkajším bodom hranola



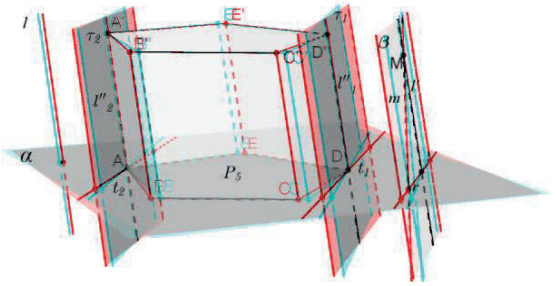
Obr. 23: Bod *M* je bodom steny hranola



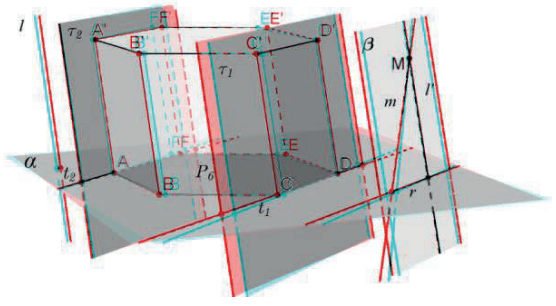
Obr. 24: Bod *M* je bodom hrany hranola



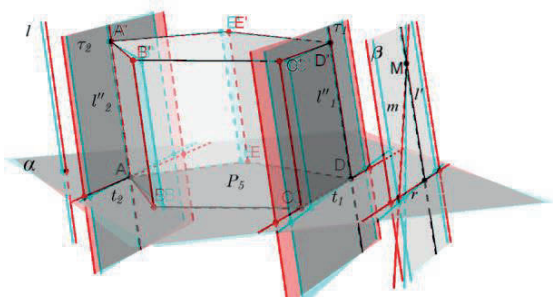
Obr. 25: Bod *M* je vnútorným bodom hranola



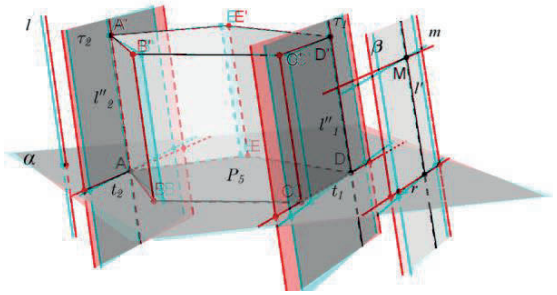
Obr. 26: Styčné roviny rovnobežné s priamkou m obsahujú hranu hranola



Obr. 27: Styčné roviny rovnobežné s priamkou m obsahujú stenu hranola



Obr. 28: Styčné roviny rovnobežné s priamkou m obsahujú hranu a stenu hranola



Obr. 29: Styčné roviny rovnobežné s priamkou m, rovnobežnou s rovinou podstavy hranola

Pre všetky vytvorené anaglyfické obrázky (obr č.6 – 29) softvér GeoGebra umožní aj dynamickú vizualizáciu, teda objekty si možno „prezrieť“ z viacerých strán. Dole uvedený QR kód je odkazom na súbor, ktorý obsahuje dynamické obrázky odpovedajúce obrázkom v texte (bez označenia bodov, priamok a rovín). K ich prezeraniu sú opäť potrebné špeciálne okuliare (obr 5).

4 Záver

Vizualizácia je nápomocná pri tvorbe geometrického objektu, ale i rozvíjaní priestorovej predstavivosti. Dobre vytvorené anaglyfické obrázky podporia slabšiu priestorovú predstavivosť jedinca. Sto anaglyfických obrázkov základných geometrických telies – hranola, valca, ihlana, kužeľa a gule je vo výučbovom texte [Kudličková, Hansmanová, 2017] z ktorého do tohto príspevku bola zaradená téma Hranolová plocha, hranol a styčné roviny. Učebný text je určený najmä pre študentov matematiky a deskriptívnej geometrie v prvom ročníku bakalárskeho štúdia. Za účelom spätnej väzby o využití anaglyfov ako didaktickej pomôcky v pedagogickom procese bol zostavený dotazník, v ktorom odpovedali študenti všetkých ročníkov kombinácie matematika a deskriptívna geometria.

Tvorba dynamických modelov je návrhom ako vhodne použiť informačné technológie v pedagogickom procese. Potrebný je softvér GeoGebra, anaglyfický obrázok a špeciálne okuliare.

Poďakovanie

Na záver by som sa chcela poďakovať mojej školiteľke RNDr. Soni Kudličkovej, PhD. za usmerňovanie, pripomienky, rady, motiváciu, trpezlivosť, precíznosť a vedenie pri vypracovaní tejto práce.

Literatúra

[Kmeťová a Vitézová, 2015] KMEŤOVÁ, M., VITÉZOVÁ, Z. *Anaglyfy a ich využitie vo vyučovaní geometrie In G – slovenský časopis pre geometriu a grafiku.* Bratislava : Slovenská spoločnosť pre Geometriu a Grafiku. ISSN 1336-524X, 2015, roč. 12, č. 23, s.31-36.

[Kudličková, Hansmanová, 2017] KUDLIČKOVÁ, S., HANSMANOVÁ, D. *Základné geometrické telesá a ich styčné, dotykové roviny* [online]. Mlynská dolina F1, 842 48 Bratislava, 2017 [cit. 2018-04-02]. Dostupné na: https://flurry.dg.fmph.uniba.sk/webog/SuboryOG/batorova/hansmanova.pdf.

[Kubáček a kol, 2013] KUBÁČEK, Z. a kol. *Matematika pre 2. ročník gymnázií*. Orbis Pictus Istropolitana, 2013. ISBN 978-80-7158-983-9.

[Molnár, 2009] MOLNÁR, J. 2009. *Rozvíjení prostorové představivosti (nejen) v stereometrii*. Olomouc: PF UP, 2009 .

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 253–260
ISBN 978-8081470882, © 2018 Vladimíra Laššáková, Mária Čujdíková

Odstraňovanie strachu z matematiky prostredníctvom skupinového vyučovania

Vladimíra Laššáková[1] Mária Čujdíková[1]
Školiteľ: Monika Dillingerová[1]

[1] Katedra algebry, geometrie a didaktiky matematiky
FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

Matematika je súčasťou sveta v ktorom žijeme, súčasťou nášho vnímania, myslenia. Keď ako deti objavujeme rôzne zákonitosti, matematika je súčasťou tohto objaviteľského dobrodružstva. Matematik Keith Devlin vo svojich publikáciách tvrdí, že matematické myslenie je našou prirodzenou črtou. Ako a kde teda vzniká strach z matematiky? Akú úlohu v tom zohráva školská matematika? V príspevku chceme predstaviť nové zistenia odborníkov skúmajúcich rozvíjanie matematického myslenia. V kontexte týchto zistení chceme analyzovať možnosti odstraňovania strachu z matematiky prostredníctvom skupinového vyučovania. Skupinové vyučovanie učí žiakov, aby sa vzájomne počúvali, aby sa nebáli prezentovať vlastné matematické teórie, spochybňovať a argumentovať. V príspevku predstavíme tri konkrétne aktivity vhodné na skupinové vyučovanie na druhom stupni ZŠ a budeme sa venovať tomu, aký vplyv majú podobné aktivity na odstraňovanie strachu z matematiky.
Príspevok súčasne slúži ako projekt výskumu, ktorý budeme v budúcnosti realizovať na žiakoch základnej školy.

Kľúčové slová: strach z matematiky, skupinové vyučovanie, školská matematika

1 Strach z matematiky

Matematici matematiku často popisujú ako krásnu a kreatívnu. Vnímajú ju ako dobrodružné skúmanie tvarov a štruktúr, hľadanie súvislostí. Matematik Keith Devlin (2002) sa o nej vyjadruje: „Matematika nám dává oči, kterými můžeme spatřit to, co by našemu zraku zůstalo jinak skryto. V tomto smyslu lze říci, že matematika je způsob, jak zviditelnit neviditelné.“Podľa slov matematika Pavla Zlatoša (1995): „Matematika otvára svoj ideálny svet ako svet neobmedzenej slobody duchovnej tvorby.“

Na rozdiel od toho študenti matematiku často považujú za nudnú, vnímajú ju ako predmet o výpočtoch a postupoch podľa určitých pravidiel, ako niečo v čom veľa priestoru na kreativitu nie je. Matematika v nich často vzbudzuje znechutenie či strach.

Strach z matematiky sa často spája s negatívnym vzťahom k matematike celkovo. Pri skúmaní tohto fenoménu nám prišlo zaujímavé sledovať, ako sa vzťah k matematike postupom času mení.

Keď sme deti a objavujeme svet a zákonitosti, ktoré v ňom platia, matematika je súčasťou tohto objaviteľského dobrodružstva. Sme ňou fascinovaní.

Bábätká a deti matematiku milujú. Dajte bábätku sadu kociek a ono ich bude skladať a zoraďovať, fascinované tým, ako sa k sebe hodia. Deti sa pozrú na oblohu a fascinuje ich, že vtáky letia vo V formácii. Spočítajte sadu predmetov pred malým dieťaťom, poprehadzujte ich a znovu spočítajte a uvidíte, aké bude dieťa nadšené, že sa počet nezmenil. Požiadajte dieťa, aby nejak usporiadalo farebné kocky a ono sa s nimi začne veselo hrať a vytvárať pravidelné vzory - jeden z charakteristických matematických úkonov. [Boalerová, J., 2016] V ideálnom prípade si zachováme chuť objavovať a skúmať svet matematiky aj v školskom veku a toto nadšenie v nás ostáva až do dospelosti. No ukazuje sa, že postoj k matematike sa počas školských rokov zhoršuje. Vankúš a Kubicová (2010) skúmali postoje žiakov v 5. a 9. ročníku k matematike. Zistili, že žiaci 9. ročníka vnímajú matematiku negatívnejšie ako piataci. Prečo to tak je? Akú úlohu v tom môže zohrať školská matematika?

Domnievame sa, že školská matematika často spôsobuje, že žiaci začnú vnímať pojmy matematika a počítanie ako takmer totožné a tento názor si zachovávajú až do dospelosti. To naznačujú

aj 2 prieskumy, ktoré sme realizovali.

Prvý prieskum bol realizovaný na vzorke 52 žiakov a žiačok z troch tried piateho ročníka. Aktivita prebiehala na hodine výtvarnej výchovy a mala jednoduché zadanie: „Nakresli, ktoré tri školské predmety máš najradšej." Medzi svoje obľúbené predmety zaradilo matematiku 22 detí. Zobrazovanie matematiky ako čísel bez kontextu nebolo výnimočné. Treba si uvedomiť, že schopnosti vyjadrenia pri tejto forme sú limitované tiež vzťahom ku kresleniu. V tomto prípade sme mali výhodu v tom, že sme mali k dispozícii od každého dieťaťa viac kresieb rôznych predmetov.

Druhý prieskum bol realizovaný na vzorke 38 respondentov (52,6 % ženy, 47,4 % muži) vo veku 21 – 45 rokov. Okrem iných otázok sme im položili dve otázky súvisiace s matematikou, konkrétne: „Čo vám napadne, keď sa povie ‚matematika'?" a otázku: „Využívate pri svojej práci / ďalšom štúdiu / bežnom živote matematiku?" pri ktorej sme respondentov vyzvali, aby skúsili svoju odpoveď rozpísať. Pri vyhodnocovaní odpovedí sme prišli k niekoľkým zaujímavým postrehom: Niektorí respondenti vnímali matematiku ako kreatívny proces, no išlo o menšinu prípadov. Častejšie sa objavovali asociácie so slovami ako počítanie, číslo, príklad, prípadne konkrétnymi matematickými operáciami, či školským prostredím ako odpovede zdôrazňujúce matematiku ako nástroj na riešenie problémov, vedu skúmajúcu hranice kreativity, koreláciu, logické, či abstraktné myslenie. Matematika je vnímaná ako užitočná. Menej ako 8% respondentov povedalo, že matematiku vo svojom živote nepoužívajú alebo ju využívajú málo. Respondenti častejšie spomínali využitie procedurálnej, nie konceptuálnej matematiky.

Podľa Devlina (2011) by úlohou školskej matematiky malo byť učiť žiakov myslieť ako matematici. Ako príklad uvádza, že je matematik, ale keď sadne na bicykel, je aj cyklista. Cyklistike sa venuje dosť intenzívne, má cyklistický odev, dobrý bicykel, cez víkendy občas jazdí nepretržite viac ako 100 míľ a zdolal dokonca niektoré horské úseky tratí Tour de France. Číta cyklistické časopisy a pozerá relácie o jazdení. Aj keď nie je profesionálny cyklista, vie si predstaviť aké to je. Opisuje tiež, aké je to uňho s tenisom. Tenis nesleduje a hrá ho len veľmi príležitostne. Nemá tenisovú výstroj a keď drží v ruke raketu, cíti sa ako outsider.

V dôsledku týchto dvoch veľmi odlišných duševných postojov, sa z neho stal celkom dobrý cyklista, ale je hrozný v tenise. To isté platí pre každého a v akejkoľvek ľudskej činnosti. Ak chceme byť v činnosti X dobrý, musíme sa s činnosťou X identifikovať, začať sa vnímať ako X-er - a konať ako X-er.

Zhoršovanie vzťahu k matematike a vnímanie matematiky ako počítanie môže byť spôsobené tým, že v škole sa k matematike niekedy pristupuje opačne oproti tomu ako k nej pristupujú deti alebo ako k nej pristupujú matematici. Objavovanie, ktorým je dieťa či matematik fascinovaný je nahradené učením sa metód a poučiek. Učitelia často najskôr ukážu istú metódu, ktorú následne žiaci precvičujú na množstve podobných príkladov. Problémy sú rozdelené do celkov, ktoré sa učia oddelene a objaviteľský rozmer sa niekedy načisto vytráca. Tematický celok sa nakoniec uzatvorí testom, z ktorého žiak dostane známku. Pri hodnotení sa často kladie dôraz na rýchlosť a podaný výkon. Následne učiteľ prejde na vysvetľovanie ďalšieho oddeleného celku. Známkovanie má niekedy za následok, že učenie sa matematiky kvôli pochopeniu a radosti z objavovania súvislostí je nahradené naháňaním sa za výsledkom, čo prispieva k predstave, že matematika nie je o tvorivosti ale o podávaní určitých výkonov. Vnútorná motivácia dieťaťa hrajúceho sa s kockami je nahradená vonkajšou motiváciou.

Nie je veľkým prekvapením, že sa niektorí žiaci procedurálne orientovanej matematiky zameranej na výkon začnú obávať. Ostatne podobné je to aj s vrcholovými športovcami. Mnohí končia so športom, lebo zábava prerástla v povinnosť a miera zaťaženia tréningom neprináša želaný výsledok.

Devlin (2011) vidí problém so školskou matematikou v tom, že väčšina učiteľov matematiky nie sú matematici (neštudovali matematiku do tej hĺbky ako matematici) a nevedia čo to znamená myslieť ako matematik. Podotýka, že to nie je vina samotných učiteľov. Učiteľ podľa neho môže učiť najlepšie ako vie a môže to robiť s najlepšími úmyslami, ale nikto nemôže niekoho naučiť premýšľať určitým spôsobom, ak nevie, čo tento spôsob myslenia obnáša. Upozorňuje na to, že myslieť ako matematik znamená viac ako schopnosť robiť aritmetické operácie, alebo riešiť problémy z algebry, napríklad je možné myslieť ako matematik a zrátať zle svoj účet. Sam o sebe hovorí, že nikdy nebol dobrý v aritmetike. Matematické myslenie vidí ako celkový spôsob, ako sa pozerať na veci, schopnosť nahliadnuť do ich číselnej, logickej alebo štruktúrnej podstaty a schopnosť analyzovať základné vzory.

V súčasnosti sa mnoho odborníkov venuje tomu, ako pristupovať k školskej matematike tvorivejšie. Veľká časť z nich sa zhodujú na tom, že je dôležité nepredkladať žiakom metódy na riešenie, ale predkladať im problémy a nechať ich klásť otázky, odhaľovať súvislosti, riešiť vlastným spôsobom a tempom. Učiteľ žiaka usmerňuje a

pomáha mu, no necháva mu priestor na vlastné skúmanie. Ak chce ukázať nejakú novú metódu, ktorá by s riešením daného problému mohla pomôcť, robí to až po samostatnom bádaní žiakov.

Pri analyzovaní príspevkov v diskusných fórach a internetových poradniach, v ktorých žiaci riešia svoj strach z matematiky sme si všimli, že žiaci sa málokedy báli matematiky samotnej. Študenti mali strach hlavne kvôli známkam. V niektorých prípadoch na základe týchto známok hodnotili svoju úspešnosť v matematike, či dokonca samých seba. Zlú známku považovali za zlyhanie. Pričom to, čo považovali za zlú známku je individuálne. Pre niektorých je to dokonca dvojka. Všimli sme si opakujúce sa obavy z reakcie rodičov na známku. Ďalším často menovaným problémom bol strach z učiteľa. Ten v spomínaných prípadoch nevystupuje ako niekto, kto pomáha študentom na ceste vzdelávania, pri objavovaní, ale skôr ako niekto, kto je nekompromisný, niekedy neobjektívny, na ich chyby reaguje negatívne, niekedy dokonca kričí alebo ich zosmiešňuje. Je prirodzené, že väčšina učiteľov nedokáže svojou osobnosťou zaujať každého, no dobrý učiteľ by sa mal snažiť v žiadnom zo žiakov nevzbudzovať strach. Opakovala sa myšlienka, že sa učivo nedokážu naučiť, v žiadnom z príspevkov sme nezaznamenali, že by žiaci spomínali proces objavovania.

O tom, že strach z matematiky niektorí ľudia prežívajú veľmi intenzívne pojednáva výskum Lyonsa a Beilocka (2012). Vo svojom výskume potvrdili, že strach z matematiky môže spôsobovať dokonca bolesť. Bolo testovaných 30 respondentov, ktorí uviedli, že majú z matematiky strach. Respondentom boli predložené matematické úlohy a bola skenovaná aktivita v ich mozgu. Ukázalo sa, že pri predložení úloh ich mozog aktivoval centrá, ktoré sú aktivované aj pri pociťovaní bolesti.

Bolesť však nie je spôsobená samotným riešením matematického problému, ale obavami, ktoré riešeniu predchádzajú. Centrá pre bolesť boli aktivované len pred riešením úlohy, počas riešenia sa táto aktivácia nepreukázala.

2 Skupinové vyučovanie

„Viac ako polovica prác vznikla vďaka spolupráci (Burton, 1999). Napriek tomu v mnohých triedach študenti vypracúvajú zadania v tichosti. Skupinové diskusie v rámci triedy sú skutočne dôležité.“ (Boalerová, 2016) V prípade, že chceme žiakom na hodinách priblížiť prácu matematikov, okrem obsahu matematického vzdelávania je dobré sústrediť sa aj na jeho formu. V prípade, že sú žiakom predkladané problémy a úlohy, ktoré od nich vyžadujú kreatívne zapojenie sa, ktoré sú na skupinové vyučovanie vhodné, učenie sa sa stáva aktívnym procesom. Žiaci majú príležitosť prebrať zodpovednosť za vlastné vzdelávanie a v prípade skupinovej práce zároveň získavajú zodpovednosť za kvalitu vzdelávania iných.

Skupinové vyučovanie má pozitívny vplyv na rozvoj matematického myslenia. Matematické myslenie sa rozvíja a zdokonaľuje argumentáciou, snahou o odovzdanie svojich myšlienok tým, s ktorými spolupracujeme. Argumentácia ako nástroj vzdelávania vedie k snahe porozumieť veciam viac do hĺbky. Keď niečo objavíme, musíme tento objav sprostredkovať členom skupiny, respektíve celému kolektívu triedy. Ak iné skupiny alebo členovia skupiny majú odlišné závery, dochádza k argumentácii. Počas argumentácie sa do problému ponárame hlbšie, hľadáme pevné body a dôvody. Uvedené má vplyv na rozvoj logiky i komunikačných zručností. Ak sa argumentácia objaví najprv v rámci skupiny, žiaci predkladajú výsledky za skupinu vo vyzretejšej forme a odráža sa to najmä na voľbe slov a konštrukcii viet, ktoré používajú. Veľkou výhodou je aj to, že v prípade fungujúcej skupinovej práce má príležitosť novým poznatkom porozumieť každý. Prístupy pri vysvetľovaní sú rôzne, výklad nie je obmedzený na spôsoby výkladu učiteľa.

Veríme, že práve aktívna komunikácia, odvaha vyjadriť svoju teóriu a otvoriť myseľ nápadom druhých môže byť vynikajúcim základom pre odbúravanie strachu zo školskej matematiky.

Zvýšenú pozornosť je potrebné venovať tomu, aké úlohy je vhodné na tento typ práce zvoliť. Ako najvhodnejšie sa nám zdajú úlohy s objaviteľským prvkom a otvorené úlohy.

Objaviteľský prvok v úlohách, teda to, že žiak nepozná presný postup riešenia daného typu úlohy alebo jej časti, vedie k tomu, že práca na hodine sa viac podobá skutočnej matematickej práci. Veríme, že cieľom vyučovacích hodín by nemalo byť len porozumenie a prípadne memorovanie predostretých postupov, ktoré je nasledované ich precvičovaním, ale priestor by mal byť venovaný v maximálnej možnej miere úlohám, kde postupujeme smerom od problému k jeho riešeniu. Pri objaviteľskom spôsobe riešenia tiež vzniká priestor na kreatívne omyly, ktoré môžu prispieť k rozvoju myslenia a k postupnému budovaniu matematickej intuície.

Otvorené úlohy sú úlohy, ku ktorým sa dá pristupovať viacerými rôznymi spôsobmi. Často ide o úlohy, ktoré majú viac riešení. V prípade výberu tohto typu úloh dávame priestor žiakom s rôznym typom myslenia a tým umožňujeme jednoduchšie zapojenie sa do procesu riešenia pre všetkých.

Dôležitou otázkou je to, ako vhodne zvoliť náročnosť úlohy. Nenáročné úlohy v žiakoch vzbudzujú pocit známosti, ktorý je často príjemný, čo môže byť pri odstraňovaní strachu z matematiky

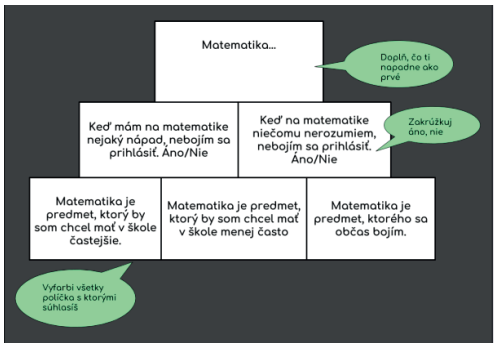
užitočné. Podľa Kahnemana (2012) *„Rôzne príčiny nenáročnosti alebo vypätia majú navzájom zameniteľné účinky. Keď ste v stave kognitívnej nenáročnosti, máte pravdepodobne dobrú náladu, páči sa vám, čo vidíte, veríte tomu, čo počujete, dôverujete svojej intuícii a máte pocit, že súčasná situácia je príjemne známa.“* Na jednej strane, cítiť sa príjemne a mať dobrú náladu pri riešení matematiky je žiadané, no na druhej strane je potrebné všimnúť si tiež to, že kognitívna nenáročnosť spôsobuje, že veríme tomu, čo počujeme. Bezvýhradné prijímanie toho, čo počujeme je však mimoriadne vzdialené od matematického myslenia a kritického myslenia všeobecne. Navyše, pokiaľ dlhodobo volíme príliš jednoduché úlohy, riskujeme, že nevyužijeme potenciál žiakov a postupne ich úlohy prestanú motivovať a baviť.

Možným riešením ako zachovať príjemné pocity spojené s kognitívnou nenáročnosťou a zároveň podporiť náročnú a dôslednú prácu môžu byť úlohy s nízkou podlahou a vysokým stropom. Nízka podlaha vyjadruje to, že aspoň časť z úlohy dokáže na nejakej úrovni vyriešiť každý. A to bez väčších problémov a vynaloženia veľkej dávky úsilia. Na druhej strane vysoký strop označuje to, že na komplexné vyriešenie a porozumenie predkladaného problému je potrebné vyvinúť značnú mieru snahy. A tak, kým nízka podlaha v úlohách zaisťuje príjemný pocit známosti, vysoký strop sa stáva živnou pôdou pre vytváranie nových vedomostí. Môže ísť napríklad o úlohy s gradujúcim charakterom, úlohy, kde hľadáme čo najlepšiu stratégiu, prípadne otvorené úlohy s viacerými možnosťami riešenia, v ktorých nájsť niektoré riešenia je jednoduché.

3 Návrh aktivít vhodných na skupinové vyučovanie zameraných na odstraňovanie strachu z matematiky

3.1 Návrh testovania

Na vybranej škole bude odučených 5 vyučovacích hodín formou skupinového vyučovania. Pred začatím testovania, ideálne v časovom predstihu aspoň 2 týždňov, žiaci vyplnia krátky dotazník, na základe ktorého zistíme, či majú z matematiky strach. Dotazník je spracovaný graficky (obr. 1). Jeho vyplnenie by nemalo trvať dlhšie ako 5 minút.



Obr. 1

V závere testovania žiaci dostanú opäť rovnaký dotazník ako na začiatku. Na základe odpovedí žiakov porovnáme, či svoj vzťah a prípadný strach z kladenia otázok a vyjadrenia svojich nápadov na hodine prehodnocujú. Tiež dostanú priestor vyjadriť sa priamo k tomu, ako sa im páčilo vyučovanie týmto spôsobom a ako sa pri ňom cítili.

3.2 Aktivita 1 - Olympiáda

Cieľom aktivity je vytvoriť nesúťažné, ale motivačné prostredie v ktorom žiaci vyriešia vybrané príklady. Vzhľadom na to, že v aktivite je možné použiť takmer ľubovoľnú sadu príkladov, je možné ju využiť k plneniu rôznych vzdelávacích cieľov. Výchovným cieľom aktivity je povzbudenie tímového ducha v triede.

Pravidlá aktivity: Žiakov rozdelíme do skupín, pričom v každej skupine bude 3-6 žiakov. Každá skupina bude mať k dispozícii sadu príkladov a dva plastové poháriky - žltý a zelený. Na testovanie budeme využívať príklady z rôznych súťaží s prihliadnutím na to, aby išlo o zadanie s nízkou podlahou a vysokým stropom. Na začiatku učiteľ presne stanoví, koľko času majú žiaci k dispozícii. Pri štandardnej 45 minútovej hodine odporúčame 20-30 minút. Žiaci v skupine pracujú na riešení príkladov. V prípade, že si chcú nechať príklad skontrolovať učiteľom, vyložia na lavicu zelený pohárik. V prípade, že im niečo nie je jasné, vyložia pohárik žltý. Učiteľ tak vždy vie, pri ktorej skupine sa má zastaviť. Ak má skupina príklad vyriešený správne, učiteľ im ho označí (podpíše, opečiatkuje…)

Po uplynutí stanoveného času učiteľ veľmi stručne predstaví “športové disciplíny”, z ktorých si žiaci môžu vybrať. Malo by ísť o veľmi jednoduché aktivity, napr. Hádzanie papierovým lietadlom do terča, gúľanie papierovej gule do vyhradeného priestoru, prípadne “basketbal”, t.j. hádzanie papierovej gule alebo lopty do obruče.

Žiaci si každý vyriešený príklad vymenia za papier, prípadne loptičku. Učiteľ zapisuje body a snaží sa vytvoriť priateľskú atmosféru, žiaci sa môžu povzbudzovať, mali by však brať ohľad aj na triedy, ktoré sa učia naokolo. Pri dobrej organizácii by táto

aktivita nemala zabrať viac ako niekoľko minút, učiteľ si môže priebežne udržiavať prehľad o počte vyriešených príkladov, aby žiakom hneď po uplynutí času a vysvetlení aktivity mohol dať k dispozícii loptičky / papiere. Po skončení aktivity učiteľ slávnostne oznámi, koľko úloh všetci spoločne vyriešili a koľko z týchto úloh dokázali premeniť na body, zdôrazní, že je to výsledok práce všetkých. Zvyšný čas a nasledujúca hodina by mala byť venovaná reflexii. Učiteľ môže so žiakmi prediskutovať zaujímavé chyby, ktoré sa v ich riešeniach objavovali, prípadne môže vytvoriť priestor na to, aby navzájom zdieľali svoje riešenia a dojmy z úloh pred tabuľou. Žiaci, ktorí sa prvej hodiny nezúčastnili by mali mať k dispozícii zadanie, v ideálnom prípade dopredu.

3.3 Aktivita 2: Experimentovanie s pravdepodobnosťou

Cieľom aktivity je priviesť žiakov k intuitívnemu pochopeniu fungovania pravdepodobnosti.

V rámci tejto aktivity sme sa rozhodli použiť experimentovanie založené na vypisovanie “áno” a “nie” a dve hry s kockami.

Začneme s experimentom „áno” a „nie”. Experiment prebehne vo dvojiciach. Žiaci si budú môcť vybrať z dvoch alternatív - malý experiment alebo veľký experiment. Každý z dvojice bude mať za úlohu pod seba niekoľkokrát vypísať „áno” alebo „nie”. Tí zo záujmom o malý experiment 20 krát, tí zo záujmom o veľký 100 krát.

Potom si vo dvojici zrátajú, koľkokrát sa zhodli.

Dvojica zapíše svoj výsledok na spoločný papier, kde budú svoje počty zhôd zapisovať všetci účastníci experimentu. Na spoločnom papieri bude stĺpček pre výsledky z malého experimentu a stĺpček pre výsledky z veľkého experimentu.

V záver tejto aktivity prebehne diskusia o výsledkoch, ktoré sa objavovali. Všímame si, ako často sme sa už aj pri malom experimente zhodovali približne v polovici tipov.

Tiež môžeme diskutovať o tom, ako sa pravdepodobnosť viac napĺňa pri väčšom množstve pokusov.

Ďalšou aktivitou bude hra s dvoma kockami. Žiakov na začiatku rozdelíme do skupín. V jednej skupine bude 4 - 6 žiakov. Každá skupina dostane dve kocky s bodkami od 1 do 6 a papiere podľa počtu hráčov plus jeden. Vždy jeden hráč hádže a ostatný tipujú, aký súčet na kockách padne. Svoje tipy napíšu tak, aby ich ostatní hráči nevideli. Po hode kociek svoje tipy odkryjú. Pri uhádnutí, hráč ktorý tipol správne, získa bod. Ten sa zaznamená na spoločný papier, na ktorom sú mená hráčov. Kocky sa po každom hode posunú na ďalšieho hráča v smere hodinových ručičiek. Hrá sa dovtedy, kým niektorý z hráčov nezíska 5 bodov.

Ako ďalšia aktivita bude nasledovať hra Bluff[1]. Žiaci sa rozdelia do približne rovnakých skupín. V jednej skupine bude 5 - 8 žiakov. Každá zo skupín dostane 48 hracích kociek. V skupine sa žiaci posadia do kruhu a rozdelia si kocky, podľa toho koľko ich je. V prípade, že sa kocky nedajú rozdeliť rovným dielom, dostanú hráči iba rovnaký najväčší možný počet kociek. Zvyšné kocky odložte bokom, nehrá sa s nimi.

Hra prebieha tak, že každý hodí svoje kocky a zakryje ich pred ostatnými. Niekto začne a povie nejaký počet čísla, ktoré mohlo padnúť na všetkých kockách – napríklad 6 trojok. Potom postupne ďalší hráč povie buď väčší počet hocakého čísla, alebo rovnaký počet väčšieho čísla, alebo povie: „neverím“.

Keď sa povie neverím, všetci musia ukázať svoje kocky a spočítajú sa počty čísla, o ktorom sa hovorilo naposledy, plus počet šestiek. Šestka slúži ako žolík, ráta sa namiesto ľubovoľného čísla. Pri tipovaní je tiež možné tipovať namiesto počtu nejakého čísla, ktorý by mal nasledovať, polovičný počet šestiek. Ak bol po odkrytí počet daného čísla menší, ako počet ktorý bol naposledy tipovaný, hráč ktorý ho tipoval prichádza o toľko kociek, ako je rozdiel medzi tipovaným a skutočným počtom. Ak bol skutočný počet väčší ako tipovaný, o tento počet kociek prichádza hráč, ktorý povedal „neverím“ Hru vyhráva ten, komu ako poslednému zostanú nejaké kocky.

3.4 Aktivita 3: Kartová hra zameraná na propedeutiku záporných čísel

Cieľom aktivity je hravým spôsobom zoznámiť žiakov so sčítavaním záporných a kladných čísel a násobením čísel konštantou -1 a zároveň vytvorenie prostredia, kde sa žiaci nebudú báť vyjadriť svoje myšlienky.

Pravidlá hry sú jednoduché. V prvej fáze hry využívame žolíkové karty s číselnými hodnotami. Ostatné karty z balíčka odstránime. Rozdáme karty tak, aby mal každý hráč rovnako veľa kariet. Ak nám nejaké karty ostanú, odložíme ich naspäť do balíčka. Jedno kolo prebieha tak, že každý hráč postupne vyloží na stôl jednu kartu. Karty kola získava ten hráč, ktorý dá kartu s najvyššou hodnotou. Ak dá viac hráčov kartu s rovnakou hodnotou, získava karty ten hráč, ktorý dal svoju kartu ako prvý. Nie všetky karty chce hráč získať. Červené karty predstavujú dobré

[1]Hra Bluff dostupná na https://www.ihrysko.sk/vsetky-hry/ravensburger/bluff

(kladné) body, no čierne karty predstavujú trestné (záporné) body.



Obr. 2 - Kartová hra zameraná na propeudetiku záporoných čísel

Základné pravidlá sme spracovali vo forme videa[2]. Žiakom môžeme počas hry klásť doplňujúce otázky ako napr. či je výhodné začínať kolo a podobne. Pri tom môžeme jednoducho dohliadať na to, či žiaci hre porozumeli.



Obr. 3: Situácia z pracovného listu

Po zhliadnutí videa necháme priestor na to, aby si žiaci hru aspoň jedenkrát zahrali, a potom im rozdáme pracovné listy, jeden pracovný list do každej skupiny. Pýtame sa v ňom na to, akým spôsobom počítali body, na herné stratégie a to, akú kartu by zahrali v konkrétnej hernej situácii. Za užitočné považujeme priamo v zadaní vyzývať žiakov k tomu, aby uvádzali všetky riešenia nápady, na ktoré v skupine prišli, aby uvádzali ich riziká a podobne. Vedieme tak žiakov k tomu, aby úlohy vypracovávali naozaj v skupinách.

Druhá polovica pracovného listu sa zaoberá vysvetlením doplňujúcich pravidiel pre druhú fázu hry. Medzi karty pridávame esá a zavádzame tri jednoduché pravidlá:

1. Prvé eso, ktoré v kole zahráme, vždy získava karty daného kola.
2. Eso pri počítaní nemá žiadnu hodnotu.
3. Každé čierne eso, ktoré je v kole zahrané, mení dobré body na trestné body a naopak.

Následne žiakom ukážeme tri konkrétne príklady. Chceme, aby odpovedali na otázku, kto získa karty na obrázku a koľko bodov tým získa. Jeden z vybraných príkladov nemá jednoznačne správnu odpoveď, keďže nevieme v akom poradí boli karty zahraté.



Obr. 4: Situácie z pracovného listu

Po tom, ako si žiaci zahrajú hru aj s týmito novými pravidlami, nasledujú v pracovnom liste ešte tri úlohy. Opäť sa ich pýtame na to, akým spôsobom počítali finálne skóre. Žiaci by mali postupne pochopiť, že keď sa v kole objaví čierne eso a teda násobíme -1, je potrebné karty počítať inak. Predpokladáme, že si ich oddelia. V ďalších úlohách sa ich pýtame na to, aké stratégie využívali a či ich napadá nejaké pravidlo, ktoré by mohlo hru vylepšiť. Pracovný list je možné podľa potrieb modifikovať.

4 Testovanie

Ucelený výskum popísaný v predchádzajúcich kapitolách zatiaľ nebol realizovaný.

Uskutočnili sme prvú fázu testovania, v ktorej sme vybrané aktivity testovali samostatne ako súčasť bežného vyučovania. Toto testovanie malo za účel porozumieť problémom, ktoré môžu v skupinovom vyučovaní vzniknúť. Otestované boli aktivity „áno-nie" a kartová hra zameraná na propedeutiku záporných čísel. Obidve aktivity boli otestované na žiakoch piateho ročníka v škole pre mimoriadne nadané deti.

Pri hre „áno-nie", ktorú sme spolu s inými aktivitami skúšali na hodine venovanej pravdepodobnosti žiaci pracovali v dvojiciach.

[2] Video je dostupné na: http://www.youtube.com/watch?v=oKZPGFQO9Is

Na základe ich nadšených reakcií predpokladáme, že aj vo forme skupinovej práce má potenciál žiakov zaujať.

Kartová hra bola počas rôznych akademických rokov otestovaná dvakrát. Pri prvom testovaní boli pravidlá mierne zložitejšie, v hre sa násobilo konštantou -2 a nemali sme pripravené video s pravidlami hry. Veľké množstvo problémov, najmä neochota žiakov sústrediť pozornosť na výklad pravidiel a časté neporozumenie pravidlám, nás doviedli k nápadu vypracovať video a pracovný list, ktorý by nám pomohol žiakov usmerňovať. Opatrenia boli funkčné a vyššie opísaný druhý pokus považujeme za úspešný. Počas hry sme si všimli, že žiaci prirodzene začali trestné body označovať ako „mínusové“ alebo „záporné“, pracovali s nimi bez problémov a s nadšením a preto hru považujeme za dobrý spôsob propedeutiky záporných čísel. Žiakov hra zaujala, v druhej fáze hry sa objavili dokonca entuziastické reakcie. V hre chceli pokračovať aj cez prestávku a žiakom z iných skupín o nej nadšene rozprávali. Pri pozorovaní práce žiakov sme si uvedomili, že na to, aby sa mohol naplno prejaviť potenciál úloh z pracovného listu a pozitíva skupinovej práce, museli by žiaci mať k dispozícii väčšie množstvo času. Tiež by bolo vhodné, aby mali viac skúseností s týmto druhom práce – dôsledná a pomalá práca v skupinách. Oba tieto problémy sú však do budúcna riešiteľné, aktivitu plánujeme upraviť na aktivitu na dve vyučovacie hodiny, pričom druhú vyučovaciu hodinu by sme chceli venovať primárne spoločnému riešeniu a prezentovaniu zistení a zavádzaniu pojmu záporné číslo. Výsledky testovania tretej aktivity boli prezentované na konferencii Dva dny s didaktikou matematiky 2018 v Prahe.

Medzi často spomínané riziká práce v skupinách patrí to, že sa do riešenia úloh nezapoja všetci, že tempo práce skupiny nebude vyhovovať žiakom, ktorí úlohe porozumejú príliš rýchlo alebo tým, ktorí budú na riešenie potrebovať väčšie množstvo času. Myslíme si, že práve vzájomná komunikácia medzi žiakmi na rôznom stupni porozumenia môže byť veľmi užitočná. Na to, aby sme motivovali k práci všetkých, môžeme využívať rôzne stratégie.

Osvedčilo sa nám priamo v zadaní žiakov vyzvať k tomu, aby zapísali nápady všetkých členov skupiny. V prípade, že sa to neosvedčí, pri niektorých aktivitách je možné prideliť rolu, napr. objasňovateľ, zapisovateľ, moderátor… Pričom v popise každej role môže byť uvedené niečo, čo bude prirodzene viesť ku kontrole toho, či sú všetci aktívnou súčasťou skupiny. Navyše úloha objasňovateľa / skeptika, ktorý má za úlohu všetko, čomu porozumie zopakovať vlastnými slovami a opýtať sa na všetko, čomu neporozumel, má veľký potenciál v podpore rozvoja argumentácie a dôvodenia.

Obávali sme sa organizácie práce v skupinách z dôvodu, že skupiny nebudú pracovať rovnakým tempom. Tento problém však prirodzene riešia úlohy s nízkou podlahou a vysokým stropom, prípadne zadania, ktoré sú zakončené tvorbou vlastnej úlohy.

Ďalším rizikom práce v skupinách je nevhodné zostavenie skupín, ktoré z krátkodobého hľadiska môže negatívne ovplyvniť prácu. Z dlhodobého hľadiska však je dôležité, aby sa žiaci učili spolupracovať s každým. Touto otázkou sa aj naďalej zaoberáme. Pri aktivite s kartami, ako aj pri iných aktivitách skupinového vyučovania sa nám doteraz najviac osvedčilo zostavovať heterogénne skupiny s prihliadnutím na skúsenosti s konkrétnou triedou (pokiaľ máme tieto informácie k dispozícii) a nevyhýbať sa ani využitiu náhody pri zostavovaní skupín.

Veríme, že výhody a potenciál práce v skupinách vysoko prevyšujú možné riziká, čo potvrdzuje aj naša doterajšia učiteľská prax.

Poďakovanie

Ďakujeme Mgr. Jaroslavovi Baričákovi za cenné pripomienky a poskytnutie priestoru na testovanie aktivity 3 a RNDr. Monike Dillingerovej, PhD za čas a usmernenia.

Literatúra

[Boalerová, J., 2016] Boalerová, J. (2016). Matematické cítenie. Bratislava: Tatran.

[Dweck, C. S., 2017] Dweck, C. S. (2017). Nastavení mysli: nová psychologie úspěchu, aneb, naučte se využít svůj potenciál. Brno: Jan Melvil Publishing.

[Devlin, K., 2002] Devlin, K. (2002). Jazyk matematiky: jak zviditelnit neviditelné. Praha: Argo.

[Devlin, K., 2011] Devlin, K. (2011). Mathematics Education for a New Era: Video Games as a Medium for Learning. Natick: A. K. Peters, Ltd. Natick, MA.

[Kahneman, D., 2012] Kahneman, D. (2012). Myšlení rychlé a pomalé. Brno: Jan Melvil Publishing.

[Lyons, I. M. & Beilock, S. L., 2012] Lyons, I. M. & Beilock, S. L. (2012). When Math Hurts: Math Anxiety Predicts Pain Network Activation in Anticipation of Doing Math. San Francisco: PLOS.

[Vankúš, P. & Kubicová, E., 2010] Vankúš, P. & Kubicová, E. (2010). *Postoje žiakov 5. a 9. ročníka ZŠ k matematike.* ACTA MATHEMATICA 13: zborník príspevkov z VIII. nitrianskej matematickej konferencie. Nitra: Katedra matematiky FPV UKF.

[Zlatoš, P., 1995] Zlatoš, P. (1995). Ani matematika si nemôže byť istá sama

sebou: úvahy o množinách, nekonečne, paradoxoch a Gödelových vetách. Bratislava: Iris.

Internetové zdroje:
https://www.ihrysko.sk/vsetky-hry/ravensburger/bluff
https://www.zatrolene-hry.cz/spolecenska-hra/bluff-417/k-stazeni/pravidla-6454/
http://www.zpovednice.cz
http://www.alik.cz/p/skola-uceni

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 261–268
ISBN 978-8081470882, © 2018 Simona Vajdiarová

Možnosti využitia videosekvencií vo vyučovaní fyziky

Simona Vajdiarová[1]*
Školiteľ: Klára Velmovská[1‡]

[1]Katedra teoretickej fyziky a didaktiky fyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

V dnešnej dobe uznávaná empirická metóda poznávania vyžaduje vo vyučovaní fyziky realizáciu fyzikálnych pokusov. Učiteľ však nie vždy má priestor a prostriedky na jeho zaradenie do vyučovacieho procesu, preto navrhujeme alternatívne možnosti jeho realizácie. Jednou z nich je aj využitie videosekvencie fyzikálneho pokusu. V príspevku sa venujeme jej tvorbe, spracovaniu a vhodnému zaradeniu. Príspevok obsahuje aj konkrétne videosekvencie fyzikálnych pokusov – *Destilácia liehu, Topenie tiosíranu sodného* a *Topenie parafínu* spolu s pracovnými listami určenými pre žiakov aj pre učiteľa. Aktivity s videosekvenciami sme realizovali so študentami na vyučovaní fyziky, z čoho sme vypracovali prípadovú štúdiu.

Kľúčové slová: videosekvencia, fyzikálny pokus, pracovný list, vyučovanie fyziky

1 Úvod

Témou videosekvencia fyzikálneho pokusu sme sa zaoberali v bakalárskej práci [Vajdiarová, 2017] ktorú sme v značnej miere využívali aj pri tvorbe tohto príspevku. Našim cieľom spolu s vytvorením súboru videosekvencií fyzikálneho pokusu je overiť možnosti ich využitia vo vyučovaní fyziky. S cieľom vytvoriť návod pre učiteľa, ktorý chce vytvoriť ďalšiu videosekvenciu, opisujeme celý proces tvorby videosekvencií.

2 Realizácia fyzikálneho pokusu v školských podmienkach

Dnes sa fyzikálne vzdelávanie chápe ako proces, v ktorom sa žiak aktívne podieľa na konštruovaní poznatkov v spolupráci s učiteľom a spolužiakmi. Od učiteľa sa preto vyžaduje, aby našiel spôsoby, ktorými zapojí žiakov do procesu vyučovania tak, aby pomocou praktických činností využívali doterajšie vedomosti, mohli si osvojovať nové, a tým ich hlbšie chápať. [Lapitková et al., 2015] Hlavným takýmto spôsobom je experimentovanie, a teda realizácia fyzikálneho pokusu. Učiteľ však nemá vždy vhodné podmienky na jeho realizáciu.

Dovoľujeme si poukázať na niektoré dôvody, ktoré môžu skomplikovať učiteľovi realizáciu fyzikálneho pokusu:

Bezpečnostné dôvody – každý pedagóg je povinný dbať na bezpečnosť žiakov pri práci. Niektoré pokusy však vyžadujú manipuláciu napríklad s otvoreným ohňom. Pokiaľ učiteľ vyučuje naraz 30 žiakov a nemá k dispozícii delené hodiny, pokusy, kde je potrebná manipulácia s otvoreným ohňom nemusí považovať za vhodné. Destilácia liehu, napríklad, si vyžaduje manipuláciu s otvoreným ohňom v kombinácii s liehom.

Organizačné dôvody – realizácia fyzikálnych pokusov s počtom žiakov nad 16-18 nie je možná, nakoľko sa učiteľ stíha venovať na hodine maximálne štyrom skupinám po štyroch žiakoch.

Časové dôvody – sú pokusy, ktorých príprava aj priebeh trvajú niekoľko minút, napríklad meranie hustoty nejakého telesa, ale sú aj pokusy, ktoré trvajú rádovo desiatky minút. Ako príklad si môžeme uviesť už vyššie spomínanú destiláciu, prípadne elektrolýzu vody. Pokiaľ má učiteľ k dispozícii 45 minút, kedy potrebuje stihnúť okrem samotnej výuky aj organizačné záležitosti, s veľkou pravdepodobnosťou tieto pokusy vynechá. Takisto aj pokusy, ktorých priebeh síce nie je zdĺhavý, ale príprava aparatúry zaberie veľa času z hodiny tak, že samotný priebeh sa nestihne (pokiaľ učiteľ nemá možnosť využiť fyzikálne laboratórium, v ktorom by si mohol všetko dopredu pripraviť). Prípadne, aj keď si pomôcky učiteľ nachystá vopred, musí si ich pripravovať z hodiny na hodinu, ale keď má dozor a manipulácia s nimi trvá aj cez prestávku veľa času, nestihne ich dostať do stavu vhodného na použitie.

Nedostupnosť pomôcok – dnes je na Slovensku ešte mnoho škôl, ktoré nemajú postačujúce vybavenie na vyučovanie fyziky. Keď aj pomôcky na niektoré pokusy sú mnohokrát len pre jednu skupinu to znamená, že pokus bude demonštrovať učiteľ pred žiakmi, alebo nebude vôbec predvádzať, pretože by sa to v triede 30 žiakov minulo účinku. Avšak je pravda, že šikovný učiteľ si dokáže aj sám pomôcť ako vie, avšak také pomôcky ako vývoveva, voltmeter a ampérmeter, reostat a pod. si nedokáže nejako

* simavajdiarova@gmail.com
‡ Klara.velmovska@fmph.uniba.sk

svojpomocne vyrobiť alebo zadovážiť. Preto nemá možnosť pokus so žiakmi prejsť.

Všetky vyššie spomenuté dôvody môžu zabrániť učiteľovi v realizácii fyzikálneho pokusu na hodinách fyziky. Niektoré obmedzenia dokážeme odstrániť, no zvyšné nevieme ovplyvniť, preto sme sa rozhodli hľadať aj iné možnosti, ako dať fyzikalnému pokusu určité miesto vo vyučovacom procese.

3 Videosekvencia

Sekvencia vo všeobecnosti značí sled častí tvoriacich uzavretý celok. Videosekvencia je teda sled záberov tvoriacich súvislú dejovú líniu. Videosekvenciu môžeme do vyučovacieho procesu zaradiť rôznymi spôsobmi, napríklad ako ukážku fyzikálneho javu v prírode, filmovú scénu na rozvíjanie kritického myslenia, ako náhradu reálneho experimentu (ukážka experimentu vo forme videosekvencie), ako zaujímavú ukážku s cieľom upriamiť pozornosť žiakov na nejaký fyzikálny jav a iné.

3.1 Možnosti využitia videosekvencií na hodinách fyziky

Online videosekvencie

Dnes si už takmer každý má možnosť vytvoriť videosekvenciu pomocou svojho smartfónu a takmer každý má prístup na internet, teda môže svoje záznamy zdieľať. Najznámejšou a najväčšou online databázou videosúborov v súčasnosti je internetový server spoločnosti Google – YouTube. Na YouTube sú okrem iného k dispozícii aj vzdelávacie videosekvencie. Môžeme tu nájsť mnoho pokusov z fyziky aj spolu s komentárom realizátora, ktorý popisuje, aké deje prebiehajú, aké sú príčiny týchto dejov, ich dôsledky a podobne. Na YouTube nenájdeme len zaznamenané pokusy, ale napríklad aj videosekvencie, kde autor vysvetľuje konkrétne učivo, napríklad Archimedov zákon. V takejto videosekvencii je najčastejšie záber na papier a ruku vysvetľujúceho, ktorý niečo píše, kreslí a tým vysvetľuje danú tému. Niektorí autori si na vysvetlenie vytvoria prezentácie, animácie alebo iné pomôcky. Ďalším druhom vzdelávacích videosúborov, ktoré môžeme nájsť na YouTube sú prednášky vyučujúcich z vysokých škôl. Napríklad naša fakulta má vytvorený vlastný kanál na YouTube, kde sú zverejnené rôzne prednášky z dní otvorených dverí a iných zvláštnych príležitostí, ale napríklad aj kompletný semester prednášok predmetu Elektromagnetizmus pre prvákov bakalárskeho stupňa odboru Fyzika.

Pozrime sa teda, ako by sme mohli využiť videosúbory z YouTube na hodinách fyziky, prípadne inde vo vyučovacom procese:

- motivačná videosekvencia – pred začiatkom nejakého tematického celkom môžeme vyhľadať videosekvenciu, ktorá by u žiakov vzbudila záujem o danú tému, napr. https://www.youtube.com/watch?v=cHf9eWRd_bc
- videosekvencia pokusu, ktorý nemáme možnosť zrealizovať sami – učiteľ žiakom ukáže videosekvenciu z YouTube, napr. ak škola nevlastní vývevu, učiteľ môže ukázať princíp: https://www.youtube.com/watch?v=DltDe8lvu3M
- videosekvencia s aplikáciou fyzikálneho javu v praxi – napríklad po dokončení učiva žiaci uvidia niekoľko videosekvencií a rozhodnú, či a kde sa vyskytuje dej, s ktorým sa vo vyučovaní fyziky už stretli, napr. odporová sila: https://goo.gl/fpNG1j
- videosekvencie ako inšpirácia - pre nás, čo sa týka pokusov, s ktorými sme sa ešte nestretli, sú zaujímavé a môžeme ich realizovať, napr. https://goo.gl/Bo7VoA

Videosekvencie z YouTube môžu pomôcť žiakom v pochopení rôznych javov, taktiež si ich môžu sami vo vlastnom záujme prezerať doma, avšak často sú vytvorené v takej forme, ktorá žiakom hneď oznámi analýzu problému, postup riešenia a často aj samotné riešenie, preto nemajú možnosť sa zamyslieť nad problémom, ktorý je nastolený, nemajú možnosť navrhnúť svoj postup na riešenie problému a nájsť konkrétny výsledok riešenia. Žiak sa teda aktívne nepodieľa na získavaní poznatkov, čo vidíme ako veľký nedostatok Preto je na učiteľovi, aby pri rozhodovaní, či použije takúto videosekvenciu vo vyučovacom procese, zvážil aj jej vhodné zaradenie. Ďalším nedostatkom, ktorého sme si vedomí, je, že videosekvencie z YouTube neprechádzajú recenziou, a teda je na divákovi, aby posúdil ich kvalitu, čo môže byť z pohľadu žiaka ťažké, a preto si žiak môže vytvoriť nesprávne predstavy.

Filmové scény

Problematike fyziky vo filme sa venovalo a venuje mnoho autorov. Vo vedecko-fantastických filmoch sú zákony fyziky často popierané, keďže dominantným prvkom týchto filmov je fikcia. Avšak aj vo filmoch založených na realite sa často tieto zákony porušujú. Niekedy neúmyselne, inokedy zas úmyselne z rôznych dôvodov. Tým, ako sa dajú využiť filmové scény sa zaoberá český pedagóg Jaroslav Reichl, ktorý sa snaží využiť filmové scény na zvýšenie záujmu žiakov o fyziku. „Zaujímavé scény sa dajú nájsť nielen vo vedecko-fantastických filmoch, ale aj v rodinných komédiách, rozprávkach a ďalších filmových žánroch. Filmové ukážky, ktoré môžeme na hodinách fyziky použiť môžeme rozdeliť do troch skupín podľa toho, aké zábery sú v nich zachytené:

- nereálne alebo fyzikálne nesprávne zábery, najčastejšie ukážky z akčných filmov, napríklad keď človek padá z vysokej budovy, spadne na

betón, zdvihne sa a nič mu nie je, prípadne zábery z rozprávok, rodinných filmov, kedy autori nepresne pochopili fyzikálny zákon,
- zábery, ktoré zobrazujú fyzikálny jav, ktorý sa nedá v podmienkach školy demonštrovať – jav je však natoľko zaujímavý, že je vhodné ukážku použiť. Napríklad beztiažový stav v družici krúžiacej okolo Zeme, alebo nejaké katastrofické udalosti ako záplavy a pod., ktoré síce podliehajú fantázii scenáristu, v ktorej často nie je miesto pre fyzikálne zákony, avšak môžu sa reálne stať (napr. záplavy),
- vierohodne zobrazené reálne deje – ich výhodou je, že sa s nimi študent v praxi bežne stretne, avšak tu je možné pri ich analyzovaní ich zastaviť, vrátiť späť, opakovane prezrieť, upozorniť na dôležité momenty.

Pri takýchto scénach je dôležité žiakov donútiť premýšľať, kriticky zhodnotiť ich reálnosť, nereálnosť, navrhnúť zmeny, ktoré by pomohli fyzikálnu nezrovnalosť opraviť.“ [Reichl, 2008]

Filmové scény môžeme použiť počas vyučovacej hodiny rôznymi spôsobmi, treba však brať do úvahy charakteristiky konkrétnej triedy, napríklad všeobecná obľúbenosť fyziky v triede, a síce či ide o triedu, kde žiaci majú radi fyziku, alebo ju nemajú radi, prípadne niečo medzi. Taktiež či triedu tvoria prevažne chlapci alebo dievčatá, alebo je to vyrovnané. Nesmieme zabudnúť ani na vek žiakov a iné špecifické charakteristiky triedy. Konkrétne využitie na hodine uvádza Reichl (2008) takto:

a) využitie ukážky na dokreslenie atmosféry – napr. pri preberaní slnečnej sústavy,

b) využitie ukážky pri ústnom preskúšaní – žiakovi je premietnutá situácia z filmu, kde napr. muž visiaci na strome nespadne a žiak má popísať, aké sily na neho pôsobia a zhodnotiť situáciu,

c) využitie ukážky pri teste – podobne ako pri ústnom preskúšaní žiaci dostanú nejakú úlohu na základe filmovej scény, ktorú vyriešia.

Ďalšie možné miesto filmových scén vo vyučovaní fyziky je využitie fyzikálne nesprávnych filmových scén na rozvoj kritického myslenia žiakov. „Na to, aby v škole došlo k rozvoju kritického myslenia, musia učitelia žiakom poskytnúť priestor na jeho uplatnenie, či už kladením správnych otázok, zadávaním vhodných úloh alebo iným spôsobom.“ [Velmovská, 2011] „Keď budú študenti schopní odhaľovať chyby vo filmoch, budú vedieť lepšie uvažovať aj v reálnom živote. Nebudú sa musieť rozhodovať náhodne, ale budú mať na svoje rozhodnutia dôvody. Budú vedieť zvážiť pre a proti v rozhodovaní v životných situáciách.“ [Urbašíková, 2013] Filmové scény môžu teda byť prostriedkom pre rozvoj kritického myslenia. „ Ak použijeme filmovú ukážku, v ktorej sa vyskytuje fyzikálny filmový omyl, úlohou žiakov je tento omyl objaviť, pričom musia v nemalej miere využiť nielen fyzikálne poznatky, ale aj kritické myslenie. Výhody využitia takýchto filmových ukážok vo vyučovaní fyziky podľa nás môžu byť nasledovné:

- motivácia – filmy sú žiakom blízke, o čom svedčí aj návštevnosť kín;
- rozvoj kritického myslenia – pri hľadaní fyzikálnych omylov musia žiaci uplatniť kritické myslenie;
- zopakovanie učiva – ak aj nie všetci žiaci objavia fyzikálny omyl, dôjde k opakovaniu fyzikálnych pojmov a javov, ktoré môžu viesť k utvrdeniu poznatkov z daného javu;
- hodnotenie – umožní učiteľovi zhodnotiť hĺbku žiackych poznatkov a kritické myslenie žiakov;
- žiakovi umožní zhodnotiť úroveň jeho poznatkov a jeho kritické myslenie;
- aplikácia fyziky v praxi – vo filmových scénach ide vlastne o využitie fyzikálnych javov praxi.“ [Velmovská, 2011]

Videomerania

„Videomeraním nazývame také meranie, pri ktorom využívame videozáznam. Z neho, posúvaním záznamu po jednotlivých snímkach, zisťujeme časovú závislosť polohy, rýchlosti, prípadne zrýchlenia pohybu. Výsledkom videomerania býva graf závislosti spomenutých kinematických veličín od času.“ [Horváth, 2011]

„Realizovať videomeranie znamená pomocou vhodného softvéru označiť polohu zvoleného bodu telesa na vybraných snímkach videoklipu a získať tak informácie o polohe a čase. Dostupné programy umožňujú meranie v dvoch režimoch - manuálne alebo automatickým sledovaním bodu.“ [Kiráľová, 2014]

Videomeranie môžeme so žiakmi vykonávať rôznymi spôsobmi využívaním:

- vopred pripraveného videozáznamu, ktorý si buď sami zaznamenáme a pripravíme do vhodnej formy hotovej na použitie, prípadne si ho zabezpečíme z vhodných zdrojov,
- videozáznamu vytvoreného samotnými žiakmi na hodine – dnes už takmer každý žiak disponuje mobilným zariadením, ktorým je schopný zachytiť dostatočne kvalitný videozáznam.

Ak sa učiteľ nachádza v časovej tiesni alebo nemôže vytvoriť podmienky na to, aby si žiaci pracovali so svojim videozáznamom, je vhodnejšie siahnuť po vopred pripravenej nahrávke, či už učiteľom samotným, alebo niekým iným. Avšak analyzovať svoje vlastné nahrávky býva pre žiakov motivujúce.[Horváth, 2011]

„Pri nahrávaní interaktívneho videozáznamu je potrebné brať do úvahy:

- rozmer snímaného obrazu v bodoch,
- počet vytvorených snímok za sekundu,
- nemennosť polohy vzťažnej sústavy,
- videozáznam nahrávať staticky,

- primerané osvetlenie scény,
- kontrast sledovaného telesa z pozadím a jeho prekrývanie s inými objektmi,
- využitie plochy záberu
- nastavenie vhodného priblíženia počas nahrávania,
- umiestnenie objektu známych rozmerov do záberu,
- uloženie súboru do správneho videoformátu, ktorý softvér na videoanalýzu prehráva a spracováva.“ [Kiráľová, 2014]

„Na samotnú videoanalýzu môžeme použiť rôzne programy. Ak nahráme napríklad pád loptičky s pozadím pokreslenej tabule, môžeme analýzu uskutočniť jednoduchým spôsobom, zaznamenávaním polohy loptičky na samotné pozadie. Nepotrebujeme špeciálny softvér, stačí nám prehliadač videa, kde môžeme záznam sledovať po jednotlivých obrázkoch. Na tento typ spracovania sa osvedčil napríklad program Quick Time Player. Ak chceme ako výsledok videoanalýzy mať priamo na obrazovke zobrazené grafy závislostí polohy, prípadne rýchlosti od času, potrebujeme vhodný softvér. V ňom potom naznačujeme pomocou myši okamžitú polohu telesa na jednotlivých snímkach videa.“ [Horváth, 2011]

Asi najznámejším bezplatným a voľne stiahnuteľným softvérom je Tracker. „Je to softvér, ktorým možno vykonávať analýzu fotografií a videoanalýzu. Má jednoduché a intuitívne ovládanie. Dáva možnosť matematicky modelovať skúmané deje, vykresliť v analyzovanom videu vektory rýchlosti, zrýchlenia, hybnosti a sily, dokáže vykresliť graf ľubovoľnej funkcie, poskytuje kopírovanie údajov napr. do Excelu“ [Duľa, 2009]

Čo sa týka platených softvérov vhodným je napríklad Coach 7.

Videosekvencia fyzikálneho pokusu

Videosekvencia fyzikálneho pokusu, ako sme ju poňali my, je videozáznam priebehu fyzikálneho pokusu, ktorý je upravený pre potreby učiteľa (napr. upravený tak, aby bolo možné kvantifikovať experiment, pozorovať detailne nejaký fyzikálny jav a podobne). Rozdiel medzi videomeraním a videosekvenciou fyzikálneho pokusu je preto hlavne ten, že videosekvencia fyzikálneho pokusu je len prostriedkom na pozorovanie priebehu fyzikálneho pokusu, prípadne kvantifikovanie fyzikálneho experimentu. Pri videomeraní analýzou nejakého videozáznamu dospejeme k určitým záverom.

Cieľom našej práce je vytvoriť súbor takýchto videosekvencií, ktoré môže učiteľ využiť vo vyučovacom procese. V ďalšej kapitole sa budeme zaoberať procesom prípravy a samotnej tvorby videosekvencií fyzikálnych pokusov.

4 Proces tvorby videosekvencie fyzikálneho pokusu

4.1 Kritériá výberu fyzikálneho pokusu na spracovanie vo forme videosekvencie

Pri výbere vhodných pokusov pre ďalšie spracovanie sme brali do úvahy dôvody nerealizácie fyzikálnych pokusov, ktoré sme spomínali v prvej kapitole, a síce bezpečnostné dôvody, časové dôvody, prípadne nedostupnosť pomôcok. Takisto sme sa snažili zvoliť také pokusy, ktoré vo forme videosekvencie nestratia svoj hlavný cieľ, t.j. napr. nevyberali sme pokusy, ktorých cieľom je rozvíjať manuálne zručnosti žiaka. Tiež sme sa vyhýbali pokusom ako napríklad skúmanie pohybu loptičky po naklonenej rovine, keďže to si žiak môže sám manuálne vyskúšať, odmerať, prípadne spraviť videomeranie pomocou nejakého softvéru. My sme sa zamerali hlavne na pokusy, kde je skúmaná závislosť teploty nejakej látky od času. Dôvody sú jednoduché. Keďže skúmame závislosť teploty od času, potrebujeme, aby pokus prebiehal dlhšiu dobu, čo je v rámci 45 minútovej vyučovacej hodiny často nezlučiteľné s prípravou pomôcok, so zostavením aparatúry, dostatočným časom na priebeh pokusu a upratanim pomôcok. Preto sme sa zamerali na pokusy: Destilácia liehu, Topenie tiosíranu sodného a Topenie parafínu. Žiak dokáže pomocou videosekvencie zaznamenávať teplotu a čas azostrojiť graf závislosti teploty od času, takisto vidí samotný priebeh pokusu, čo sa s látkou v priebehu času deje, či sa mení a ako.

Destilácia liehu: Cieľom tohto pokusu je ukázať žiakom oddelenie dvoch kvapalných látok zo zmesi, taktiež vysvetliť priebehu čiary grafu závislosti teploty od času zohrievania pri konštantnom dodávaní tepla. Pokus má slúžiť pre žiaka na lepšie osvojenie si vedomostí o skupenských premenách látok.

Topenie tiosíranu sodného: Tiosíran sodný je kryštalická látka, ktorá má nízku teplotu topenia (t_t = 48,3°C), preto je vhodný na demonštráciu skupenskej premeny – topenia.

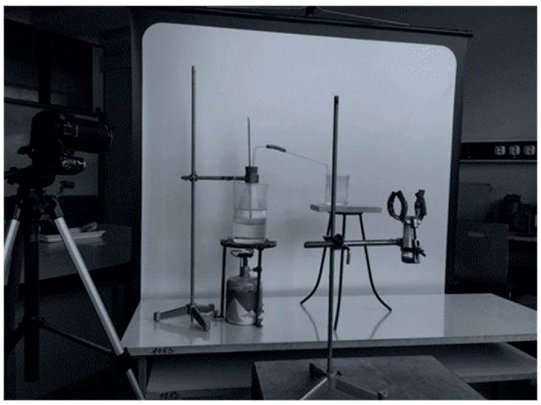
Topenie parafínu: Topenie parafínu sme si vybrali ako porovnanie s topením tiosíranu sodného, keďže parafín je amorfná látka na rozdiel od tiosíranu sodného. Žiaci preto majú možnosť vidieť rozdiel medzi závislosťou teploty od času pri topení kryštalickej a amorfnej látky.

4.2 Príprava na zaznamenávanie a spracovanie videosekvencií

Pred začatím zaznamenávania videa sme si museli premyslieť, ako chceme, aby záverečná videosekvencia vyzerala. Ako prvú sme sa rozhodli spracovať destiláciu. Problémy, ktoré nastali počas zaznamenávania:

- uprostred pokusu došiel plyn v horáku,
- teplomer bol krátky, a teda nebol dostatočne ponorený, preto ukazoval teplotu pary a nie teplotu kvapaliny, museli sme vymeniť teplomer, s tým súviselo vyvŕtanie novej diery do zátky kvôli tesneniu,
- počas destilovania sa vyparilo toľko vody z vodného kúpeľa, že banka s liehom už nebola ponorená,
- počas destilovania sa zotmelo a svetlo v laboratóriu sa zmenilo tak, že na zázname nebolo vidno takmer nič,
- počas zaznamenávania pokusu došla pamäť na fotoaparáte, keďže pokus prebiehal už cez 30 minút,
- počas zaznamenávania pokusu došla batéria vo fotoaparáte, keďže sme zaznamenávali nepretržite viac ako 50 minút.

Tieto všetky problémy spôsobili, že sme pokus museli zastaviť, všetko nechať vychladnúť a opakovať. Pri príprave sme taktiež museli dbať na to, aby bolo miesto, kde postavíme aparatúru dobre osvetlené, aby nevznikali tiene, ale zároveň, aby sa svetlo neodrážalo od kadičiek a bánk. Ďalším dôležitým prvkom, ktorý sme sa snažili brať do úvahy je minimalizmus. Snažili sme sa aparatúru vždy zostaviť čo najjednoduchšie tak, aby sa v samotnej videosekvencii nenachádzali rušivé prvky, aby nebolo mnoho zbytočných vecí, ktoré by odpútavali pozornosť, aby aparatúra bola jednoduchá a postačujúca.



Obr. 1 Kompozícia kamier pri experimente Destilácia

Pri destilácii sme robili záznam na dve zariadenia, pričom sme potrebovali, aby jedno zaznamenávalo len detail – teplomer – a druhé zaznamenávalo celý pokus. Preto ďalšia vec, na ktorú sme museli dávať pozor, bola kompozícia kamier. Museli sme ich usporiadať tak, aby ich navzájom na svojich záberoch nebolo vidno, ale aby zaznamenávali obraz kvalitne.

Zároveň sme museli používať klapku, aby sme tieto dva záznamy dokázali pri spracovávaní zosynchronizovať.

Destilácia liehu bola našim cvičným experimentom, kedy sme sa naučili veľa rôznych vecí a zvyšné dva experimenty – topenie tiosíranu sodného a parafínu sme dokázali s dostatočnou prípravou zachytiť na jeden z prvých pokusov.

4.3 Spracovanie videosekvencií

Ďalšou fázou v procese tvorby videosekvencií bolo ich spracovanie. Na spracovanie videosekvencií sme používali rôzne programy, najčastejšie však platený softvér Adobe Premiere Pro CC. Princíp fungovania softvérov na spracovanie videí je však takmer u všetkých rovnaký. Na spracovanie sme nevyužívali mnoho špeciálnych efektov. Jediným bola súbežnosť dvoch videozáznamov naraz, aby sme zabezpečili, že žiak vie v určitom čase odčítať teplotu z teplomera a zároveň môže sledovať v akom štádiu sa nachádza látka, ktorú skúma. My sme na vytvorenie takejto sekvencie použili efekt Video Overlay, ktorý je možné robiť v rôznych programoch. Pri exportovaní videosekvencií po ich úprave sme nastavili vysoké rozlíšenie obrazu, nakoľko je pre nás dôležité, aby žiaci videli detaily vo videosekvencii.

5 Pracovné listy k jednotlivým videosekvenciám

K jednotlivým pokusom – Destilácia, Topenie tiosíranu sodného a Topenie parafínu sme vypracovali pracovné listy pre žiaka aj pre učiteľa. Taktiež sme vytvorili aktivitu v programe Coach 6 na tvorbu grafov. Ak sa učiteľ rozhodne a dovolia mu to technické možnosti, môže využiť túto aktivitu. Žiaci si v nej môžu zaznamenávať dáta a graf sa im zobrazí automaticky. K pracovnému listu si vytlačený graf môžu doložiť. Aktivitu spolu s pracovnými listami pre žiaka aj učiteľa spolu s jednotlivými videosekvenciami prikladáme v prílohách.

6 Prípadová štúdia – Topenie tiosíranu sodného a parafínu

Aktivity, ktoré sme pripravili v rámci bakalárskej práce – videosekvencie spolu s pracovnými listami sme sa rozhodli vyskúšať na vyučovaní fyziky, v prvom ročníku gymnázia. Vyučovacie hodiny prebehli na konci mája školského roka 2016/2017. Najskôr sme kontaktovali vyučujúceho, ktorému sme poskytli videosekvencie a pracovné listy spolu

s potrebnými informáciami, pričom on zvolil, ktoré z nich môžeme použiť na hodine. Vybral Topenie tiosíranu sodného a Topenie parafínu, keďže sa práve venovali téme Topenie tuhých látok. Po dohode s vyučujúcim sme zvolili dva spôsoby zaradenia týchto aktivít do vyučovania. Dve z troch tried dostali aktivity bez využitia pracovných listov na domácu úlohu, pričom na hodine sme spoločne realizovali vyhodnotenie. Jedna trieda pracovala s celou aktivitou aj s pracovnými listami priamo na hodine. Pred začiatkom vyučovacích hodín sme s vyučujúcim pripravili potrebnú techniku, skontrolovali, či majú všetky prenosné počítače nainštalované videoprehrávače a pre skontrolovanie funkčnosti prehrávania spustili videosekvencie.

Prvé dve vyučovacie hodiny sme absolvovali v triedach, kde žiaci dostali aktivitu na domácu úlohu. Úlohou bolo prezrieť si jednotlivé videosekvencie Topenie tiosíranu sodného a Topenie parafínu. Zaznamenávať teplotu v rovnakých časových intervaloch a zostrojiť graf závislosti teploty od času na milimetrový papier.

V prvej triede chýbali dvaja žiaci a traja žiaci si domácu úlohu nespravili. Z celkového počtu 14 študentov, 11 študenti mali aktivitu vypracovanú. Zvyšní traja si videosekvencie v rýchlosti prezreli na svojich mobilných telefónoch, pretože ich mali sprístupnené v e-learningovom systéme školy a následne sa pridali k študentom, ktorí si spravili domácu úlohu, aby sa aktívne mohli zapájať do vyhodnocovania výsledkov.

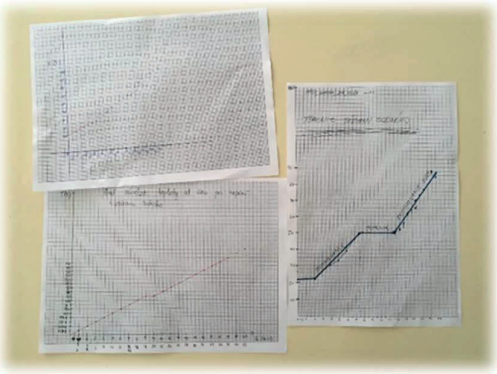
Najskôr sme so študentmi diskutovali o zostrojenom grafe, ktorý priniesli narysovaný na milimetrovom papieri. Problémom pri tejto aktivite býva uvedomiť si, že vzniknuté body nemôžeme preložiť jednou priamkou, ale tromi, pretože znázorňujeme tri deje, a to zohrievanie tuhej látky, topenie a zohrievanie kvapaliny. Z 11 študentov mali správne zostrojený graf 4 študenti, 4 študenti vedeli, že treba preložiť priamku, ale preložili iba jednu priamku a 3 študenti neprekladali priamku, ale pospájali body.

Ďalším diskutovaným aspektom bol sklon jednotlivých častí grafu a porovnanie grafov pri topení tiosíranu sodného a parafínu, teda všeobecne rozdiel medzi topením kryštalickej a amorfnej látky. Študenti sami zvládli pomenovať jednotlivé deje, vymenovať rozdiely nielen medzi grafmi, ale aj konzistenciou látok počas zohrievania.

Na záver sme sa pýtali študentov na vzniknuté problémy, prípadne nejaké postrehy ku videosekvenciám. Študenti so zadaním úlohy nemali žiadne problémy, taktiež rozumeli formulácii otázok v pracovnom liste. Videosekvencia Topenia parafínu nespôsobovala problémy, žiaci dokázali odčítavať teplotu z teplomera aj pozorovať zmeny v skupenstve parafínu. Avšak Topenie tiosíranu sodného bolo problematickejšie. Viacerí študenti nedokázali v určitých momentoch odčítať teplotu z teplomera, pretože bol veľmi tmavý. Preto volili iný časový úsek. Celkovo študenti hodnotili aktivitu pozitívne, pár študentov by však chcelo vidieť priebeh dejov aj priamo na hodine, nielen prostredníctvom videosekvencie. Aktivity sme stihli realizovať v rámci jednej vyučovacej hodiny.

Tretiu hodinu sme aktivitu realizovali so študentmi priamo na hodine. V triede bolo 15 študentov, ktorých sme rozdelili do troch skupín po 4 študentoch a jednu skupinu tvorili 3 študenti. Všetci dostali aj pracovné listy a celá aktivita bola samostatnou prácou. Dve skupiny pracovali na topení tiosíranu sodného a dve skupiny na topení parafínu, pričom jedna z týchto dvoch skupín mohla vytvoriť graf pomocou mobilnej aplikácie, ostatní rysovali graf na milimetrový papier. Každá skupina mala k dispozícii prenosný počítač s konkrétnou videosekvenciou.

Skupiny, ktoré pracovali s videosekvenciou topenia tiosíranu sodného mali problém s odčítaním teploty v určitom časovom úseku, čo sme ale pridaním jasu na obrazovke prenosného počítača takmer úplne odstránili a študenti teplotu odčítali. Graf závislosti teploty od času obe skupiny zostrojili správne.



Obr. 2 Grafy zostrojené jednotlivými skupinami

Ďalšie dve skupiny, ktoré spracovali topenie parafínu mali problém až pri vyhodnocovaní grafu. Nakoľko sklon medzi jednotlivými časťami grafu bol tak malý, že sa body javili akoby sa dali preložiť jednou priamkou.

Na záver spoločne všetky 4 skupiny porovnali priebehy topení a spolu s vyučujúcim zovšeobecnili rozdiely medzi topením kryštalickej a amorfnej látky.

Na tejto hodine sme však pociťovali časovú tieseň. Organizačná časť hodiny a rozdelenie študentov do skupín trvalo okolo 4 minút. Prvá časť aktivity z pracovného listu ešte pred prezretím videosekvencie zabrala 6 minút. Keďže samotné videosekvencie trvajú 13 a 17 minút, napriek tomu, že ich študenti nie sú povinní sledovať celé, teplotu zaznamenávali približne 15 minút. Tvorba grafu každej skupine zabrala okolo 7 minút. Na otázky v závere pracovného listu teda študentom ostávalo 13 minút a potrebovali sme ešte navzájom grafy

porovnať. Preto sme otázky v závere pracovného listu riešili v rámci porovnávania a spoločného vyhodnotenia. Porovnanie grafov sme stihli do zvonenia ukončiť.

Celkovo vyučovaciu hodinu hodnotíme pozitívne. Rozdelenie do skupín sa ukázalo ako vhodné, avšak rovnako dobre pracovala aj trojčlenná skupina. Preto pokiaľ by bolo dostatočné množstvo technického zabezpečenia, mohli by sme vytvoriť aj trojčlenné, prípadne dvojčlenné skupiny.

Zistenia z týchto troch hodín môžeme zhrnúť v nasledujúcich bodoch:

- Aktivita sa dá realizovať viacerými spôsobmi. Prvý spôsob, prezretie videosekvencie na domácu úlohu, je časovo výhodný, lebo na hodine sa spoločne môže učiteľ so žiakmi venovať výsledkom. Avšak závisí od toho, či si študenti spravia domácu úlohu, lebo ak nie, efektivita sa stráca. Druhý spôsob, práca s videosekvenciami priamo na hodine, je časovo náročnejší, ale vzniknuté problémy dokážeme so študentmi priamo riešiť (napr. problém s odčítaním teploty z teplomera). Nie je však možné, aby každý študent za jednu vyučovaciu hodinu spravil obe aktivity, a to topenie tiosíranu sodného aj parafínu. Ak budeme chcieť, aby si každý študent prešiel obe aktivity, potrebujeme aspoň dve vyučovacie hodiny. Skupinová práca sa preto javí ako časovo výhodné riešenie, lebo polovica skupín rieši jednu aktivitu, druhá polovica druhú aktivitu a o výsledkoch sa navzájom informujú.
- Videosekvencia Topenie tiosíranu sodného je problémová. V určitých časových úsekoch nie je zreteľne viditeľná teplota na teplomere. Treba preto obmedziť svetlo v učebni, prípadne zvýšiť jas počítača.
- Študentov treba upozorniť na to, aby teplotu odčítavali v rovnako dlhých časových úsekoch a všímali si priebeh topenia v skúmavke, resp. zmenu skupenstva.
- Treba zvážiť rozdelenie do skupín, aby každý študent bol zamestnaný.
- Nezabúdať vrátiť sa na začiatok aktivity k predpokladom a diskutovať o nich.

Zároveň sme poprosili vyučujúceho o hodnotenie aktivity. Vyučujúci uviedol „Navrhnuté aktivity sú vhodné a pripravené pre vyučovanie fyziky. Študenti dokázali s navrhnutými materiálmi a videami pracovať v skupinách samostatne. Úlohy a otázky v materiáloch sú jasne definované.

Najväčší prínos aktivít pre vyučovanie je v skrátení času trvania jednotlivých experimentov. Keby sme chceli so študentmi tieto experimenty realizovať spolu so zostavením aparatúry a pozorovaním celého priebehu experimentu tak by sme museli venovať daným aktivitám určite viac ako jednu vyučovaciu hodinu. Za pozitívum taktiež považujem materiál pre učiteľa k navrhnutým aktivitám. V materiáloch sú uvedené všetky výsledky a spôsob prevedenia experimentov a aktivít. Učiteľovi teda odpadá značná časť práce spojená s prípravou na vyučovaciu hodinu.

Experimenty, tak ako sú navrhnuté v učebniciach považujem za náročné v mnohých oblastiach. Náročné je už len zostavenie daných aparatúr, na ktoré je potreba mnoho pomôcok. Náročná je taktiež obsluha aparatúry a z časti nebezpečná. Pri experimentoch sa pracuje s otvoreným ohňom a študenti musia zasahovať do aparatúry a to občasným premiešaním látok, resp. vodného kúpeľa. Ak má učiteľ v triede väčší počet študentov a má naraz pracovať viac ako dve skupiny študentov tak považujem za nemožné, aby učiteľ ustrážil bezpečnosť práce počas týchto experimentov. Použitie video sekvencií odstraňuje tieto problémy.

Počas vyučovacej hodiny, na ktorej boli použité navrhnuté aktivity sa nevyskytli značné problémy pri práci s video sekvenciami. Za mierny nedostatok sa ukázal spôsob snímania hodnôt na digitálnych teplomeroch. Niektorí študenti nevideli na teplomeroch desatinnú čiarky a spočiatku odčítavali hodnoty teploty napríklad 280 ˚C. Sami si však uvedomili, že tieto hodnoty sú nereálne a nakoniec si všimli desatinnú čiarku na digitálnom teplomere. Študenti mali taktiež problémy pri tvorbe grafu z nameraných údajov, čo však nesúvisí s kvalitou navrhovaných materiálov a aktivít. Daný fakt len potvrdzuje nutnosť realizovania aktivít na tvorbu a interpretáciu grafov, ktorá zlepšuje grafickú gramotnosť študentov. Po usmernení pri postupe tvorby grafu študenti dokázali jednotlivé grafy spracovať a interpretovať.“

Doc. Velmovská uvádza reakciu učiteľov zo školení: „Počas kalendárneho roka 2017 realizovalo vydavateľstvo EXPOL PEDAGOGIKA s podporou Odborov školstva bezplatné semináre pre pedagógov prírodovedných predmetov – fyzika, chémia, biológia – s názvom EXPOLEDU. Témy seminára boli tri a každý z nich sa uskutočnil v troch mestách – Košice, Banská Bystrica a Bratislava. Na každom seminári sa zúčastnilo 25-30 učiteľov. Mala som tú možnosť tieto semináre lektorovať, a popritom som veľa diskutovala s učiteľmi o problémoch spojených s experimentovaním na hodinách fyziky. Ako jeden z príkladov uviedli experimenty na premenu skupenstiev uvedených v učebnici fyziky pre 7. ročník, ktoré sú podľa nich zdĺhavé a na hranici bezpečnosti a učitelia sa zhodli, že tieto experimenty vo vyučovaní síce spomenú, ale nerealizujú ich.

Téma druhej série seminárov bola Teplo a teplota a cieľom bolo predstaviť koncepciu uplatnenú v učebniciach fyziky pri zavádzaní týchto pojmov. Ako alternatívu k realizácii experimentu na hodine som zvolila využitie videosekvencií, ktoré spracovala vo svojej bakalárskej práci Simona. Učitelia pracovali s aktivitou Destilácia, pričom využívali pripravený pracovný list pre žiaka. Aktivita učiteľov zaujala o čom svedčí aj fakt, že po skončení seminára sa prostredníctvom mailu

dožadovali stránky, na ktorej sú materiály k aktivitám – videosekvencie, pracovný list pre žiaka a pracovný list pre učiteľa – zverejnené. Ocenili, že materiály sú pripravené „na kľúč“ – korešpondujú s učebnicou a možno ich priamo, bez úprav použiť na vyučovaní. Vyzdvihli skutočnosť, že realizácia takejto aktivity netrvá dlho (na rozdiel od reálneho experimentu) a rozvíja grafickú gramotnosť žiaka, od ktorého sa vyžaduje tvorba grafu a jeho interpretácia. Každý žiak si môže vytvoriť svoj graf aj doma a na hodine je možné viac času venovať interpretácii. Doplňujúce otázky vedú žiaka k novým zisteniam. Pracovný list pre učiteľa ocenili najmä učitelia, ktorý nemajú aprobáciu spojenú s fyzikou, ale napriek tomu fyziku na základnej škole učia.

Z reakcií učiteľov bolo zrejmé, že pripravené materiály majú pragmatický charakter a budú využívané na vyučovaní fyziky.“

7 Záver

Našim cieľom bolo vytvoriť materiál slúžiaci pre zjednodušenie práce učiteľa vo vyučovaní fyziky. Preto sme vytvorili súbor videosekvencií fyzikálnych pokusov spolu s pracovnými listami a aktivitou v programe Coach 6 na tvorbu grafov. Všetky materiály sú učiteľom k dispozícii na webovej stránke http://e-fyzika.ddp.fmph.uniba.sk/. Opísali sme postup, ktorý sme zvolili pri tvorbe videosekvencií pre prípad, že by si učiteľ chcel sám vytvoriť takúto videosekvenciu. Materiály sme vyskúšali vo vyučovaní fyziky a vypracovali prípradovú štúdiu. Veríme, že učiteľom daný material pomôže pri ich práci.

Poďakovanie

Rada by som na prvom mieste poďakovala doc. PaedDr Kláre Velmovskej, PhD. za odbornú pomoc, korekcie, poskytnuté rady a za vedenie pri vypracovávaní tohto príspevku. Veľká vďaka tiež patrí Mgr. Jakubovi Čevajkovi za jeho ochotu, poskytnutý priestor na jeho vyučovaní a za jeho rady.

Literatúra

[Duľa, 2009] Duľa, , I. (2009)
Možnosti využitia programu Tracker na hodinách fyziky. [online] In SFS - Tvorivý učiteľ fyziky II, Smolenice 2009. [cit 18.04.2017]. Dostupné na: https://goo.gl/mOi25r

[Horváth, 2011] Horváth, , P. (2011)
Videomerania brzdnej dráhy auta. In Šoltésové dni 2010. Bratislava: Knižničné a edičné centrum FMFI UK, 2011. 150 s. ISBN 978-80-89186-85-3

[Kiráľová, 2014] Kiráľová, , K. (2014)
Využitie programu Tracker v téme rovnomerný a nerovnomerný pohyb telesa. [online]. [cit.17.04.2017] Bratislava: MPC, 2014. 15 s. ISBN 978-80-565-0825-1. Dostupné na: https://goo.gl/lfpbww

[Lapitková et al., 2010] Lapitková, V. et al. (2010a)
Fyzika pre 7. ročník základnej školy a 2. ročník gymnázia s osemročným štúdiom. Bratislava: Didaktis, s.r.o, 2010, 112 s. ISBN 978-80-89160-79-2.

[Lapitková et al, 2015] Lapitková, V. a kol. (2015)
Spôsobilosti vedeckej práce v prírodovednom vzdelávaní. Bratislava: Knižničné a edičné centrum FMFI UK, 2015. 125 s. ISBN 978-80-8147-048-6

[Reichl, 2008] Reichl, J. (2008)
Fyzika ve filmu. In Dílny Heuréky 2008 [online]. [cit.06.04.2017] Praha: Prometheus, 2009, 153 s. ISBN 978-80-7196-397-4. Dostupné na: https://goo.gl/W1Hfhq

[Urbašíková, 2013] Urbašíková, M. (2013) Využitie filmových scén vo vyučovaní fyziky: Diplomová práca. Bratislava: Univerzita Komenského, 2013. 82s.

[Vajdiarová, 2017] Vajdiarová, S. (2017) Videosekvencie fyzikálnych pokusov vo vyučovaní fyziky: Bakalárska práca. Bratislava: Univerzita Komenského, 2017. 51 s.

[Velmovská, 2011] Velmovská, K. (2011) Fyzikálne filmové omyly. In Šoltésové dni 2010. Bratislava: Knižničné a edičné centrum FMFI UK, 2011. 150 s. ISBN 978-80-89186-85-3

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 269–278
ISBN 978-8081470882, © 2018 Patrícia Bartschová

Rozširujúce úlohy z kockových telies

Patrícia Bartschová
Školiteľ: Vladimíra Laššáková

KAGDM - oddelenie didaktiky matematiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

Obsahom práce je sada pracovných listov venujúcich sa kockovým telesám. Ďalej sa v práci okrajovo venujeme stereometrii a jej vyučovaniu na základných školách. Práca pozostáva z troch častí.

V prvej časti práce sa venujeme pojmu stereometria, kockové telesá a vyučovaniu stereometrie na hodinách matematiky.

Druhá časť práce sa zaoberá rozborom jednotlivých celkov pracovných listov, ktoré sme sa snažili navrhnúť netradične a aby boli riešiteľné len pomocou zručností, ktoré žiaci nadobudli pri výučbe kockových telies a kombinatoriky.

Posledná časť sa zameriava na vyhodnotenie testovania pracovných listov. Testovanie prebehlo na dvoch školách na vzorke 115 žiakov.

Cieľom práce bol návrh sady pracovných listov a ich otestovanie.

Pracovné listy sme sa snažili navrhnúť tak, aby u žiakov vzbudzovali záujem a dostatočne ich vnútorne motivovali, aby bola pomôckou pri rozvoji priestorovej predstavivosti žiaka.

Kľúčové slová: Stereometria, Kocka, Kockové telese, Kocková stavba

Úvod

V tomto príspevku sa venujeme problematike stereometrie, prevažne stavbám z kociek.

V rámci praktickej časti práce sme navrhli sadu pracovných listov, ktorú si ďalej v príspevku viac rozoberieme.

V prvej časti príspevku si priblížime pojmy stereometria a kockové stavby. K stereometrii si povieme základnú definíciu a delenie stereometrie, pri stavbách z kociek si uvedieme definíciu kockovej stavby a telesa. Rovnako sa pozrieme na to ako vyzerá vyučovanie stereometrie na základných a stredných školách, pričom sa viac zameriavame na situáciu na základných školách.

V druhej časti sa zaoberáme analýzou pracovných listov, ktoré sme navrhli tak, aby okrem bežných úloh zo stereometrie a kockových stavieb obsahovali aj nové úlohy, s ktorými sa žiaci nestretnú na hodinách stereometrie.

V tretej časti seminárnej práce si ukážeme výsledky testovania niektorých úloh, ktoré sme testovali v štyroch triedach. Testovanie prebehlo na 115 žiakoch 7. ročníka.

Sada pracovných listov je navrhnutá tak, aby šikovnejší žiaci neboli limitovaní slabšími a mohli napredovať, ale aby si aj slabší žiaci s horšou priestorovou predstavivosťou našli „svoje zadanie“.

1 Stereometria, telesá z kociek

V tejto časti si povieme čo predstavujú pojmy stereometria a kockové telesá pri vyučovaní na základných školách. V rámci vyučovania matematiky je stereometria zahrnutá do časti „meranie a geometria“.

Priblížime si pojmy kocková stavba a kockové teleso. Rozdiel medzi týmito pojmami je uvedený v nami navrhovanej definícii.

V tretej časti tohto odseku sa pozrieme na zobrazovanie trojrozmerného priestoru do dvojrozmerného na základných školách a na to, aké zobrazovacie metódy by mali žiaci ovládať.

V poslednej časti sa pozrieme na vyučovanie stereometrie a kockových telies na základnej škôl.

Jednou z kompetencií, ktoré má matematika rozvíjať, je zlepšenie priestorovej predstavivosti. Nápomocné pri zlepšovaní priestorovej predstavivosti môžu byť zadania, ktoré obsahujú obrázky s priemetmi trojrozmerného priestoru.

1.1 Stereometria

Stereometria je oblasť matematiky, ktorá sa zaoberá geometriou (konštrukčnou, analytickou) trojrozmerného euklidovského priestoru.

Pod **konštrukčnú geometriu** patria rezy telies ich konštrukcia, postup konštrukcie, tvorba siete, zobrazovanie telies, rozoznávanie telies, vzájomná poloha dvoch priamok, priamky a roviny, konštrukčné zostrojenie vzdialenosti bodov od priamky, roviny alebo uhol dvoch priamok, rovín alebo priamky a roviny.

Pod **analytickú geometriu** zase patria výpočty objemu, povrchu, vzdialenosti bodu od roviny, priamky, uhol dvoch priamok alebo rovín, vzájomná poloha dvoch priamok, priamky a roviny.

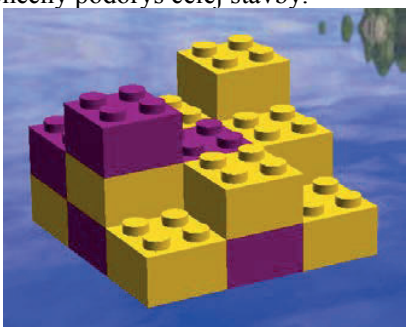
Naše zadania s kockovými telesami by sme zaradili pod konštrukčnú geometriu k zobrazovaniu a rozoznávaniu telies, nakoľko sa v zadaniach stretávame s priemetmi kockových telies.

1.2 Telesá z kociek

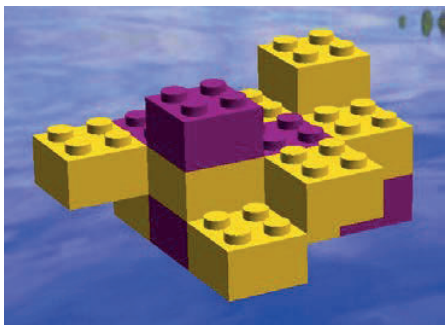
V zadaniach so stavbami z kociek sa môžeme stretnúť s dvoma pojmami. Sú to kocková stavba a kockové teleso. Bližšie si vysvetlime rozdiel medzi týmito dvoma útvarmi. Navrhujeme nasledujúcu pracovnú definíciu:

Kocková stavba (obr.1**)** je rozloženie kociek v štvorčekovej sieti tak, že prvá vrstva kociek vytvorí pôdorys vrstvy a každá ďalšia vrstva má buď rovnako alebo menej kociek ako vrstva o úroveň nižšie. Kocky sú vždy uložené v pôdoryse z predchádzajúcej úrovne, nikdy nie mimo a dotýkajú sa ďalšej kocky aspoň 1 bočnou stenou. Pôdorys prvej (najnižšej) vrstvy určuje konečný pôdorys celej stavby.

Kockové teleso (obr.2) je rozloženie kociek v štvorčekovej sieti tak, že prvá vrstva kociek vytvorí pôdorys vrstvy a každá ďalšia vrstva má buď rovnako, menej alebo viac kociek ako vrstva o úroveň nižšie. Kocky sú vždy uložené v pôdoryse z predchádzajúcej úrovne, alebo vedľa neho tak, že sa dotýkajú aspoň jednej kocky aspoň 1 bočnou stenou. Pôdorys prvej (najnižšej) vrstvy nemusí určiť konečný pôdorys celej stavby.



Obr. 1: Kocková stavba.



Obr. 2: Kockové teleso.

Z predchádzajúcej definície teda môžeme povedať, že kocková stavba je kockovým telesom, ale kockové teleso nemusí byť kockovou stavbou.

1.3 Zobrazovanie 3D priestoru na ZŠ

So zobrazovaním trojrozmerného priestoru do dvojrozmerného sa žiaci stretávajú už na prvom stupni, keď k zadaniam majú obrázky s priemetmi trojrozmerných objektov. Na druhom stupni postupne zobrazujú základné trojrozmerné geometrické útvary, kockové stavby. Kedy by žiaci mali zvládať zaznamenať priemet objektu je určené štátnym vzdelávacím programu, ktorý je zostavený podľa aktuálnych potrieb a kognitívnych schopností a zručností žiakov.

Podľa inovovaného štátneho vzdelávacieho programu je v **obsahovom štandarde** pre siedmi ročník v rámci matematiky [iŠVP - matematika, 2014, str. 21]:

- priestor, vzor, obraz, náčrt,
- voľné rovnobežné premietanie, perspektíva,
- teleso, jednoduché a zložené teleso.
- nárys, bokorys, pôdorys.

A **žiak na konci 7. ročníka základnej školy vie / dokáže**:

- načrtnúť a narysovať obraz kvádra a kocky vo voľnom rovnobežnom premietaní,
- zhotoviť náčrt telies skladajúcich sa z kvádrov a kociek,
- nakresliť nárys, bokorys a pôdorys telies zostavených z kvádrov a kociek.

Zobrazovanie priestoru sa vyskytuje aj v **obsahovom štandarde** pre výtvarnú výchovu, taktiež pre siedmi ročník [iŠVP – výtvarná výchova, 2014, str. 18]:

- zobrazovanie priestoru,
- lineárna perspektíva,
- zobrazenie architektonického tvaru v krajine.

A **žiak na konci 7. ročníka základnej školy vie / dokáže**:

- zobraziť jednoduché priestorové vzťahy v perspektíve.

V našich pracovných listoch požadujeme od žiakov, zakresľovanie kockových telies a stavieb v axonometrii, konkrétne v izometrii. Teda žiaci budú mať možnosť sa stretnúť aj s iným zakresľovaním telies, s akým sa doposiaľ stretli na hodinách matematiky alebo výtvarnej výchovy. Pre zjednodušenie zakresľovania telies budú mať žiaci pripravenú izometrickú mriežku, ktorá by mala zjednodušiť a sprehľadniť nákresy žiakov.

Obrázky v našich pracovných listoch sú zobrazované v axonometrii, konkrétne izometrii, ktorá je špeciálnym prípadom rovnobežného premietania. Voľné rovnobežné premietanie, s ktorým sa stretávajú žiaci na hodinách matematiky, je špeciálnym prípadom šikmého premietania. A preto sa objekty v ňom zakresľujú tak, že útvary ležiace v rovinách rovnobežných s premietacou rovinou sú podobné a útvary kolmé na túto rovinu sa zakresľujú pod uhlom 45°s ½ skrátením.

1.4 Vyučovanie stereometrie a kockových telies

Stereometria sa vyučuje počas celej základnej školy. Začína sa rozoznávaním základných telies na prvom stupni v prvom ročníku, prechádza cez zakresľovanie pôdorysu, nárysu a bokorysu, tvorby siete, výpočet objemu a povrchu, postupne sa na stredných školách pridáva, zobrazovanie priestoru a stereometriu ukončujú rezy telies.

Nakoľko nami navrhnuté pracovné listy obsahujú zadania prevažne na prácu s kockovými telesami, ktoré sa vyučujú na základných školách, tak sa pozrieme, že v akých učebniciach pre základné školy sa kockové telesa nachádzajú.

V učebniciach sa kockové telesá vyskytujú v prvej časti Matematiky pre 7. ročník ZŠ a 2. ročník gymnázií s osemročným štúdiom [Žabka, Černek, 2010, str. 63] v kapitole Kocky a kvádre I. V rámci tejto kapitoly si žiaci zopakujú jednoduché kockové stavby, ktoré kódovali na 1. stupni. Ďalej sa naučia znázorňovať kocku, kváder a iné telesá vo voľnom rovnobežnom premietaní. Koniec kapitoly je venovaný tvorbe pôdorysov, nárysov a bokorysov kockových telies.

Úlohy na kockové telesá sú gradované od ľahších po ťažšie. Učebnica je príjemne spracovaná a okrem učiva, ktoré si majú žiaci osvojiť, obsahuje zaujímavosti navyše, ktoré sa problematiky týkajú. Okrem týchto učebníc sme kockové telesa nenašli v žiadnej inej učebnici, ktorá by spĺňala požiadavky na aktuálne obsahové štandardy. Zadania s kockovými telesami sa ale vyskytujú ešte v Novom pomocníkovi z matematiky pre 7. ročník 1.časť [Kohanová, Švecová, 2016, str. 7] a učebnicu dopĺňa o zaujímavé zadania z voľného rovnobežného premietania a z kockových telies.

1.5 Programy na tvorbu kockových telies

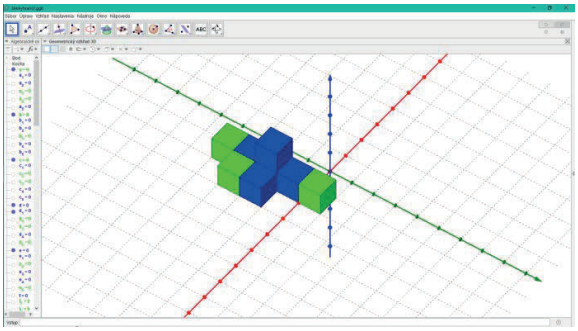
Pri tvorbe našej práce sme použili dva programy, **GeoGebru** (obr. 3) a **Lego Digital Designer** (obr. 4). Oba programy majú svoje výhody aj nevýhody.

GeoGebra- výhody:
- prehľadnosť
- stačí 1 farba

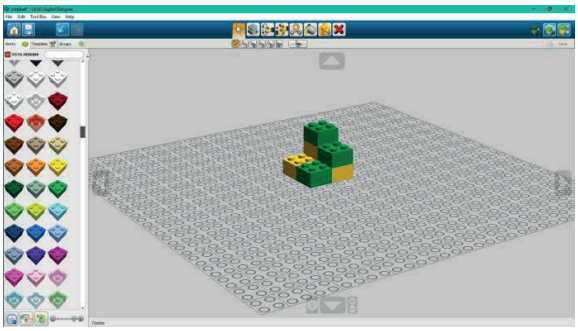
nevýhody:
- nezvláda viac kociek
- ťažšie ukladanie kociek

Lego Digital Designer- výhody:
- zvláda viac kociek
- ľahké ukladanie kociek

nevýhody:
- neprehľadnosť
- potreba 2 farieb



Obr. 3: Kockové teleso v GeoGebre.



Obr. 4: Kockové teleso v Lego Digital Designer.

2 Rozširujúce úlohy z kockových stavieb

V tejto kapitole si priblížime pracovné listy, ktoré sme navrhli. Sada obsahuje 21 pracovných listov, ktoré sú rozdelené do troch typov.

V pracovných listoch požadujeme od žiakov zakresľovanie do izometrickej mriežky. Ako sme si uviedli v predchádzajúcej časti, tak na základných školách sa žiaci učia zobrazovať priestor pomocou voľného rovnobežného premietania a pomocou lineárnej perspektívy.

Izometrickú mriežku sme sa rozhodli použiť z dvoch dôvodov. Prvý bol, aby si žiaci skúsili zakresľovanie geometrických útvarov aj bez nutnosti použitia rysovacích pomôcok a tým pádom sa aj zjednodušilo zakresľovanie a druhým dôvodom bolo, aby výsledok bol prehľadnejší a žiakom sa jednoduchšie riešili ďalšie zadania, ktoré nadväzujú na zadania spojené so zakresľovaním útvarov do mriežky.

Zameranie pracovných listov je nasledovné. Pracovné listy zamerané na:
- Zobrazovanie geometrických útvarov pomocou izometrickej mriežky
  (0. Pracovný list)
- Výplň kocky (kvádra) kockovým telesom
  (1. – 10. Pracovný list)
- Dopĺňanie kockovej stavby na kocku (kváder) požadovaného rozmeru
  (11. – 20. Pracovný list)

Pred riešením pracovných listov 1 – 20 je potrebné so žiakmi urobiť aspoň zopár zakreslení útvarov do izometrickej mriežky, alebo s nimi prejsť 0. Pracovný list.

2.1 Zobrazovanie geometrických útvarov pomocou izometrickej mriežky

Táto časť pracovných listov obsahuje iba 1 pracovný list. 0. Pracovný list je zameraný na naučenie sa zakreslenia dvoj a trojrozmerných útvarov do izometrickej mriežky.

V zadaniach, ktoré si uvedieme nižšie si má žiak osvojiť zakresľovanie do izometrickej mriežky. Úlohou žiakov je zakresľovanie jednoduchých útvarov alebo komplexu útvarov.

Pojmy:

- Zobrazenie, útvar, teleso

Odhad časového trvania:

- 15/10 minút

Typ práce

- Práca jednotlivca/ dvojice

Kognitívne schopnosti: žiak vie:

- zobraziť aspoň dva útvary na základe opisu ich vlastností učiteľom.

Ciele:

- zobrazenie útvarov do izometrickej mriežky.

Charakteristika listu:

- Pracovný list je zameraný na naučenie sa zakreslenia

dvoj - a troj - rozmerných útvarov do izometrickej mriežky

Didaktický postup pri práci s pracovným listom:

- Učiteľ by mal žiakom uviesť rozdiel medzi voľným

rovnobežným (ďalej len VRZ) a izometrickým zobrazovaním (ďalej len IZ), t.j. že pri zakresľovaní prednej steny napríklad kocky je vo VRZ štvorec bez zmenenej dĺžky strany, pri IZ je prednou stenou kocky kosoštvorec, ktorého strany sú zakreslené v mriežke. Ďalšou zmenou je, že pri VRZ sa bočná stena kocky zakresľuje pod uhlom 45° a dĺžka bočnej strany sa zmenší na ½ pôvodnej dĺžke strany a pri IZ sa bočná stena zakresľuje opäť ako kosoštvorec a uhol medzi prednou a bočnou stenou je v tomto zobrazení rovný 120°.

Učiteľ by mohol po úvodných informáciách o VRZ a IZ viesť so žiakmi diskusiu o spoločných a rozdielnych znakoch týchto dvoch zobrazení. Teda či obidve zobrazenia zachovávajú rovnobežnosť, dĺžku, uhly a ďalšie vlastnosti telies.

List sa skladá z dvoch zadaní. Prvé znie (Obr. 5): „*Do izometrickej mriežky zakresli 5 rôznych (2 útvary sú rovnaké ak dĺžky prislúchajúcich strán sú zhodné):*

- štvorcov
- *obdĺžnikov*
- *pravouhlých trojuholníkov*
- *kociek*
- *kvádrov*
- *ihlanov*“

Pod zadaním sa nachádza izometrická mriežka, do ktorej majú žiaci zakresliť požadované útvary. Odporúčame, aby učiteľ spoločne so žiakmi zakreslil aspoň jeden z útvarov z bodov a) – f) zo zadania, aby žiaci videli, ako zakresľovanie funguje. V prípade, že žiaci rozumejú čo sa od nich v zadaní žiada a sú pripravení zakresliť do mriežky svoje riešenia. V tomto prípade nie je nutné spoločne zakresľovať ďalšie útvary, ale každý žiak sám. Za zadaním majú žiaci pomôcku, že ak je to možné, tak má žiak dodržiavať predkreslené čiary mriežky.



- **Obr. 5: 0. Pracovný list (ukážka).**



- **Obr. 6: 0. Pracovný list (ukážka).**

Druhé zadanie pracovného listu znie (Obr. 6): „*Do nasledujúcej siete zakresli časť mesta s budovami, ulicami, prípadne parkom so stromami alebo s fontánou. Obr. vyfarbi a do spodnej časti izometrickej mriežky zakresli svoje meno.*“

Toto zadanie je zamerané na priestorovú predstavivosť žiakov, teda či je žiak schopný zakresľovať objekty v priestore do mriežky, či zvláda zakresľovať prekrývajúce sa objekty, či objekty, ktoré sa majú nachádzať v zadnej časti neprekrývajú objekty, ktoré sú pred nimi a pod.

2.2 Výplň kocky (kvádra) kockovým telesom

Druhá časť pracovných listov obsahuje 10 pracovných listov a to 1. – 10. Pracovný list. Tieto pracovné listy sú zamerané na vypĺňanie kocky alebo kvádra kockovým telesom. Pracovné listy obsahujú 5 zadaní, ktoré sú v každom pracovnom liste rovnaké.

Pojmy:

- zobrazenie, teleso, kockové teleso, kocka

Odhad časového trvania:

- 40/ 30/ 20 minút

Typ práce

- Práca jednotlivca/ dvojice/ trojice

Kognitívne schopnosti: žiak vie:

- zobraziť aspoň dva útvary na základe opisu ich vlastností učiteľom,
- spájať kockové telesa.

Ciele:

- zobrazenie útvarov do izometrickej mriežky, vyplnenie kocky kockovým telesom.

Charakteristika listu:

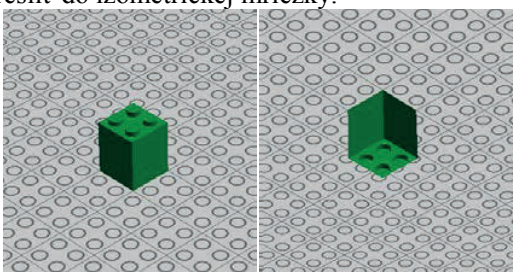
- Pracovné listy sú zamerané na vypĺňanie kocky alebo

kvádra kockovým telesom.

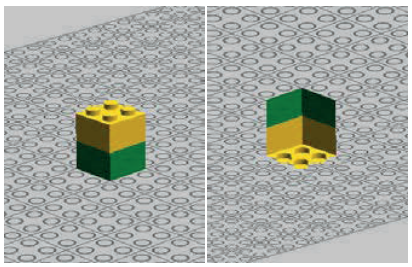
Didaktický postup pri práci s pracovným listom:

- Pred zadaniami je úlohou žiakov nasledovné:

„*Do izometrickej mriežky zakresli všetky rôzne polohy kockového telesa, ktoré je na obrázku. V nasledujúcich zadaniach pracuj s kockovým telesom, ktoré je zobrazené na obrázku a odpovede na zadania zapíš do tabuľky na druhej strane.*“ (Obr. 9., 10.) Od žiakov očakávame, že sú schopní mentálne pracovať s geometrickými útvarmi, a teda budú schopní kockové teleso otáčať a následne zakresliť do izometrickej mriežky.



Obr. 7: Jednofarebné teleso.



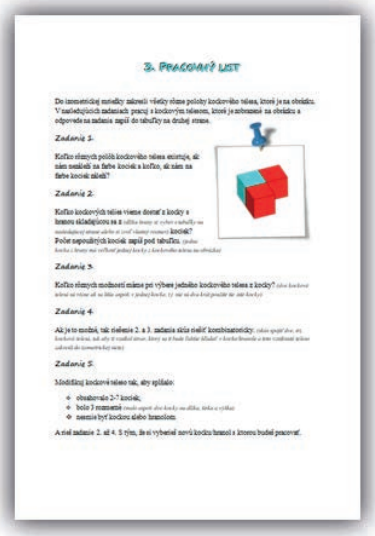
Obr. 8: Viacfarebné teleso.

Po ukončení kreslenia žiakov čakajú nasledujúce zadania. Prvé zadanie znie: *„Koľko rôznych polôh kockového telesa existuje, ak nám nezáleží na farbe kociek a koľko, ak nám na farbe kociek záleží?“* Pri riešení očakávame, že si žiaci uvedomia, že rôznym otáčaním dostávame rôzne polohy, ak máme jednofarebné kockové teleso, tak sa nám počet možností môže znížiť a pri viacerých farbách sa počet možností pri rôznych otočeniach môže líšiť od možností pri jednofarebnom telese. Na ukážkach vidíme, že pri otočení jednofarebného telesa (Obr. 7) okolo vodorovnej osi o 180° máme na sebe dve rovnaké farby, kým pri dvojfarebnom telese (Obr. 8) pri rovnakom otočení sa nám mení poradie farieb. Takéto telesá sa vyskytujú v pracovnom liste 1., 4. a 9.

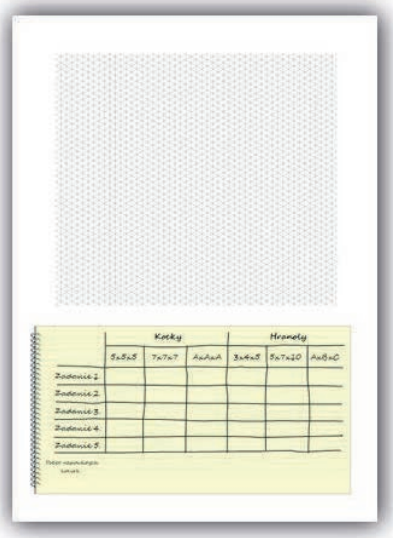
Druhé zadanie pracovných listov je: „*Koľko kockových telies vieme dostať z kocky s hranou skladajúcou sa z (dĺžku hrany si vyber s tabuľky na nasledujúcej strane alebo si zvoľ vlastný rozmer)*

kociek? Počet nepoužitých kociek zapíš pod tabuľku. (jedna kocka z hrany má veľkosť jednej kocky z kockového telesa na obrázku)“. Žiaci majú z jednej kocky odrezávať kockové teleso, ktoré majú na obrázku. Predpokladáme, že ak žiak použije kocky z veľkej kocky na jedno kockové teleso, tak kocky, ktoré použil už sa nezopakujú pri inom kockovom telese.

Ďalšie zadanie pracovných listov vyzerá nasledovne: „*Koľko rôznych možností máme pri výbere jedného kockového telesa z kocky? (dve kockové telesá sú rôzne ak sa líšia aspoň v jednej kocke, t.j. nie sú dva krát použité tie isté kocky)*“ . Toto zadanie je veľmi podobné druhému zadaniu, ale pri výbere kockové teleso neodoberáme, takže môžeme použiť o jednu kocku menej ako pri voľbe kociek na predchádzajúce teleso.



Obr. 9: 3. Pracovný list (ukážka).



Obr. 10: 3. Pracovný list (ukážka).

V druhom a treťom zadaní okrem zamerania zadania na stereometriu sa objavuje aj zameranie zadania na kombinatoriku, v ktorom žiakov nabádame na prácu s termínom kocka sa v kockovom telese smie a nesmie opätovne použiť.

Štvrté zadanie je: „*Ak je to možné, tak riešenie 2. a 3. zadania skús riešiť kombinatoricky. (skús spojiť dve, tri,.. kockové telesá, tak aby ti vznikol útvar, ktorý sa ti bude ľahšie hľadať v kocke/hranole a toto vzniknuté teleso zakresli do izometrickej siete)*“ . Z tohto zadania je zrejme, ako má riešenie zadania prebiehať. Žiaci si vytvoria kocku resp. kváder, ktorý budú len posúvať alebo otáčať, nakoľko sa tieto útvary hľadajú jednoduchšie ako väčšina kockových telies, ktoré majú žiaci k dispozícii. Z kockového telesa v 10. Pracovnom liste nevieme zložením viacerých rovnakých telies poskladať kocku ani kváder, ale v zvyšných deviatich listoch, ak nemáme daný kváder alebo kocku, tak zložením viacerých útvarov vieme dostať kocku resp. kváder.

Posledné, teda piate zadanie v našich pracovných listoch znie: *„Modifikuj kockové teleso tak, aby spĺňalo:*

- *obsahovalo 2-7 kociek,*
- *bolo 3 rozmerné (malo aspoň dve kocky na dĺžku, šírku a výšku)*
- *nesmie byť kockou alebo hranolom*

A rieš zadanie 2. až 4. S tým, že si vyberieš novú kocku/hranol s ktorou budeš pracovať.“ . Pre toto zadanie platia rovnaké postrehy a pripomienky ako pre zadania č.1. až 4.

2.3 Dopĺňanie kockovej stavby na kocku (kváder) požadovaného rozmeru

V tretej časti pracovných listov je opäť 10 pracovných listov, v ktorých majú žiaci pracovať s kockovou stavbou a dopĺňať ju na požadovaný útvar. Pracovné listy obsahujú päť zadaní, z ktorých je jedno bonusové.

Pojmy:

- zobrazenie, teleso, kockové teleso, kocka

Odhad časového trvania:

- 40/ 30/ 20 minút

Typ práce

- Práca jednotlivca/ dvojice/ trojice

Kognitívne schopnosti: žiak vie:

- zobraziť aspoň dva útvary na základe opisu ich vlastností učiteľom,
- spájať kockové telesa,
- dopĺňať kockovú stavbu,
- vypočítať objem kocky/kvádra.

Ciele:

- zobrazenie útvarov do izometrickej mriežky, doplnenie kockovej stavby, vyplnenie kockovej stavby kockovým telesom

Charakteristika listu:

- Pracovné listy sú zamerané na dopĺňanie kockovej

stavby na kocku alebo kváder..

Didaktický postup pri práci s pracovným listom:

- Pred zadaniami majú žiaci: „*Do izometrickej mriežky*

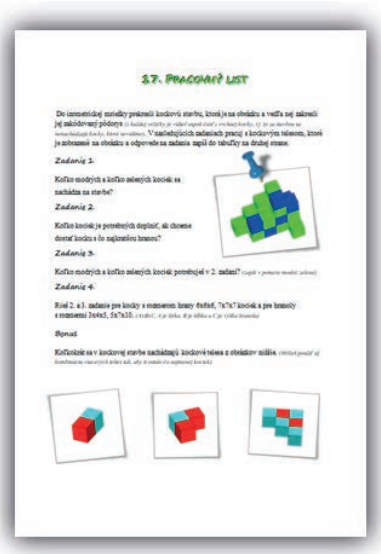
prekresli kockovú stavbu, ktorá je na obrázku a vedľa nej zakresli jej zakódovaný pôdorys (z každej vežičky je vidieť aspoň časť z vrchnej kocky, t.j. že za stavbou sa nenachádzajú kocky, ktoré nevidíme). Odpovede na nasledujúce zadania zapíš do tabuľky na druhej strane.“ Na tomto cvičení si môžeme otestovať či žiaci vedia určiť rozloženie telesa, koľko kociek sa nachádza v jednotlivých stĺpcoch.

Prvé zadania pracovných listov sú: *„Koľko modrých a koľko zelených kociek sa nachádza na stavbe?“* Už v predchádzajúcich 10 pracovných listoch si žiaci mali možnosť všimnúť, že kockové telesá, ktoré im boli predkladané boli po vrstvách stavané ako šachovnica a ďalšia vrstva mala len zmenené poradie farieb. Pri kockových telesách, ktoré sa vyskytujú v tejto desiatke listov sa princíp stavby kockovej stavby nezmenil, teda časť šachovnice nájdeme v každej úrovni.

Druhým zadaním je: „*Koľko kociek je potrebných doplniť, ak chceme dostať kocku s čo najkratšou hranou?*“ Žiaci majú pomocou priemetu alebo pôdorysu, ktorý zostrojili, zistiť akú dĺžku bude mať najdlhšia hrana kocky a zvyšné stĺpce doplniť na tento rozmer. Prípadne ak sa už učili vzťahy na výpočet objemu kocky, tak pomocou neho by sa mali dostať k rovnakému číslu ako v predchádzajúcej metóde.

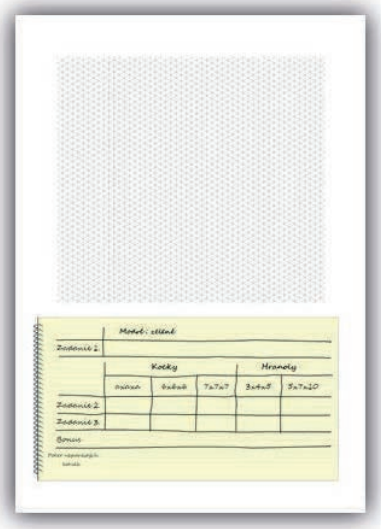
Tretie zadanie vyzerá: „*Koľko modrých a koľko zelených kociek potrebuješ v 2. zadaní?*“ Vzhľadom na to, že vrstvy stavieb sú šachovnicové, tak je potrebné, aby si žiak našiel svoj systém v zápise a riešení zadania. Žiak môže využiť výsledok z druhého zadania (prípadne zakódovaný pôdorys), alebo „dopĺňa“ stĺpčeky a zapisuje všetky kocky, ktoré doplní. Žiak zapisuje výsledok ako pomer modrých a zelených kociek, ktoré potrebuje.

Posledné zadanie je: *„Rieš 2. a 3. zadanie pre kocky s rozmerom hrany 6x6x6,7x7x7 a 10x10x10 kociek a pre hranoly s rozmermi 3x4x5, 5x7x10. (AxBxC, A je šírka, B je hĺbka a C je výška hranola)“*. Pre toto zadanie platia rovnaké pripomienky ako pre zadania 1. až 3., jediný rozdiel je, že sa mení dĺžka hrán kocky/kvádra. Tým pádom, ak žiak riešil zadania výpočtom, tak pri riešení väčšej kocky zohľadní, že stĺpik kociek na hrane sa vyskytuje v dvoch stenách, teda ju nezapočíta dva krát alebo od medzi výpočtu ho odráta a pod.



Obr. 11: 17. Pracovný list (ukážka).

Na záver je bonusové zadanie, ktoré znie: *„Koľkokrát sa v kockovej stavbe nachádzajú kockové telesa z obrázkov nižšie. (Môžeš použiť aj kombináciu viacerých telies tak, aby ti ostalo čo najmenej kociek)“*. Bonusové zadanie je nadstavbou pre pracovné listy 1. až 10., žiak ma „vydlaždičkovať “ kockovú stavbu kockovým telesom, ktoré má na obrázku, ktoré sa nachádza v dolnej časti pracovného listu. Počet riešení tu nie je obmedzený a každé zdôvodnené riešenie je považované za správne, za nesprávne riešenie sa považuje také „vydlaždičkovanie“, pri ktorom kockové telesá vyčnievajú zo stavby.



Obr. 12: 17. Pracovný list (ukážka).

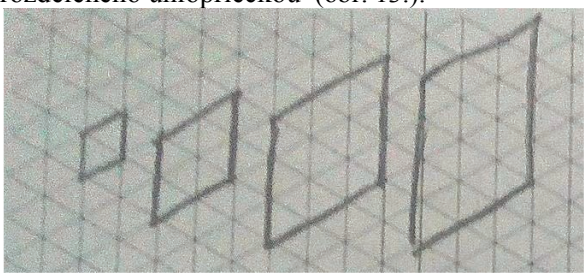
3 Testovanie

V tejto časti príspevku si priblížime výsledky z testovania našich pracovných listov. Testovanie prebehlo v dvoch základných školách v Poprade. Testovania sa zúčastnilo 115 žiakov, 56 žiakov z jednej školy a 59 z druhej školy.

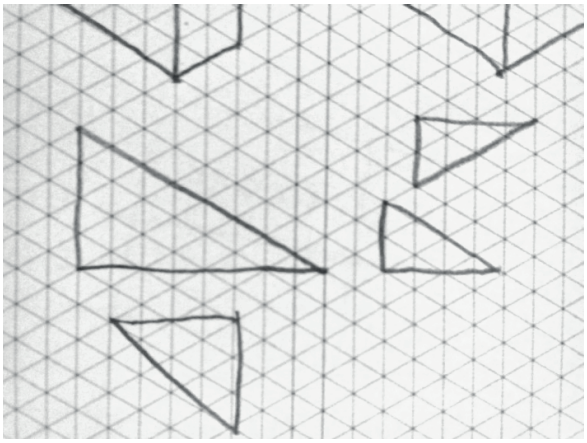
Testovali sme tri pracovné listy. Tak aby z každej časti (ktoré sme uviedli v časti 2) bol otestovaný aspoň jeden pracovný list. Testované boli pracovné listy číslo 0., 3. a 17.

Žiaci pracovali v trojiciach a čas na vypracovanie mali podľa pokynov, ktoré sú tiež uvedené v 2. časti tohto príspevku. Celkovo bolo 39 skupín, z ktorých boli štyri štvorice a zvyšné skupiny pozostávali z troch žiakov.

0. Pracovný list vypracovávali žiaci v skupinách, ale každý člen mal odovzdať svoje riešenie (Obrázok 12.). V prvom zadaní sa v dvadsiatich dvoch riešeniach vyskytla chyba pri zakresľovaní štvorca, kocky, pravouhlého trojuholníka. Kedy žiaci jednu stranu štvorca skrátili v pomere 2:1 a u tých istých žiakov sa vyskytla rovnaká chyba aj pri zakreslení kocky. Túto chybu pripisujeme prepočutiu úvodných pokynov a nepozornosti pri kreslení spoločného ilustračného obrázku. Týchto riešení bolo 17. Zvyšných päť riešení malo nesprávne zakreslený pravouhlý trojuholník, t.j. nebolo z obrázku zrejme, ktorý uhol je pravý, resp. zakreslili ľubovoľný trojuholník. Vzhľadom k tomu, že títo žiaci mali zakreslenie štvorca aj obdĺžnika správne, tak predpokladáme, že im v daný moment nenapadlo zakresliť pravouhlý trojuholník ako časť štvorca, obdĺžnika rozdeleného uhlopriečkou (obr. 13.).



Obr. 12: Žiacke riešenia (ukážka).



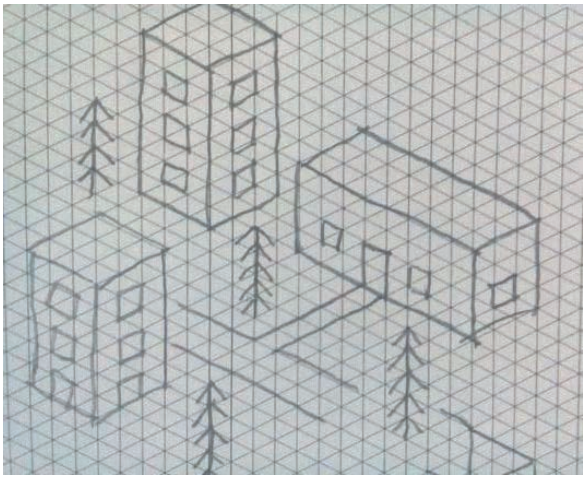
Obr. 13: Žiacke riešenia (ukážka).

V druhom zadaní 0. Pracovného lista sa vyskytli dva druhy riešenia. Jeden bol, že sa budovy na obrázku neprekrývali, maximálne sa dotýkali jednou hranou a druhé riešenie je, že sa budovy navzájom prekrývali, týchto riešení bolo len 7. Množstvo riešení s neprekrývajúcich sa objektov pripisujeme k nedostatočnej skúsenosti žiaka zakresľovať takúto scenériu.

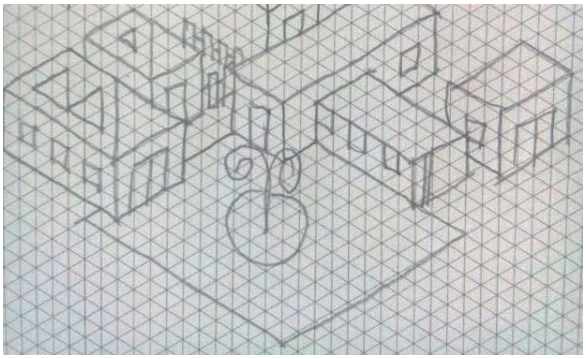
Okrem týchto nedostatkov sme pri prechádzaní riešení nenarazili na diametrálne odlišné riešenia.

Druhý pracovný list, ktorý sme testovali bol pracovný list číslo 3., tento pracovný list žiaci vypracovávali v trojiciach a štyroch štvoriciach. Riešenie sme žiadali len jedno od skupiny. Každá skupina dostala jedno zadanie a izometrickú mriežku pre každého žiaka (obr. 16.).

Pri riešeniach tohto pracovného listu sme vedeli vyhodnotiť len zadania, v ktorých úlohou žiakov bolo kresliť, nakoľko pri zadaniach, v ktorých mali zapísať výsledok v tvare čísla, bez žiackeho postupu nevieme vyhodnotiť, či je riešenie nesprávne alebo čiastočne správne, len žiak zabudol na nejaké ďalšie možnosti, alebo niekde niečo pripočítal navyše. Tento nedostatok by sa dal odstrániť označením rôznych polôh, ktoré mali zakresľovať a rozloženie v kocke by zapísali napríklad do štvorcov, ktoré by predstavovali úrovne, v ktorých sa kockové teleso nachádza.



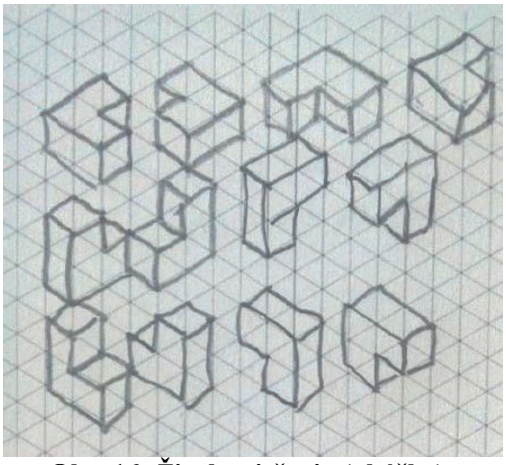
Obr. 14: Žiacke riešenia (ukážka).



Obr. 15: Žiacke riešenia (ukážka).

Vyriešený pracovný list odovzdalo 37 skupín. Teleso zakresliť vo všetkých polohách zvládlo 22 skupín a zvyšným 15 chýbala niektorá z polôh kockového telesa.

Ďalšie zadanie s kreslením bolo zadanie číslo 4 a zakresliť spojené kockové telesá do jedného zvládli všetky skupiny. Odpovede na ďalšie zadania boli buď rovnaké ako naše, alebo predstavovali zlomok z možností, ktoré nám vyšli. Usudzujeme, že žiaci mohli na niektoré možnosti zabudnúť alebo si ich nevšimli. Ani jedno z uvedených čísel nie je vyššie ako naše riešenie.



Obr. 16: Žiacke riešenia (ukážka).

Posledný testovaný pracovný list bol pracovný list číslo 17. Tento vypracovaný list odovzdalo 38 skupín.

Zakresliť kockovú stavbu a zakódovať ju, sa podarilo 32 skupinám úspešne, zvyšných 6 skupín malo malé nedostatky, že im niekde chýbala kocka a inde bola navyše. Vzhľadom k skutočnosti, že už v tejto časti mali chybu, tak aj zadania 1-4 obsahovali iný počet kociek ako mal byt, preto sme tieto zadania, pri týchto šiestich skupinách podrobnejšie nekontrolovali.

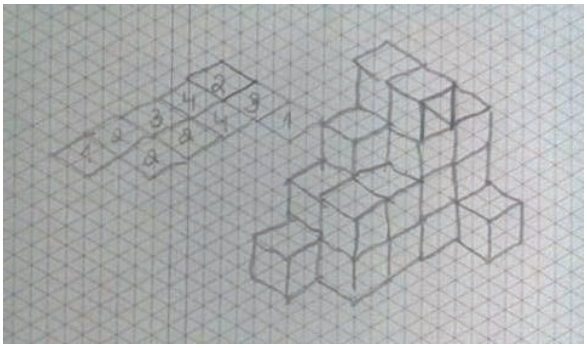
V zadaní 1 sa správne riešenie vyskytlo v 29 skupinách, v zvyšných troch skupinách nesedel počet modrých a zelených kociek, v jednej skupine započítali jednu modrú ako zelenú a v dvoch skupinách presne naopak.

Riešenia druhého zadania boli vo všetkých 32 skupinách správne.

V zadaní 3 sa správna odpoveď vyskytla v 27 skupinách a vo zvyšných 5 nastala rovnaká chyba ako v zadaní 1, pričom sa rovnaká chyba vyskytla v jednej skupine, ktorá mala aj prvé zadanie nesprávne.

Zadanie číslo štyri malo najviac nesprávnych odpovedí. Správna odpoveď bola v 22 skupinách a vo zvyšných boli zrejme niektoré kocky na hranách zarátané dva krát. V tomto zadaní sme nehodnotili riešenia pre hranol s hranou 3x4x5 kociek, nakoľko sme neurčili pevný bod na kockovej stavbe od ktorého sa mali odraziť.

A teda pre tento hranol malo zadanie viac možných riešení, ale rovnako ako pri 3. Pracovnom liste nevieme vyhodnotiť toto zadanie, keďže v zadaní sme nevyžadovali postup riešenia a žiacke riešenia sa v 15 skupinách od nášho riešenia líšia.



Obr. 17: Žiacke riešenia (ukážka).

Testovanie pracovných listov hodnotíme ako úspešné. Očakávali sme približne polovičný počet správnych riešením. Pracovné listy odporúčame riešiť so žiakmi v skupinách po dvoch až troch žiakoch. Predpokladáme, že riešenie jednotlivých žiakov by mohlo dosiahnuť vyššiu chybovosť ako riešenia skupín.

Naše pracovné listy by sa do budúcna dali určite vylepšiť minimálne odstránením nedostatkov v 1.-10. Pracovnom liste, kde neviem kontrolovať žiacke riešenia, čo sa nám ukázalo počas testovania.

Žiaci so zakresľovaním útvarov do izometrickej mriežky nemali väčšie problémy, ojedinele sa vyskytuje pravidlo skrátenia bočnej steny, na ktoré sú zvyknutí z voľného rovnobežného premietania.

Záver

V tomto príspevku sme sa venovali problematike stereometrie, prevažne stavbám z kociek. V rámci praktickej časti práce sme navrhli sadu pracovných listov, ktorú sme si v texte viac rozobrali.

V prvej časti práce sme si priblížili pojmy stereometria a kockové stavby. K stereometrii sme si povedali základnú definíciu a delenie stereometrie, pri stavbách z kociek s definíciou kockovej stavby a telesa. Rovnako sme sa pozreli na to, ako vyzerá vyučovanie stereometrie na základných a stredných školách, pričom sme sa viac zameriavali na situáciu na základných školách.

V druhej časti sme sa zaoberali analýzou pracovných listov, ktoré sme navrhli tak, aby okrem bežných úloh zo stereometrie a kockových stavieb obsahovali aj nové úlohy, s ktorými sa žiaci nestretnú na hodinách stereometrie.

V tretej časti seminárnej práce sme si ukázali výsledky testovania niektorých úloh, ktoré sme testovali v štyroch triedach. Testovanie prebehlo na 115 žiakoch 7. ročníka.

Sada pracovných listov je navrhnutá tak, aby šikovnejší žiaci neboli limitovaní slabšími a mohli napredovať, ale aby si aj slabší žiaci s horšou priestorovou predstavivosťou našli „svoje zadanie“.

Pracovné listy sa ukázali ako vhodné pre zaradenie na hodiny matematiky pre učiteľov alebo lektorov matematiky, ktorí používajú aj iné zadania aké sa nachádzajú v učebniciach.

Ďalej v práci by sa dalo pokračovať rozšírením sady pracovných listov, zlepšením existujúcich zadaní, alebo podrobnejším výskumom.

Poďakovanie

Chcem sa poďakovať mojej školiteľke za odborné rady, nápady a čas, ktorý venovala vedeniu mojej práce.

Literatúra

[iŠVP - matematika, 2014] online, 6.4.2018, goo.gl/B8VXXgcontent_copy.

[iŠVP – výtvarná výchova] online, 6.4.2018, goo.gl/YGxgsncontent_copy.

[Kohanová, Švecová, 2016] Kohanová, I., Švecová, S, Totkovičová, M.. (2016). Nový pomocník z matematiky 7, 80.

[Žabka, Černek, 2010] Žabka, J., Černek, P. (2010). Matematika pre 7. ročník ZŠ a 2. ročník gymnázií s osemročným štúdiom, 112.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 279
ISBN 978-8081470882, © 2018 Mária Čujdíková

Videohry ako spôsob prirodzeného učenia sa matematiky (rozšírený abstrakt)

Mária Čujdíková[1]
Školiteľ: Viera Uherčíková[1]

[1] Katedra algebry, geometrie a didaktiky matematiky
FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Matematik zo Stanfordskej Univerzity, Keith Devlin, vo svojej knihe Mathematics Education for a New Era: Video Games as a Medium for Learning (Devlin, 2011) označuje videohry ako ideálny nástroj na rozvoj matematického myslenia. Poukazuje na štúdie, ktoré dokazujú, že ak sú ľudia prirodzene vystavení matematickým problémom, sú pri ich riešení zväčša dosť kreatívni a úspešní. Mysli si, že simulovať takéto situácie v reálnom svete pre účely vzdelávania by bolo náročné, no videohry sú, obrazne povedané, práve takými simulátormi. Berú nás do sveta, kde môžeme matematiku zažiť.

Videohry môžeme rozdeliť do viacerých žánrov a ak matematiku berieme v jej širšom kontexte, tak ju môžeme nájsť v každom z nich. My sme sa zamerali na adventúry, stratégie, RPG, logické hry a akčné hry.

Adventúry predstavujú žáner v ktorom nájdeme množstvo logických puzzle. Nachádzame tu úlohy, kde treba hľadať súvislosti, tvoriť postupnosti, používať správne kombinácie, lúštiť šifry, hľadať význam záhadných symbolov,… Celá hra je postavená na hľadaní a spájaní súvislosti, takže pri riešení je treba nepretržite logicky uvažovať.

V **stratégiách** je potrebné postupovať takticky, premýšľať nad každým krokom, využívať logiku. Často je potrebné tvoriť zložité kombinácie postupných ťahov. Pri odhadovaní úspechu pre daný ťah, alebo vykonanú akciu sa platí zvážiť pravdepodobnosť úspechu. K úspechu môže pomôcť aj jednoduchá aritmetika či odhady.

RPG hry sú priamo presiaknuté matematikou. Postavy sú v nich, ak použijeme matematický slovník, charakterizované pomocou rôznych premenných - majú vlastnosti a schopnosti vyjadrené číselnými hodnotami. Hodnota týchto premenných je závislá od iných premenných skrytých vo vybavení (výzbroj a zbrane), predmetoch a v schopnostiach. Táto závislosť býva vyjadrená buď číselnou hodnotou alebo pomocou percent či pravdepodobnosti.
Pri nakupovaní vybavenia sa rieši problém, ako využiť herné peniaze čo najlepšie (problém plného batoha).
Pri boji sa oplatí premýšľať nad účinnými stratégiami, využívať kombinácie schopností, vlastností a predmetov tak, aby boli čo najúčinnejšie voči aktuálnym nepriateľom. Pre zistenie vlastnosti postavy je často potrebné vedieť sa zorientovať v tabuľkách a diagramoch.

Akčné hry sa často odohrávajú v prostredí náročnom na orientáciu, vďaka čomu sa rozvíja schopnosť vnímania 3D priestoru. Často treba prechádzať cez úzke priestory, čím sa zlepšuje odhad na veľkosť. V hre sa objavujú miesta alebo predmety, ktorým sa je potrebné vyhnúť - rozvíjanie odhadu vzdialenosti.

Logické hry sú postavené na logických výzvach, ktoré sa postupovaním v hre stále sťažujú. Často ide zároveň o experimentovanie s geometriou, priestorom alebo o odhaľovanie systémov.

Zdá sa, že potenciál, ktorý videohry majú na učenie sa matematiky je dosť veľký. To ako sa im v tom reálne darí závisí zrejme od prístupu konkrétneho hráča, čo by si zaslúžilo hlbšiu štúdiu.

Obšírnejšiu analýzu jednotlivých žánrov a matematiky v nich aj s príkladmi hier a ukážkami konkrétnych matematických situácii možno nájsť v priloženom príspevku.

Literatúra

[Devlin, K., 2011] Devlin, K. (2011). Mathematics Education for a New Era: Video Games as a Medium for Learning. Natick: A. K. Peters, Ltd. Natick, MA.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 280
ISBN 978-8081470882, © 2018 Barbora Matušková

Mobilná hra "Statistico" na hodinách matematiky strednej školy (rozšírený abstrakt)

Barbora Matušková[1]*
Školiteľ: Viera Uherčíková[1†]
[1] Katedra algebry, geometrie a didaktiky matematiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

V posledných rokoch sa čoraz častejšie do popredia dostávajú mobilné zariadenia ako napríklad tablet alebo smartphone. K takémuto trendu dochádza nie len v bežnom reálnom živote, ale aj na vyučovaní rôznych predmetov v školách. Vo svete, ale aj u nás sa takéto učenie pomocou tabletov a mobilných telefónov odborne nazýva mobile learning alebo skrátene aj m-learning. V preklade je to „učenie s podporou mobilných technológií“ (Neumajer, Rohlíková, Zounek, 2015, s. 21). Podľa definície ide o „akúkoľvek podobu či formu učenia, ktorá prebieha prostredníctvom mobilných zariadení alebo s ich pomocou“ (Neumajer, Rohlíková, Zounek, 2015, s. 21).

Hra Statistico je určená pre žiakov SŠ v rámci tematického celku *Štatistika*, resp. *Miery polohy štatistického súboru*. Výchovno-vzdelávacím cieľom tejto hry je pomôcť žiakovi porozumieť pojmom aritmetický priemer, modus a medián a ich reprezentácií v štatistickom súbore. Hra pozostáva z módu učenia a módu hrania. V móde učenia žiak vidí, ako sa dané hodnoty troch uvedených mier polohy menia v závislosti od jednotiek štatistického súboru. Mód hrania obsahuje 3 levely, každý so 4 úlohami.

Vybranú hru sme zaraďovali do vyučovania matematiky v 3. ročníku SOŠ a gymnázia (žiaci vo veku 17-18 rokov). K dispozícií sme mali dve školy z Bratislavského kraja, spolu štyri triedy. Tri z uvedených tried sú ako experimentálne, jedna kontrolná. Toto rozdelenie súviselo s počtom a typmi jednotlivých modelov vyučovacích hodín. Celkovo sme vytvorili tri modely, v ktorých bola mobilná hra Statistico zaradená do rôznych fáz vyučovacej hodiny (doma – domáca príprava na vyučovanie, motivačno-expozičná časť, opakovania časť). V kontrolnej triede nebola mobilná hra zaradená do vyučovania, ale úlohy podľa zadania v hre Statistico boli riešené na tabuľu alebo samostatne žiakmi do zošita.

Žiaci experimentálnych tried pracovali s tabletmi 15 minút. Počas tejto doby sme ich pozorovali a zaznamenávali ich pozitívne, ale aj negatívne reakcie, dosiahnutý level, vzniknuté problémy a pod. Následne boli po vyučovaní urobené s vybranými respondentami rozhovory. O jednu až dve vyučovacie hodiny neskôr predmetu matematika písali žiaci krátky vedomostný test pozostávajúci zo štyroch hlavných úloh a jednej bonusovej.

Na základe výsledkov vedomostného testu môžeme povedať, že v tejto vzorke žiakov dopadli vo vedomostnom teste podstatne lepšie žiaci experimentálnych skupín. Naučili sa, resp. zapamätali si výrazne viac ako žiaci kontrolnej skupiny.

Vychádzajúc z pozorovaní začleňovania hry Statistico do vyučovacieho procesu môžeme povedať, že žiaci pracovali počas hodiny samostatne, práca s tabletom ich bavila. Nezaznamenali sme žiaden problém s ovládaním tabletu alebo aplikácie. Ako pozitívum vidíme, že matematická hra dávala žiakom okamžitú spätnú väzbu o správnom/nesprávnom riešení úloh. V neposlednom rade by sme chceli spomenúť, že na hodinách s využitím tabletu a mobilnej aplikácie sa prepočítalo viac alebo rovnaké množstvo úloh ako v kontrolných triedach.

Literatúra

[Kohanová a kol., 2016] Kohanová, I. a kol. Apps in Math: Metodická príručka pre učiteľov. Bratislava: KEC FMFI UK Bratislava, 2016. 34s. ISBN978-80-8147-061-5.

[Matušková, 2018] Matušková, B. Efektivita aplikácií pre mobilné zariadenia vo vyučovaní matematiky (Písomná časť dizertačnej skúšky). KAGDM FMFI UK Bratislava, 2018. 69s.

[Matušková, 2017] Matušková, B. Začlenenie mobilnej aplikácie ″Apps in Math″ do vyučovania matematiky v témach kombinatorika a štatistika. IN Zborník z konferencie Dva dni s didaktikou matematiky. FMFI UK Bratislava, 2017. 61-66 s. ISBN978-80-8147-082-0.

[Neumajer a kol., 2015] Neumajer, O., Rohlíková, L., Zounek, J. Učíme se s tabletem. Využití mobilních technologií ve vzdělávání. Praha: Wolters Kluwer, a.s., 2015. 192s. ISBN978-80-7478-768-3.

* barbora.matuskova@fmph.uniba.sk
† viera.uhercikova@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 281–285
ISBN 978-8081470882, © 2018 Iveta Csicsolová

Robotické stavebnice v škole a po škole

Iveta Csicsolová[1]*
Školiteľ: Karolína Mayerová[1‡]

[1]Katedra základov a vyučovania informatiky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48

Abstrakt

V súčasnosti existujú rôzne robotické stavebnice, ktoré je možné využiť vo vyučovaní. Počas zimného semestra sme na predmete Robotické stavebnice vzdelávaní 2 vytvárali rôzne aktivity, ktoré som následne odskúšala na krúžku s deťmi rôzneho veku. Aktivity sme sa snažili vytvárať tak, aby sme pomocou nich naučili deti ovládať, stavať či programovať robotov a to zaujímavým spôsobom. V tomto článku prinášame analýzu tvorby aktivít pre deti a zároveň aj spätnú väzbu na vytvorené materiály po odskúšaní aktivít.
Kľúčové slová: robotické stavebnice, voľnočasové krúžky, aktivity

1 Úvod

Dnešné deti sa s robotickými stavebnicami stretávajú už od detstva. Existujú robotické stavebnice, ktoré sa objavujú už v materských školách, napríklad robotická včielka Bee-Bot. Pre učiteľky v materských školách boli vyvinuté rôzne metodické materiály, napríklad [Točená, 2015], [Buľko, 2015], [Pekárová a kol., 2013].

Dnešná moderná doba už umožňuje rodičom zakúpiť aj iné cenovo prístupné robotické stavebnice pre deti domov. Podľa Veselovskej [Veselovská, 2016] *„v súčasnej dobe sa edukačná robotika objavuje v mnohých krajinách v procese učenia i učenia sa všetkých vekových kategórií“*. Aj na slovenských školách sa deti postupne stretávajú s robotikou. Väčšinou ide o roboty zo sady Lego Education, ktoré sa dajú zakúpiť napríklad aj cez portál eduxe.sk , ktorý distribuuje učebné pomôcky.

Veselovská [Veselovská, 2016] ďalej uvádza, že *„v mnohých slovenských školách sa nachádzajú robotické stavebnice využívajúce sa hlavne vo voľnočasových krúžkoch, ktoré sú však mnohokrát zamerané na prípravu na robotické súťaže a často sa im venuje len niekoľko nadšencov“*.

Aktivity, ktoré sme vytvárali my, študenti na vysokoškolskom predmete Robotické stavebnice vo vzdelávaní (2), boli taktiež určené pre deti navštevujúce voľnočasový krúžok, avšak nešlo o prípravu na robotické súťaže, ale o krúžok zaoberajúci sa robotikou, digitálnymi technológiami a informatikou.

Práca s robotickými stavebnicami pomáha žiakom rozvíjať konštruktivistické myslenie [Kabátová and Pekárová, 2010]. Žiaci sa *„učia jasne a presne formulovať svoje myšlienky, spolupracovať v skupine a organizovať si vlastnú prácu“* [Veselovská, 2016].

Naším cieľom bolo vymyslieť také vzdelávacie aktivity vhodné pre deti na voľnočasovom krúžku, ktoré by deťom pomohli rozvinúť ich myslenie. Tieto aktivity sme sa snažili skonštruovať tak, aby deti zaujali a motivovali ku práci s robotikou, aby sme deťom predstavili rôznych robotov a naučili ich ovládať ich a taktiež, aby sme žiakov pripravili na programovanie, ktoré je v neskorších plánoch krúžku.

2 Tvorba aktivít v škole

Počas prvého polroku tohto akademického roka sme mali predmet Robotické stavebnice vo vzdelávaní (2). Vytvárali sme tu rôzne aktivity na rôzne robotické stavebnice.

Následne som tieto aktivity testovala v dvoch krúžkových skupinách v Centre voľného času (CVČ) v Šali. Deti navštevujúce krúžok boli rôzneho veku (8 až 14 rokov). Niektorí sa poznali dlhšie, niektorí nie a postupne sa ich počet zvyšoval. Ku zvyšovaniu počtu žiakov zrejme prispel aj fakt, že deťom navštevujúcim krúžok, sa páčili aj aktivity s robotmi a potom o tom povedali svojim spolužiakom.

2.1 Vymyslenie aktivít

Predmet Robotické stavebnice sme navštevovali spolu piati študenti. Vždy som na hodinu priniesla požičaného robota z CVČ alebo nám vyučujúca požičala robotov zo školy. Následne sme mali deväťdesiat minút na to, aby sme sa zoznámili s robotom, zistili ako funguje a vymysleli aktivitu vhodnú pre deti.

Niekedy sme aktivity vytvárali vo dvojici, niektorí tvorili sami, pri niektorých robotoch sme pracovali v trojici, prípadne všetci piati. Potom, ako sme sa rozdelili do skupín, každá skupina načrtla,

[1*] ivetkacs@gmail.com
[1‡] mayerova@fmph.uniba.sk

aktivitu k danému robotovi, ktorého sme mali k dispozícii na danej hodine.

Zisťovali sme jeho funkcionality a zároveň sme navrhovali aktivity. Potom sme aktivity spísali. Bolo nutné to zároveň aj skúšať na robotovi, aby deti neskôr nerobili niečo, čo sa nedá zrealizovať. Každý sa zameral na iné ciele, iné veci, ktoré chcel deti pomocou aktivity naučiť.

Vymyslieť naozaj zaujímavú aktivitu, ktorá by mala jasné ciele a deti bavila, bolo pomerne náročné. Väčšinou sme aktivity dokončovali doma.

Ak bola aktivita dokončená, bola odskúšaná hneď v piatok na krúžku v dvoch skupinách.

Aktivity sme vymýšľali na robotov Bee-Bot, Code-a-pillar, Albi Robot, Ozobot, Lego WeDo a Lego Mindstorm NXT. K dispozícii sme mali aj ďalších robotov, ale vzhľadom na krátkosť semestra, sme toho viac nestihli.

2.2 Aktivity

Vytvorili sme niekoľko aktivít, viaceré však boli odskúšané na jednej krúžkovej hodine.

Na prvej hodine sme naraz vymysleli tri aktivity – Bee-Bot, Code-a-pillar a Albi Robot. Všetky tri boli potom testované na jednej hodine.

Tieto roboty fungovali približne rovnako, s niektorými sme pracovali v minulosti už aj my a taktiež ich ovládanie nebolo náročné ani pre nás, ani deti. Tieto aktivity sa nám vymýšľali pomerne ľahko. Pri každom robotovi sme sa orientovali aj na príbeh.

Na ďalšej hodine sme vymýšľali aktivity na Ozobota. Vzhľadom na funkcionality tohto robota, sme aktivity rozdelili na dve polovice. Jedna sa týkala kreslenia kódov, druhá sa týkala programovania robota pomocou tabletu. Aktivity boli potom odskúšané na dvoch krúžkových hodinách.

Vymysleli sme aj aktivity na robotov Lego WeDo 1.0 a 2.0. Tieto roboty mi boli následne zapožičané, keďže týmito robotmi CVČ nedisponovalo.

Poslednú aktivitu, ktorú sme vymýšľali bola na robota Lego Mindstorm NXT 2.0. Táto aktivita nám samým zabrala niekoľko vyučovacích hodín. Túto aktivitu sme pripravovali ku Mikulášovi. Postavili sme sane s Mikulášom a deti mali podľa návodu z internetu postavať sobov. Tie potom doprogramovali a Mikuláš na saniach im za odmenu priniesol cukríky.

Myslím si, že my sami sme sa pri tvorbe aktivít zabavili. Bavilo nás vymýšľať aktivity a skúšať robotov. Niektoré veci však v konečnom dôsledku vyšli inak, než sme zamýšľali a preto by bolo pre ďalšie použitie vhodné tieto aktivity dokončiť, prípadne čiastočne prerobiť, aby ich mohli neskôr využívať aj iní učitelia.

3 Testovanie aktivít

Pri testovaní v praxi som bola už sama. Niekedy to bolo náročné, vzhľadom na počet detí a rozsah aktivít. Niekedy som musela improvizovať alebo za behu pozmeniť zadanie, vzhľadom na vyskytnutú situáciu.

Avšak aj napriek menším problémom, ktoré sa počas testovania vyskytli, deti boli z aktivít nadšené. Veľmi sa im to páčilo a na hodinu pravidelne prichádzali aj deti z iných krúžkov, prípadne sa na krúžok prihlásili nové deti.

V prvej krúžkovej skupine boli najprv iba štyria chlapci vo veku 8-12 rokov. Neskôr na krúžok prichádzali aj deti z divadelného krúžku, väčšinou dievčatá vo veku približne 12 rokov. Potom sa na krúžok prihlásili ďalší traja noví chlapci, jeden vo veku 9 rokov a dvaja vo veku 11 rokov, a jedno dievča vo veku 9 rokov.

V druhej krúžkovej skupine boli šiesti chlapci vo veku 8-14 rokov.

3.1 Priebeh aktivít

Deti som vždy rozdelila do dvojíc, prípadne väčších skupín. Záviselo to od počtu detí, ktoré boli na krúžku a taktiež od počtu robotov, ktoré sme mali k dispozícii.

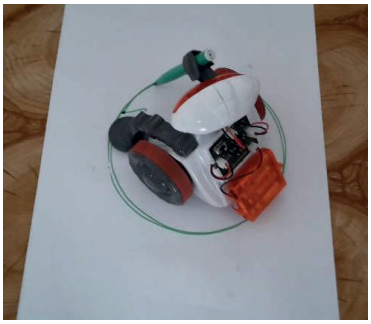
Niekedy sa vyskytli komplikácie súvisiace s pomôckami. Napríklad pri aktivite s Bee-Botom som zistila, že k dispozícii nie sú uvedené pomôcky, preto som musela improvizovať.

Pri niektorých robotoch a aktivitách, som žiakom vopred vytlačila zadanie a rozdala im ho. Neskôr som im zadanie buď prečítala alebo prerozprávala.

Žiaci následne pracovali na aktivite. Väčšinou vo dvojici. Väčšie deti chceli pracovať aj samé. Ak niečomu nerozumeli, opýtali sa ma. Bolo veľmi zaujímavé pozorovať to, ako dôsledne si premerali kroky robotov, skúšali a až keď mali dokonale premyslené a vyskúšané to, čo robot má urobiť, tak až potom ma zavolali na kontrolu.

Aktivita Albi robot (Obr. 1): S týmto robotom mali deti najväčšie skúsenosti, pretože mnohí ho majú aj doma alebo ho majú doma ich kamaráti. Žiaci tu upozornili na chybu v zadaní. Deťom sa páčil príbeh zo zadania, ale samotné zadanie mohlo byť trochu kratšie.

Aktivita Bee-Bot (Obr. 2): Pri tomto zadaní som musela na hodine improvizovať, kvôli nedostatku pomôcok. Niektorí mali skúsenosti s Bee-Botom z materskej školy. Všeobecne je Bee-Bot pre väčšie deti najmenej atraktívny.



Obr. 1: Aktivita Albi Robot.



Obr. 2: Aktivita Bee-Bot.

Aktivita Code-a-pillar (Obr. 3): Aktivita trvala dlhšie, než sme predpokladali. Deti si veľmi presne vymeriavali trasu a skúšali ju niekoľkokrát. Zadanie mohlo byť teda taktiež kratšie, pretože žiaci s aktivitou skončili v okamihu skončenia krúžku.

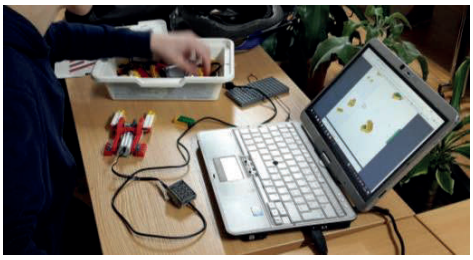


Obr. 3: Aktivita Code-a-pillar.

Aktivita Ozobot kreslenie: Žiakom sa veľmi páčilo kreslenie trasy pre Ozobota. V tomto zadaní bolo náročné to, že k dispozícii bol iba jeden Ozobot a preto som musela behať s robotom medzi deťmi. Žiaci sú veľmi kreatívni a popísali mnoho papierov, len aby vyskúšali všetko.

Aktivita Ozobot programovanie cez aplikáciu: Zadanie bolo nepresné, sama som nevedela, aký výsledok chceli dosiahnuť spolužiaci, ktorí vytvorili aktivitu. Takže deti tiež improvizovali, ale veľmi sa im páčil výsledok toho, ako svietil Ozobot a pohyboval sa. V zadaní nebolo napísané, pomocou ktorého typu programovania majú programovať Ozobota (aplikácia totiž ponúka viacero možností – piktogramy, kódy s textom,... Je tam rozdiel v zložitosti a typoch príkazov).

Aktivita Lego WeDo (Obr. 4): Toto Lego bolo zaujímavé pre deti, len škoda, že bol iba jeden počítač k Legu Wedo 1.0. O jednu stavebnicu sme mohli mať taktiež viac, pretože v jednej skupine bolo dosť veľa detí. Na túto hodinu prišlo aj niekoľko detí z iného krúžku. Všeobecne sa deťom viac páčilo ovládanie Lega WeDo 2.0, ale pri Legu WeDo 1.0 mali väčšiu dávku kreativity pri stavaní.



Obr. 4: Aktivita Lego WeDo 1.0.

Aktivita Lego Mindstorm NXT: Skladanie soba pre deti nebolo náročné, avšak programovanie bolo nereálne pre malé deti. Tešili sa však z pohybu sobov a cukríkov, ktoré priniesol Mikuláš.

3.2 Výsledok aktivít

Žiakov veľmi fascinoval výsledok – pohyb robota, jeho interakcia, výsledok toho, čo sa im vlastne podarilo urobiť. Deti boli neskutočne šťastné, keď Ozobot začal svietiť ako semafor, keď včielka zvládla prejsť náročnú trasu, keď húsenica spievala a zároveň prišla presne na to miesto, ktoré si označili. Niekedy robot splnil to, čo od neho očakávali na začiatku až po niekoľkých pokusoch, mladším deťom trvalo trochu dlhšie dosiahnuť požadovaný výsledok.

V roli učiteľa bolo náročné to, že zadanie, ktoré bolo vytvorené na hodine, bolo predovšetkým pre žiakov. To znamená, že tam neboli pokyny pre učiteľa, neboli tam výsledky, neboli tam naprogramované kódy, ktoré sa čakalo, že budú mať žiaci hotové.

Taktiež na hodine bolo pomerne dosť detí, väčšinou pracovali vo dvojiciach, každé na vlastnom zadaní a behať medzi nimi, pomáhať im, pričom každý robil niečo iné, nebolo vždy najjednoduchšie.

Najlepšie však na tom bola tá radosť detí, keď videli a skúsili niečo nové. Keď dokázali postavať a naprogramovať robotov. Z krúžku odchádzali nadšené, niekedy sa im ani nechcelo odísť. O tom, že sa deťom aktivity páčili, svedčí aj to, že postupne sa zvyšoval počet členov krúžku.

Podľa môjho názoru sa nám podarilo motivovať deti ku práci s robotickými stavebnicami. Deti sa naučili pracovať v tíme a navzájom sa zoznámili. Vďaka jednoduchému programovaniu, ktorého výsledok uvideli hneď, získali dobrý úvod do programovania, v ktorom pokračujeme na ďalších krúžkových hodinách. Žiaci sami zistili, že robotická včielka robila rovnaké kroky, ktoré

dokáže urobiť aj postavička v programovacom jazyku Scratch (počet krokov dopredu, otočenie o 90 stupňov).

4 Spätná väzba na aktivity

Spätnú väzbu na vytvorené aktivity som svojim spolužiakom a učiteľke priniesla ja. Po odučení aktivity som napísala správu o tom, ako aktivita prebiehala, čo sa deťom páčilo viac, čo menej, s čím mali problém, ako sa im podarilo naprogramovať robota, koľko im aktivita trvala atď. Taktiež aj to, aký som mala z aktivity pocit ja, čo mi chýbalo a naopak, čo sa mi zdalo veľmi dobre navrhnuté.

Čo sa týka zadaní, navrhujem do budúcnosti vytvárať dve zadania. Jedno pre učiteľa a jedno pre žiaka. V zadaní pre učiteľa by potom mali byť aj výsledky a presný priebeh aktivity resp. vyučovacej hodiny. Mne osobne ako učiteľke, chýbal v zadaní výsledok. Ja sama som nie vždy vedela, ako to moji spolužiaci mysleli. Týkalo sa to najmä programovania.

Žiacke zadanie by malo obsahovať menej textu, pretože najmä menšie deti majú problém s čítaním a čistý text pre nich nie je atraktívny. Lepšie by bolo tvoriť zadania, ktoré by boli kratšie, doplnené o obrázky, prípadne schémy.

Deťom sa páčili príbehy v zadaní. Zadanie potom nebolo iba zadaním, ale akousi misiou na záchranu ľudstva pred robotmi alebo ich zadanie vtiahlo do akéhosi sveta, v ktorom bolo ich životnou úlohou dostať robota z bodu A do bodu B. Príbehy však zadanie predĺžili, preto by možno bolo lepšie uvažovať o forme komiksu alebo nad iným štýlom zadania. Určite by sme pri tvorbe zadaní mali dbať viac aj na vizuálnu stránku zadania.

Keďže pri testovaní sa vyskytli určité problémy skoro s každým zadaním (bez toho to však ani nejde), preto by bolo vhodné zadania po otestovaní upraviť podľa požiadaviek, aby bolo zadanie možné používať aj opätovne, pokojne aj inými učiteľmi.

Na krúžku mali žiaci, okrem stavebníc Lego WeDo a Mindstorm NXT, vždy k dispozícii iba jeden kus daného robota. Určite odporúčam, aby každá dvojica žiakov mala svojho robota, svoj tablet, prípadne počítač. V niektorých situáciách by sa mi hodil jeden asistent. Týkalo sa to chvíľ, kedy žiakov bolo buď príliš veľa alebo každá skupina sa venovala niečomu inému.

V škole by sme zas možno mohli vytvoriť viac zadaní pre jeden typ robota. Žiaci by sa naučili viac ovládať jedného robota, mohli by si aj precvičiť viac funkcionalít, naučiť sa lepšie programovať konkrétneho robota. Programovanie robotov Lego Mindstorm NXT a Ozobot bolo pre žiakov pomerne náročné, nakoľko sa programovalo cez aplikáciu a výsledok nevideli okamžite. Taktiež by sme mohli vytvoriť viac gradovaných úloh pre jedného robota.

Mne osobne sa páčilo, že som nemusela vymýšľať aktivita sama, pretože je to časovo náročné. Taktiež si myslím, že viac ľudí vymyslí viac dobrých nápadov, ktoré by som sama len tak nevymyslela.

Myslím si, že sme vymysleli niekoľko dobých aktivít, ktoré ak sa upravia a dotvoria, tak kľudne môžu byť použité aj inými učiteľmi alebo opätovne o rok.

Bolo cítiť aj rozdiel v tom, ktorá dvojica robila aké zadanie. Informatici vymysleli úžasné veci, ale aktivite chýbal trošku taký väčší pohľad na deti. My učiteľky sme zase asi až moc prihliadali na deti a ich vek, pričom by deti zvládli aj náročnejšie veci.

Mne osobne sa páčil najviac sled aktivít v jeden deň, kedy boli na jednej hodine BeeBot, Code-a-pillar aj Albi robot. Zároveň bola toto zrejme asi najťažšia hodina na organizáciu, pretože každá skupina detí, robila niečo iné.

Z robotov sa mi najlepšie pracovalo s Ozobotom, pretože má mnoho zaujímavých funkcionalít. Najťažšie sa pracovalo mne, ale aj deťom s robotom Lego Mindstorm NXT. Pre deti bolo najťažšie programovanie tohto robota pomocou počítača.

5 Záver

Mne osobne sa veľmi páčil predmet Robotické stavebnice, pretože bolo zaujímavé pracovať s rôznymi robotmi. Myslím si však, že práca s takýmito robotmi by bola v normálnej triede veľmi náročná. V škole by na ňu nebolo možné vyčleniť dostatočný priestor, ktorý poskytujú voľnočasové krúžky. Robotika je však pre deti zaujímavá. Opätovne aj po ukončení sledu našich aktivít, deti na krúžku prejavujú záujem o ďalšie aktivity s robotmi.

Myslím si, že aktivity, ktoré sme vytvorili boli dobré. Niektoré mohli byť lepšie, resp. mohli by sme ich dokončiť, aby bolo naozaj dobré.

Práca s robotmi má veľký potenciál preniesť deti základom programovania „jednoduchšou“ a možno aj zaujímavejšou formou. Deti pracujúce v skupinách sa učia spolupracovať, spoločne tvoria a spolu si pomáhajú.

Z realizovaných aktivít som si všimla, že menšie deti preferujú prácu v skupine resp. vo dvojici. Niektoré staršie deti preferujú samostatnú prácu.

Najväčší úspech však podľa mňa bolo to, že sme vytvorili aktivity (ktoré môžu byť neskôr používané aj inými učiteľmi), zároveň sme ich mali možnosť odskúšať aj v praxi a tak získať spätnú väzbu od žiakov, učiteľa, vysokoškolského učiteľa aj od spolužiakov navštevujúcich tento predmet.

Tento predmet mal podľa mňa pre nás veľký prínos, pretože nebol iba o teórii, ale získali sme zároveň aj okamžitú spätnú väzbu z praxe. Naše zadania neboli iba jednorázovým zadaním, ale bolo

to zadanie, ktoré muselo byť urobené tak, aby mohlo byť hneď aj použité v praxi.

Dovolím si tvrdiť, že sa nám podarilo slniť ciele, ktoré sme si stanovili. Žiakov aktivity motivovali, nakoľko o ne prejavujú aj naďalej záujem, naučili sa ovládať rôzne robotické stavebnice, získali úvod do programovania a naučili sa pracovať v tíme.

Poďakovanie

Chcela by som poďakovať aj svojim spolužiakom, ktorí navštevovali predmet Robotické stavebnice vo vzdelávaní (2), že vymysleli rôzne aktivity, ktoré som s deťmi mohla vyskúšať.

Ďakujem aj Karolíne Mayerovej za to, že predmet prispôsobuje našim možnostiam a že ho robí zaujímavým spôsobom.

Literatúra

[Buľko, 2015] Buľko, K.. (2015). Včielka Bee-Bot v edukačných aktivitách. Národný projekt Inkluzívny model vzdelávania na predprimárnom stupni školskej sústavy. *Metodicko-pedagogické centrum.* ISBN 978-80-565-1292-0. *Dostupné na: <http://ucebnezdroje.npmrk2.sk/sites/default/files/189.pdf>*

[Kabátová and Pekárová, 2010] Kabátová, M. and Pekárová, J. (2010). Learning how to teach robotics. In Constructionism 2010 conference.

[Točená, 2015] Točená, K. (2015). Edukačné aktivity s využitím Bee-Bot. Národný projekt Inkluzívny model vzdelávania na predprimárnom stupni školskej sústavy. *Metodicko-pedagogické centrum.* ISBN 978-80-565-1335-4. *Dostupné na: <http://ucebnezdroje.npmrk2.sk/sites/default/files/187.pdf>*

[Pekárová a kol., 2013] Pekárová, J., Záhorec, J., Hrušecký, R. (2013). Digitálne technológie v materskej škole 3. *Metodicko-pedagogické centrum, Bratislava.* ISBN 978-80-8052-582-8.

[Veselovská, 2016] Veselovská, M. (2016). Edukačná robotika ako súčasť informatiky na 2. stupni ZŠ. *Dizertačná práca.*, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Univerzita Komenského, Bratislava.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 286–291
ISBN 978-8081470882, © 2018 Jakub Krcho

Robotické súťaže z pohľadu riešiteľského tímu

Jakub Krcho*
Školiteľ: Michaela Veselovská‡
Katedra základov a vyučovania informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

Cieľom práce je preskúmať ukážky zadaní z vybraných robotických súťaží konajúcich sa na Slovensku a priblížiť možnosti ich riešenia prostredníctvom robotickej stavebnice LEGO Mindstroms EV3, a taktiež s využitím robotickej stavebnice Arduino. V práci spomenieme robotické súťaže, ktorých sa môžu zúčastniť študenti stredných škôl a žiaci základných škôl. Ďalej v práci predstavíme rôzne riešenia úloh z niekoľkých ročníkov súťaže FIRST LEGO Leaugue. Zo súťaže RoboCup Junior uvedieme riešenie z kategórie Tanec robotov (angl. *OnStage*) a zo súťaže RoboRave prezentujeme riešenie z kategórie Hasenie ohňa (angl. *Fire Fighting*). V závere popíšeme skúsenosti, ktoré sme získali ako členovia tímu na súťažiach, respektíve počas riešenia problémovej úlohy.

Kľúčové slová: robotika, história robotiky, robotické súťaže, FLL, RoboRave, RoboCup, skúsenosti

Úvod

Robotika je veda zaoberajúca sa robotmi a všetkého čo s nimi súvisí [David Hitt, 2009]. Samotné slovo robot bolo prvýkrát na svete použité v divadelnej hre R.U.R (*Rossum´s universal robots*) Karla Čapka [Ján Kužník, 2011]. Robotika nie je len veda o robotoch, ale aj o ich dizajne, výrobe a aplikáciách. Taktiež úzko súvisí s elektronikou, mechanikou a softvérom.

Prvý návrh týkajúci sa robotiky podal George Devol v roku 1954. Jeho spoločnosť Unimation bola prvá, ktorá vyrobila priemyselného robota [Jeremy Pearce, 2011]. Konštrukciou sa človeku vôbec nepodobal a jeho hlavnou úlohou bolo prenášanie objektov z miesta na miesto. Neskôr sa konkurenciou Unimationu stali mnohé japonské firmy. Japonsko má dodnes popredné miesto v priemyselnej robotike aj vo výskume.

Vo svete sú čoraz populárnejšie súťaže robotov, ktoré motivujú amatérskych konštruktérov a programátorov vo všetkých vekových kategóriách.

1 Robotické súťaže

Súťaže v robotike majú zvyčajne za cieľ podporiť rozvoj robotiky, umelej inteligencie a ďalších súvisiacich okruhov a pritiahnuť pozornosť laickej a odbornej verejnosti ako aj študentov. Existuje široká škála súťaží, od jednoduchých predvádzaní robotov, cez súťaže s definovanými pravidlami, ktoré vyžadujú od robotov splnenie určitých úloh, pričom sa hodnotí presnosť a rýchlosť, s akou sú úlohy splnené. Na Slovensku sa organizuje množstvo zaujímavých robotických súťaží, medzi ktoré patria:

- FIRST LEGO Leaugue
- RoboRave
- RoboCup Junior
- Robotický Battle na Alejovej
- G-Robot

V nasledujúcich častiach bližšie predstavíme jednotlivé súťaže.

1.1 FIRST LEGO Leaugue

Základom FLL je robotická súťaž, počas ktorej žiaci základných škôl riešia "zapeklité misie" použitím robota, ktorého sami navrhli, postavili a naprogramovali v čase od vypísania úloh (zvyčajne august) do termínu konania súťaže (november-január). Celá súťaž aj s prípravou tímu trvá približne 3 až 5 mesiacov. Okrem postavenia robota musia žiaci spracovať aj zadanú výskumnú úlohu, ktorej výsledky musia byť schopné vhodným spôsobom prezentovať pred porotou. To všetko dodáva veľa zábavy, zatiaľ čo sa naučia aplikovať vedu, technológiu, inžinierstvo a matematické koncepty s veľkou dávkou fantázie, aby vyriešili problém.

1.2 RoboRave

RoboRave je robotický vzdelávací program, ktorý vyučuje študentov a učiteľov ako navrhovať, vytvárať, programovať a testovať roboty, vytvorené z robotických stavebníc, na vykonávanie rôznych

* jakub.krcho70@gmail.com
‡ miska.veselovska@gmail.com

úloh. Súťaží sa vo viacerých kategóriach ako napríklad Hasenie ohňa (angl. *Fire Fighting*), Sledovanie čiary (angl. *Line Following*) a mnohé iné. RoboRave je určený najmä pre stredné školy, no samozrejme sa môžu zúčastniť aj žiaci základných škôl.

1.3 RoboCup Junior

RoboCup Junior je podsúťaž celosvetovej súťaže RoboCup. Robocup Junior je určený pre žiakov základných a stredných škôl vo veku od 12 až do 19 rokov. Cieľom súťaže je rozvoj a podpora záujmovej činnosti, tvorivosti, vedomostí a zručností žiakov oblasti konštrukcie a programovania automatizovaných a kybernetických systémov (robotov). Súťaž pozostáva z kategórií:

1. Robotický futbal – (angl. *Soccer*)
2. Záchranár – (angl. *Rescue*)
3. Tanec robotov – (angl. *OnStage*)

1.4 Robotický Battle na Alejovej

Robotický Battle na Alejovej (RBA) je súťaž pre žiakov základných a stredných škôl, ktorí majú záujem o robotiku. Cieľom súťaže je popularizácia robotiky a informatiky na školách. Súťaž sa skladá z 3 kategórií:

1. Vlastný model
2. Robotická výzva
3. Závodenie (angl. *Racing*)

1.5 G-Robot

G-Robot je robotická súťaž, ktorú sme ako robotický tím (OHYZDI) vytvorili a spolu so strednou školou Gymnázium Viliama Paulinyho-Tótha v Martine sme túto súťaž organizovali. Súťaž je vhodná pre žiakov, ktorí s robotikou iba začínajú.

2 Ukážky zadaní a ich riešenie z vybraných robotických súťaží

V tejto časti preskúmame ukážky zadaní z vybraných robotických súťaží a priblížime možnosti ich riešenia prostredníctvom robotickej stavebnice LEGO Mindstroms EV3, a taktiež s využitím robotickej stavebnice Arduino.

- FIRST LEGO Leaugue (ročník 2015 a 2016)
- RoboRave – Fire Fighting (ročník 2016)
- RoboCup Junior – OnStage (ročník 2015 a 2017)

2.1 Ukážka FIRST LEGO Leaugue

Ako sme už spomenuli súťaž FIRST LEGO Leauge pozostáva nie len zo samotného zadania, ktoré musí robot vyriešiť, ale aj z výskumného projektu. V nasledujúcich častiach bližšie predstavíme 2 ročníky, ktorých sme sa zúčastnili (ročník 2015 a 2016).

2.1.1 FIRST LEGO Leaugue (ročník 2015)

Témou súťaže bolo Spracovanie odpadu (angl. *Trash Trek*). Tímy súťažiacich skúmali, ako sa vysporiadať z neustále sa navyšujúcim množstvom odpadu - nájdením iného účelu, recykláciou, vhodným spracovaním, skladovaním a separovaním a na túto tému si pripravili zaujímavé i užitočné projekty. Náš projekt boli DIY (urob si sám) videá s využitím odpadového materiálu.

V robotickom zadaní súťažiace tímy v predstihu pred turnajom zo súčiastok LEGA majú za úlohu poskladať a naprogramovať svoje roboty. Na turnaji navzájom súťažia a každý robot počas 2½ minútovej hry na ihrisku plní úlohy. Cieľom je získať čo najviac bodov. Roboty pracujú autonómne, všetky ich pohyby riadi program. Na obrázku č. 1 si môžeme všimnúť podobu ihriska.

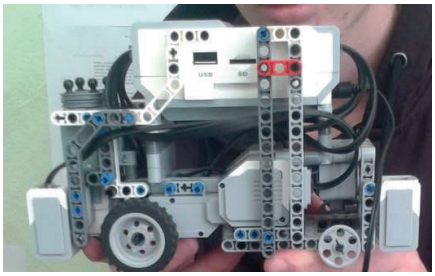


Obrázok č. 1 – ihrisko

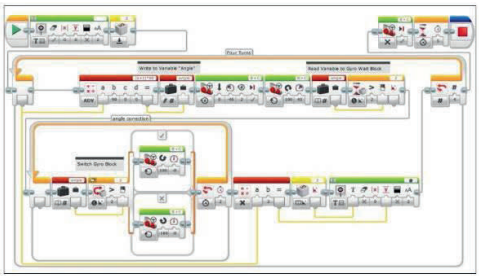
Našou stratégiou, ako riešiteľského tímu, bolo preskúmanie všetkých úloh a možností, ktoré sme boli schopní za 2½ minútovej hry splniť. Dôležitým faktorom pri výbere úloh na ihrisku bolo bodové ohodnotenie a časová náročnosť na splnenie danej úlohy.

Samotná konštrukcia robota bola veľmi náročná. Vzhľadom na to, že tím môže využiť iba jednu riadiacu jednotku (my sme použili EV3), má k dispozícii maximálne 4 motory. Z toho musí byť zabezpečený nie len pohyb robota, ale aj plnenie úloh. Práve preto sme postavili robota, ktorý tvoril hlavný základ a postupne sme menili vrchnú časť konštrukcie (nástavce robota). Na obrázku č. 2 si môžete všimnúť konštrukciu základnej časti robota a na obrázku č. 3 je znázornená krátka ukážka

programu v programovacom prostredí LEGO Mindstroms EV3.

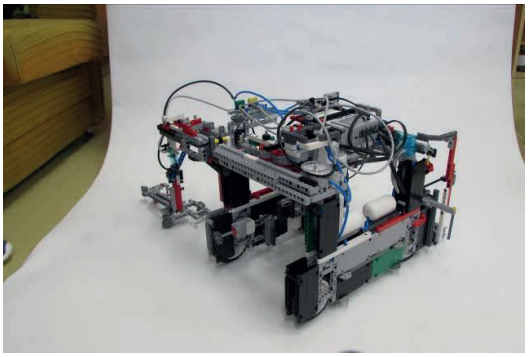


Obrázok č. 2 – základ robota



Obrázok č. 3 – časť programu k robotovi na obrázku č. 2

Každý nástavec mal splniť pár úloh a spojením všetkých výjazdov do ihriska s rôznymi nástavcami sme mohli dosiahnuť vysoký počet bodov. Obrázok č. 4 predstavuje jeden zo 4 nástavcov robota.



Obrázok č. 4 – nástavec robota

Neoddeliteľnou súčasťou celej súťaže je aj kategória robot dizajn a tímová práca. V časti robot dizajn musí tím predviesť svojho robota a ukázať všetky technické aj programátorské špeciality. V tímovej spolupráci dostane súťažný tím úlohu alebo problém, ktorý musia spoločne vyriešiť za čo najkratší čas.

2.1.2 FIRST LEGO Leaugue (ročník 2016)

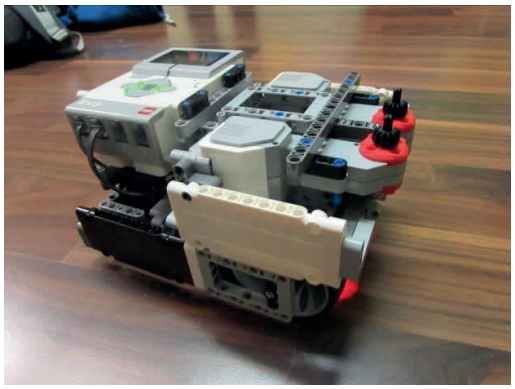
Témou tohoto ročníka boli *zvieratá a ľudia*. Tímy hľadali spôsob, ako sa kontakt medzi ľuďmi a zvieratami môže zlepšiť. Skúmali spôsoby, ktorými ľudia s určitým druhom zvierat prichádzajú do kontaktu. Náš projekt bol transport akváriových rybičiek na dlhé trasy.

V robotickom zadaní tímy pracujú rovnako ako sme uviedli v časti 3.1.1 FIRST LEGO Leaugue (ročník 2015). Obrázok č. 5 znázorňuje ihrisko pre uvedený ročník.



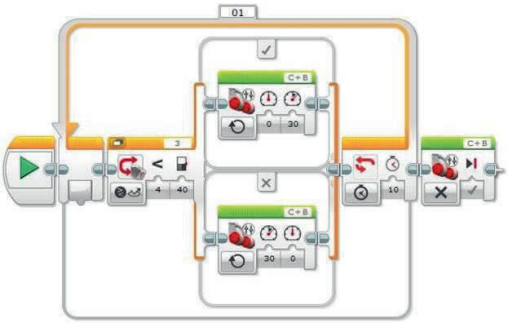
Obrázok č. 5 – ihrisko pre ročník 2015

Program spolu s konštrukciou prešli určitými úpravami (prispôsobili sme robota k plneniu nových úloh na ihrisku). Na obrázku č. 6 predstavujeme základnú konštrukciu robota uvedeného ročníka.



Obrázok č. 6 – základ robota (FIRST LEGO Leaugue – ročník 2015)

Najdôležitejším krokom k úspešnému vyriešeniu problémovej úlohy je využívanie senzorov. Senzory slúžia na to, aby sa robot dokázal orientovať na ihrisku a zároveň na rozhodovanie, čo má v danej chvíli urobiť. Obrázok č. 7 ponúka ukážku programu na sledovanie čiary.

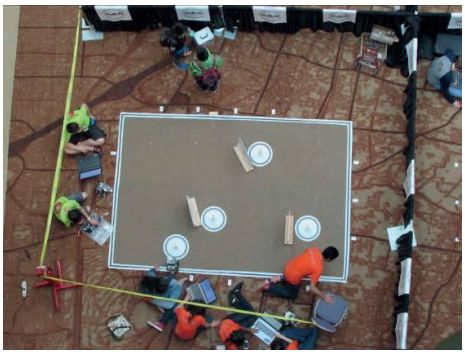


Obrázok č. 8 – program na sledovanie čiary

2.2 Ukážka RoboRave – Fire Fighting

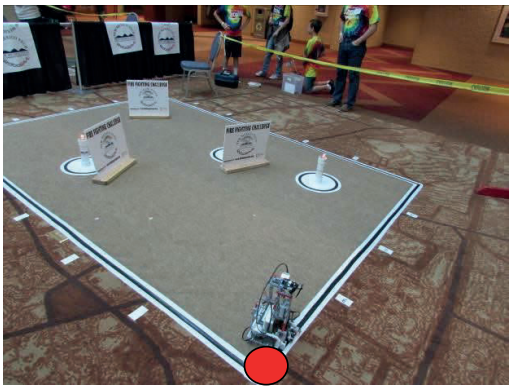
V tejto časti si bližšie popíšeme kategóriu Hasenie ohňa (angl. *Fire Fighting*) a naše riešenie zadania.

Hasenie ohňa (angl. *Fire Fighting*) je najlákavejšia kategória celej súťaže. Úlohou je navrhnúť, vytvoriť a naprogramovať autonómneho robota, ktorý dokáže nájsť 4 zapálené sviečky, priblížiť sa a uhasiť každú sviečku bez kontaktu. Na obrázku č. 8 predstavujeme ihrisko tejto kategórie.



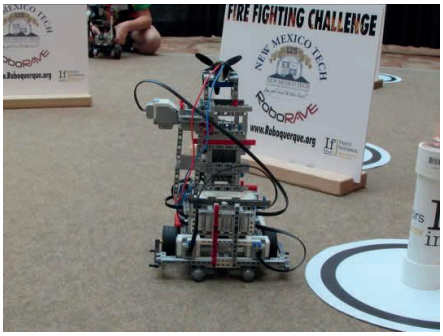
Obrázok č. 8 – ihrisko Fire Fighting

Robot štartuje z náhodného rohu ihriska, ktorý vyberie rozhodca. Robot jednu sviečku vidí z tejto pozície, no ostatné sú zakryté stenou. Cieľom je uhasiť všetky sviečky bez dotyku za čo najkratší čas. Na obrázku č. 9 si všimnite štartovaciu pozíciu robota.



Obrázok č. 9 – štartovacia pozícia robota

Našim riešením bol robot, ktorý bol zostavený zo stavebnice Lego Mindstroms EV3. Využívali sme najmä infračervený senzor na detekciu sviečky a svetelné senzory, ktoré nám zabezpečili, aby robot nevyšiel z ihriska. Motory robota slúžili na pohyb po ihrisku a na spínanie ventilátora, ktorý sa spustil pri detekcii sviečky. Obrázok č. 10 ponúka vizualizáciu nášho robota.



Obrázok č. 10 – náš robot v kategórii Hasenie ohňa (angl. *Fire Fighting*)

2.3 Ukážka RoboCup Junior – OnStage

Kategória Robotický tanec (angl. *OnStage*) na súťaži Robocup Junior spája nie len robotickú a informatickú časť, ale je to súzvuk robotiky, informatiky a umenia. Úlohou tejto kategórie je robotické predstavenie alebo vystúpenie, kde roboty tancujú spolu so žiakmi a predvádzajú rôzne tanečné exhibície. Dĺžka predstavenia je maximálne 2 minúty.

V nasledujúcich častiach sa bližšie pozrieme na riešenia nášho tímu v ročníku 2015 a 2016.

2.3.1 Riešenie kategórie OnStage (ročník 2015)

V ročníku 2015 naším riešením bolo tanečné vystúpenie 3 robotov. Tieto roboty boli postavené len z LEGO stavebníc a to LEGO stavebnice EV3 a NXT. Náš najvyšší robot meral približne 1 meter a vo všetkých robotoch boli využívané senzory najmä na estetickú zložku predstavenia. Taktiež sme využili 3D tlačiareň na vytvorenie dokonalej podoby tváre a rúk. Obrázok č. 11 predstavuje konštrukciu tancujúceho robota.



Obrázok č. 11 – konštrukcia robota

Na programovanie robotov sme namiesto LEGO programovacieho jazyka pre stavebnice LEGO Mindstorms využili LEJOS (JAVA pre LEGO Mindstorms). Na obrázku č. 12 ponúkame krátku ukážku programu v jazyku JAVA s využitím LEJOS.

```
import lejos.hardware.Button;

public class HelloMain {

    private static RegulatedMotor m;
    private static EV3TouchSensor t;
    private static EV3IRSensor i;
    private static EV3ColorSensor c;

    private static float[] sample;

    public static void main(String args[]){

        Sound.beep();                          14 seconds after running the program
        LCD.drawString("Hello EV3", 0, 2);     17 seconds after running the program

        m = new EV3LargeRegulatedMotor(MotorPort.A);
        t = new EV3TouchSensor(SensorPort.S1);
        i = new EV3IRSensor(SensorPort.S4);
        c = new EV3ColorSensor(SensorPort.S3);
        m.setSpeed(400);
        sample = new float[10];

        while(!Button.ESCAPE.isDown()){
            t.fetchSample(sample, 0);
            float touchValue = sample[0];
            i.fetchSample(sample, 1);
            float irValue = sample[1];
            c.fetchSample(sample, 2);
            float colorValue = sample[2];

            LCD.drawString("Touch: " + touchValue + "\t " + t.sampleSize(), 0, 3);
            LCD.drawString ("IR: " + irValue + "\t " + i.sampleSize() , 0, 4) ;   24 seconds after running the program
            LCD.drawString("Color: " + colorValue + "\t " + c.sampleSize(), 0, 5);

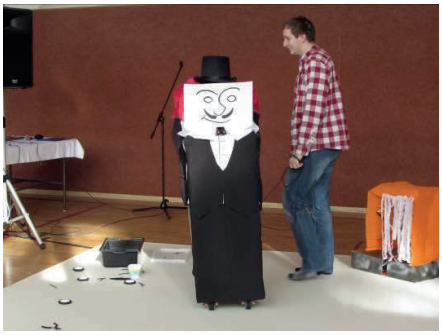

            if(sample[0] != 0){
                m.forward();
            }
            else{
                m.stop();
            }
            Delay.msDelay(100);
        }
    }
}
```

Obrázok č. 12 – program robota v LEJOS

2.3.2 Riešenie kategórie OnStage (ročník 2017)

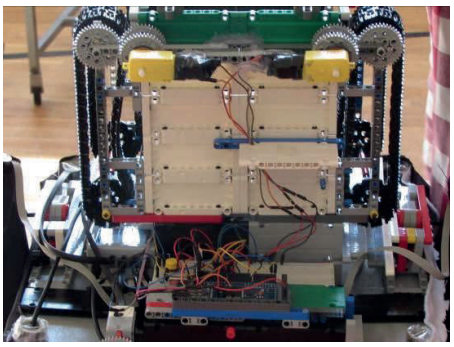
Ročník 2017 kategórie OnStage bol našim posledný rokom čo sa týka robotických súťaží. Našim predstavením bolo *kúzelnícke vystúpenie*. V kúzelníckom predstavení sme mali 3 robotov. Najdôležitejším robotom bol kúzelník (obrázok č. 13). Jeho výška bola približne 1,6 metra a mal za úlohu tvorenie kúziel. Vo vystúpení sme mali 3 kúzelnícke triky:

1. Zmiznutie robota
2. Prerezanie robota na dve časti
3. Vytiahnutie zajaca z klobúka



Obrázok č. 13 – robot kúzelník

Okrem LEGO stavebnice EV3 sme využívali aj robotickú stavebnicu Arduino. Na prepojenie EV3 a Arduina sme použili I2C. I2C je počítačová zbernica vyvinutá firmou Philips. Používa sa na pripojenie rôznych periférií, pričom na prenos údajov sa používajú dva vodiče. Komunikácia prebieha tak, že jedno zariadenie hrá úlohu Master (ovláda ostatné) a zvyšné zariadenia hrajú úlohu Slave. V našom prípade bolo Arudiono Master. Slave čaká na svoje oslovenie a keď ho Master osloví, podľa okolnosti si len prečíta, čo za údaje dostalo, alebo odpovie nejakými inými údajmi. Obrázok č. 14 predstavuje prepojenie LEGO Mindstorms EV3 s Arduinom.



Obrázok č. 14 – prepojenie EV3 a Arduina

3 Získané skúsenosti

Počas 5 rokov, ktorým sme sa venovali robotike a robotickým súťažiam, sme získali množstvo skúseností. Vzhľadom na to, že sme boli študentmi gymnázia pomocou robotiky sme sa naučili množstvo poznatkov, ale aj praktických zručností v oblasti elektrotechniky (prepojenie a predĺženie káblov, vytváranie obvodov a pod.). K tomu sme sa naučili ako správne vytvoriť konštrukciu robota. To znamená, že sme sa naučili správne robota vyvážiť so zameraním na plynulý pohyb robota, zjednodušiť konštrukciu robota, aby nebola príliš ťažká na pohyb a výkon, ale aj ako dômyselne využiť motory pre čo najväčší zámer pôsobnosti.

Programovacie zručnosti a skúsenosti boli pre nás mimoriadne dôležité. Bolo zložité vytvoriť taký program, ktorý by bol čo najmenej náročný na pamäť aj logiku. Na základe našich skúseností si myslíme, že nám budú nápomocné na prípravu efektívneho a časovo primeranejšieho programovania.

Prvým prínosom bola tímová spolupráca. Zistili sme, že bez tímu a vzájomnej spolupráce by bolo oveľa náročnejšie dosiahnuť také výsledky, aké sme dosiahli na súťažiach. Dokonca sme získali skúsenosti organizácie a plánovania, keď sa nám podarilo trikrát postúpiť na celosvetové majstrovstvá v robotike (RoboRave a dvakrát Robocup). Práve na takýchto súťažiach sa získa obrovské množstvo skúseností, pretože sme sa zoznámili a mohli sme zdieľať svoje skúsenosti s odborníkmi z oblasti robotiky z univerzitného a profesionálneho prostredia.

Všetky skúsenosti, ktoré som osobne získal poskytujem ďalším robotickým tímom, ktoré vediem ako tréner. Taktiež už 2 roky pracujem ako vedúci krúžkovej činnosti v Martine a pripravujem robotické tímy na súťaže.

Poďakovanie

Naše poďakovanie patrí najmä Michaele Veselovskej, vďaka ktorej sa nám podarilo napísať tento príspevok a taktiež našim kolegom z robotického tímu OHYZDI, s ktorými sme prežili a získali všetky spomenuté skúsenosti a zážitky.

Literatúra

[Ján Kužník, 2011] Ján Kužník (2011). České slovo ROBOT zná celý svět už 90 let [online]. 2011. Aktualizované 2018-04-05. [cit. 2018-04-03]. Dostupné na internete: https://technet.idnes.cz/ceske-slovo-robot-zna-cely-svet-uz-90-let-fcw-/tec_technika.aspx?c=A110126_125558_tec_technika_kuz

[Jeremy Pearce, 2011] Jeremy Pearce (2011). George C. Devol, Inventor of Robot Arm, Dies at 99 [online]. 2011. Aktualizované 2011-084-15. [cit. 2018-04-03]. Dostupné na internete: https://www.nytimes.com/2011/08/16/business/george-devol-developer-of-robot-arm-dies-at-99.html

[David Hitt, 2009]. David Hitt (2009). What is Robotics? [online]. 2009. Aktualizované 2017-08-07. [cit. 2018-04-03]. Dostupné na internete: https://www.nasa.gov/audience/forstudents/5-8/features/nasa-knows/what_is_robotics_58.html

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 292–297
ISBN 978-8081470882, © 2018 Marek Mansell

Platforma micro:bit v nižšom sekundárnom vzdelávaní

Marek Mansell[1*]

Školiteľ: Eva Klimeková[2†]

[1] Fakulta Informatiky a Informačných Technológií, STU, Ilkovičova 2, 842 16 Bratislava
[2] Katedra základov a vyučovania informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt: V tejto práci sa zameriavame na využitie platformy BBC micro:bit na hodinách informatiky v nižšom sekundárnom vzdelávaní. Vďaka jej modularite je možné pripájať rôzne druhy senzorov a aktorov, ktoré interagujú s okolitým prostredím, ako napríklad LED pásiky, bzučiaky, senzory teploty a vlhkosti, atď. Táto rôznorodosť možných aktivít znižuje monotónnosť hodín a zvyšuje motiváciu žiakov. Zároveň popisujeme niekoľko hardvérových aktivít rôznych náročností, pri ktorých sú žiakom prezentované základné koncepty z oblasti informatiky užitočné aj v rámci základnej digitálnej gramotnosti. V práci taktiež priblížime zrealizované semináre pre učiteľov informatiky.

Kľúčové slová: microbit, hardvér, informatika

1 Úvod

Hardvérové platformy sa stávajú bežnou súčasťou vyučovania informatiky, a to pre ich schopnosť získať pozornosť žiaka a relatívne nízku cenu. Ich častou spoločnou vlastnosťou je modularita, a teda schopnosť pripájať a ovládať elektronické aktory, napr. motory a LED svetlá, a tiež snímať pomocou externých senzorov rôzne veličiny, ako napr. vlhkosť pôdy, teplota vzduchu, množstvo slnečné žiarenia. Práve takéto hardvérové komponenty sú základnými stavebnými blokmi bežnej spotrebnej elektroniky.

Rôznorodosť aktivít môže u žiakov zvýšiť motiváciu vzdelávať sa v oblasti informatiky, najmä ak sa zadania prispôsobia konkrétnej skupine žiakov, podľa ich záujmov a zamerania. Zároveň je práca s hardvérom tiež vhodnou pomôckou na dosahovanie vzdelávacích cieľov [Štátny pedagogický ústav, 2014], a to podnecovať u žiakov rozvoj algoritmického a logického myslenia a viesť ich k tvorivosti a sebavzdelávaniu. Hardvérové platformy môžeme taktiež využiť pri medzipredmetových či tímových projektoch, s cieľom rozvíjať poznatky žiakov o informatických systémoch v súvislostiach za účelom lepšieho porozumenia spolupráce softvéru a hardvéru, ktoré je nevyhnutné pre zorientovanie sa v konceptoch ako je *Smart City* či *IoT* (*Internet vecí*).

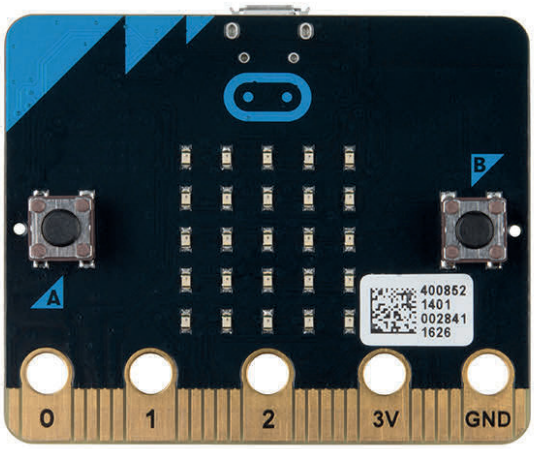
Na Slovenských základných školách sú rozšírené najmä edukačné roboty Bee-Bot a Lego Mindstorms [Veselovská and Mayerová, 2018]. Menované platformy ale nespĺňajú kritérium univerzálnej modularity a ich využitie je vyhradené na robotiku. Najčastejšie používanými modulárnymi platformami sú Arduino a Raspberry Pi [Bers et al., 2014]. Platforma BBC micro:bit, však spĺňa podmienku modularity, vďaka ktorej je možné vytvárať medzipredmetové projekty, a zároveň je navrhnutá tak, aby ju bolo možné do vyučovania zakomponovať čo najjednoduchšie. Práve preto sme sa rozhodli navrhnúť postupnosť aktivít a realizovať semináre pre učiteľov, ktoré boli určené na zoznámenie sa s hardvérom a možnosťami ich využitia vo vzdelávaní.

2 BBC micro:bit

Zariadenie BBC micro:bit je výsledkom spoločnej iniciatívy širokého spektra súkromných i verejných organizácií, ktorej cieľom bolo vytvorenie lacnej edukačnej platformy, ktorú zastrešila britská verejnoprávna televízna spoločnosť BBC [Sentance et al., 2017]. Tá v roku 2016 rozdistribuovala jeden micro:bit každému žiakovi siedmeho ročníka v Spojenom Kráľovstve (11 až 12 roční). V rámci projektu bolo vytvorených niekoľko učebných materiálov a vývojových prostredí pre toto zariadenie. Škálu materiálov rozširujú aj učitelia, ktorí zariadenia používali na hodinách informatiky.

Za prvý polrok projektu sa v priebežnom prieskume 85% učiteľov vyjadrilo, že hardvér na hodinách informatiky spravil výučbu pre žiakov zaujímavejšou a až 90% opýtaných žiakov sa po projekte vyjadrilo, že naučiť sa programovať je možné pre každého. U dievčat bol pozorovaný 70% nárast záujmu o informatiku. Približne polovica učiteľov uviedla, že sa po projekte cítili viac sebavedomí v programovaní, a to predovšetkým tí učitelia, ktorí nemali

*marek.mansell@gmail.com
†klimekova@fmph.uniba.sk



Obr. 1: Zariadenie BBC micro:bit (Zdroj: Sparkfun [2])

veľa predchádzajúcich skúseností s programovaním. [BBC, 2017]

2.1 Hardvérové možnosti

Zariadenie BBC micro:bit je programovateľný mikropočítač. Obsahuje vstavanú obrazovku, tlačidlá, senzor pohybu, naklonenia, teploty a svetelnosti. Podporuje dva druhy bezdrôtovej komunikácie - Bluetooth Low Energy (BLE) pre komunikáciu s mobilnými zariadeniami a rádiový prenos pre komunikáciu s inými zariadeniami BBC micro:bit. Taktiež je možná sériovú komunikácia s počítačom cez USB kábel.

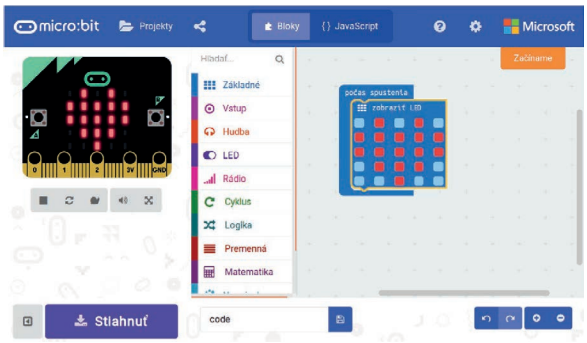
Podobne ako iné modulárne hardvérové platformy má všeobecne použiteľné vstupno-výstupné piny (vývody), vďaka ktorým zariadenie interaguje s fyzickým svetom. Tie majú pri tejto platforme podobu kovových plôch na okraji dosky. Príkladom aplikácie pre vstupný pin je snímanie stlačenia tlačidla, príkladom výstupného je zapínanie a vypínanie LED svetla. Niektoré z týchto pinov podporujú aj sériovú komunikáciu s externými modulmi s vlastným mikroprocesorom. Najjednoduchším spôsobom pripojenia externých modulov je pomocou prepojovacích káblov ukončených krokosvorkami. BBC micro:bit má päť pinov prispôsobených na pripájanie krokosvoriek, z toho dve slúžia na napájanie a tri sú programovateľné ako vstupy alebo výstupy.

Napájanie je realizovateľné tromi spôsobmi: cez USB kábel; dvoma batériami v špeciálnom držiaku bežne dodávanom s BBC micro:bit alebo pripojením batérie priamo na napájacie piny.

2.2 Prostredie pre micro:bit

Popisujeme dve prostredia pre tvorbu kódu na BBC micro:bit, a to prostredia Mu a MakeCode.

MakeCode[3] je online grafickým prostredím, v ktorom žiaci vytvárajú pomocou spájania blokov funkčné programy (Obr. 2). Vhodný je najmä pre žiakov základných škôl. Výhodou tohoto prostredia je nízka technická náročnosť prípravy pre učiteľa, nakoľko prostredie je online a nie je potrebná žiadna inštalácia. Po vytvorení programu v prostredí si žiak program stiahne ako obyčajný súbor. BBC micro:bit, ktorý si žiak medzičasom pripojil k počítaču pomocou USB kábla, sa na počítači zobrazí ako klasické USB úložisko, na ktoré stiahnutý súbor s programom stačí skopírovať. Program sa následne automaticky spustí na zariadení.



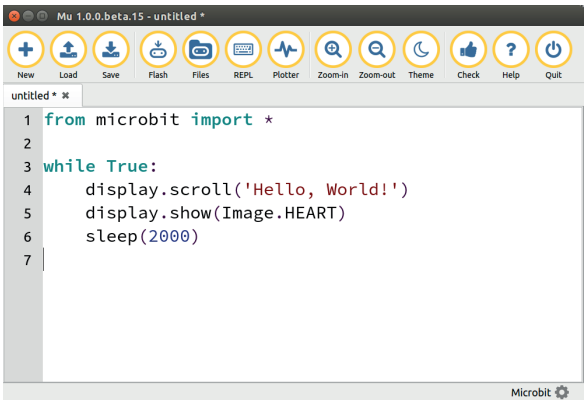
Obr. 2: Prostredie MakeCode

MicroPython je špeciálna verzia jazyku Python pre programovanie hardvéru, v ktorej syntax a veľká časť štandardných knižníc zostáva rovnaká. Žiaci sa tak nemusia učiť viacero nových jazykov, ten istý vedia využiť aj pri hardvéri a aj pri klasických programovacích úlohách. Podobne. ako pri blokovom programovaní, je možné využiť online MicroPython editor a stiahnuť vygenerovaný program na zariadenie, no pre využitie rozšírenej funkcionality je vhodné používať prostredie **Mu**[4]. Mu sprístupňuje interaktívnu konzolu REPL, ktorá slúži najmä na ladenie programu a hľadanie chýb, ako aj interné dátové úložisko,

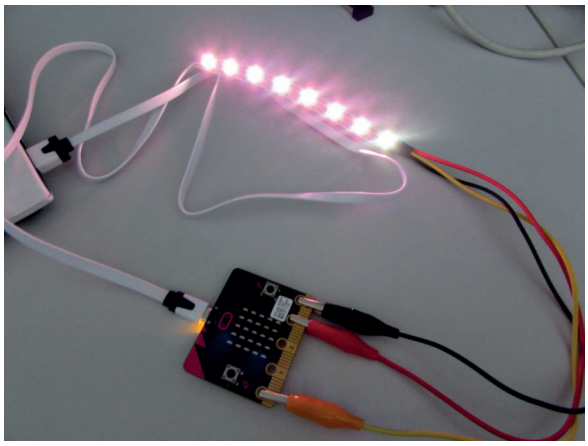
[2] https://flic.kr/p/WKkWmD

[3] https://makecode.microbit.org

[4] https://codewith.mu



Obr. 3: Prostredie Mu



Obr. 4: Pripojenie Neopixel LED pásiku

na ktoré je možné zapisovať nazbierané údaje zo senzorov.

Ďalšími, menej využívanými možnosťami sú programovacie jazyky JavaScript a C++.

3 Aktivity s BBC micro:bit

V tejto sekcii popisujeme štyri aktivity s BBC micro:bit s rôznymi úrovňami náročnosti, ktoré majú za cieľ priblížiť čitateľovi hardvérové zadania.

3.1 Ahoj Svet!

Cieľom tejto aktivity je zoznámiť žiakov so zariadením BBC micro:bit, vývojovým prostredím MakeCode a procesom tvorby a nahrávania programu.

Na začiatku si žiaci otvoria online prostredie MakeCode a učiteľ im v krátkosti názorne ukáže, akým spôsobom sa jednotlivé bloky do seba zapájajú. Prvou úlohou je vytvoriť program, ktorý bude neustále zobrazovať reťazec "Ahoj Svet!". Pre splnenie úlohy postačuje kombinácia dvoch blokov - *vždy* a *zobraziť' reťazec*. Vytvorený program je možné priamo v online prostredí odsimulovať. Po ukončení úpravy programu žiaci stlačia tlačidlo *Stiahnuť* a súbor s programom uloží na počítač. Po pripojení BBC micro:bit k počítaču pomocou USB kábla sa zariadenie zobrazí ako externé úložisko, na ktoré je možné súbor s kódom skopírovať. Po nahratí sa program sám spustí.

Následne je možné aktivitu rozširovať o ďalšie výpisy textu či obrazcov (príkazom *zobrazit' LED*) na obrazovke zariadenia, prípadne príkazom *pozastavit' (ms)* ponechať obrazec na zadaný počet milisekúnd zobrazený na obrazovke. Tým sa žiaci zoznamujú s konceptmi postupnosti príkazov a parametrami príkazov.

Ďalšie pokračovanie tejto aktivity môže byť nahradenie bloku vždy blokom *keď potrasenie* zo sekcie *Vstup*. Daný kód sa teda vykoná po fyzickom potrasení zariadením. Parameter potrasenie je možné nahradiť ďalšími udalosťami, ako napríklad naklonenie či prevrátenie. Zaujímavou úlohou je zobrazenie usmiateho "smajlíka" otočeného správnym smerom pri akomkoľvek otočení zariadenia, podobným spôsobom, ako sa dnes automaticky otáčajú obrazovky smartfónov.

Túto aktivitu sme overili aj na hodinách informatiky na ZŠ Jána Baskossa v Banskej Bystrici v skupine 28 žiakov zo siedmeho a ôsmeho ročníka. Z našej skúsenosti je popisovaná aktivita zvládnuteľná v rámci jednej vyučovacej hodiny.

3.2 Animácie na LED pásiku

V tejto aktivite žiaci využijú schopnosť madularity zriadenia BBC micro:bit a pripoja k nemu adresovateľný LED pásik NeoPixel. Podľa úrovne zručností žiakov je možné zvoliť buď grafický programovací jazyk v online prostredí MakeCode, alebo jazyk MicroPython v prostedí Mu.

NeoPixel pásik sa od štandardných LED pásikov odlišuje tým, že je možné osobitne nastaviť každej LED dióde farbu a intenzitu svetla. Každá LED dióda obsahuje tri farebné zložky (modrú, červenú a zelenú) a ich kombináciami je možné vytvoriť akékoľvek svetlo z viditeľného spektra, vrátane čisto bieleho. NeoPixel LED pásik je možné ovládať z jedného dátového pinu, avšak zároveň potrebuje pripoje-

nie na napájacie piny. Tieto tri prepojenia realizujeme káblami s krokosvorkami. Takéto LED pásiky majú viacero spôsobov vyhotovení, od klasických LED pásov (Obr. 4) cez vianočné reťaze až po LED diódy v tvare kružnice či maticovej obrazovky.

Vďaka individuálnej adresovateľnosti LED pásika je možne na ňom vytvárať rôzne druhy viacfarebných animácií. Tie sú najmä pre žiakov základných škôl veľmi motivujúce a často si sami vymyslia vlastnú animáciu.

Pri takejto aktivite žiaci najprv analyzujú postupnosť krokov, ktoré treba vykonať a následne vytvoria postupnosť príkazov využitím cyklov, pomocných premenných, podmienok a vetvenia. Tento proces rozvíja u žiakov algoritmické riešenie problémov. Nespornou výhodou je možnosť overiť si správnosť algoritmu spustením kódu na LED pásiku. S prihliadnutím na cieľové požiadavky predmetu informatika podľa iŠVP je táto aktivita vhodná pre žiakov siedmeho a ôsmeho ročníka základných škôl.

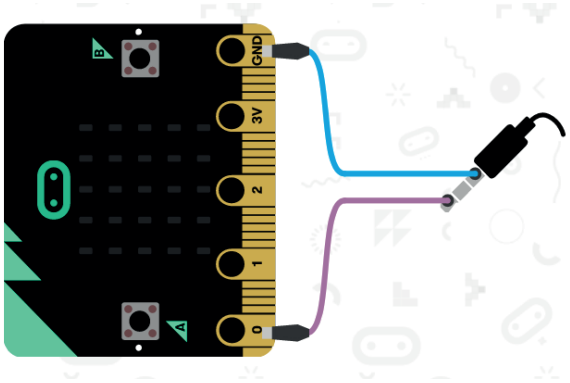
3.3 Banánový klavír

V tejto aktivite prepájajú žiaci softvér nie len s hardvérom, ale aj s hudobným umením. Znalosť notového zápisu je výhodou, avšak nie podmienkou. Podľa iŠVP pre predmet Hudobná výchova žiak na konci šiesteho ročníka dokáže zahrať tóny podľa notového zápisu. Samotná aktivita sa skladá z troch častí: z prehrávania hudby, zo zisťovania dotyku banánového klávesu a z prepojenia týchto dvoch častí a teda banánového klavíra. Okrem zariadenia BBC micro:bit sú potrebné káble s krokosvorkami, reproduktor, banán a alobal. Aktivitu je možné realizovať v obidvoch spomínaných prostrediach, v tejto časti popíšeme riešenie pomocou jazyka MicroPython a prostredia Mu.

Listing 1: Ukážka programu na prehrávanie zvuku

```
import music
tune = ["C4:4", "D4:4", "E4:4"]
music.play(tune)
```

Prehrávanie zvuku je realizované pripojením reproduktoru k pinu číslo 0 (Obr. 5). Nie je potrebné žiadne špeciálne zariadenie, pomocou káblov s krokosvorkami je možné pripojiť akýkoľvek bežný reproduktor či slúchadlá. V rámci modulu music, ktorý je súčasťou štandartnej knižnice jazyka MicroPython, sa nachádza príkaz play, ktorého parametrom je zápis hudby vo forme zoznamu nôt. Každá nota má



Obr. 5: Pripojenie reproduktora

tiež určenú tóninu (prvé číslo za notou) a dĺžku (číslo za dvojbodkou).

V druhej časti si žiaci vyskúšajú zisťovanie hodnoty vstupu z jedného zo všeobecne použiteľných vstupno-výstupných pinov, napríklad k pinu 2. Ten pomocou káblu s krokosvorkami prepoja žiaci s banánom (druhú krokosvorku zapoja do banánu). Ďalším káblom prepoja pin GND kúskom predpripraveného alobalu, ktorý bude slúžiť ako elektróda. Ak sa žiak jednou rokou chytí alobalu a druhou banánu, zmení množstvo elektrického náboju na pine 2 a túto zmenu vieme zistiť pomocou príkazu *pin2.is_touched()*, ktorý vráti hodnotu *True*, ak sa banánu žiak dotýka, a *False*, ak nie. Pri tejto úlohe je možné požiadať dvojice žiakov, aby sa jeden dotkol elektródy z alobalu, druhý banánu a následne sa dotkli voľnými rukami, čím uzavrú obvod a zmenia stav na pine 2.

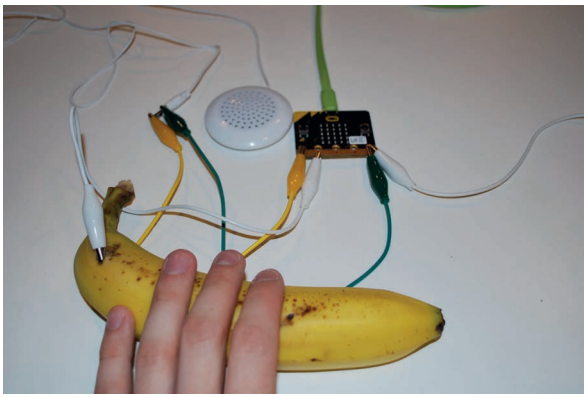
Listing 2: Kód pre banánový klavír

```
from microbit import *
import music

tune = ["C4:4", "D4:4", "E4:4"]
i = 0

while True:
    if pin2.is_touched():
        music.play(tune[i])
        i += 1
        if i == len(tune):
            i = 0
```

V poslednej časti aktivity majú žiaci tieto dve funkcionality prepojiť, a síce v nekonečnej slučke kontrolovať dotyk banánu a v prípade pravdivej hodnoty



Obr. 6: Snímanie dotyku ovocia

následne prehrať jeden tón.

Doplňujúcou úlohou môže byť vytvorenie ľudskej reťaze pri stláčaní banánového klávesu, alebo skúšanie vodivosti ďalších objektov, ako napríklad kovový príbor či iné druhy ovocia. Žiaci tak zisťujú rozdiel medzi vodivými a nevodivými objektmi.

3.4 Bezdrôtová komunikácia

Nasledujúca aktivita približuje žiakom princípy bezdrôtovej komunikácie, komunikačných protokolov a poukazuje na zraniteľnosti nešifrovanej komunikácie. Na jej realizáciu potrebujeme iba BBC micro:bit.

Zariadenie BBC micro:bit podporuje dva spôsoby bezdrôtovej komunikácie - Bluetooth s mobilnými telefónmi a rádiovú komunikáciu s inými zariadeniami BBC micro:bit. Práve druhý spomínaný je preferovaný, nakoľko Bluetooth nie je možné používať s jazykom MicroPython. Rádiová komunikácia je implementovaná veľmi jednoduchým spôsobom (najmä v jazyku MicroPython), čiže vysielajúce zariadenie pošle správu a všetky ostatné zariadenia v okolí ju môžu prečítať.

Pri prvej úlohe žiaci sformujú dvojice a určia si, ktorý žiak bude informácie vysielať a ktorý ich bude prijímať. Každý má k dispozícii jedno zariadenie BBC micro:bit, jeden zo žiakov pripravuje vysielač, na ktorom sa po stlačení tlačidla vyšle informácia, a druhý žiak prijímač, ktorý podľa prijatej informácie mení obrázok zobrazený na obrazovke. Po ukážke rádiového prenosu sú vyzvaní k tomu, aby si v rámci dvojíc vytvorili vlastný protokol, ktorý zabezpečí to, aby prijímacie zariadenia počúvali iba im určené príkazy, a teda aby nevznikali kolízie. Nadstavbou na túto úlohu môže byť spísanie jednoduchej špecifikácie svojho protokolu. Tie si potom jednotlivé dvojice náhodne povymieňajú a budú mať za úlohu implementovať protokol inej dvojice. Na záver sa v spoločnej diskusii žiaci majú dopracovať k špecifikácii jedného protokolu, ktorý budú môcť použiť všetky dvojice bez toho, aby medzi nimi nastávali kolízie.

Druhá úloha nadväzuje na prvú, avšak zameriava sa na zraniteľnosť nešifrovanej komunikácie. Učiteľ na projektore spustí program, ktorý cez sériovú konzolu REPL začne vypisovať všetky správy, ktoré medzi sebou zariadenia BBC micro:bit posielajú. Náhodne skopíruje obsah nejakej správy a cez rádiový komunikáciu ju vyšle zo svojho zariadenia, tváriac sa ako vysielač, čím zmení stav jedného z prijímacích zariadení. Je pravdepodobné, že šikovnejší žiaci si tohto bezpečnostného nedostatku všimnú už počas predchádzajúcich úloh. Úloha prezentuje zraniteľnosť nešifrovanej komunikácie a dôležitosť šifrovacích algoritmov v komunikácií. Príkladom aplikácie z reálneho života sú bežne používané protokoly pre web stránky HTTP (nešifrovaný) a HTTPS (šifrovaný). Učiteľ môže následne priamo v prehliadači ukázať, ktoré bežne používané stránky sú zabezpečené a ktoré nie.

Ak to povoľuje úroveň znalostí žiakov, ďalšou aktivitou je návrh a implementácia vlastného šifrovacieho protokolu v rámci dvojice. Jednoduchým príkladom môže byť Cézarova šifra (posun o n písmen v abecede). Podobne ako pri komunikačných protokoloch odporúčame diskusiu, v ktorej žiaci zhodnotia riziká jednotlivých protokov s cieľom nájsť spôsob, ako šifru prelomiť.

Samotná aplikácia, ktorú žiaci spínajú nemusí byť iba obrazovka zariadenia, ale napríklad robot, pri ktorom každé ovplyvnenie nechcenými správami viditeľne ovplyvní dráhu robota. Ďalšou možnosťou je bzučiak, ktorý simuluje diaľkový alarm a narušenie ktorého by v reálnom živote bolo veľmi nežiadúce.

Táto aktivita približuje riziká nešifrovanej a slabo zabezpečenej komunikácie na internete a sociálnych sieťach, a tak napomáha k napĺňaniu vzdelávacích cieľov iŠVP, častí *Softvér a hardvér - práca proti vírusom a špehovaniu* a *Informačná spoločnosť - bezpečnosť a riziká*.

4 Semináre pre učiteľov

V rámci snahy o popularizáciu harvérových platforiem vo vzdelávacom systéme sme zorganizovali sériu seminárov pre žiakov, širokú verejnosť a učiteľov

informatiky. Od účastníkov sa neočakávali predchádzajúce znalosti zapájania hardvéru ani programovania. Cieľom seminárov nebolo prehlbovať vedomosti v programovaní, ale interaktívnou formou priblížiť učiteľom informatiky rôzne druhy aktivít s hardvérom a predstaviť dostupné materiály.

Pri seminároch sme postupovali podľa nami vytvoreného materiálu [Mansell, 2018], ktorého aktivity sú čiastočne popísané v predchádzajúcej sekcii. Kým prvá aktivita "Ahoj Svet!" bola vykonávaná v online prostredí MakeCode, pri nasledujúcich aktivitách učitelia využívali editor Mu.

Z organizačného hľadiska bolo potrebné zabezpečiť dostatočný počet počítačov, ktoré môžu účastníci počas semináru využívať. Taktiež pripraviť všetok potrebný hardvér: zariadenia BBC micro:bit, USB micro káble, káble s krokosvorkami, LED pásiky, reproduktory, alobal a ovocie. Semináre pri menšom počte účastníkov viedol jeden lektor, ale pri viac ako desať účastníkov boli prítomní aj pomocní lektori.

Realizovali sme tri semináre pre učiteľov a študentov učiteľstva, spolu s približne 45 účastníkmi a tiež päť seminárov so žiakmi 7. a 8. ročníka ZŠ a jeden seminár pre záujemcov - širokú verejnosť. Približná dĺžka trvania seminárov bola 2,5 hodiny, avšak doba trvania bola závislá od počtu účastníkov ako aj počtu pomocných lektorov. Podľa našich zistení dokáže skúsený lektor sám viesť najviac 12 účastníkov, s jedným pomocným lektorom najviac 20.

V spätnej väzbe, ktorá mala formu online formulárov, hodnotili účastníci semináre zväčša pozitívne a označili ich za *"inšpiratívne"* a *"objavné"*. Najviac pozitívne bola hodnotená aktivita s bezdrôtovou komunikáciou (s dôrazom na aspekt bezpečnosti v bezdrôtovej komunikácií) a taktiež tvorba animácií na NeoPixel LED pásiku. Najmenej populárnou aktivitou bolo prehrávanie hudby a tvorba banánového klavíru, avšak táto aktivita je veľmi kladne hodnotenou pri seminároch so žiakmi. Medzi učiteľmi bolo taktiež populárne prostredie Mu, ktoré je vhodné aj pri tvorbe programov v Pythone. Ako najväčší nedostatok bola najčastejšie uvádzaná absencia schém zapojenia káblov k zariadeniu.

5 Záver

V článku sme predstavili hardvérovú platformu BBC micro:bit, štyri aktivity vhodné na hodiny informatiky a taktiež semináre s hardvérom pre učiteľov informatiky.

Vzhľadom na rôznorodosť aktivít sa zvyšuje pravdepodobnosť, že žiakov obsah hodín zaujme a motivuje. Fyzický aspekt hardvéru, a teda možnosť chytiť si preberané učivo, je u žiakov mimoriadne populárny. Toto je viditeľné najmä u aktivít s pripájaním zariadení ako sú reproduktory či LED pásiky, kedy žiaci spontánne vykrikujú slová ako: "ono to svieti!", "to je fakt husté!" či "to je super!".

Poďakovanie

Príspevok vznikol na základe iniciatívy Učíme s Hardvérom [Spy o.z, 2018]

Literatúra

[BBC, 2017] BBC (2017). New bbc stats reveal micro:bit impact. http://microbit.org/en/2017-07-07-bbc-stats/.

[Bers et al., 2014] Bers, M. U., Flannery, L., Kazakoff, E. R., and Sullivan, A. (2014). Computational thinking and tinkering: Exploration of an early childhood robotics curriculum. *Computers Education*, 72:145 – 157.

[Mansell, 2018] Mansell, M. (2018). micro:bit workshop pre učiteľov. http://micropython.sk/microbit.

[Sentance et al., 2017] Sentance, S., Waite, J., Yeomans, L., and MacLeod, E. (2017). Teaching with physical computing devices: The bbc micro:bit initiative. In *Proceedings of the 12th Workshop on Primary and Secondary Computing Education*, WiPSCE '17, pages 87–96, New York, NY, USA. ACM.

[Spy o.z, 2018] Spy o.z (2018). Učíme s hardvérom. http://micropython.sk/microbit/ucime-s-hardverom.pdf.

[Veselovská and Mayerová, 2018] Veselovská, M. and Mayerová, K. (2018). Lego wedo curriculum for lower secondary school. In Lepuschitz, W., Merdan, M., Koppensteiner, G., Balogh, R., and Obdržálek, D., editors, *Robotics in Education*, pages 53–64, Cham. Springer International Publishing.

[Štátny pedagogický ústav, 2014] Štátny pedagogický ústav (2014). Informatika - nižšie stredné vzdelávanie. http://www.statpedu.sk/files/articles/dokumenty/inovovany-statny-vzdelavaci-program/informatika_nsv_2014.pdf.

[Štátny pedagogický ústav, 2016] Štátny pedagogický ústav (2016). Metodické usmrnenie č. 1/2016. http://www.statpedu.sk/files/articles/nove_dokumenty/inovovany-statny-vzdelavaci-program/metodicke_usmernenie_c_1_2016.pdf.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, pp. 298–301
ISBN 978-8081470882, © 2018 Eva Klimeková

Transformácia učiteľov na vyučovanie základov programovania v jazyku Python

Eva Klimekova[1]*
Školiteľ: Monika Tomcsányiová[1‡]

[1] Katedra základov a vyučovania informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

V príspevku predstavíme výskum, v ktorom skúmame prechod učiteľov na nový programovací jazyk. Na základe analýzy zrealizovaných emailových rozhovorov navrhneme kategorizáciu transformácie. Podrobne popisujeme jednotlivé kroky, ktorými učitelia prechádzajú počas prechodu na nový programovací jazyk. Taktiež popisujeme výsledky zrealizovaného dotazníka na širšej vzorke učiteľov, pomocou ktorého posilníme nami navrhnuté kategórie prechodov učiteľov na nový programovací jazyk.

Kľúčové slová: Transformácia, Vyučovanie programovania, Python

1 Úvod

Programovací jazyk Python sa dostáva do popredia a univerzity a stredné školy postupne prechádzajú na vyučovanie základov programovania v tomto jazyku. V období, keď sme s naším výskumom začínali, sa tento proces práve rozbiehal aj na Slovensku. Neexistovali školenia pre učiteľov o jazyku Python, ani podporné metodické materiály pre vyučovanie programovania v tomto jazyku. Postupne sa ale tento stav menil, časom pribúdali udalosti pre učiteľov, materiály a školenia. V našom výskume sme sa venovali skúmaniu tohto procesu, transformácii učiteľov na nový programovací jazyk.

2 Analýza príbehov učiteľov

Počas nášho výskumu sme systematicky vyhľadávali učiteľov, ktorí sa v tom čase začínali zaujímať o jazyk Python a o to, či by bol tento jazyk vhodný na vyučovanie základov programovania pre žiakov na strednej škole. Takto sme vyhľadali a následne nadviazali emailovú komunikáciu s dvadsiatimi učiteľmi stredných škôl. Počas dlhšieho obdobia sme sa na týchto učiteľov opakovane obracali a zisťovali sme aktuálne informácie o ich vyučovaní a o tom, ako prebieha ich transformácia na jazyk Python. Analýzou našej komunikácie s učiteľmi sme vytvorili kategorizáciu krokov, ktoré môže urobiť učiteľ v prípade, že sa rozhodne prejsť vo svojom vyučovaní na iný programovací jazyk.

Pre náš výskum sme si vybrali skupinu dvadsiatich učiteľov, ktorí učili na rôznych stredných školách vo väčších, ale aj menších mestách na Slovensku. V skupine sme mali sedemnásť učiteľov z gymnázií a troch zo stredných odborných a priemyselných škôl.

Z pohľadu nášho výskumu bolo pre nás zaujímavé, ako sa zoznámili s jazykom Python, aké podnety ich priviedli k prechodu na nový jazyk a podľa akých materiálov učia. Podľa ich odpovedí a analýze ich príbehov prechodu na nový programovací jazyk, sme sa snažili nájsť spoločné, resp. odlišné, črty a tak navrhnúť kategorizáciu prechodov učiteľa na nový programovací jazyk.

Po analýze dát sme identifikovali tri základné kroky, ktoré môžu byť súčasťou prechodu učiteľa na vyučovanie v novom programovacom jazyku:

1. Podnet k prechodu na nový jazyk.
2. Osvojenie si jazyka.
3. Príprava a realizácia vyučovania v novom programovacom jazyku.

Tieto kroky môžeme deliť podľa ďalších kritérií, čím nám vzniknú rôzne formy prechodov.

2.1 Podnet k prechodu

Prvým krokom k prechodu učiteľa na nový programovací jazyk je podnet, ktorý ho bude viesť k rozhodnutiu, či má alebo nemá prejsť na nový programovací jazyk. V našom výskume nás zaujímali len učitelia, ktorí sa nakoniec rozhodli, že absolvujú transformáciu na nový programovací jazyk.

Do skupiny učiteľov, ktorú sme skúmali, patrili aj učitelia, ktorí už dlhšie hľadali nový jazyk na vyučovanie programovania, pretože jazyk (Pascal) alebo jeho programovacie prostredie (Lazarus), ktorý teraz používali, im z rôznych dôvodov nevyhovoval. Medzi skúmanými učiteľmi boli aj takí, ktorí sami sledovali aktuálne trendy vyučovania programovania. Zachytili, že medzi jazykmi, pomocou ktorých sa môžu žiaci naučiť základy programovania, sa v súčasnosti objavil aj jazyk Python. Takýmto spôsobom sa zoznámili

* klimekova@fmph.uniba.sk
‡ tomcsanyiova@fmph.uniba.sk

s jazykom Python, ktorý ich natoľko zaujal, že sa rozhodli prejsť na tento jazyk aj vo svojom vyučovaní. Medzi učiteľmi, s ktorými sme komunikovali, boli aj takí, ktorých k prechodu na nový programovací jazyk podnecovali ich súčasní alebo bývalí žiaci, či kolegovia. Napokon, najmä tí učitelia, ktorí absolvovali školenie jazyka Python, sa nám zdôverili, že prvým podnetom k ich prechodu na nový jazyk bola práve ponuka školenia alebo to, že sa objavila učebnica jazyka Python.

Medzi skúmanými učiteľmi sme teda identifikovali tri hlavné podnety:

- vlastný – sledovanie aktuálneho trendu,
- z blízkeho okolia – na základe odporúčaní žiakov, absolventov alebo kolegov,
- externý – ponuka školenia alebo učebnice.

2.2 Osvojenie si nového programovacieho jazyka

Druhým krokom k prechodu učiteľa na nový programovací jazyk je osvojenie si tohto jazyka, inými slovami naučenie sa jazyka a získanie vlastných skúseností riešením úloh v tomto programovacom jazyku. Táto fáza transformácie učiteľa môže byť rôzne dlhá a môže mať u jednotlivých učiteľov pomerne odlišný priebeh.

Na základne analýzy komunikácie s učiteľmi sme identifikovali nasledujúce typy osvojovania si jazyka:

- samoštúdium – rôzne materiály z internetu, knihy jazyka Python, konkrétny online kurz
- samoštúdium a neskôr absolvovanie školenia pre učiteľov,
- absolvovanie školenia pre učiteľov a ďalšie samoštúdium,
- absolvovanie školenia (bez samoštúdia).

V našom výskume sme zisťovali, aké dôvody majú učitelia, keď sa rozhodujú, či si osvojiť nový programovací jazyk pomocou samoštúdia alebo či sa zúčastniť školenia. Medzi dôvodmi pre absolvovanie školenia uvádzali nedostatok času, či „*vstrebať niečo na kurze je príjemnejšie a samozrejme pohodlnejšie než samoštúdium*“. Ako dôvod voľby samoštúdia uviedli napríklad potrebu doplnenia vedomostí po školení alebo vlastný štýl učenia sa. Jedna pani učiteľka sa predošlé programovacie jazyky učila formou samoštúdia, avšak teraz sa zúčastnila školení. Hneď po školení prešla na tento jazyk, pričom pri vyučovaní využívala materiály zo školenia (t. j. nevytvárala si vlastné materiály).

2.3 Príprava a realizácia vyučovania

Tretím krokom v procese transformácie učiteľa na nový programovací jazyk je samotná príprava a realizácia vyučovania. V našom výskume sme sa sústredili na dve základné kritériá: podľa obdobia prípravy učiteľa v súvislosti s vyučovaním a podľa materiálov, ktoré používa pri vyučovaní.

Podľa obdobia prípravy učiteľa na vyučovanie môžeme rozdeliť učiteľov na dva typy:

- vopred pripravený učiteľ – vytvoril si vlastné materiály na vyučovanie na celý rok (polrok) dopredu a tie používa alebo používa bez zmeny úlohy a zadania z učebnice, ktoré pozná zo školenia,
- priebežne z hodiny na hodinu – učiteľ si v rámci prípravy na každú vyučovaciu hodinu vytvára vlastné materiály.

Rozlišujeme teda prípady, keď si učitelia najprv pripravili vlastné materiály na vyučovanie, či už cez letné prázdniny alebo počas školského roka, rok alebo pol roka pred samostatným vyučovaním programovania v novom jazyku. Do tohto typu môžeme tiež zahrnúť učiteľov, ktorí absolvovali školenie a rozhodli sa postupovať pri vyučovaní podľa materiálov zo školenia bez zmeny. Počas nášho výskumu sme boli v kontakte aj s učiteľmi, ktorí sa pripravovali samostatne na vyučovanie v novom jazyku formou samoštúdia, pričom si postupne vytvárali vlastné materiály pre vyučovanie, alebo existujúce materiály upravovali podľa vlastných požiadaviek. Títo učitelia uviedli, že sa pripravovali približne dve-tri vyučovacie hodiny dopredu.

Rozdiel sme si všimli aj pri použitých materiáloch. Učitelia si buď postupne vytvárali vlastné materiály prípadne upravovali iné materiály pre vlastnú potrebu, alebo si vybrali a použili niektorý dostupný materiál. Niektorí učitelia si cez letné prázdniny pripravili plán vyučovania a vlastné materiály. V čase začiatku nášho výskumu ešte neexistovala oficiálna učebnica pre vyučovanie základov programovania pre stredné školy. Prístupné boli rôzne materiály z internetu a materiály niektorých učiteľov [Blaho, 2016], [Belan, 2013],[Kučera, 2016],[Mészárosová, 2017].

Pri realizácii vyučovania môžeme teda rozlišovať rôzne typy použitých materiálov:

- učebnica, resp. materiály zo školenia.
- učebnica a vlastné úlohy,
- vlastné materiály upravené na nový programovací jazyk,
- viac materiálov, z každého časť,
- konkrétne materiály z internetu.

Analýza príbehov učiteľov ukázala, že nami identifikované tri kroky transformácie učiteľov na vyučovanie programovania v novom jazyku a ich ďalšie členenie na typy, nám spolu definujú niekoľko kombinácií foriem prechodov. Tieto formy prechodov ďalej dopĺňajú aspekty a faktory, ktoré ovplyvňujú tento proces a tým vytvárajú nové, jedinečné príbehy transformácií.

3 Dotazník

Na základe preskúmania komunikácie s učiteľmi a ich príbehov prechodov na nový jazyk sme vytvorili kategórie, ktoré sme sa však rozhodli posilniť zrealizovaním dotazníka. Dotazník vyplnilo 103 učiteľov z celého Slovenska, a traja z Česka, z rôznych typov škôl: gymnázium, stredná odborná škola, stredná technická škola i základná škola. Boli zastúpené všetky vekové kategórie učiteľov: do 10 rokov praxe pri vyučovaní programovania malo 51% učiteľov, medzi 10 a 20 rokov malo 32% respondentov, medzi 20 a 30 rokov praxe 13% opýtaných a medzi 30 a 36 rokov praxe 4% učiteľov. Cieľom realizácie dotazníka nebolo len potvrdenie vytvorenej kategorizácie, ale aj hľadanie nových kategórii prechodov, typov podnetov, učenia sa jazyka, či prípravy učiteľa na vyučovanie. Pýtali sme sa učiteľov aj na ťažkosti, s ktorými sa stretli počas ich prechodu na nový jazyk alebo na pomôcky, ktoré im pomohli, alebo aké by potrebovali, k plynulej transformácii. Otázky sme sformulovali na základe výsledkov z analýzy získaných dát emailovými rozhovormi so skupinou učiteľov z prvej časti tohto príspevku.

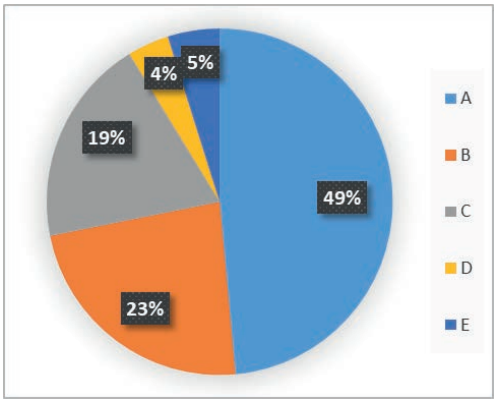
Na otázku *Aké podnety Vás k prechodu na iný programovací jazyk viedli?* sme učiteľom poskytli v dotazníku možnosť vybrať si z odpovedí:

- sledovanie aktuálneho trendu (89,3% respondentov),
- žiaci/rodičia žiakov si vyžadovali zmenu programovacieho jazyka (14,6 %),
- ponuka školenia alebo materiálov (22,3 %).

Mali však aj na výber možnosť *Iné*, kde mohli zadať svoj vlastný podnet. Dostali sme odpovede ako napríklad: „*potreba rozvíjať sa*“, „*Grafika, objekty*“, „*Souvislost s reálným životem a tím, v čem se dnes programuje*“. Z toho vyplýva, že väčšina opýtaných učiteľov bola motivovaná práve aktuálnym trendom a vonkajšími vplyvmi od blízkeho okolia. Tento výsledok je nadmieru pozitívny, keďže ukazuje snahu učiteľov k udržaniu alebo zvýšeniu kvality vyučovania, ktorá je orientovaná na budúcnosť žiaka napriek tomu, že učiteľom sa tak niekoľkonásobne zvýšil čas prípravy na vyučovacie hodiny.

Učiteľov sme sa v dotazníku spýtali aj otázku: *Ako ste sa učili nový programovací jazyk?* Mali na výber možnosti:

A. samoštúdium - rôzne materiály z internetu, konkrétny online kurz alebo iné materiály
B. samoštúdium a neskôr absolvovanie školenia pre učiteľov
C. absolvovanie školenia pre učiteľov a ďalšie samoštúdium
D. absolvovanie školenia (bez samoštúdia)
E. Iné



Obr. 1: Graf k otázke *Ako ste sa učili nový programovací jazyk*

Z dotazníka vyplýva, že u učiteľov prevažuje forma samoštúdia v kombinácii s absolvovaním školenia. Takisto veľká časť učiteľov označila formu samoštúdia bez absolvovania školenia s lektorom. Malé percento respondentov označilo možnosť absolvovanie školenia bez ďalšieho samoštúdia. Učitelia však zvolili aj možnosť *Iné*, kde písali napríklad o knihách o jazyku, alebo o tom, že prežili viackrát transformáciu na iný programovací jazyk, pričom sa učili nový jazyk rôznymi spôsobmi. Z toho nám vplýva, že učitelia nevolia formu štúdia nového jazyka len na základe osobných preferencií, ale aj na základe práve dostupných možností.

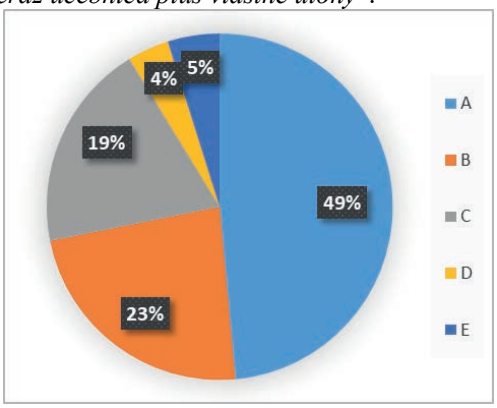
V dotazníku sme tiež položili otázky týkajúce sa prípravy a realizácie vyučovania. Na otázku *Ako prebieha Vaša príprava na vyučovanie v novom programovacom jazyku?* viac ako polovica (61%) učiteľov odpovedala, že sa pripravuje priebežne z hodiny na hodinu – v rámci prípravy na každú vyučovaciu hodinu si vytvára vlastné materiály. K druhému definovanému typu vopred pripravený učiteľ sa prihlásil zvyšok učiteľov. Takisto mohli zadať aj *Inú* možnosť. V tejto možnosti učitelia uviedli aj kombináciu týchto možností: vopred si pripravili materiály avšak tie menia priebežne popri vyučovaní podľa toho ako postupujú so žiakmi.

Pre otázku *Podľa akých materiálov postupujete pri vyučovaní po prechode na nový jazyk?* mohli učitelia voliť z nasledujúcich možností:

A. učebnica doplnená vlastnými úlohami
B. učebnica, resp. materiály z kurzu pre učiteľov
C. viac materiálov, z každého používam časť, ktorá sa mi hodí
D. výhradne vlastné materiály upravené na nový programovací jazyk
E. iné

Skoro polovica učiteľov označila, že pri vyučovaní používajú viac materiálov, z každého časť, ktorá sa im hodí. Ďalej s menšími percentami sa vyskytli odpovede, v ktorých si vybrali učebnicu alebo učebnicu doplnenú vlastnými úlohami, ale aj

vlastné materiály upravené na nový programovací jazyk. Pre možnosť *Iné* sa rozhodol učiteľ, ktorý uviedol „*predtým viac materiálov plus vlastné úlohy, teraz učebnica plus vlastné úlohy*“.



Obr. 2: Graf k otázke *Podľa akých materiálov postupujete pri vyučovaní po prechode na nový jazyk*

Pomocou dotazníka sme tiež chceli zmapovať problémy a ťažkosti, s ktorými sa učitelia stretli počas transformácie. Položili sme im preto dve otázky: *Aké najväčšie problémy ste mali pri zmene programovacieho jazyka?* a *Stručne opíšte, aké ťažkosti ste zažili pri prechode na nový jazyk.*

Pre prvú otázku sme im poskytli možnosti, ktoré vyplývali z analýzy emailovej komunikácie so skupinou dvadsiatich učiteľov popísanej v predošlej časti.

- Málo materiálov, metodík, učebníc a testov v slovenskom jazyku. (54,6%)
- Nedostatok školení/kurzov pre učiteľov. (39,2%)
- Nemám dostatok času na naučenie sa nového jazyka. (37,1%)
- Problém s podporou zmeny jazyka medzi kolegami na škole. (15,5%)

Pomocou možnosti *Iné* sme chceli nájsť možné problémy, s ktorými sme sa počas analýzy skupiny učiteľov nestretli. Odpovede pre druhú otázku sú rovnakého charakteru ako pre otázku týkajúcu sa ťažkostí pri prechode, preto tieto odpovede skúmame spoločne. Učitelia popisovali ich problémy a ťažkosti týkajúce sa nedostatku času, či už na štúdium nového jazyka, alebo na prípravu materiálov na vyučovanie. Tiež sa nám zdôverili s problémami vzniknutými charakteristikou nového jazyka ako napríklad: „*Komplexita programovacieho jazyka, chýbali niektoré integrované funkcie z Pascal, Delphi v C++*“, „*Chybové hlásenia, o ktorých som nevedel, čo znamenajú, zámena syntaxe pri písaní programu*“, ale aj „*zlozvyky*" z predchádzajúcich prostredí. Medzi ťažkosťami uviedli aj chýbajúcu spoluprácu s ostatnými učiteľmi, ako napríklad „*odkázanosť sama na seba, nemám možnosť konzultovať svoje postupy s kolegami*. Tiež spomenuli ťažkosti pri štúdiu jazyka: „*Školenia ak boli, prichádzali neskoro a často by som preferovala do väčšej hĺbky*“, „*Chýbajú detailné školenia - sú len krátke, povrchné a zostaneme po nich len začiatočníci, aj keď sme celkom zruční v programovaní v inom jazyku. Je to potom ťažké dobiehať samoštúdiom.*“, „*Pri riešení náročnejších úloh a narazení na problém zdĺhavé hľadanie riešenia vo fórach*“.

Otázkami o ťažkostiach a potrebných pomôckach pre učiteľov sme sledovali dva ciele. Prvým bolo zistiť, aké faktory vplývajú na proces prechodu učiteľa na nový programovací jazyk, druhým bolo zistiť, akým spôsobom pomôcť učiteľom pri prechode na vyučovanie programovania v jazyku Python. Dotazníkom sme chceli zistiť aj to, či sa nájdu aj také kategórie, s ktorými sme sa nestretli počas skúmania skupiny učiteľov, avšak dotazník ukázal aj na širšej vzorke učiteľov, že tieto kategórie pokrývajú príbehy prechodov aj širšej skupiny učiteľov a nebolo teda potrebné rozširovať nami navrhnuté kategórie o ďalšie. Môžeme konštatovať, že výsledky tejto časti nášho výskumu potvrdili náš názor na potreby učiteľov pri prechode na nový programovací jazyk.

4 Záver

V našom príspevku sme popísali proces prechodu učiteľov na nový programovací jazyk. Našu výskumnú skupinu tvorilo dvadsať učiteľov, s ktorými sme viedli emailové rozhovory a tak sme získali cenné informácie o priebehu ich prechodu na jazyk Python. Na základe analýzy zozbieraných dát sme navrhli kategorizáciu procesu transformácie učiteľov na nový programovací jazyk. Následne sme realizovali dotazník, pomocou ktorého sme túto kategorizáciu overili. Preštudovaním transformácie širšej skupiny učiteľov sme získali prehľad o tom, akým spôsobom prechádzajú učitelia vo svojom vyučovaní na nový programovací jazyk.

Literatúra

[Blaho, 2016] Programovanie v Pythone 1 (prednášky k predmetu Programoanie (1). [Online] 2016. [Dátum: 30. 9. 2016.] Dostupné na: www.input.sk.

[Belan, 2013] Python, učebný text pre septimu osemročného gymnázia, 2013, ŠPMNDaG http://www.smnd.sk/anino/moje/Python.pdf

[Kučera, 2016] Programujeme v Pythone, učebnica informatiky pre stredné školy, 2016, ISBN 978-80-972320 (pdf)

[Mészárosová, 2017] Python a korytnačia grafika. Metodický materiál pre vyučovanie základov programovania pre gymnáziá. Knižničné a edičné centrum, FMFI UK, Bratislava, 2017. ISBN 978-80-8147-080-6

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 302
ISBN 978-8081470882, © 2018 Adrián Matejov

GTA Monitor: Automatické monitorovanie priebehu vyučovacích aktivít (rozšírený abstrakt)

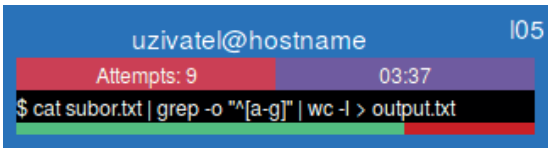
Adrián Matejov[1*]

Školiteľ: Marek Nagy[2†]

[1] Katedra informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2] Katedra aplikovanej informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Tento príspevok vychádza zo skúseností z akademického roka 2016/2017, kedy si kurz Linux pre používateľov na FMFI UK zapísalo 90 študentov. Študenti riešili úlohy, ktorými ich sprevádzala aplikácia go-term-adventures (GTA) [Šuppa and Jariabka, 2017]. Na cvičeniach sa väčšinou snažilo pomáhať 6 cvičiacich. Študenti riešili úlohy a často sa stávalo, že potrebovali pomôcť a dlhšiu dobu sa neprihlásili. Pri tak veľkom počte študentov je ťažké zisťovať, kto sa zasekol na danej úlohe. Taktiež sa vyskytlo veľa problémov s príliš podobnými riešeniami a nemožnosť ich riešiť priamo na cvičení komplikovalo hodnotenie.

V našom príspevku predstavujeme administratívny a monitorovací systém, ktorý slúži na monitorovanie priebehu cvičenia, kde študenti pracujú v Linuxovom termináli. Systém sa snaží automaticky vyhodnocovať kritické situácie, upozorňovať vyučujúcich na neaktivitu študentov a automaticky obodovať riešenia. Takto dostáva učiteľ oveľa lepší prehľad o napredovaní študentov.



Obr. 1: Zobrazenie pokroku študenta na cvičení.

Aplikácia GTA odosiela informácie o úspešnom, ale aj neúspešnom vyriešení úloh na server, kde sú spracované. Následne sa v reálnom čase odošlú vyučujúcim, ktorí tak majú o každom študentovi prehľadné informácie (obrázok 1). Po cvičení môže vyučujúci zvoliť možnosť automatického obodovania riešení alebo prípadne manuálne ohodnotiť jednotlivé riešenia. Taktiež získa celkový prehľad o náročnosti jednotlivých úloh, ktoré sa vyskytli na cvičení, čo predstavuje nesmierne dôležitú spätnú väzbu. V budúcnosti sa vďaka týmto informáciám vyučujúci na prednáške môže viac sústrediť na to, s čím mali študenti najväčšie problémy. Aplikácia ponúka aj možnosť klasifikovať riešenia pomocou metódy K-means. Riešenia, ktoré sú si syntakticky podobné sa snaží zaraďovať do rovnakých zhlukov, čím vyučujúcemu priblížime rôzne zmýšľanie študentov pri riešení úloh.

Systém bol architektonicky navrhnutý ako webová aplikácia, čo prináša výhodu v tom, že vyučujúcemu stačí íba klasický webový prehliadač. Systém sme testovali na 10 cvičeniach, vďaka čomu sa podarilo opraviť niekoľko drobných chýb a pripraviť ho na použitie v budúcnosti.

Predstavený koncept automatického monitorovania priebehu cvičenia je tiež možné jednoducho abstrahovať od predstavenej aplikácie v kontexte Linuxového terminálu. Systém by sme vedeli rozšíriť aj na monitorovanie iných vyučovacích aktivít. Ako príklad uvádzame programovanie v programovacích jazykoch Python, Scratch, či C++. Mnohé z uvedených programovacích jazykov sa vyučujú s pomocou automatizovaných testov, ktoré kontrolujú správnosť riešenia jednotlivých úloh. Na to, aby sme vedeli monitorovať priebeh vyučovania, by bolo postačujúce implementovať odosielanie výsledkov testov do našej aplikácie.

Open-source implementácia nášho systému je dostupná na adrese `https://github.com/NaiveNeuron/gta-monitor`

Literatúra

[Šuppa and Jariabka, 2017] Šuppa, M. and Jariabka, O. (2017). go-term-adventures: Learning the *nix command line, text adventure style. In Brejová, B., Guričan, J., and Vinař, T., editors, *Proceedings of the Student Science Conference 2017*, page 245, FMFI UK, Bratislava. CreateSpace Independent Publishing Platform.

*ado.matejov@gmail.com
†mnagy@ii.fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 303
ISBN 978-8081470882, © 2018 Dana Šuníková

Mobilná hra na výučbu AVL stromov (rozšírený abstrakt)

Dana Šuníková[1]*

Školiteľ: Zuzana Kubincová[1]†

[1] Katedra základov a vyučovania informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

V posledných rokoch sa do popredia dostáva využívanie digitálnych hier v rámci vyučovania na všetkých úrovniach škôl. Výhodou tohto prístupu je okrem iného učenie sa nenásilným, zaujímavým spôsobom. Nakoľko je kvalitných edukačných hier - najmä pre vysokoškolákov - stále málo, rozhodli sme sa vymyslieť, implementovať a otestovať mobilnú hru na výučbu algoritmu vkladania nových vrcholov do AVL stromu [Wirth, 1976].

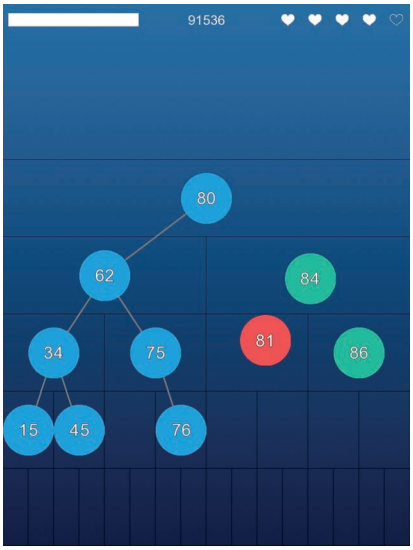
Po ozrejmení si cieľového publika edukačnej hry sme sa museli rozhodnúť, aký typ hry vyvinieme a aké herné prvky použijeme. Rozhodli sme sa pre logickú hru, nakoľko v nej vieme priamočiaro nechať používateľa vykonávať vybraný algoritmus – vkladanie prvkov do AVL stromov.

Algoritmus sme rozdelili do niekoľkých krokov, používateľ sa v hre učí algoritmus postupne, v každej úrovni sa pridá jeden z krokov do akcií, ktoré musí hráč vykonávať. Používateľ vykonáva algoritmus v zmysluplnom kontexte v rámci hry, čo napomáha učeniu [Van Eck, 2006].

Dôležitým prvkom hry je možnosť opakovania po zlej akcii, čo dáva hráčom pocit slobody a robí z chyby žiadaný prvok na preskúmavanie priestoru možností [Kapp, 2012]. Pokiaľ v našej hre používateľ spraví pri vkladaní vrchola chybu, vrchol sa nepridá a hráč má za úlohu skúsiť umiestniť vrchol s tým istým číslom znova. Takto nestráca nárok daný vrchol umiestniť aj keď sa mu to na prvýkrát nepodarilo.

Ďalším prvkom spoločným pre hry aj výučbu je spätná väzba [Kapp, 2012]. V našej hre je spätnou väzbou hlavne pripojenie vrchola na správne miesto po dobre vykonanom vložení do stromu a s tým spojené narastanie stromu na obrazovke, v prípade zlej akcie používateľa je to vibrácia mobilného zariadenia a strata herného života.

Po vypracovaní návrhu hry a jej implementácii v spolupráci s externým programátorom [Šuníková et al., 2018] sme pre ňu vyvinuli metodiku použitia na cvičeniach predmetu Algoritmy a údajové štruktúry, kde sme ju aj otestovali.



Obr. 1: Hra AVL Trees

Študenti pracovali samostatne, neodpisovali hotové riešenia z tabule, ale vytvárali ich v rámci hry sami. Napriek samostatnej práci sa medzi študentmi vyskytli interakcie týkajúce sa učiva. Z pozorovania, rozhovoru s vyučujúcou a z dotazníka sa zdá, že sa všetci zapájali do hodiny a zvládli dané učivo. Bonusom pre nich bolo, že ich tieto cvičenia naozaj bavili.

Literatúra

[Kapp, 2012] Kapp, K. M. (2012). *The gamification of learning and instruction: game-based methods and strategies for training and education*. John Wiley & Sons.

[Šuníková et al., 2018] Šuníková, D., Byrtus, M., and Kubincová, Z. (2018). Mobilná hra na výučbu avl stromov.

[Van Eck, 2006] Van Eck, R. (2006). Digital game-based learning: It's not just the digital natives who are restless. *EDUCAUSE review*, 41(2):16.

[Wirth, 1976] Wirth, N. (1976). *Algorithms+ Data Structures= Programs Prentice-Hall Series in Automatic Computation*. Prentice Hall.

*sunikova@st.fmph.uniba.sk

†kubincova@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 304
ISBN 978-8081470882, © 2018 Michal Vido, Monika Kúdelová

Edison robot (rozšírený abstrakt)

Michal Vido (vido8@uniba.sk)
Monika Kúdelová (kudelova29@uniba.sk)
Školiteľ: Karolína Mayerová (mayerova@fmph.uniba.sk)

Katedra základov vyučovania informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

V tejto práci prezentujeme využitie robota Edison na vyučovaní informatiky. Edison je jednoduchý programovateľný lego robot určený pre najmenších žiakov. Má schopnosť reagovať na svetlo, zvuk (tlesknutie), dokáže sledovať čiernu čiaru na podložke a dokonca prijímať správy od iných robotov. S prostredím interaguje zväčša pomocou dvoch motorov (jeden pre každé z dvoch kolies), ale tiež pomocou zvukových signálov, svetelných diód a posielaním jednoduchých správ pre iné roboty v blízkosti.

Edison je programovateľný pomocou programovacieho jazyka EdPy, založenom na jazyku Python, obohatenom o knižnicu príkazov robota. Ďalej pomocou prostredia EdBlocks, inšpirovaného programovacím jazykom Scratch, ktorý sa dá využiť pri vyučovaní základov programovania na základnej škole. Prostredie EdWare poskytuje prirodzený prechod medzi jednoduchosťou EdBlocks a silou EdPy. Nakoniec existuje možnosť programovať robota pomocou predpripravených čiarových kódov, pričom každý čiarový kód reprezentuje jeden jednoduchý program ako „sledovanie čiary," „odrážanie od stien" alebo „tlesknutím riadený pohyb."

Robota sme priniesli na záujmový krúžok, kde mali deti vo veku od osem do jedenásť rokov možnosť si ho prakticky vyskúšať. Roboty sme rozdelili medzi deti. Niektorí pracovali samostatne, iní vo dvojiciach alebo v trojiciach. Najskôr sme žiakov naučili programovať robota pomocou čiarového kódu. Všetky deti si ako prvý program vybrali „tlesknutím riadený pohyb," zrejme kvôli lákavému názvu a možnosti priamo interagovať s robotom. Žiakom sa v tom momente začal robot veľmi páčiť, čo potvrdzovali veľkým záujmom o prácu s robotom a výrazne pozitívnou reakciou. Žiaci si všímali aj nedostatky robota, najmä, čo sa týka reagovania na potlesk. Zistili, že presnejšie reaguje na jemné klepnutia priamo po robotovi. Niektorí žiaci tlieskali robotovi až do konca krúžku, iní (zväčša tí, ktorí pracovali v skupinách) sa po čase rozhodli vyskúšať aj ostatné čiarové kódy. Jedna skupina žiakov začala pri programe odrážania od stien stavať Edisona kolmo, lebo si mysleli, že steny deteguje pomocou spodného svetelného senzora.

Starší žiaci sa po odskúšaní všetkých čiarových kódov odvážili skúsiť robota programovať. Sami pripojili Edisona k počítaču pomocou priloženého kábla a spustili EdPy zo stránky uvedenej na obale. Po chvíli rezignovali na zložitosť tohto prostredia, lebo ešte nevideli Python a prišli sa spýtať, ako sa robot programuje pomocou počítača. Vtedy sme ich mohli naviesť na stránku EdBlocks, s ktorou už vedeli pracovať, keďže sa v nižších ročníkoch stretli so Scratchom. Preto by sme programovanie Edisona cez EdPy odporučili až žiakom vyššieho stupňa základných škôl. Programovacie prostredie EdBlocks je založené na ikonografickom programovaní, čo predstavuje veľmi dobrý úvod do programovania.

Programovanie Edisona pomocou EdBlocks nie je síce také spoľahlivé ako čiarové kódy, celkovo sa však ukázalo ako veľmi vhodné pre žiakov piateho ročníka základnej školy. Deti sa tešili zo samotného pohybu robota a neprekážala im jeho neschopnosť otáčať sa o presne zvolený uhol. Menej intuitívne boli paralelné procesy, keď žiaci naprogramovali Edisona tak, aby po spustení neprestajne blikal a čudovali sa, prečo nereaguje na potlesk. Prekvapivo rýchlo (počas jedného krúžku) sa žiaci dostali k funkcii odosielania správ, s ktorou sme mali problém aj my po niekoľkých hodinách práce s robotom. Túto funkciu považujeme za nespoľahlivú a príliš zložitú na prácu s malými deťmi.

Deti na krúžku sa nikdy predtým tak veľmi netešili z novej aktivity. Všeobecne možno zhodnotiť, že deti ocenili novú, zaujímavú a kreatívnu aktivitu. Robot Edison nám príjemne spestril hodinu a v deťoch vzbudil záujem o programovanie a robotiku. Starší žiaci mali možnosť skúšať a objavovať, mladší sa hrali s inteligentnou hračkou, no obe skupiny zistili, ako robot funguje, aké s ním majú možnosti a aké nepresnosti sú s ním spojené a ako je možné niektoré z nich odstrániť. Preto si myslíme, že aktivity podobného charakteru sa vo vzdelávacom procese javia ako efektívne, pretože výrazne zvyšujú logické myslenie a kreativitu u detí.

Literatúra

[Meet Edison, 2018] Meet Edison [online, 9.4.2018] https://meetedison.com/

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 305
ISBN 978-8081470882, © 2018 Patrik Furmánek

Moodle doplnok s prvkami gamifikácie na výučbu informatiky (rozšírený abstrakt)

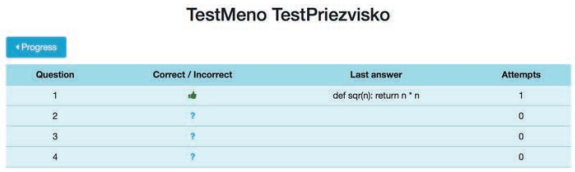
Patrik Furmánek[1]*
Školiteľ: Dana Šuníková[2]‡

[1] Katedra aplikovanej informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2]Katedra základov a vyučovania informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Cieľom tejto práce bolo navrhnúť a implementovať Moodle doplnok pre žiakov na stredných školách, využívajúci gamifikáciu. Gamifikácia je použitie herných prvkov v mimo herných kontextoch. Dobrým príkladom je schodisko do metra známe ako Piano Staircase, na ktorom každý schod zahrá určitú hudobnú notu akonáhle naň niekto stúpi. Štatistiky dokazujú, že o 66% viacej ľudí použilo toto schodisko než eskalátor. Doplnok je určený na vyučovanie informatiky a hravým spôsobom rozvíja algoritmické myslenie. Takisto aj uľahčuje prácu učiteľa, keďže doplnok si uchováva všetky informácie ohľadom odpovedí žiakov a to buď skupinovo alebo dokáže zobraziť úspešnosť, zoznam odpovedí a rovnako aj počet pokusov pre jednotlivca. Aktuálne je v štádiu riešenia reálne testovanie, ktoré chceme uskutočniť do konca apríla.

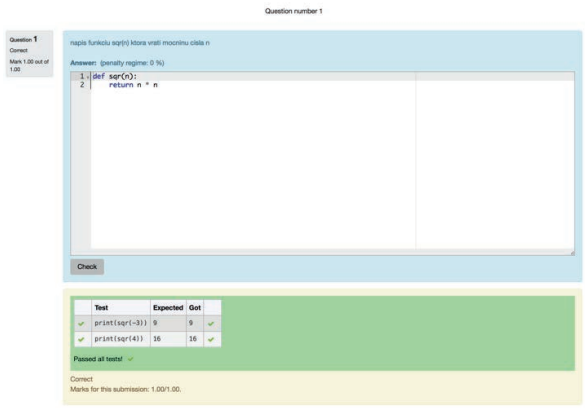
Prostredie je primárne určené na výučbu v programovacom jazyku Python ale momentálne podporuje aj ďalšie jazyky ako Java, C++ alebo C#. Doplnok je ľahko rozšíriteľný pre podporu akéhokoľvek predmetu, v ktorom chce učiteľ otestovať vedomosti žiakov pomocou kvízu, priraďovania správnych odpovedí alebo krátkych slovných odpovedí.

Základom programu je odpovedanie na otázky, ktoré sú vytvorené učiteľom a schválne zakrývajú obrázok taktiež nahratý učiteľom. Žiak buď odpovedá napísaním celej funkcie alebo len doplnením častí, ktoré boli schválne vynechané. Následne doplnok overí správnosť kódu pomocou testovacích scenárov. Na základe toho, či sa žiakove výstupy rovnajú s očakávanými, doplnok vyhodnotí otázku, zaznamená odpoveď a číslo pokusu na danú otázku. Ak odpoveď bola správna, otázka zmizne a tak odkryje časť obrázku, ktorú skrývala. Pri nesprávnej odpovedi žiak vidí, čo presne sa kontrolovalo a aké výstupy sa očakávali. Ďalej má žiak možnosť zobraziť si vlastný profil, v ktorom vidí svoj celkový postup ako počet pokusov, zodpovedané a nezodpovedané otázky. Keď žiak klikne na detail jednotlivých otázok, tak uvidí všetky jeho odpovede na danú otázku. Učiteľ má túto možnosť tiež, no s tým rozdielom, že vidí detaily všetkých žiakov, ktorých zapísal do tohto doplnku. Všetky uchovávané informácie sú prevedené aj do grafov, kvôli lepšiemu prehľadu.



Obr. 1: Zoznam zapísaných žiakov a ich progres

Doplnok bol vyvíjaný v programovacom jazyku PHP a je plne kompatibilný so systémom Moodle. To znamená, že je možnosť pomerne jednoducho doplnok rozšíriť o ďalšie funkcie, ktoré Moodle ponúka, napríklad známkovanie.



Obr. 2: Kontrola odpovede žiaka

Literatúra

[Deterding, 2011] Deterding, Sebastian, et al. "From game design elements to gamefulness: defining gamification."Proceedings of the 15th international academic MindTrek conference: Envisioning future media environments. ACM, 2011.

* patrikfurmanek1@gmail.sk
‡ sdanka9@gmail.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 306
ISBN 978-8081470882, © 2018 Eva Klimeková, Marek Mansell

Case study on physical computing with NodeMCU on summer school (Extended Abstract)

Eva Klimeková[1]* Marek Mansell[2†]
Supervisor: Michaela Veselovská[1‡], Karolína Mayerová[1]

[1] Katedra základov a vyučovania informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2] Fakulta Informatiky a Informačných Technológií, STU, Ilkovičova 2, 842 16 Bratislava

Physical computing in secondary schools takes advantage of robots, physical computing devices and constructionist toolkits in education, where researchers tend to focus on a variety of positive aspects of physical computing, such as motivation, creativity and cognitive load. The Python community has developed documentation for NodeMCU that is regularly used in introductory physical computing workshops organised by the community. Experience gained from previous workshops has suggested the possibility that this more advanced hardware could, in certain circumstances, be used in lower education, reducing the number of different platforms used by teachers. As organizers of a summer school for pupils aged 8 to 14, we decided to conduct a case study with NodeMCU, where we monitored pupil's reactions to activities with this device. Due to the fact we had no prior knowledge of the pupil's programming skills we prepared activities for computing novices.

We prepared a hardware kit to support the NodeMCU and provide the physical component of the workshop. In lieu of an educational software environment suitable for our workshop, we developed the ESPBlocks IDE. We also designed four activities which we conducted during our workshop:

1. Connect the device and light the LED
2. Blink the LED
3. Blink the S.O.S. sign
4. Changing colours in addressable LED strip

A case study was chosen as the main strategy and we used qualitative methods of data collection and data analysis. Our research was conducted through the use of a workshop of approximately 90-minute duration with sixteen pupils (7 girls, 9 boys), aged between 8 and 14.

According to results, we strongly suggest that physical computing education should be synchronized with the physics curriculum. In our opinion, activities with hardware configuration should be only introduced when pupils have gained the requisite academic and technical foundations, thus constraining the age at which the subject can be introduced, which in Slovakia would currently be 14. Consequently, we would recommend that pupils younger than 14 should be taught using preconfigured hardware that does not require knowledge of physics, such as the Micro:bit

Attention span should also be taken into consideration. The process of the device component connection and programming the LED to illuminate lasted approximately half an hour, which was too long for younger pupils who didn't comprehend the underlying physical concepts. This concludes that a single teacher, without assistance, cannot manage to check each pair's work before connecting the device to the computer on a 45 minutes long lesson.

Based on the pupils' reactions during the workshop, we believe that pupils who completed the workshop were excited, with those less enthusiastic about hardware configuration still excited by their experiences programming the LED strip.

While we wanted to show that the NodeMCU would be suitable for younger pupils, the frustrations caused to some by having to connect components before programming them suggests that an already preconfigured device, such as the Micro:bit, would be more suitable for engaging younger and less technically inclined pupils. However, this means teachers need a second platform for younger pupils, which is the opposite of what this research tried to prove.

We come to the conclusion that while this approach is not suitable for younger pupils, it did motivate pupils to continue programming and experimenting with physical computing.

References

[Klimekova et al.] Case study on physical computing with NodeMCU on summer school. In Proceedings of the 9th International Conference on Robotics in Education. To appear.

* eva.klimekova@fmph.uniba.sk
† marek.mansell@gmail.com
‡ veselovska@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2018, p. 307
ISBN 978-8081470882, © 2018 Martina Ďuricová

Najmenej ťahov

Martina Ďuricová[11]
Školiteľ: Monika Tomcsányiová[2‡]

[1] KAI, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava
[2] KZVI, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

V práci predstavím webovú aplikáciu Najmenej ťahov, ktorá umožní žiakom na 2. stupni základnej školy experimentovať pri vyhľadávaní najkratšej cesty. V aplikácii je pripravená štvorčeková sieť, v ktorej sú voľné políčka a prekážky. Úlohou hráča je nájsť čo najmenej ťahov tak, aby sa bobor dostal zo štartu do cieľa. Pravidlá pre ťah sú zadefinované tak, že v jednom ťahu je možné preskočiť z voľného políčka na iné voľné políčko, ale tiež preskočiť jednu alebo viac prekážok.

1 Úvod

V rámci prieskumu som vyhľadávala také typy úloh z informatickej súťaže iBobor, v ktorých sa nachádzal labyrint vykreslený ako štvorčeková sieť. Väčšina z nich bola formulovaná tak, že úlohou žiaka bolo nájsť čo najrýchlejší spôsob ako sa dostať zo štartu do cieľa. Rozhodla som sa zrealizovať zadanie Najmenej ťahov (2015-IL-02), v ktorom steny nie sú nepriechodné tak, ako v bežnom labyrinte, ale predstavujú prekážky, ktoré bobor dokáže preskočiť, a takýmto spôsobom nájsť kratšiu cestu do cieľa.

2 Softvér

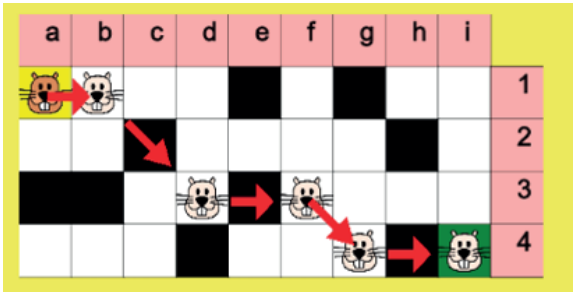
Edukačný softvér Najmenej ťahov má dve časti – pre učiteľa a pre žiaka. Učiteľom umožňuje interaktívne pripraviť postupnosť gradovaných úloh. Žiakom program umožňuje klikaním a zobrazovaním cesty hľadať najkratšie cesty v rôzne náročných labyrintoch. Softvér môže učiteľ využiť v rámci individuálnej domácej práce žiakov, ale aj pre spoločné riešenia úloh na hodine.

2.1 Učiteľská časť

Učiteľská časť edukačného softvéru umožňuje učiteľovi vytvárať nové zadania pre žiakov, prípadne upravovať zadania, ktoré vygeneruje program. Učiteľ navrhuje veľkosť labyrintu, počet a umiestnenie stien, formu riešenia, dovoľuje alebo zakazuje interpretáciu cesty. Takýmto spôsobom určuje náročnosť riešenia pripraveného labyrintu. Učiteľ zadania uloží do online databázy alebo lokálne na počítač. Po vyriešení zadania žiakom učiteľ v online prostredí vidí percentuálnu úspešnosť žiakov pri riešení konkrétneho zadania a tiež vidí aj to, ako sadu pripravených úloh riešil každý jeho žiak. Týmto spôsobom umožní aplikácia realizovať učiteľovi cielený výskum o jeho žiakoch a o tom, či sa zlepšujú pri riešení tohto typu úloh.

2.2 Žiacka časť

Žiaci môžu riešiť buď generátorom vytvorené úlohy alebo, po prihlásení sa, zadania, ktoré pre nich vytvoril učiteľ. Žiak v zobrazenom zadaní klikaním na jednotlivé políčka určuje cestu pre bobra. Počítač mu môže radiť pri ďalšom ťahu, resp. zobraziť celé riešenie. Takýmto spôsobom softvér žiakovi umožňuje experimentovať, uvažovať o dĺžke cesty a interaktívne hľadať najkratšie riešenie.



Obr. 1. Ukážka zadania

3 Záver

Pripravený edukačný softvér Najmenej ťahov by som chcela vyskúšať priamo na niektorej základnej škole. Pri jeho používaní učiteľmi a žiakmi budem vidieť, napr. či je ovládanie programu dostatočne intuitívne, aby ho učitelia a žiaci dokázali efektívne využívať na hodinách informatiky.

Literatúra

[1] Prednášky predmetu Softvér pre vzdelávanie

[2] Informatická súťaž Ibobor. Dostupné na <http://ibobor.sk>

[1] duricova72@fmph.uniba.sk
[‡] tomcsanyiova@fmph.uniba.sk