Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025
Zborník príspevkov

Fakulta matematiky, fyziky a informatiky
Univerzita Komenského, Bratislava
9. apríla 2025

Proceedings of the Student Science Conference 2025

Faculty of Mathematics, Physics and Informatics
Comenius University, Bratislava
April 9, 2025



Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025: Zborník príspevkov
Proceedings of the Student Science Conference 2025
Editori: Jaroslav Guričan, Juraj Tekel
Autor loga: Matej Novotný
Vydavateľ: Knižničné a edičné centrum FMFI UK, Bratislava
Vydanie: prvé
Rok vydania: 2025

ISBN 978-80-8147-165-0

Zborník obsahuje príspevky účastníkov Študentskej vedeckej konferencie, ktorá sa konala 9. apríla 2025 na Fakulte matematiky, fyziky a informatiky Univerzity Komenského v Bratislave. Všetky príspevky boli posudzované aspoň trojčlennou odbornou komisiou.

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

Zborník © 2025 Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Univerzita Komenského, Bratislava
Články © 2025 autori a autorky jednotlivých článkov

Predhovor

Tento zborník obsahuje príspevky zo Študentskej vedeckej konferencie, ktorá sa konala 9. apríla 2025 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 2025 bolo na konferenciu prihlásených 82 príspevkov v jedenástich 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 9. apríla 2025 na celodennej konferencii. Odborné komisie udelili v desiatich sekciách ocenenia 31 víťazom a víťazkám a ďalším 45 laureátom a laureátkam 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 experimentálnu prácu v oblasti fyziky plazmy, cenu prof. Mariána Neamtu, cenu Slovenskej informatickej spoločnosti za vynikajúcu prácu v oblasti informatiky a cenu ASTROS solutions s.r.o. za vynikajúcu prácu v oblasti astronómie a astrofyziky.

Súčasťou konferencie bola ”poster session” na ktorej mohli účastníci konferencie prezentovať svoju prácu aj prostredníctvom posteru. Táto časť sa konala poobede, medzi prezentáciami a vyhlásením výsledkov.

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 2026.

Jaroslav Guričan, Juraj Tekel
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky
Univerzity Komenského v Bratislave

Sponzori: Literárny fond, Slovenská informatická spoločnosť, Slovenská nukleárna spoločnosť, prof. Marian Neamtu, prof. Tillman D. Märk, prof. Peter Lukáč, FINAMIS s.r.o., ASTROS solutions s.r.o., Slovenská fyzikálna spoločnosť, Spoločnosť pre podporu výskumu a aplikácií plazmy.

Zloženie komisií

Organizačný výbor: doc. Mgr. Broňa Brejová, PhD.; doc. RNDr. Jaroslav Guričan, CSc.; Mgr. Juraj Tekel, PhD.; prof. RNDr. Peter Babinec, CSc.; doc. Mgr. Tomáš Vinař, PhD.

Predsedovia odborných komisií:
Astronómia a astrofyzika: RNDr. Roman Nagy, PhD.
Biofyzika: RNDr. Ing. Milan Melicherčík, PhD.
Didaktika fyziky: doc. PaedDr. Klára Velmovská, PhD.
Didaktika matematiky a informatiky: doc. RNDr. Ľudmila Jašková, PhD.
Fyzika plazmy: doc. Mgr. Peter Čermák, PhD.
Fyzika tuhých látok: doc. RNDr. Tomáš Roch, Dr. techn.
Informatika: prof. RNDr. Rastislav Kráľovič, PhD.
Jadrová fyzika: doc. RNDr. Ivan Sýkora, PhD.
Matematika: Mgr. Samuel Rosa, PhD.
Počítačová grafika strojové učenie: doc. RNDr. Zuzana Černeková, PhD.
Teoretická fyzika: Mgr. Peter Mészáros, PhD.

Recenzenti: Melánia Babincová, Andrej Baláž, Soňa Balogová, Pavol Bartos, Lukáš Bartošovič, Martina Bátorová, Zuzana Berger Haladová, Daniela Bezáková, Pavol Bokes, Vladimír Boža, Broňa Brejová, Lucia Budinská, Jaroslav Budiš, Benedek Bukor, Katarína Čechová, Peter Čermák , Zuzana Černeková, Daša Červeňová, Žofia Chrobáková, Richard Cimerman, Mária Čujdíková, Ingrid Damborská, Peter Demkanin, Monika Dillingerová, Roman Ďurikovič, Pavol Ďurina, Rastislav Dvornický, Marián Fecko, Andrej Ferko, Tomáš Fiantok, Lukáš Gajdošech, Barbora Gejdošová, Martin Gera, Branislav Grančič, Maroš Gregor, Ján Greguš, Peter Guba, Dušan Guller, Radoslav Harman, Karol Hensel, František Herman, Veronika Hidaši Turiničová, Martin Homola, Michaela Horňáčková, Róbert Jajcay, Jaroslav Janáček, Mário Janda, Dávid Janko, Katarína Jánošková, Miroslav Ješkovský, Jozef Klačka, Viktor Kocur, Richard Kollár, Martin Kopáni, Leonard Kornoš, Dominik Kostoláni, Samuel Kováčik, Tünde Kozánek Kiss, Andrej Krafčík, Martin Kršňák, Zbyněk Kubáček, Zuzana Kubincová, Milan Lapin, Robert Lukoťka, Edita Mačajová, Zdenko Machala, Martin Madaras, Marcel Makovník, Peter Maták, Pavol Matlovič, Ján Mazák, Marián Melo, Peter Mészáros, Patrik Mihala, Andrej Mihálik, Karolína Miková, Marián Mikula, Vladimír Mlynárik, Roman Nagy, Martin Niepel, Juraj Országh, Richard Ostertág, Peter Papp, Dana Pardubská, Jozef Rajník, Samuel Rosa, Branislav Rovan, Leonid Satrapinskyy, Michal Sedlák, Jiří Šilha, Fedor Šimkovic, Miroslav Šinger, Jaroslava Skriniarová, Mária Slavíčková, Martin Sleziak, Petra Šrámková, Martin Stanek, Luboš Staňo, Veronika Šubjaková, Marek Šuppa, Ivan Sykora, Marek Tatarko, Juraj Tekel, Juraj Tóth, Ivan Alexander, Urbina Medina, Peter Vankúš, Klára Velmovská, Martin Venhart, Katarína Viskupová, Iveta Waczulíková, Viktor Zaujec, Mário Ziman,

Obsah

Astronómia, astrofyzika a meteorológia

Recenzované články

David Frnda: Priemyselné sneženie na Slovensku 1
Michal Šturc: Coupling of dark and baryonic matter in the Milky Way galaxy II . . . 10
Martin Vozár: Dekompozícia polí meteorologických veličín metódami strojového učenia 13
Martin Petrovič: Asimilácia satelitných údajov a bias korekcia v numerickom modeli ALADIN/SHMU 26
Tomáš Vörös: A GUI tool for modelling of the atmospheric flight of meteors 36

Abstrakty

Filip Janák: Analyzing the HI content of galaxies with machine learning 42
Katarína Sabolová, Jiří Šilha: Color index evolution of CZ-3B rocket bodies due to space weathering 43
Emma Račáková: Extrasolárne planéty v zóne života 44

Biofyzika

Recenzované články

Hana Škúciová, Andrej Krafčík: Automatic Segmentation and Quantification of Morphological Structures in Patients' MRI Data Using Artificial Intelligence 45
Katarína Purdjaková, Martin Kopáni: Vyšetrovanie prítomnosti železa v mozgu . . 50
Petra Mušinková, Dávid Janko, Natália Andelová, Veronika Farkašová, Táňa Ravingerová, Miroslav Ferko, Iveta Waczulíková: Analýza mitochondriálnych uncoupling proteínov: Vplyv hypoxie na ROS signalizáciu 62
Jakub Lešták, Marek Tatarko, Tibor Hianik: Štúdium mechanizmov interakcie bakteriálnych lipopolysacharidov s DNA aptamérmi a s antimikrobiálnym peptidom polymyxínom B pomocou metódy QCM-D 68

Abstrakty

Tomáš Niedl, Milan Zvarík, Lucia Noskovičová, Soňa Balogová: Rádiomická analýza funkčného obrazu pozitrónovej emisnej tomografie s fludeoxyglukózou (18F) 76
Zuzana Okruhlicová, Karol Hensel, Zuzana Lukačová: Optimalizácia aplikácií plazmou aktivovanej vody na zlepšený rast a antioxidačnú kapacitu hybridov kukurice 77

Didaktika fyziky

Recenzované články

Mariia Saprykina: Implementácia Rumsfeldovej matice do teórie vyučovania fyziky 78
Marek Králik: Skefolding v práci učiteľa fyziky 90
Aneta Kolodzejová: Využitie aktivít so športovou tematikou v rámci kontextuálneho prístupu k vyučovaniu fyziky na stredných školách 96
Ľubomír Varchol: Využitie programu Algodoo pri vizualizácii fyzikálnych javov . . . 105

Abstrakty

Karin Zacharová, Peter Demkanin: Komentované riešenie úloh vo fyzike gymnázia 117

Didaktika matematiky a informatiky

Recenzované články

Patrik Mäsiar, Martina Bátorová: Primitívne pytagorejské trojuholníky ako alternatívna forma opakovania vybraných tém na maturitnú skúšku z matematiky . . 118
Adela Mináriková: Gradované úlohy na prácu so štruktúrou slovník v Python-e . . 129
Barbora Stenová: Ako s nami komunikujú roboty? Prekoncepty žiakov vo veku 11 až 13 rokov. Pilotná štúdia 136

Abstrakty

Martina Kalašová: Nekonečno a číselné množiny na gymnáziu 141
Dušan Daniel: Návrh a pilotné overovanie testu algebrického myslenia 142
Zuzana Tureková: Aktivity na rady a zásobníky pre žiakov základnej školy 143
Júlia Pešková: Úniková hra s grafovými úlohami 144

Fyzika plazmy

Recenzované články

Samuel Peter Kovár, Peter Papp: Modelovanie ionizačných procesov vybraných halogénanizolov v plazme 145
Dominik Diňa, Richard Cimerman: Štúdium aplikácie elektrických výbojov pre konverziu oxidu uhličitého 153
Alexandra Jančišinová: Teoretické štúdium ionizačných a ión-molekulových procesov pesticídu chlórpyrifos 164

Abstrakty

Hanna Tatarevska, Pavel Veis: Nanoparticles enhancement LIBS (NELIBS) to correct absorption effects on plasma produced by laser pulses 171
Diana Chernenko, Peter Čermák, Filip Pastierovič: Určovanie tlaku nasýtených pár metánu pri nízkych teplotách 172
Enmily Garcia, Barbora Stachová, Natalia Tańska, Wojciech Breguła, Marek Moravčík, František Krčma, Štefan Matejčík: Electron Induced Dissociative Excitation of Formamide 174
Gadisa Deme Megersa, Barbora Stachová, Garcia Angulo Enmily Loelbis, Štefan Matejčík: Low energy electrons interaction with acetone (CH3)2CO in the UV-Vis spectral region 175
Tereza Mišútová, Mohamed K. A. Fawwaz, Petra Šrámková: Porovnanie efektu dvoch rôznych zdrojov nízkoteplotnej plazmy na semená sóje 176

Ramin Mehrabifard, Bernard Gitura Kimani, Zdenko Machala: Synergistic effect of cold atmospheric pressure plasma and ultraviolet radiation (UVA) on Gram-negative bacteria 177

Fyzika tuhých látok

Recenzované články

Pengbo Liu, Qiang Li: III-V nanowires on silicon-on-insulator for advanced photonic devices 178
Yevhenii Popov, Leonid Satrapinskyy: Fabrication, Oxidation, and Property Modulation of Iron-Doped Titanium Nanotubes 186
Boris Gajdušek, Veronika Hidaši Turiničová: Vplyv nehomogénneho elektrického poľa generovaného nabitým hydroxyapatitom na visiacu kvapku 189

Abstrakty

Matej Mikula, Katarína Viskupová: Štruktúra tvrdých VBx vrstiev pripravených magnetrónovým naprašovaním 197
Adriana Kecerová, Pavol Ďurina, Tomáš Roch: Analýza možnosti využitia rezistu SU-8 na prípravu mikroštuktúr pomocou procesu pyrolýzy 198
Richard Vrablec, Branislav Grančič: Štruktúra a vlastnosti TiB1+x vrstiev 199

Informatika

Recenzované články

Jakub Kloc, Janka Boborová: Extending the MHS-MXP abduction solver with new algorithms 200
Ondrej Škorňák: Analýza genomickej kompozície v diagnostike rakovinových ochorení 210
Viktor Samuel Podhradský: Štatistický model na predikciu štruktúry krátkych tandemových opakovaní s využitím populačných dát 223

Abstrakty

Filip Tuch, Richard Ostertág: Rekonštrukcia obrazu zachyteného pomocou TempestSDR 229
Dennis Vita, Richard Ostertág: Hardvérové MITM útoky na komunikáciu po zberniciach 230
Peter Grochal, Martin Stanek: Testing the limits of differential MITM attacks 231
Andrej Ravinger, : Usefulness of information for bounded regular languages 232
Vincent Hlaváč, Branislav Rovan: Power of Supplementary Information for Unary Regular Languages 233
Martin Makuch, Branislav Rovan: Equivalence Between Multi-Head Finite Automata and Parallel Communicating Finite Automata Systems 234
Ján Kelemen: Monitorovanie validity, funkčnosti a bezpečnosti internetovych SSL certifikátov 235

Jadrová fyzika

Recenzované články

Karol Sučák, Miroslav Ješkovský, Ivan Kontuľ, Boris Bobáľ: Stanovenie veku artefaktov pomocou urýchľovačovej hmotnostnej spektrometrie a prvkového zloženia vzoriek 236
Tatiana Grečnárová: Study of beta-decay of isotopes in the 179Au chain 244
Patrik Soós: Možnosti protónovej emisie nových izotopov nad uzavretou vrstvou Z = 82 249

Abstrakty

Miriam Chvostálová: Majorana neutrino masses and neutrino-antineutrino oscillations 255
Kristína Trnovská: Shapes of electron energy spectra in forbidden beta decays . . 256
Benjamín Dutka: Calibration of the Digital Optical Module of the KM3NeT neutrino telescope 257

Matematika

Recenzované články

Erik Řehulka, Jozef Rajník: Cyclic edge-connectivity of junctions of multipoles . . 258
Lukáš Gáborik: Flow triangulations of cubic graphs 270
Marek Mikloš, Peter Guba: Deformácia pórovitého média vplyvom toku 279
Patrik Mäsiar: Pravouhlé trojuholníky s pomerom odvesien takmer n 291
Andrej Špitalský: Effects of Diffusion on Territory Formation in Wolf Populations . . 302
Zuzana Kováčová: Specificity of the Methodology for Detecting Anomalies in Athletes' Biological Passports Used in Anti-Doping Testing 313
Jan Gottweis, Jozef Rajník: Optimalizácia algoritmu pre testovanie kritickosti snarkov325

Abstrakty

Štefánia Glevitzká, Robert Jajcay: Cubic girth-regular graphs of girth 6 331
Makuochukwu Felix Oguagbaka, Robert Lukoťka: Covering defects of cubic graphs 332

Počítačová grafika a strojové učenie

Recenzované články

Damian Harenčák: Decentralized privacy preserving federated learning for 3D scan processing 333
Tomáš Barančok, Andrej Ferko: Evaluating Fast Scene Description for Automated Industrial Waste Sorting Using MPEG-7 Descriptors 343
Matej Mok, Viktor Kocur: Detecting 3D Line Segments for Pose Estimation 353

Abstrakty

Daniel Kyselica, Marek Šuppa, Roman Ďurikovič: RoBo6: Standardized MMT Light Curve Dataset for Rocket Body Classification 360
Roman Jančich, Marcel Makovník: Noise reduction in polygon meshes 361
Erik Božík, Marek Šuppa: Slovak Speech Corpora for Open-Source Automatic Speech Recognition 362
Martin Halaj, Martin Madaras: 3D Human Avatar Generation with Dimensional Fidelity363

Carlos Andres Pizarroso Troncoso: Evaluating the significance of outdoor advertising utilizing Computer Vision 364

Teoretická fyzika

Recenzované články

Sebastian Brezina: On the gauge groups of the teleparallel equivalents of General Relativity 365
Katarína Magdolenová: Bootstrap method in matrix models 370
Adam Kubiš, Juraj Tekel: Quantum mechanics on three-dimensional noncommutative space in the language of matrix models 380

Abstrakty

Sára Folajtárová, Peter Maták, Katarína Nedeľková: Freeze-in of dark matter and quantum statistical effects 389
Matej Hrmo, Samuel Kováčik, Patrik Rusnák, Juraj Tekel: Coulomb Problem in a spherical cavity in a Fuzzy Onion Matrix Model 390
Ján Ramaj, Martina Sabová, Peter Maták: Minimal effective theory for neutrino masses, dark matter, and matter-antimatter asymmetry cogenesis 391

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 1–9
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 David Frnda

Priemyselné sneženie na Slovensku

David Frnda[1]*
Školiteľ: Miroslav Šinger[1,2‡]
[1] Katedra astronómie, fyziky Zeme a meteorológie, FMFI UK, Mlynská dolina F1, 842 48 Bratislava
[2] Slovenský hydrometeorologický ústav, Jeséniova 17, 833 15, Bratislava

Abstrakt

Priemyselné sneženie je jav vyskytujúci sa na malej priestorovej škále v blízkosti priemyselných oblastí. V nich dochádza k uvoľňovaniu väčšieho množstva teplej vodnej pary a ďalších častíc (môžu plniť funkciu kondenzačných/ľadových jadier) do nízkej oblačnosti, čo vedie k jej presýteniu a následnej tvorbe zrážok v podobe snehových zŕn alebo ihličiek, pri kladnej teplote v podobe mrholenia. Tieto zrážky sú následne unášané prúdením a vypadávajú niekde v okolí zdroja, pričom podmienky sa väčšinou menia len nepatrne, čo môže viesť k výrazným rozdielom v počasí na stovkách, dokonca až desiatkach metrov. Keďže sa jedná o veľmi lokálny jav, informácie zo staníc nie sú postačujúce, preto je pre podrobnejšiu analýzu nutné zbierať informácie z médií, od náhodných pozorovateľov alebo z terénneho prieskumu. Významnosť tohto javu narastá v aglomeráciách alebo dôležitých dopravných uzloch, prípadne na letiskách. Preto je pre predpovednú prax, ale aj numerické modelovanie, dôležité poznať poveternostné podmienky a základnú klimatológiu javu.

V našom príspevku sme analyzovali tri prípady, z Bratislavy a Košíc počas zimy 2024/2025. Košické letisko je z hľadiska polohy významnou lokalitou, pretože disponuje profesionálnou stanicou s dlhodobým radom pozorovaní a podľa doterajších pozorovaní sa často nachádzalo v spáde priemyselného sneženia. Podľa predbežnej analýzy je výskyt priemyselného sneženia v Košiciach pomerne častý, čo je jednou z hlavných motivácii venovania sa tejto téme. Na základe získaných údajov sa nám podarilo v Košiciach podrobnejšie zmapovať a odhadnúť výskyt a výšku snehovej pokrývky spôsobenej priemyselným snežením v dňoch 30.1.2024 - 2.1.2025. Maximum výšky snehovej pokrývky dosiahlo 32 cm a výrazne rozdiely v nej sme mohli pozorovať aj v rámci susedných ulíc. Priemyselné sneženie sa v tomto období vyskytlo aj v Bratislave. Tento prípad bol významný vďaka širokému priestorovému dopadu. Pre ďalšiu analýzu sme zvolili aj prípad z 20.1.2025, pri ktorom sme mali lepšie podchytenú situáciu, ale aj z dôvodu výraznej vzdialenosti dopadu snehu od zdroja. Podľa predbežných odhadov sú prípady z Bratislavy menej časté, a ich podchytenie býva náročnejšie.

Kvôli skutočnostiam popísaným vyššie, sme pre stanicu na košickom letisku okrem analýz jednotlivých prípadov, spracovali potenciálny výskyt priemyselného sneženia v rokoch 1980 až 2016 a poukázali na doposiaľ nameraný rekord výšky snehovej pokrývky, spôsobenej priemyselným snežením s hodnotou 40 cm. Následne sme ukázali, že priemyselné sneženie sa môže vyskytnúť takmer v každej priemyselnej oblasti na Slovensku.

1 Teoretický úvod

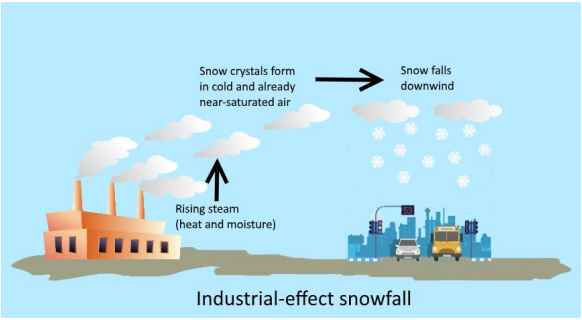
Témou priemyselného sneženia sa v zahraničí zaoberali viacerí autori, napr. [Liechti, 2004] vo Švajčiarsku, [Wood a Harrison, 2009] vo Veľkej Británii, [Simpson et al., 2015] v USA, [Ruzs et al., 2017] v Rumunsku, [Mayes, 2023] v Anglicku a [Graham, 2024] spravil prehľad o európskych prípadoch. Z našich domácich autorov sa v diplomovej práci zaoberal priemyselným snežením a jeho ekonomickými dopadmi na letisku v Košiciach [Frederik, 2023]. Vo všetkých štúdiách však chýba komplexná analýza poveternostných podmienok a vypracovanie základnej klimatológie skúmaného javu.

1.1 Základné poznatky

Industrieschnee, u nás známe ako priemyselné, v Mníchove dokonca “pivné“ sneženie je zimný meteorologický jav, vyskytujúci sa na malej priestorovej škále v blízkosti priemyselných oblastí.

* frnda3@uniba.sk
‡ miroslav.singer@fmph.uniba.sk

V Európe sa často spája so stabilnými, anticyklonálnymi podmienkami, kedy v týchto oblastiach dochádza k uvoľňovaniu teplej vodnej pary do nízkej oblačnosti (stratusu). To vedie k jej presýteniu a následnej tvorbe pevných zrážok v podobne snehových zŕn alebo ihličiek, pri kladných teplotách v podobe mrholenia [Liechti, 2004; Graham, 2024].



Obr. 1: Schéma priemyselného sneženia

Liechti vo svojej práci analyzoval prípady, v ktorých bola výška snehovej pokrývky väčšinou malá, a dalo sa proti nej bojovať solením ciest a chodníkov. Z jeho štúdie vo Švajčiarsku bola výška snehovej pokrývky typicky 0,1 až 0,2 cm, lokálne 2 cm a extrémne hodnoty dosahovali do 15 cm. Počas štyroch zimných období od obdobia 1999/2000 do 2002/2003 sa na dvoch pozorovaných miestach vyskytol priemyselný sneh v priemere 4,5 dňa za zimu [Liechti, 2004].

2 Metodika a dáta

2.1 Dáta

Pre analýzu a výber situácii sme použili merania zo správ SYNOP z vybraných staníc na Slovensku, ako aj automatické a klimatologické stanice SHMÚ. V prípade satelitných snímok boli použité produkty z polárnych družíc NOAA a Sentinel – 2. Takisto sme pracovali aj s modelovou reanalýzou a modelovými pseudotempami. Využívali sme aj informácie a fotografie od náhodných pozorovateľov, zverejnených na sociálnych sieťach, ktoré boli zhotovené počas výskytu analyzovaných prípadov, a taktiež sme v jednom termíne zhotovili vlastné terénne merania.

2.2 Analýza prípadov

Našou úlohou bolo podľa daných informácií priradiť fotografie zodpovedajúcej polohe na mape a podľa odhadu alebo informácie poskytnutej danou osobou vytvoriť priestorový odhad pokrytia a výšky snehovej pokrývky v jednotlivých prípadoch.

Ku jednotlivým termínom sme taktiež spracovali grafické priebehy jednotlivých parametrov a uviedli družicové a modelové dáta.

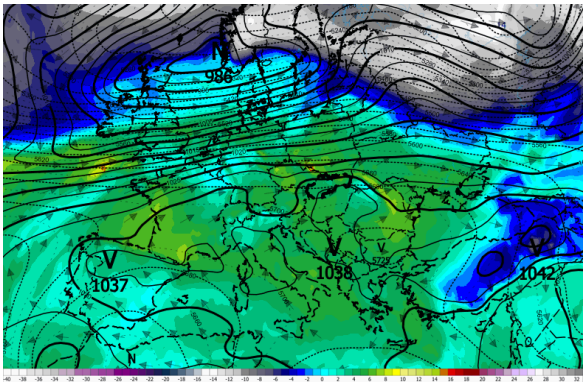
2.3 Klimatologické spracovanie výskytu priemyselného sneženia v Košiciach

Zo SHMÚ sme mali dostupný rad údajov pre stanicu na košickom letisku o atmosférických zrážkach a výške snehovej pokrývky od roku 1922 do roku 2024. Toto obdobie však nebolo možne celé spracovať, pretože sme potrebovali podobný rad údajov z nejakej blízkej stanice. Touto stanicou bola Moldava nad Bodvou, kde boli tieto údaje dostupné od roku 1980 do súčasnosti. Nakoniec sme zvolili obdobie rokov 1980 až 2016, kvôli jednotnej metodike. Prípady, ktoré sme našli od roku 2017 boli pre analýzu do diplomovej práce hľadané viacerými inými metódami. V prípade tohoto spracovania bola najprv použitá selekcia lokálnych zrážok, ktoré sa vyskytli v zimnom období na stanici na košickom letisku. Pre každý deň počas zimných období v rokoch 1980 - 2016 sme hľadali prípady, kedy stanica na košickom letisku hlásila výskyt snehových zrážok, zatiaľ čo stanica v Moldave nad Bodvou nie. Predpokladáme, že priemyselné sneženie je lokálny jav a preto bolo cieľom tohto spôsobu vyselektovať veľkoplošné zrážky, napr. pri prechode frontu alebo výskyte tlakovej níže v našej oblasti. Takáto selekcia nie je úplne dostačujúca a preto sme vybrané potenciálne dni podrobili ešte dostupným reanalýzam. Išlo o archív modelových dát modelu GFS, dostupného na stránke https://www.wetter3.de/archiv_gfs_dt.html. Pri každom potenciálnom dni sme analyzovali, či podmienky, o ktorých z teórie a predbežných analýz vieme, že sú vhodné pre výskyt priemyselného sneženia, boli prítomné. Týmto spôsobom sme urobili ďalšiu selekciu, a vo viacerých prípadoch sme zistili, že aj keď obidve stanice naraz nehlásili zrážky, išlo práve o situácie s veľkopriestorovými zrážkami, a tým sme potvrdili, že selekcia iba pomocou dát z dvoch staníc nebola postačujúca. Ďalšou analýzou bolo hodnotenie stabilných podmienok – hľadanie inverzií. Na to bol použitý archív ECMWF ERA5, dostupný na stránke https://rawinsonde.com/ERA5_Europe/. Sú tam dostupné modelové termodiagramy, pre nami zvolené zemepisné súradnice. Preto sme zvolili zemepisné súradnice Košíc a pre každý vyselektovaný potenciálny deň sme hľadali výskyt inverznej stabilnej vrstvy v hraničnej vrstve. Týmto sme sa snažili vylúčiť situácie s nereálnymi podmienkami pre výskyt priemyselného sneženia.

Vybrané termíny sme už ďalšej analýze nepodrobili. V programe Excel sme urobili grafické spracovanie počtu dni s potenciálnym výskytom priemyselného sneženia v jednotlivých rokoch z obdobia 1980 – 2016.

3 Výsledky

3.1 Analýza prípadov z Košíc a Bratislavy na prelome rokov 2024/2025

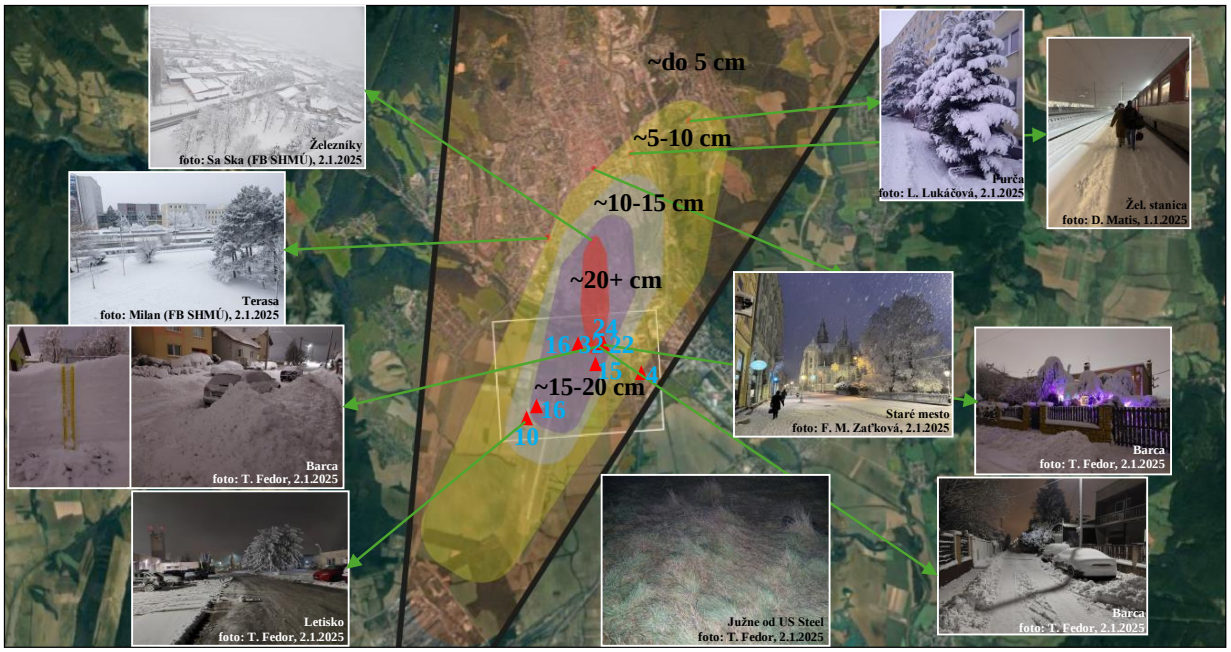


Obr. 2: Analýza ECMWF, 1.1.2025, 00:00 UTC MSLP [hPa], AT500 [gpm], Teplota 850 hPa [°C]



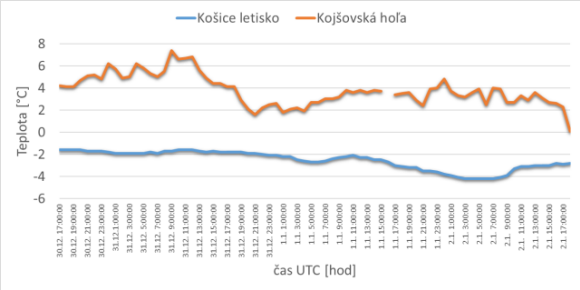
Obr. 3: Výskyt nízkej oblačnosti nad časťami Slovenska

3.1.1 Košice

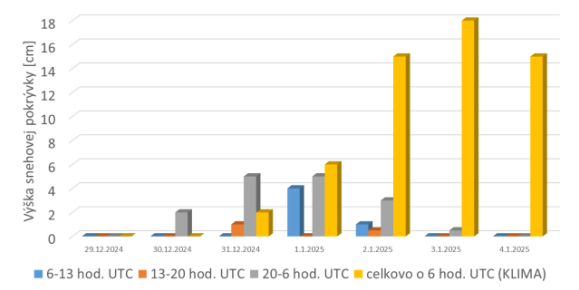


Obr. 4: Priestorový odhad pokrytia a výšky snehovej pokrývky 2.1.2025 v Košiciach a terénne merania (biely obdĺžnik s nameranými hodnotami)

Priemyselné sneženie od 30.12.2024 17:00 do 2.1.2025 18:00 UTC je najvýraznejším prípadom za posledné roky. Výška snehovej pokrývky dňa 2.1. večer na letisku dosahovala 16 cm, no maximum bolo namerané v časti Barca - až 32 cm. Najvýraznejšie snežilo počas nocí z 31.12. na 1.1. a z 1.1 na 2.1., kedy počas oboch nocí na stanici na letisku pribudlo 5 cm nového snehu (obr. 6). Cez deň snežilo výrazne slabšie alebo vôbec. Toto spĺňa očakávaný predpoklad, že sa horná hranica nízkej oblačnosti musí ochladiť radiačným vyžarovaním, aby došlo k väčšiemu presýteniu a následne aj k výraznejšej tvorbe zrážok [Liechti, 2004].

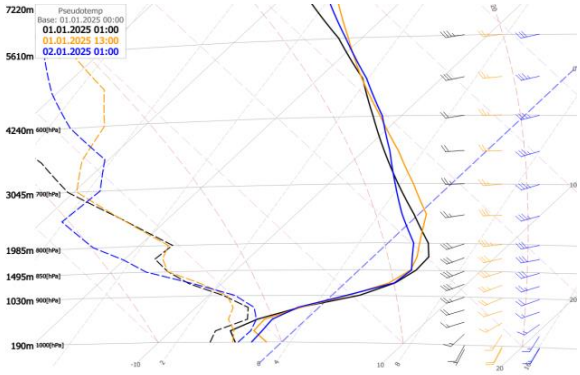


Obr. 5: Časový priebeh teploty počas výskytu priemyselného sneženia

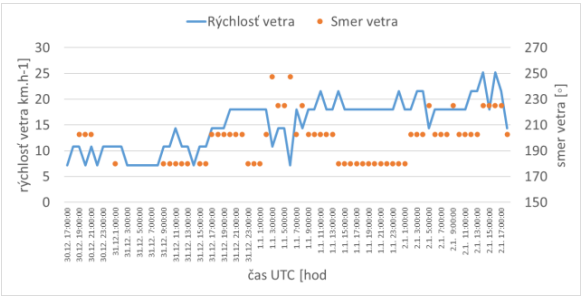


Obr. 6: Prírastok a výška snehovej pokrývky na letisku v Košiciach v dňoch 29.12.2024 až 4.1.2025

Slovensko sa nachádzalo pod vplyvom rozsiahlej tlakovej výše (obr. 2) v stabilnom teplotnom zvrstvení. V hraničnej vrstve sa vyskytoval chladný a vlhký vzduch, nad ňou v nadmorskej výške nad cca 1000 m bol vzduch teplý a veľmi suchý. Tieto podmienky postupne viedli k vzniku nízkej oblačnosti (obr. 3). Situáciu dokumentuje pseudotemp z oblasti Košíc (obr. 7), pričom teplota je porovnateľná s nameranými hodnotami na letisku v Košiciach a Kojšovskej holi (obr. 5). Predpoveď rýchlosti a smeru vetra sa zhoduje s nameranými hodnotami (obr. 8).

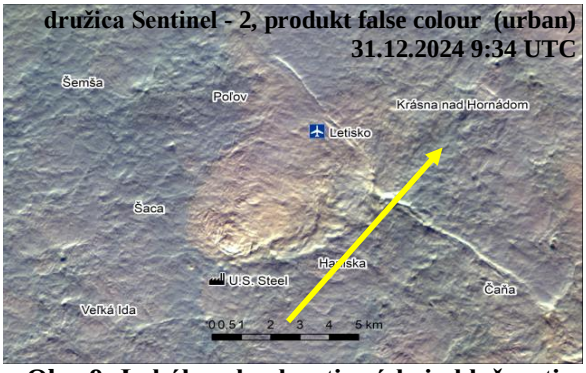


Obr. 7: Pseudotemp, Košice, model ALADIN s horizontálnym rozlíšením 1 km



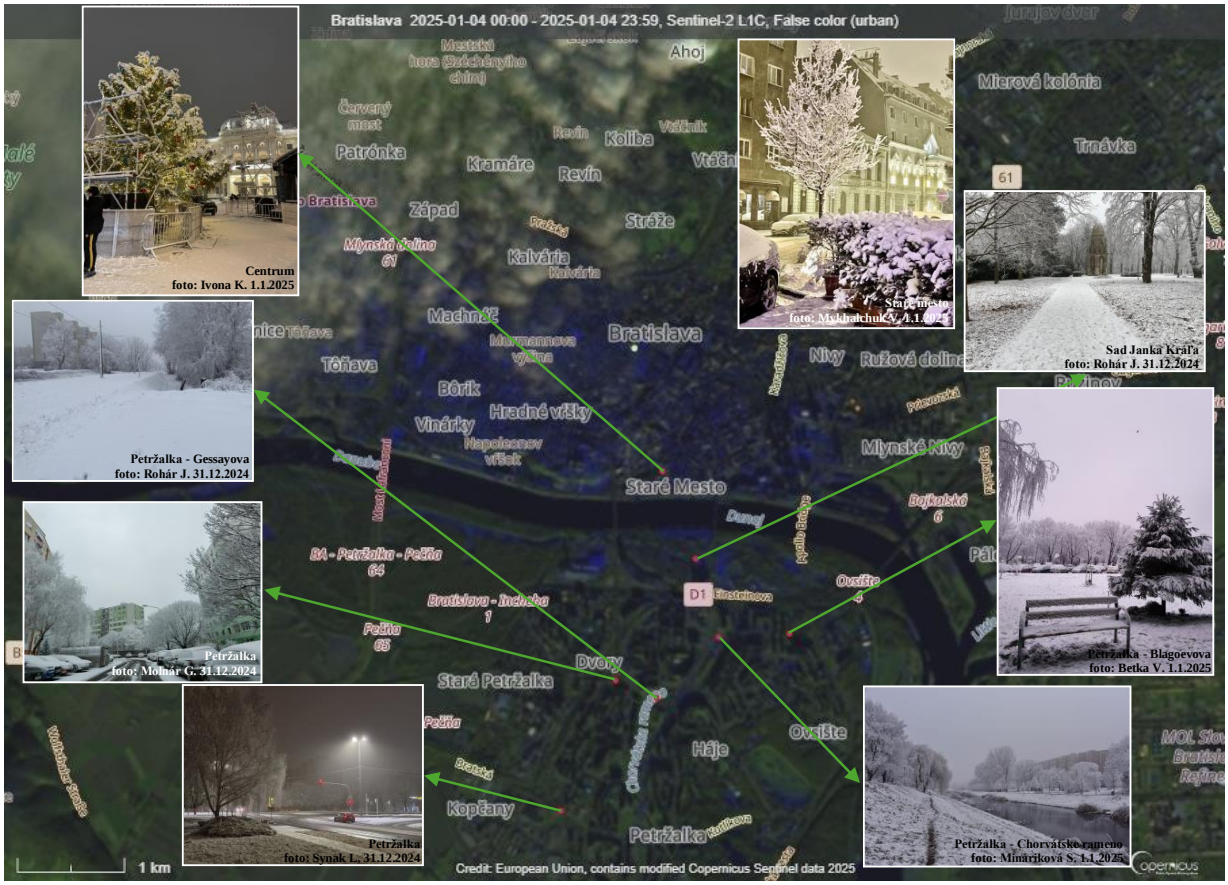
Obr. 8: Rýchlosť a smer vetra na košickom letisku počas výskytu priemyselného sneženia

Počas sneženia na košickom letisku fúkal južný až juhozápadný vietor s rýchlosťou do 25 km·h−1 (obr. 8), čomu aj zodpovedá priestorové rozloženie snehovej pokrývky. Vo vyšších hladinách bol smer prúdenia podobný. Toto tvrdenie potvrdzuje aj satelitná snímka z družice Sentinel - 2 z 31.12. 9:34 UTC (obr. 9), kde vidíme, že zhrubnutie nízkej oblačnosti bolo natiahnuté práve severovýchodným smerom od zdroja (US Steel), čo aj odpovedá nameranému a modelovému smeru vetra.



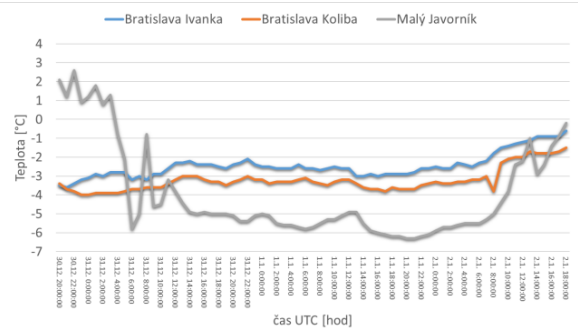
Obr. 9: Lokálne zhrubnutie nízkej oblačnosti nad priemyselným parkom US Steel

3.1.2 Bratislava



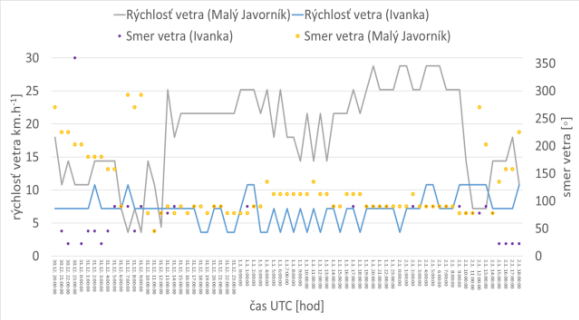
Obr. 10: Priestorové rozloženie snehovej pokrývky zo dňa 4.1.2025 v Bratislave

Priemyselné sneženie sa vyskytlo v rovnakom období nielen v Košiciach, ale aj v Bratislave. Keďže sa ani jedna profesionálna stanica nenachádzala v jeho spáde, nevieme presný čas kedy začalo a prestalo snežiť. Podľa dostupných informácii začalo snežiť v noci z 30. na 31.12. 2024, keď skoro ráno hlásili obyvatelia sneh v mestskej časti Petržalka. Aj na grafe teploty (obr. 11) vidíme, že práve v tomto období bola medzi stanicami v Bratislave teplotná inverzia.

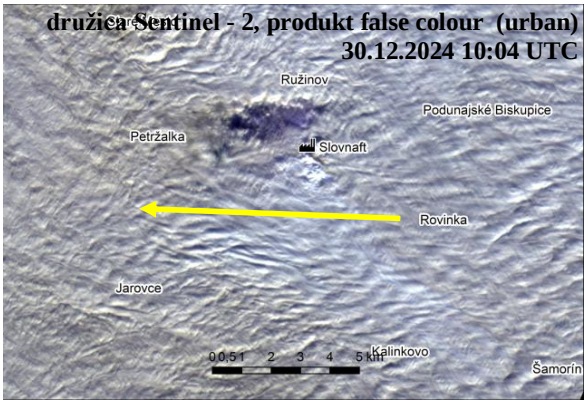


Obr. 11: Časový priebeh teploty počas obdobia, kedy došlo k výskytu priemyselného sneženia

Ako môžeme vidieť na satelitnej snímke z 4.1.2025 (obr. 10), priestorové rozloženie snehovej pokrývky je relatívne široké. Zistili sme, že pás sneženia od Slovnaftu bol relatívne úzky, no vďaka premenlivosti a rýchlosti vetra vo vyšších hladinách (viď obr. 12) sa sneh dostal na väčšie územie Bratislavy. Počas dňa 31.12.2024, bolo prúdenie východné až severovýchodné, čo je pre oblasť Bratislavy, počas inverzných situácii typické. Toto tvrdenie potvrdzuje aj satelitná snímka z 30.12.2024 (obr. 13), kedy vidíme, že lokálne zhrubnutie nízkej oblačnosti je od zdroja (Slovnaftu) natiahnuté práve západným smerom. Maximum výšky snehovej pokrývky odhadujeme na severnú časť mestskej časti Petržalka s hodnotou okolo 5 cm. 2.1.2025 večer bolo 1-2 cm snehu v mestských častiach Kramáre a Koliba, pričom minimum snehu bolo na začiatku časti Dúbravka, zatiaľ čo v Lamači pri Tescu už sneh vôbec nebol. Práve v tomto časovom termíne výskyt priemyselného sneženia skončil.

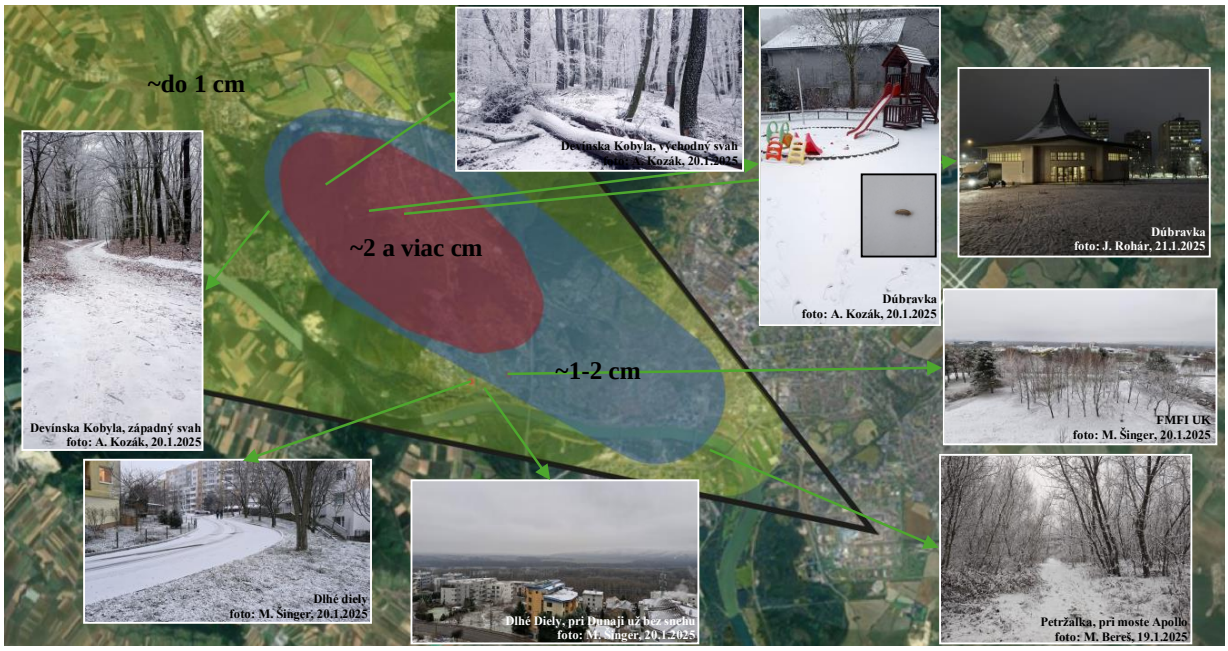


Obr. 12: Rýchlosť a smer vetra na staniciach v Bratislave počas obdobia, kedy došlo k výskytu priemyselného sneženia



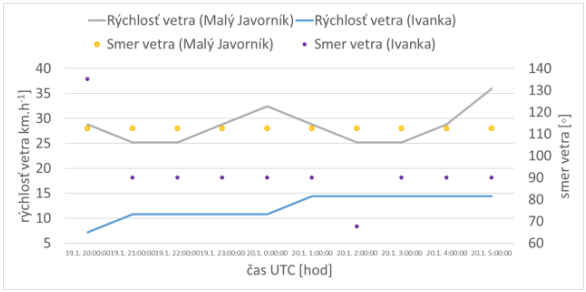
Obr. 13: Lokálne zhrubnutie nízkej oblačnosti nad priemyselným parkom Slovnaft

3.2 Analýza prípadu z Bratislavy v noci z 19.1. na 20.1. 2025

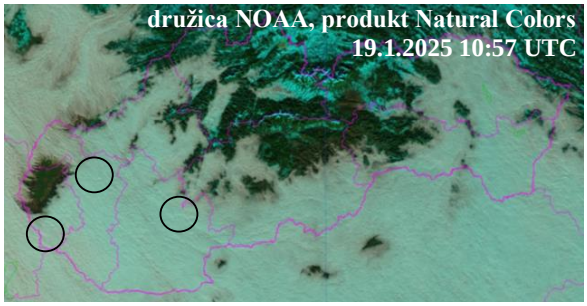


Obr. 14: Priestorový odhad pokrytia a výšky snehovej pokrývky zo dňa 20.1.2025 v Bratislave

Tento prípad sa vyznačuje výraznejšie vzdialenou polohou maxima, ale aj celkového dopadu snehu od zdroja (Slovnaftu) severozápadným smerom. To bolo spôsobené silnejším prúdením, ktoré odvialo snehové vločky ďalej od zdroja ako v predošlom prípade (obr. 14). V hladine okolo 600 metrov bol počas sneženia smer vetra východno-juhovýchodný s rýchlosťou do 32 $km \cdot h^{-1}$ (obr. 15). Z dostupných údajov a pozorovaní vieme, že priemyselné sneženie trvalo od 19.1. 22:00 do 20.1. 02:00 UTC. Priemyselné sneženie sa vyskytlo aj skôr počas dňa 19.1., čo dokazuje fotografia z okolia mosta Apollo.

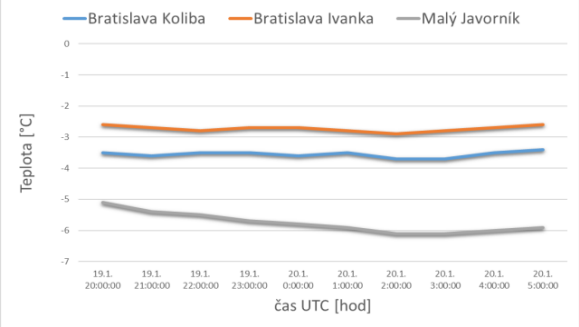


Obr. 15: Rýchlosť a smer vetra na staniciach v Bratislave počas obdobia, kedy došlo k výskytu priemyselného sneženia

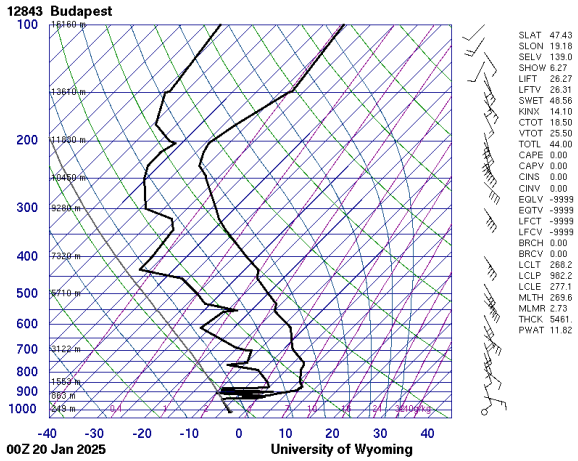


Obr. 16: Výskyt nízkej oblačnosti nad časťami Slovenska

Vo vyznačených miestach (obr. 16) sa v danom termíne vyskytlo priemyselné sneženie. Okrem Bratislavy ide o oblasti obidvoch jadrových elektrárni – Mochovce a Jaslovské Bohunice.



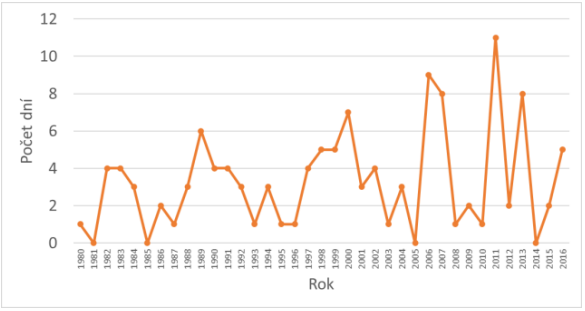
Obr. 17: Časový priebeh teploty počas obdobia, kedy došlo k výskytu priemyselného sneženia



Obr. 18: Aerologické meranie z Budapešti z termínu 20.1.2025 00:00 UTC

Z grafu teploty (obr. 17) a vertikálneho profilu teploty a teploty rosného bodu z Budapešti (obr. 18) je zjavné, že stanica na Malom Javorníku vo výške 575 m.n.m, sa ešte nachádzala vo vrstve nízkej oblačnosti. Kojšovská hoľa je v tomto ohľade lepšia, pretože po ňu zvyčajne nízka oblačnosť nesiaha.

3.3 Výskyt priemyselného sneženia v Košiciach medzi rokmi 1980 a 2016



Obr. 19: Počet dni s potenciálnym výskytom priemyselného sneženia na letisku v Košiciach v rokoch 1980 – 2016

Pri tomto spracovaní je dôležité uviesť, že prípady boli vybrané pomocou metodiky popísanej v kapitole 2.2. Prípady nie sú potvrdené SYNOP správou, ktorá by nám poskytla dôležité údaje napr. o mikrofyzike zrážok a ani satelitnou snímkou. Preto ide o výskyt potenciálnych prípadov, ktoré v budúcnosti môžeme ešte podrobiť dôkladnejšej analýze.

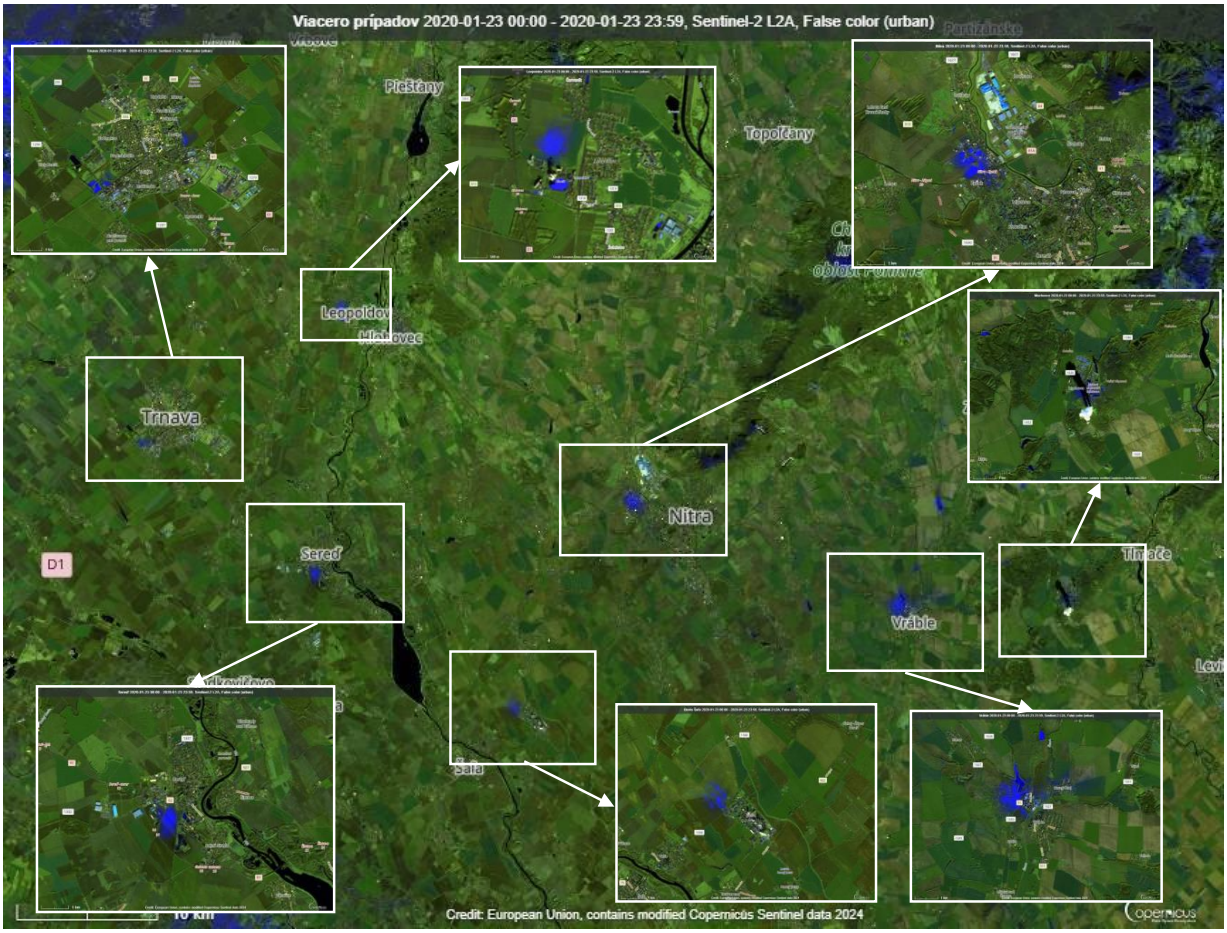
Počas spracovávania dát sme narazili na výnimočný prípad z konca roka 2007 (obr. 20). Podľa našich informácii ide o rekordný, nameraný prípad priemyselného sneženia na Slovensku, a zo zatiaľ dostupnej literatúry a publikácii, možno aj v celom svete. V priebehu 10 dní výška snehovej pokrývky na košickom letisku dosiahla extrémnych 40 cm. V kapitole 1.1 sme uviedli, že vo Švajčiarsku boli extrémne hodnoty 15 cm, čo je v porovnaní s naším prípadom takmer trikrát menej.

Date	Temperature (C) Max	Min	Avg	Td Avg (C)	Hr. Avg (%)	Wind (km/h) Dir.	Int.	Gust	Pres. s.lev (Hp)	Prec. (mm)	Tot Cl Oct	low Cl Oct	Sun D-1 (h)	Vis Km	Snow Dep. (cm)	Daily weather summary
12/31	-5.9	-7.5	-7.0	-7.8	93.4	SSW	5.0	----	1028.6	Tr	8.0	8.0	0.0	3.1	40	
12/30	-5.8	-7.6	-6.9	-7.6	94.8	SSW	7.7	----	1029.6	8.0	8.0	8.0	0.0	1.7	36	
12/29	-5.7	-6.7	-6.5	-7.0	96.2	SSW	12.2	----	1037.1	13.0	8.0	8.0	0.0	1.6	22	
12/28	-5.2	-7.4	-6.5	-7.3	95.0	SW	6.3	----	1040.4	5.0	8.0	8.0	0.0	1.6	13	
12/27	-5.3	-6.7	-6.2	-6.7	96.2	S	3.6	----	1036.3	0.0	8.0	8.0	0.0	1.2	13	
12/26	-2.2	-10.7	-6.6	-7.5	95.2	NW	2.3	----	1031.7	0.0	6.4	6.9	5.8	1.4	13	
12/25	-3.0	-10.4	-6.9	-8.6	87.7	W	3.2	----	1031.6	0.0	5.0	2.8	0.0	7.0	13	
12/24	-4.4	-7.0	-6.5	-7.5	91.8	W	2.7	----	1032.7	2.2	8.0	8.0	0.0	5.4	16	
12/23	-5.5	-6.9	-6.5	-7.2	95.1	SW	8.1	----	1034.0	8.0	8.0	8.0	0.0	1.2	8	
12/22	-4.8	-6.5	-5.7	-6.5	94.7	SW	6.8	----	1037.1	4.0	8.0	8.0	0.0	1.9	1	
12/21	-3.3	-5.0	-4.6	-5.5	94.0	WSW	4.1	----	1038.0	Tr	8.0	8.0	0.0	3.5	0	

Obr. 20: Vizualizácia Synop správy z košického letiska, z rekordného nameraného prípadu priemyselného sneženia na Slovensku z konca decembra roku 2007

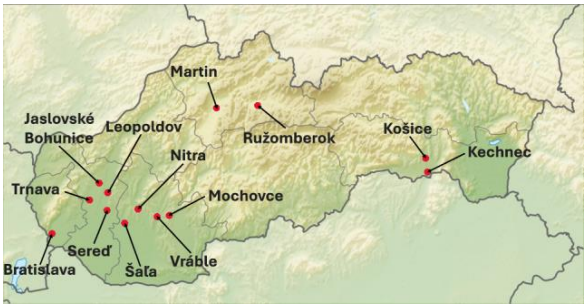
Výskyt takéhoto množstva snehu v oblasti ako je letisko, nie je zanedbateľný. Ovplyvňuje jeho chod a hlavne bezpečnosť leteckej dopravy. Tento poznatok je jednou z hlavných motivácii, prečo sa téme venujeme, a prečo je jej potrebné venovať väčšiu pozornosť.

3.4 Výskyt priemyselného sneženia v ďalších lokalitách



Obr. 21: Družicová snímka ojedinelého prípadu priemyselného sneženia, ktoré sa vyskytlo takmer vo všetkých priemyselných oblastiach na západnom Slovensku

Na Slovensku sa nachádza viacero miest, kde sa vyskytuje priemyselné sneženie. Všetky miesta na Slovensku, v ktorých máme potvrdený výskyt priemyselného sneženia, môžeme vidieť na obr. 22. Jedným z najzaujímavejších prípadov, je prípad z januára roku 2020, kedy sa sneženie vyskytlo vo viacerých lokalitách na západnom Slovensku (obr. 21).



Obr. 22: Miesta na Slovensku s potvrdeným výskytom priemyselného sneženia

4 Záver

Priestorovou analýzou a odhadom výšky snehovej pokrývky v troch konkrétnych prípadoch z Bratislavy a Košíc počas zimy 2024/2025 sme poukázali na výskyt priemyselného sneženia v hustejšie obývaných oblastiach.

Takisto sme spracovali výskyt potenciálneho výskytu priemyselného sneženia v rokoch 1980 až 2016 na stanici, ktorá sa nachádza na košickom letisku. Vieme, že podľa doterajších pozorovaní sa často nachádzala v spáde priemyselného sneženia, ale ak by sme chceli tento výsledok aplikovať pre oblasť Košíc so zdrojom US Steel, musíme počítať s tým, že by bol podhodnotený. Za také dlhé časové obdobie sa určite vyskytli prípady, pri ktorých stanica na košickom letisku nebola v spáde sneženia. Výsledok však poukazuje na to, že jav priemyselného sneženia nie je fenoménom posledných rokov, ale siaha aj do dávnejšieho

obdobia, pričom sme vyzdvihli doposiaľ nameraný rekord výšky snehovej pokrývky spôsobenej priemyselným snežením na Slovensku. Treba poznamenať, že to nemuselo byť ani maximum, ale disponujeme iba týmto údajom.

V našom príspevku sme sa venovali iba prípadom z Bratislavy a Košíc. Ako môžeme vidieť na obr. 22, priemyselné sneženie sa môže vyskytnúť takmer v každej priemyselnej oblasti na Slovensku. Najväčším problémom je podchytenie a identifikovanie prípadov. To, že sa stanica nachádza v spáde sneženia je "šťastnou" okolnosťou. Okrem oblasti Košíc sa na iných miestach Slovenska v nami skúmanom časovom období, ani jedna stanica nenachádzala v jeho spáde. Práve sociálne siete sa ukázali ako veľmi dobrý spôsob hľadania lokalít s výskytom priemyselného sneženia. Výbornými príkladmi sú mestá Martin a Ružomberok, v ktorých sa nenachádza profesionálna stanica, ktorá by poskytovala SYNOP správy. Takisto poloha a orografia týchto oblastí v zimnom období neprináša vhodné podmienky pre získanie bezoblačných satelitných snímok, ktoré by mohli potvrdiť výskyt priemyselného sneženia v nich. Nemáme ani jednu satelitnú snímku, ktorá by potvrdzovala výskyt v Ružomberku, no vďaka náhodným pozorovateľom, ktorý zdieľajú pozorovania a informácie na sociálnych sieťach vieme, že Ružomberok je jednou z lokalít s najčastejším výskytom priemyselného sneženia na Slovensku.

V ďalšom výskume sa podrobnejšie zameriame na vlastnosti vzduchovej hmoty, prúdenie, parametre nízkej oblačnosti a jej denný chod, ako aj základnú klimatológiu javu.

Poďakovanie

Touto cestou by som chcel poďakovať môjmu školiteľovi Mgr. Miroslavovi Šingerovi, PhD za jeho odborné vedenie, cenné rady, pomoc a ochotu.

Takisto sa chcem poďakovať konzultantovi mojej diplomovej práce Mgr. Tomášovi Fedorovi, ktorý spravil terénne merania výšky snehovej pokrývky v Košiciach, ktoré boli použité pre analýzu v tomto článku.

Literatúra

[Frederik, 2023] Frederik, A., (2023). Priemyselný sneh a jeho ekonomické dopady na prevádzku letiska Košice [Diplomová práca], Technická univerzita v Košiciach, 75 s. [cit. 2025-2-9], dostupné na: https://opac.crzp.sk/?fn=detailBiblioFormChildI1DPIM&sid=880D977B60C8641DDBE9239C4FC3&seo=CRZP-detail-kniha

[Graham, 2024] Graham, E., (2024). Industrieschnee: An overview of some European anthropogenic snowfall events, with a case study from Bern (Switzerland). *Weather, 79: 4-9.* [cit. 2025-2-9] dostupné na: https://rmets.onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/wea.4509

[Liechti, 2004] Liechti, O., (2004). Industrial snow, Proceedings of the 12th SIRWEC Conference, Bingen, Germany, 2004, [cit. 2025-2-10] dostupné na: https://sirwec.org/wp-content/uploads/2022/04/Bingen-D-01.pdf

[Mayes, 2023] Mayes, J., (2023). Linear snowfall trails during freezing fog in South East England, 23 January 2023: evidence for anthropogenic snowfall, Weather, 10.1002/wea.4511, 79, 1, (20-24), [cit. 2025-2-9] dostupné na: https://rmets.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/wea.4511

[Ruzs et al., 2017] Rusz, O., Stăncescu, M., Nagy, I. (2017). Unusual meteorological phenomena at Târgu Mureş in the last years. In: Air and Water Components of the Environment Conference/Aerul si Apa Componente ale Mediului, Babes-Bolyai University, Cluj-Napoca, Romania, March 2017 [cit. 2025-2-9] dostupné na: https://doi.org/10.24193/AWC2017_46

[Simpson et al., 2015] Simpson, B.J, Jackson, J., Lindley T.T., Scotten, K., (2015). Anthropogenic snow: a case of industrial plant-induced snowfall in the Texas panhandle. In: Presentation at the 20th Conference on Planned and Inadvertent Weather Modification. *American Meteorological Society*, Phoenix, Arizona, USA, January 04–08, *2015* [cit. 2025-2-9] dostupné na: https://ams.confex.com/ams/95Annual/webprogram/Paper266898.html

[Wood a Harrison, 2009a] Wood, C.R., Harrison, R.G., (2009). Anthropogenic snowfall events in the UK: examples of urban weather modification? *Weather 64: 277–280* [cit. 2025-2-9] dostupné na: https://urban.fmi.fi/papers/Wood/Wood+Harrison_2009_Weather.pdf

[Wood a Harrison, 2009b] Wood, C.R., Harrison, R.G., (2009). Some reports of snowfall from fog during the UK winter of 2008/09 [cit. 2025-2-9] dostupné na: https://urban.fmi.fi/papers/Wood/Wood+Harrison_2009_ArXiv_v2.pdf

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 10–12
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Michal Šturc

Coupling of dark and baryonic matter in the Milky Way galaxy II

Michal Šturc[1]*
Supervisor: Jozef Klačka[1‡§]
[1] DAA, DAPEM, FMPH CU, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

1 Introduction

It has been observed that the gravitational action of the visible matter alone can't explain the motion in the Milky Way galaxy [Rubin and Ford, 1970] or other large-scale structures [Zwicky, 1933]. Since the behaviour of dark matter halos is highly consistent across galaxies, a change in the law of motion [Milgrom, 1983] or the law of gravity [McGaugh et al., 2016] has been proposed. The interpolating function forming the basis of these hypothesized new laws can be interpreted as a coupling of the distribution of dark and baryonic matter.

2 Observations

The change in the law of motion or gravity can be expressed as

$$g_{\mathrm{obs}} = g_{\mathrm{BM}} \times F(g_{\mathrm{BM}}), \tag{1}$$

where g_{obs} is the centripetal acceleration necessary to explain the observed motion, g_{BM} is the gravitational acceleration inferred from observations and $F(\cdot)$ is the fitted interpolating function. In the case of the paper by McGaugh et al. (2016), the interpolating function has the form

$$g_{\mathrm{obs}} = \frac{g_{\mathrm{BM}}}{1 - \exp\left(-\sqrt{g_{\mathrm{BM}}/g_{+}}\right)}, \tag{2}$$

where $g_{+} = 1.2 \times 10^{-10}\,\mathrm{ms}^{-2}$. In this case, the interpolating function is then equal to

$$F(g_{BM}) = \frac{1}{1 - \exp\left(-\sqrt{g_{\mathrm{BM}}/g_{+}}\right)}. \tag{3}$$

Equation (1) can be interpreted as superposition of dark and baryonic matter and rewritten as

$$g_{\mathrm{obs}} = g_{\mathrm{BM}} + g_{\mathrm{DM}}, \tag{4}$$

so

$$g_{\mathrm{DM}} = g_{\mathrm{obs}} - g_{\mathrm{BM}} \equiv g_{\mathrm{BM}} \times H(g_{\mathrm{BM}}). \tag{5}$$

In the case of McGaugh et al. (2016), g_{DM} and $H(g_{BM})$ have the following forms

$$g_{\mathrm{DM}} = \frac{g_{\mathrm{BM}}}{\exp\left(\sqrt{g_{\mathrm{BM}}/g_{+}}\right) - 1}, \tag{6}$$

$$H(g_{BM}) = \frac{1}{\exp\left(\sqrt{g_{\mathrm{BM}}/g_{+}}\right) - 1}.$$

In Eqs. $(1) - (6)$, all accelerations are only the radial components of the total acceleration at the galactic equator, not the whole vectors.

3 Curl-free acceleration

The straightforward approach to construct a dark matter halo,

$$\vec{g}_{\mathrm{DM}} = \vec{g}_{\mathrm{BM}} \times H(|\vec{g}_{\mathrm{BM}}|) \tag{7}$$

doesn't work, because the right-hand side isn't curl-free for non-spherically symmetric $\vec{g}_{\mathrm{BM}}$. This means that energy would not be conserved during motion along certain closed curves, for example $[R, 0] \to [R + \Delta R, 0] \to [R + \Delta R, z] \to [R, z] \to [R, 0]$ for any coordinates $[R, z]$ in the galactic disc.

4 Results I – final formula

It is possible to add an extra component to the acceleration in Eq. (7) such that the resulting acceleration will be curl-free, namely

$$\vec{g}_{\mathrm{DM}} = \vec{g}_{\mathrm{BM}} \times H(|\vec{g}_{\mathrm{BM}}|) + \vec{g}_{\mathrm{A}}, \tag{8}$$

where $\vec{g}_{\mathrm{A}}$ can be found in terms of $\vec{g}_{\mathrm{BM}} = -\vec{\nabla}\Phi_{\mathrm{BM}}$ and $H(|\vec{g}_{\mathrm{BM}}|)$. In cylindrical coordinates, the solution is

$$\vec{g}_{\mathrm{A}} = \int_0^z \frac{\partial\Phi(R,\xi)}{\partial\xi}\frac{\partial H(R,\xi)}{\partial R}\,\mathrm{d}\xi\,\hat{R} + \int_0^R \frac{\partial\Phi(\eta,z)}{\partial\eta}\frac{\partial H(\eta,z)}{\partial z}\,\mathrm{d}\eta\,\hat{z}. \tag{9}$$

Here η and ξ are only integral variables in place of R and z. The formula obtained using this approach is curl-free, but can't include non-axisymmetric

* Michal.Sturc@fmph.uniba.sk
‡ Jozef.Klacka@fmph.uniba.sk
§ Supervisor

galactic components, such as the central bar, spiral arms or the galactic warp. A general formula is presented in Eq. (10) . However, this form if computationally much more expensive than Eq. (9).

$$\vec{g}_{\mathrm{A}} \tag{10}$$
$$= \left\{ \int_0^x \left[-\frac{\partial \Phi(x,y,\xi)}{\partial \xi} H(x,y,\xi) \right]_x' \mathrm{d}\xi \right.$$
$$+ \int_0^x \left[-\frac{\partial \Phi(x,\beta,z)}{\partial \beta} H(x,\beta,z) \right]_x' \mathrm{d}\beta \Big\} \hat{x}$$
$$+ \left\{ \int_0^y \left[-\frac{\partial \Phi(x,y,\xi)}{\partial \xi} H(x,y,\xi) \right]_y' \mathrm{d}\xi \right.$$
$$+ \int_0^y \left[-\frac{\partial \Phi(\alpha,y,z)}{\partial \alpha} H(\alpha,y,z) \right]_y' \mathrm{d}\alpha \Big\} \hat{y}$$
$$+ \left\{ \int_0^z \left[-\frac{\partial \Phi(x,\beta,\xi)}{\partial \beta} H(x,\beta,z) \right]_z' \mathrm{d}\beta \right.$$
$$+ \int_0^z \left[-\frac{\partial \Phi(\alpha,y,z)}{\partial \alpha} H(\alpha,y,z) \right]_z' \mathrm{d}\alpha \Big\} \hat{z}$$

Here, α, β, ξ are integral variables in place of x, y, z. By construction, both Eqs. (9) and (10) can have another arbitrary additive term in the form $\vec{\nabla}\Phi(x,y,z)$, as $\vec{\nabla} \times \vec{\nabla}\Phi(x,y,z)$.

5 Results II - simulations

We adopt the distribution of the baryonic matter from Pouliasis et al. (2017), Model I (p. 3, Table 1). Because this distribution is axi-symmetric, we will use Eq. (9).

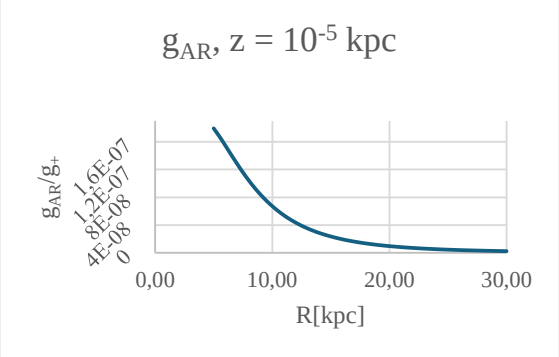


Fig. 1 Radial component of acceleration at the Galactic equator at $z = 10^{-5}$ kpc. As expected from the construction of $\vec{g}_{\mathrm{A}}$, the radial acceleration near the Galactic equator is negligible.

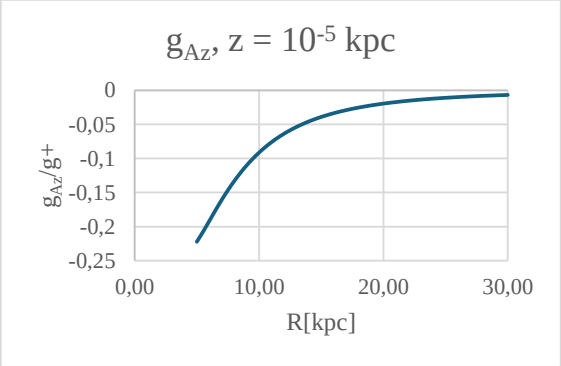


Fig. 2 Vertical acceleration at the Galactic equator at $z = 10^{-5}$ kpc.

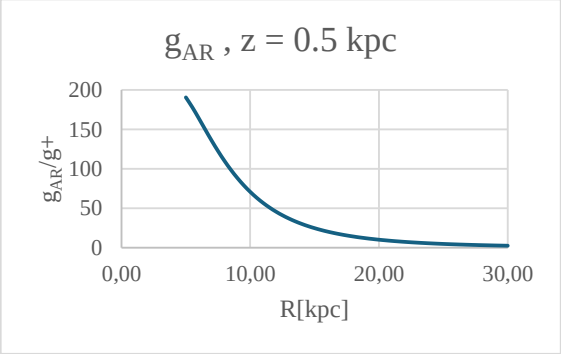


Fig. 3 Radial component of acceleration at the Galactic equator at $z = 0.5$ kpc.

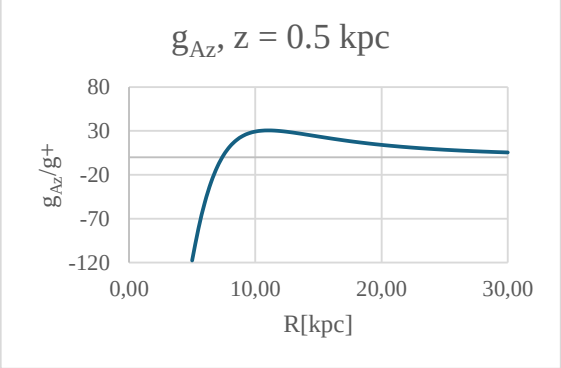


Fig. 4 Vertical acceleration at the Galactic equator at $z = 0.5$ kpc.

6 Conclusion

It is possible to interpret the interpolating formula (Eq. 1) as superposition of dark and baryonic matter. However, it is necessary to add a term to make the final acceleration vector (Eqs. 9 or 10) curl-free and thus physical (Sec. 3). After adding this term, the resulting accelerations are unphysically high (Figs. 3 and 4). This suggests that either another term must be added or that this interpretation of the interpolating formula is not correct.

1 References

[Zwicky, 1933] Zwicky, F. (1933). Die Rotverschiebung von extragalaktischen Nebeln. *Helvetica Physica Acta*, vol. 6, p. 110-127

[Rubin and Ford, 1970] Rubin, V. C. and Ford, W. K. Jr. (1970). Rotation of the Andromeda Nebula from a Spectroscopic Survey of Emission Regions. *Astrophysical Journal*, vol. 159, p. 379

[Milgrom, 1983] Milgrom, M. (1983). A modification of the Newtonian dynamics as a possible alternative to the hidden mass hypothesis. *Astrophysical Journal*, vol. 270, p. 365-370

[McGaugh et al., 2016] McGaugh, S., Lelli, F., and Schombert, J. M. (2016). Radial Acceleration in Rotationally Supported Galaxies. *Physical Review Letters*, vol. 117, issue 20.

[Pouliasis et al., 2017] Pouliasis, E., Di Matteo, P., Haywwod, M. (2017)

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 13–25
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Martin Vozár

Dekompozícia polí meteorologických veličín metódami strojového učenia

Martin Vozár[1,2*]

Školiteľ: Martin Gera[1†]

[1] Katedra astronómie, fyziky Zeme a meteorológie, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2] IBL Software Engineering, spol. s r.o., Galvaniho 17C, 821 04 Bratislava

Abstrakt: V tejto práci sa venujeme aplikovaniu vybraných metód strojového učenia na získanie reprezentácií polí vybraných meteorologických veličín datasetu CERRA. Reprezentácie sú vo forme jednorozmerných vektorov a ich kvalitu posudzujeme niekoľkými metrikami odlišnosti medzi spätnou rekonštrukciou a pôvodným poľom.

Aplikujeme lineárnu dekompozíciu a neurónové siete typu autoenkóder. Za týmto účelom využívame implementácie sietí z počítačového videnia s doimplementovanými vlastnými komponentami.

Porovnávame presnosť a prenosnosť metód medzi doménami, ako aj vplyv optimalizovaných metrík na priestorovú distribúciu chyby.

Kľúčové slová: strojové učenie, hlboké učenie, autoenkóder

1 Úvod

V súčasnosti sú pomerne dobre preskúmané metódy hlbokého učenia (ďalej DL, z angl. deep learning) na polia vstupujúce do fyzikálnych numerických predpovedných modelov (ďalej NWP, angl. numerical weather prediction). Jedná sa o polia veličín určujúcich stav atmosféry, alebo polia vlastností povrchu. Najvýznamnejšie úspechy prebiehali pri vývoji globálnych predpovedných DL modelov. Najrozšírenejšími sú metódy tzv. grafových neurónových sietí (ďalej GNN, z angl. graph neural network). [1, 2]

Okrem deterministických predpovedných modelov sa súčasný výskum venuje aj tzv. ensemblovým predpovediam. [3]

Aktuálne prelomové práce zahŕňajú aj spracovanie empirických dát (angl. observations) na samotnú predpoveď, bez využitia NWP metód. Významnú rolu zohráva spracovanie družicových snímok aktuálnymi neurónovými sieťami z počítačového videnia (ďalej CV, z angl. computer vision). Konkrétne ide o architektúru ViT (Vision Transformer). [4, 5]

Motivácia pre implementáciu DL modelov na meteorologickú predpoveď je z veľkej časti ekonomická. Napriek tomu, že pri vývoji DL modelov vedia byť pomerne vysoké výpočtové nároky, samotná prevádzka je omnoho menej výpočtovo náročná ako NWP predpoveď. To umožňuje lepšie škálovanie na vyššie rozlíšenia, či dlhší čas predpovedí.

Nedávne štúdie uvádzajú aj pri dlhodobejších predpovediach lepšie výsledky ako NWP modely. Tu však treba poznamenať, že porovnanie bolo robené na pomerne nízkom rozlíšení DL modelu. [1]

Pri mnohých krokoch spracovania meteorologických údajov v rámci NWP sú využívané štatistické metódy, resp. empirické modely. DL metódy, ako podkategória metód strojového učenia, sú v zásade iba nahradením fyzikálnych výpočtov regresormi.

Časť výskumu DL metód v oblasti CV bola venovaná znižovaniu výpočtovej náročnosti. Výsledkom sú siete, ktoré vedia efektívne pracovať aj so vstupmi s vyšším počtom bodov. [6]

Tieto metódy v budúcnosti môžu nájsť uplatnenie aj na detailnejšie dáta z modernejších meteorologických družíc. S narastajúcim rozlíšením alebo počtom kanálov je vhodné venovať pozornosť škálovateľnosti aplikovaných metód.

V tejto práci sa venujeme vybraným metódam získavania reprezentácií polí vybraných meteorologických veličín. Zameriavame sa na polia pri rozlíšení 5.5 km a sledujeme vhodnosť metód na zachytenie variability a štruktúry polí na malých škálach.

2 Dáta

2.1 Voľba datasetu

Pri vývoji globálnych DL modelov je najčastejšou voľbou dataset ERA, resp. súčasná verzia ERA5. Bežne je dostupný vo forme s priestorovým rozlíšením 0.25°, čo zodpovedá približne 10^6 bodom. [7]

V tejto práci budeme pracovať s reanalýzou CERRA. Zachytáva doménu Európy a blízkeho okolia v Lambertovej (kónickej) projekcii pri priestoro-

*vozar26@uniba.sk
†martin.gera@fmph.uniba.sk

vom rozlíšení 5.5 km. Za skúmané obdobie sme zvolili roky 2000 – 2019 vrátane. Celá doména tohto datasetu má napriek svojmu menšiemu priestorovému rozsahu taktiež približne 10^6 bodov vplyvom vyššieho priestorového rozlíšenia. [8]

Z dôvodu užšieho zamerania na čo najlepšiu reprezentáciu prízemných polí sme zúžili výber veličín. Zoznam vybraných veličín:

- Teplota a relatívna vlhkosť vo výške 2 m
- Redukovaný tlak na hladinu mora (MSLP)
- Smer a rýchlosť vetra vo výške 10m
- Teplota a relatívna vlhkosť v hladine 925hPa
- Teplota, relatívna vlhkosť a geopotenciál v hladine 850hPa
- Geopotenciál v hladine 500hPa

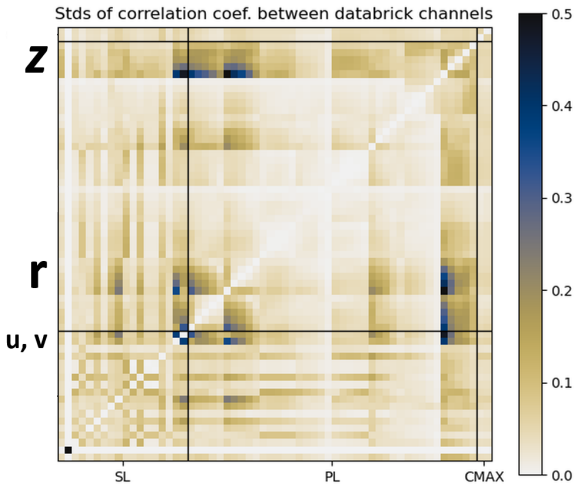
Ako statické veličiny vystupujú:

- Orografia
- Podiel pevniny (land sea mask)

Dôraz kladieme na prízemné polia. Pri výbere vhodných veličín na tento účel sme sa snažili zahrnúť informácie o zvrstvení atmosféry v prízemnej vrstve, ako aj približný obraz o situácii na mezoškále.

Celkový počet veličín sme chceli zachovať nízky, a to najmä z dôvodov časovej náročnosti výpočtov. Z rovnakého dôvodu sme namiesto celej domény venovali pozornosť konkrétnym výsekom domény (ďalej lokality). Zamerali sme sa na lokality s výraznými orografickými prvkami, pričom sme sa snažili zahrnúť klimatologicky rôzne oblasti. Ako veľkosť lokality sme zvolili 121×67 gridových bodov, v rámci predprípravy na experiment s datasetom krátkodobých predpovedí na výseku modelu ALADIN.

Za účelom vhodného výberu polí z datasetu CERRA sme na datasete predpovedí ALADIN vypracovali korelačnú analýzu medzi jednotlivými poliami. Konkrétne sme sa zameriavali na priestorovú rôznorodosť korelačného koeficientu, ktorý sme pre každý pár veličín počítali v každom bode nezávisle. Všímali sme si preto hlavne štandardnú odchýlku hodnôt korelačného koeficientu. Táto hodnota kvantifikuje priestorovú rôznorodosť interakcie dvoch veličín. Môže ísť teda o orografickú podmienenosť, alebo interakciu s iným, priestorovo podmieneným faktorom.



Obr. 1: Farebne kódovaná tabuľka štandardných odchýlok hodnôt korelačného koeficientu medzi jednotlivými veličinami. Popisky na osiach sú pre prehľadnosť, tabuľka je symetrická.

Na obr. 1 vizualizujeme tabuľku štandardnej odchýlky korelačného koeficientu. Najvyššie hodnoty pozorujeme medzi výškou nižších geopotenciálnych hladín (925 hPa, 850 hPa) a prízemným vetrom, či vlhkostnými charakteristikami.

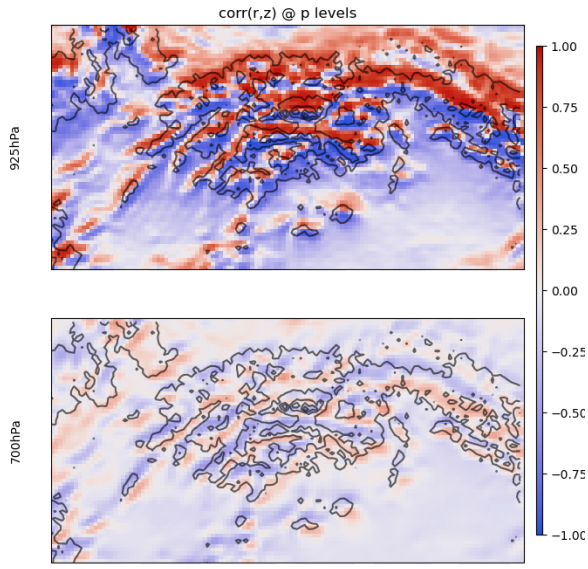
Pri vizualizácii korelačného koeficientu v mapovom zobrazení (obr. 2) pozorujeme, že sa vo viacerých prípadoch jedná o efekty orografie. Výstupy tejto analýzy zohrávali významnú úlohu pri výbere vstupných polí.

2.1.1 Delenie dát (data split)

Pri metódach strojového učenia je vhodné rozdeliť dáta na tzv. trénovaciu množinu a testovaciu množinu. Pomerne zaužívaným spôsobom rozdelenia je náhodné delenie, poprípade delenie podľa obdobia.

V experimente s lokalitami sa inšpirujeme metódou rozdelenia podľa jednotlivých lokalít. To znamená, že na všetkých vstupoch z 12 lokalít je sieť optimalizovaná, a na všetkých vstupoch z iných 4 lokalít ju vyhodnocujeme. Snažíme sa tak vyšetriť schopnosť siete zovšeobecniť vplyv orografie, za predpokladu, že má k dispozícii pole štatistík lokalít z testovacej množiny μ_{ij} a σ_{ij}. [9]

Navyše ešte formulujeme tzv. validačnú množinu. Tá slúži na monitorovanie zle generalizujúceho modelu aj v rámci lokalít vstupujúcich do optimalizácie. Oddeľujeme teda 20% trénovacej množiny. Tieto



Obr. 2: Mapové zobrazenie korelačného koeficientu medzi relatívnou vlhkosťou r a výškou geopotenciálnej hladiny z v hladinách 925 hPa a 700 hPa na oblasti Slovenska a okolia. Izočiary naznačujú orografiu. Môžeme pozorovať významný vplyv orografie, klesajúci vplyv orografie na vyššie hladiny.

konkrétne prípady model nemá k dispozícii pri optimalizácii. Tu využívame delenie podľa obdobia.

2.2 Predspracovanie

2.2.1 Predspracovanie dynamických veličín

Pri aplikovaní ML (vrátane DL) metód je vhodné zabezpečiť, aby jednotlivé hodnoty boli podobnej škály. Vstupné polia usporiadavame do trojrozmerného poľa tvaru $V \times I \times J$, kde V je počet vybraných premenných, I a J sú počty gridových bodov v približne zonálnom, resp. približne meridionálnom smere.

V rámci predspracovania sa venujeme otázke centrovania a škálovania. Pre účely centrovania vstupných polí predpočítame pole priemerov μ_{ij} za zvolené časové obdobie:

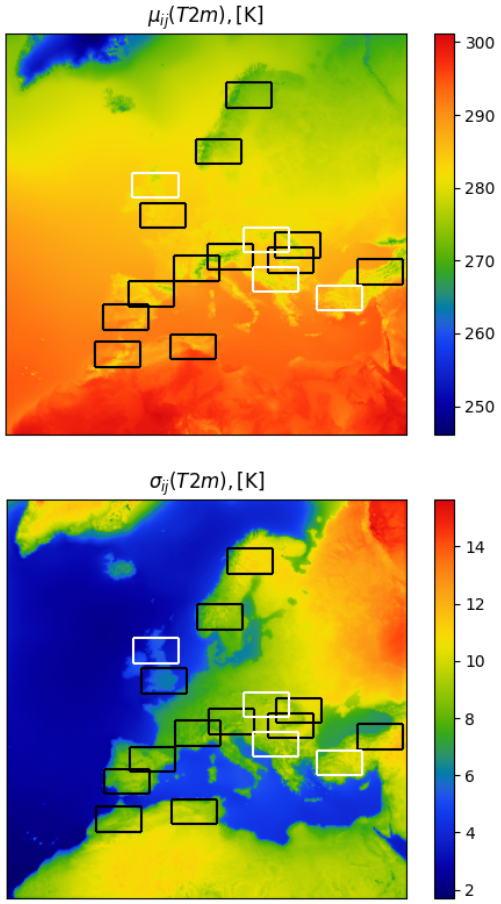
$$\mu_{ij} = \frac{1}{T}\sum_{t}^{T} x_{tij} \tag{1}$$

Pre účely škálovania predpočítavame taktiež polia štandardných odchýlok σ_{ij}:

$$\sigma_{ij}^2 = \frac{1}{T}\sum_{t}^{T} (x_{tij} - \mu_{tij})^2 \tag{2}$$

Indexy i, j označujú priestorový index v poli, t označuje index v čase. Index veličiny vynechávame pre prehľadnosť.

Na obr. 3 vizualizujeme mapy hodnôt priemeru a štandardnej odchýlky poľa teploty spolu s výberom regiónov.



Obr. 3: Vybrané likality. Čierne rámčeky označujú lokality vstupujúce do optimalizácie, biele rámčeky označujú lokality vstupujúce do vyhodnotenia. Podkladová mapa je mapa priemernej teploty vo výške 2 m v K v rámci zvoleného obdobia z datasetu CERRA (hore), resp. mapa hodnôt štandardnej odchýlky (dole).

Zavádzame:

$$\hat{\sigma} = \frac{1}{IJ}\sum_{i,j}^{I,J} \sigma_{ij} \approx \sigma \tag{3}$$

kde σ by bola daná globálne. Týmto prístupom nám postačujú uložené polia μ_{ij} a σ_{ij}.

Porovnávané metódy štandardizácie sú dané vzťahom pre bodovú (ďalej pw, point-wise):

$$z_{ij} = \frac{x_{ij} - \mu_{ij}}{\sigma_{ij}} \tag{4}$$

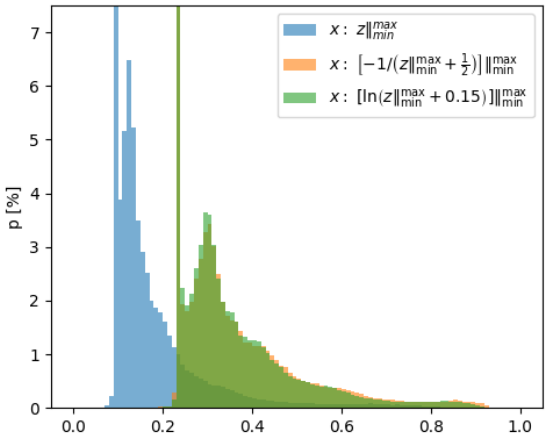
a pre globálne škálovanie, pri bodovom centrovaní (ďalej h, od pôvodného pracovného názvu hybrid):

$$z_{ij} = \frac{x_{ij} - \mu_{ij}}{\hat{\sigma}} \tag{5}$$

Pre jednoznačnosť budeme uvádzať výsledky v neškálovanom a necentrovanom tvare, a teda aj s fyzikálnou jednotkou.

Dôvodom tohto porovnania je skutočnosť, že pw škálovanie viac znižuje škálu (resp. rozsah) bodov s vyššou hodnotou σ_{ij}, čo môže byť pri snahe zachytiť maloškálové javy limitáciou.

Medzi alternatívy patrí aj tzv. min-max normalizácia. Pri tej však nie je zaručené, že normalizovaná veličina je centrovaná. Aj v prípade dodatočného centrovania môže byť citlivejšia na chvosty distribúcie.



Obr. 4: Zobrazenie $\tau_1(z)$, $\tau_2(z)$, $\tau_3(z)$, binované. Vo všetkých distribúciách je najvýraznejší pík hladina mora, ktorá pre prehľadnosť presahuje rozsah grafu.

2.2.2 Predspracovanie statických veličín

Pole land sea mask je v pôvodnom formáte v rozsahu $[0,1]$, čo je vyhovujúce a nevyžaduje ďalšie úpravy.

Pri poli orografie z je vhodné hodnoty preškálovať. Pre jednoduchosť vyjadrenia zavádzame operátor preškálovanie do intervalu $[0,1]$:

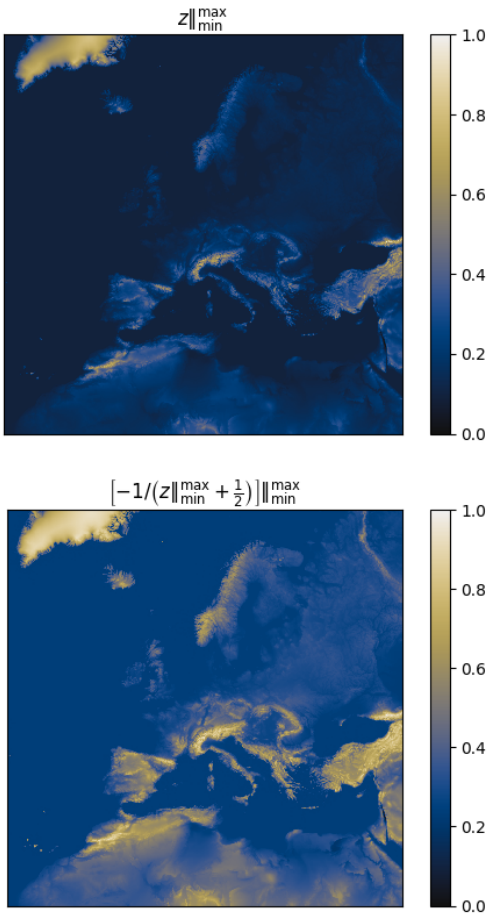
$$\xi\|_{min}^{max} = \frac{\xi - \min(\xi)}{\max(\xi) - \min(\xi)} \tag{6}$$

Porovnávame histogramy nasledujúcich transformácií orografie a vizualizujeme na obr. 4:

$$\tau_1(z) = z\|_{min}^{max} \tag{7}$$
$$\tau_2(z) = [-1/(z\|_{min}^{max} + 0.5)]\|_{min}^{max} \tag{8}$$
$$\tau_3(z) = [\ln(z\|_{min}^{max} + 0.15)]\|_{min}^{max} \tag{9}$$

Transformáciami sa snažíme priblížiť uniformnému rozdeleniu bez skreslenia charakteru poľa. Strácame síce verne zachytené extrémne maximá, ale získavame menej strmú distribúciu okolo druhého najvýraznejšieho píku, ktorý vyjadruje pevninu v nadmorskej výške približne v rozsahu $100-200$m.

Volíme transformáciu τ_2, keďže má o niečo lepšie vyjadrený chvost distribúcie. Táto voľba je arbitrárna, nakoľko existuje množstvo vhodných transformácií. Vplyv tejto voľby sme ďalej nepreskúmali. Zvolenú transformáciu vizualizujeme na obr. 5.



Obr. 5: Zobrazenie $\tau_1(z)$ a $\tau_2(z)$ s využitím percepčne uniformnej farebnej škály. [10]

3 Predchádzajúce práce

3.1 ConvAE

Jedným z priamych východísk je štúdia porovnávajúca PCA reprezentácie s pomerne jednoduchou konvolučnou neurónovou sieťou (CNN) Transformácie boli realizované na datasete ERA, pri celkovom rozlíšení 81×81 bodov. V rámci predvýskumu k tejto práci sme túto sieť reimplementovali a adaptovali na $T2m$ z CERRA datasetu bilineárne interpolovanú do rozlíšenia 64×64. Pri tomto rozlíšení bola sieť kompetitívna. Avšak pri ďalších experimentoch so vstupmi o veľkosti 256×256 už sieť nebola vhodná. Dôvodom je malý počet vrstiev v sieti. [11].

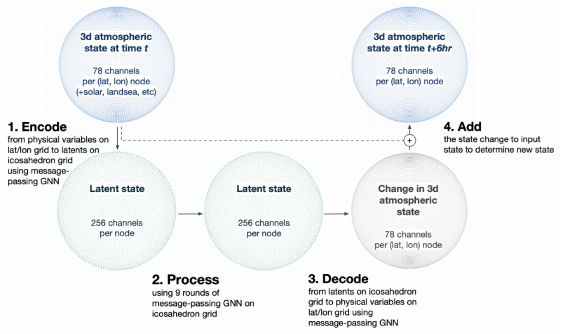
Ďalej sme sieť neupravovali a jej vyhodnoteniu sa v tejto práci nevenujeme.

3.2 GNN

Pri predpovedných DL modeloch je predpovedný krok počítaný ako zmena voči predchádzajúcemu. Vstupné polia teda vstupujú do výpočtu, a latentná reprezentácia nie je nútená obsiahnuť všetky dostupné informácie o stave atmosféry, ale len zložky vplývajúce na zmenu pri časovom kroku [2].

Zapojenie enkóder, procesor, dekóder využíva napríklad ML model AIFS. Schéma je načrtnutá na obr. 6 [1, 2].

V našom prípade sa snažíme dosiahnuť úplnú latentnú reprezentáciu zvolených atmosférických polí. Naše zapojenie teda obsahuje len enkóder a dekóder, pričom dekóder dostáva na vstupe okrem samotnej reprezentácie iba statické veličiny. GNN sa v tejto práci ďalej nevenujeme.



Obr. 6: Schéma zapojenia GNN na predpoveď časového kroku. V tejto práci sa venujeme zapojeniu enkóder a dekóder, vynechávajúc tzv. procesor a záverečné pričítanie k vstupným poliam. [2]

3.3 Počítačové videnie

V tejto práci budeme vychádzať z architektúr NN, ktoré boli vyvinuté so zameraním na výpočtovú účinnosť aj pri väčších veľkostiach vstupných polí. [12, 6]

4 Metódy

Implementované metódy radíme medzi metódy strojového učenia. Ďalej konkrétne neurónové siete radíme medzi metódy hlbokého učenia. [13] [14]

4.1 EOF/PCA

Metóda dekompozície pomocou tzv. empirických ortogonálnych funkcií (EOF), taktiež známa ako analýza hlavných komponentov (ďalej ako PCA, z angl. principal component analysis) sa radí medzi metódy štatistického strojového učenia.

Metóda spočíva v dekompozícii podľa vlastných vektorov centrovanej kovariačnej matice. Nevýhodou metódy je pomerne prudké škálovanie výpočtovej náročnosti $O(\min[T(IJ)^2, T^2IJ])$, kde T je počet časových krokov. [15, 16]

Alternatívam obchádzajúce tento problém v tejto práci neimplementujeme ani nevyhodnocujeme. V literatúre sa vieme stretnúť s tzv. kernel PCA, poprípade inkrementálnom kernel PCA. [17, 18]

Túto metódu považujeme za vhodnú kalibračnú metódu. Počas ladenia sietí sme implementovali aj tzv. PCA asistenciu, kde časť latentnej reprezentácie sú koeficienty komponentov PCA. Tento prístup bol výhodný len pri menšom počte prípadov (vstupujúcich do optimalizácie).

4.2 ConvNeXt-v2 autoenkóder

Prvou preberanou sieťou je CNN, vychádzajúca z ResNet architektúry [19].

Pri implementácií ConvNext siete bola snaha o aktualizáciu konvolučných sietí. Výsledkom je kombinácia rôznych prvkov výpočtového grafu ako aj samotných techník pri optimalizácii. V tejto práci preberáme architektúru z nadväzujúcej práce ConvNeXt V2, kde mierne zmenili normalizačné vrstvy v rámci výpočtových blokov. [20, 12]

4.3 SHViT autoenkóder

V problematike počítačového videnia boli dlho siete CNN dominantnou formou metód DL. V posledných rokoch sa do popredi čoraz viac dostávajú siete typu Transformer, resp. Vision Transformer. [5]

Problémom týchto architektúr je škálovanie výpočtovej náročnosti s rozlíšením vstupu. Spomedzi súčasných riešení tohto problému sme zvolili architektúru SHViT, ktorá kombinuje konvolučné vrstvy s vrstvami tzv. Attention tak, aby zachovali kvalitu výstupov pri nižších výpočtových nárokoch, resp. lepšom škálovaní nárokov pri vyššom rozlíšení vstupov. [6]

4.4 Dekóder

K architektúram ConvNeXt V2 aj SHViT sme doimplementovali dekóder. Štandardné výpočtové bloky boli ponechané. Výpočtové vrstvy, ktoré v enkóderi znižujú rozlíšenie boli v dekóderi nahradené vrstvami zvyšujúce rozlíšenie. [12, 6]

Najčastejšie išlo o nahradenie konvolučných vrstiev vrstvami transponovaných konvolúcií. V dekóderi pre SHViT je navyše lineárna vrstva namiesto adaptívneho priemerovania vystupujúceho v enkóderi.

4.5 Autoenkóder

Pri zapojení enkóder E, dekóder D pri súčasnom optimalizovaní oboch komponentov hovoríme o autoenkóderi. Schému formulujeme:

$$\mathbf{Z} = E(\mathbf{X}) \tag{10}$$

$$\hat{\mathbf{X}} = D(\mathbf{Z}) \tag{11}$$

Pričom optimalizujeme chybu spätnej rekonštrukcie poľa $L(\hat{\mathbf{X}},\ \mathbf{X})$.

4.6 Enkóder statických veličín

Ako jedno z riešení extrakcie informácie zo statických polí sme navrhli prístup samostatného, menšieho enkódera typu SHViT-s1 podľa pôvodnej implementácie.

Implementovali sme dva samostatné takéto moduly. Jedna prispieva k dodatočnej korekcii latentnej reprezentácie:

$$\mathbf{Z}' = \mathrm{MLP}([E\mathbf{X},\ \mathbf{E}_{ES}\mathbf{S}]) \tag{12}$$

a druhá napomáha dekóderu:

$$\hat{\mathbf{X}}' = D\left\{\mathrm{MLP}([\mathbf{Z}',\ \mathbf{E}_{DS}\mathbf{S}])\right\} \tag{13}$$

kde $\mathbf{E}_{ES}$, $\mathbf{E}_{DS}$ sú SHViT-s1 aplikované na pole statických veličín, $\mathbf{S}$ je tenzor statických veličín konkrétnej parcely. E, D sú vo všeobecnosti enkóder. Notáciou $[\ldots]$ označujeme konkatenáciu. Operátor MLP (multi layer perceptron) je vo všeobecnosti sekvencia operátorov:

$$\mathrm{MLP}(\xi) = \sigma(\mathbf{W}_f(\ldots\sigma(\mathbf{W}_1\xi)\ldots)) \tag{14}$$

kde W_i sú matice váh i-tej vrstvy, σ je vo všeobecnosti tzv. aktivačná funkcia. [21]

Pri našej implementácii používame ako σ funkciu GELU:

$$\mathrm{GELU}(\xi) = \frac{\xi}{2}\left[1 + \mathrm{erf}\left(\frac{\xi}{\sqrt{2}}\right)\right] \tag{15}$$

[22]

Medzi alternatívne postupy patrí napr. pridanie kanálov statických veličín na vstup enkódera. Vtedy sa otvára otázka, či od autoenkódera požadovať rekonštrukciu statických polí. Pokiaľ áno, môžeme podporiť tendencie na overfitting. V prípade, že nie, strácame možnosť stratovej funkcie počítanej medzi jednotlivými symetrickými výpočtovými štádiami v enkóderi a dekóderi.

Porovnávame oba postupy, pričom nastavenie optimalizácie zachovávame pre obe zapojenia totožné.

4.7 Optimalizácia

4.7.1 Optimizér

Využívame optimizér AdamW. Jedná sa o metódu vychádzajúcu zo stochastických gradientových metód (SGD), s využitím adaptívneho kroku. Oproti donedávna populárnemu optimizéru Adam je pri AdamW korekcia tzv. L2 regularizácie. Táto metóda penalizuje veľké hodnoty parametrov sietí, čo podporuje tendenciu konvergovať k jednoduchším riešeniam. [23, 24]

Taktiež využívame techniku AMSGrad, pre dodatočnú stabilizáciu optimalizácie. [25]

Využívame viacstupňové znižovanie optimalizačného kroku v neskorších štádiach optimalizácie za účelom zlepšenia konvergencie.

4.7.2 Optimalizovaná metrika

Optimalizujeme viaceré metriky kvantifikujúce rozdiel medzi rekonštrukciou $\hat{\mathbf{X}}$ a vstupným poľom $\mathbf{X}$.

Častou voľbou býva stredná kvadratická chyba L_2, alebo stredná absolútna chyba L_1:

$$L_1 = \frac{1}{IJV}\sum_{i,j,v}^{I,J,V} |\hat{x}_{ijv} - x_{ijv}| \tag{16}$$

$$L_2 = \frac{1}{IJV}\sum_{i,j,v}^{I,J,V} (\hat{x}_{ijv} - x_{ijv})^2 \tag{17}$$

Preberáme metriku použitú v predchádzajúcom projekte, kde bolo cieľom zachytiť maloškálovú štruktúru polí. Metriku označujeme L_{c1} (kompozit 1) a je daná vzťahom:

$$L_{c1} = L_1(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{X}) + L_1(\mathbf{K}_u\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{K}_u\mathbf{X}) + L_1(\mathbf{K}_g\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{K}_g\mathbf{X}) \tag{18}$$

kde $\mathbf{K}_u$ je uniformný kernel, a $\mathbf{K}_g$ je gaussovský kernel s maximom v strede. V pôvodnej implementácii bola nastavená veľkosť kernelov na hodnotu 5. Keďže metriku autori navrhovali pri práci s CERRA datasetom, jej nastavenie neupravujeme. [26]

V oblasti CV je pomerne rozšírené využívanie tzv. percepčných metrík. Tie sú dizajnované tak, aby emulovali ľudské vnímanie podobnosti obrázkov. Nakoľko chceme využiť metriku aj pri optimalizácii, zvolili sme ako percepčnú metriku tzv. MS-SSIM (z angl. multi-scale structural similarity, viacškálová štrukturálna podobnosť).

SSIM (štrukturálna podobnosť) je daná:

$$\mathrm{SSIM}(x,y) = [l(x,y)]^{\alpha} \cdot [c(x,y)]^{\beta} \cdot [s(x,y)]^{\gamma} \tag{19}$$

pričom l je označované ako zložka luminencie (intenzity), c zložka kontrastu a s ako štrukturálna zložka, popísané vzťahmi:

$$l(x,y) = \frac{2\mu_x\mu_y + C_1}{\mu_x^2 + \mu_y^2 + C_1} \tag{20}$$

$$c(x,y) = \frac{2\sigma_x\sigma_y + C_2}{\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + C_2} \tag{21}$$

$$s(x,y) = \frac{\sigma_{xy} + C_3}{\sigma_x\sigma_y + C_3} \tag{22}$$

Výsledná hodnota metriky je určená:

$$\text{MS-SSIM}(X,Y) = [l_M(X,Y)]^{\alpha_M} \cdot \prod_{j=1}^{M} [c_j(X,Y) \cdot s_j(X,Y)]^{\beta_j} \tag{23}$$

Zaužívaný je počet posudzovaných škál $M = 5$. Vyššie škály označujú vždy dvojnásobné zníženie rozlíšenia (v oboch horizontálnych smeroch). Hodnoty parametrov pre vyváženie vplyvu jednotlivých škál sú v takom prípade typicky nastavené:

$$\alpha_M = 0.1333,\ \beta_1 = 0.0448,\ \beta_2 = 0.2856,$$
$$\beta_3 = 0.3001,\ \beta_4 = 0.2363,\ \beta_5 = 0.1333$$

[27]

Následne zavádzame L_{c2} (kompozit 2):

$$L_{c2} = \frac{1}{2}(L_1 + \text{MS-SSIM}) \tag{24}$$

Optimalizujeme metriky L_1, L_{c1}, a L_{c2} vypočítané pre veličiny:

- Teplota vo výške 2 m
- MSLP
- Smer vetra v 10m
- Rýchlosť vetra v 10m

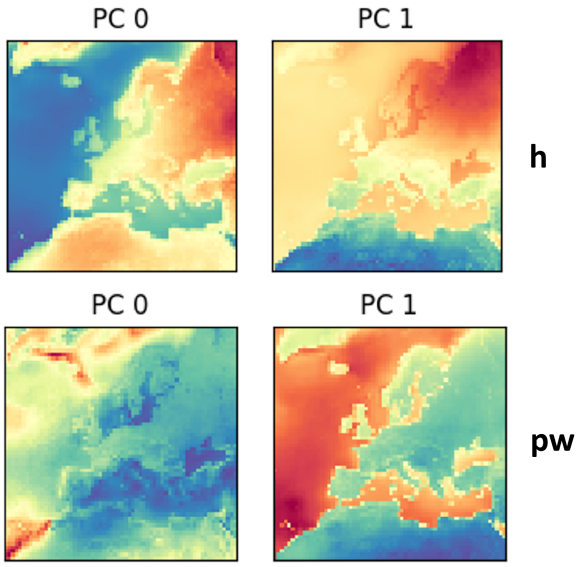
Zužujeme teda výber optimalizovaných metrík na veličiny na, alebo blízko povrchu.

5 Výsledky

5.1 PCA

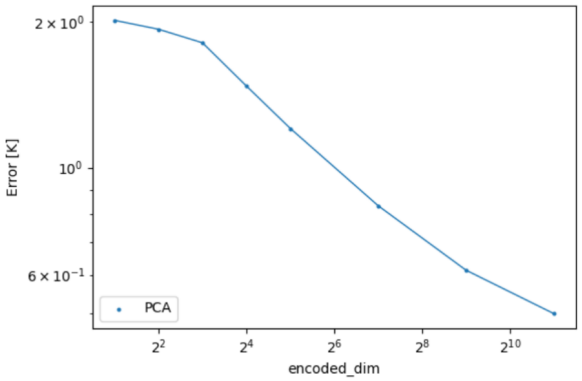
V rámci predexperimentu na poliach teploty vo výške 2 m na celej doméne CERRA, bilineárne interpolovanej na rozlíšenie 256×256 sme vyhodnocovali vplyv metódy štandardizácie na formu základných komponentov.

Na obr. 7 vizualizujeme dva najvýznamnejšie komponenty (tie, ktoré vysvetľujú najviac variability dát) pre obe metódy (pw, h).



Obr. 7: Polia dvoch najvýznamnejších módov PCA pre pw a h štandardizáciu pre polia teploty vo výške 2 m z datasetu CERRA. Polia sme z dôvodov výpočtovej náročnosti bilineárne interpolovali do rozlíšenia 256×256.

Napriek značnému rozdielu v získaných komponentoch bola celková chyba, aj jej priestorová distribúcia navzájom porovnateľná. Na obr. 8 zobrazujeme chybu pre pw metódu pre rôzne veľkosti latentnej reprezentácie.



Obr. 8: Graf priemernej absolútnej chyby rekonštrukcie poľa teploty vo výške 2 m z datasetu CERRA metódou PCA. Na osi x je veľkosť latentnej reprezentácie, na osi y je MAE v [K]. Obe osi sú v logaritmickej škále. Polia sme z dôvodov výpočtovej náročnosti bilineárne interpolovali do rozlíšenia 256×256.

Pri tejto úlohe sme nastavili základné verzie autoenkóderov. Nastavenia sme považovali za vyhovujúce, keď konzistentne pre všetky veľkosti latentnej reprezentácie poskytovali menšiu chybu ako PCA.

5.2 ConvNeXt V2

Autoenkóder odvodený z ConvNeXt V2 (CN2AE) poskytoval veľmi podobné výsledky ako SHViT autoenkóder (SHViTAE). Najzásadnejším rozdielom bola výpočtová náročnosť, kde SHViTAE bol rýchlejší.

Pre stručnosť sa ďalej venujeme iba výsledkom SHViTAE v dvoch variantách zapojenia.

5.3 SHViTAE

Prvá varianta je v zapojení enkóder, dekóder. Enkóder dostáva na vstup všetky dynamické aj statické veličiny a na výstupe rekonštruuje iba dynamické. Z formálneho hľadiska sa teda nejedná o autoenkóder, avšak mechanizmus ostáva rovnaký. Priestorovú distribúciu chyby, štandardnú odchýlku chyby a štandardnú odchýlku pre $T2m$ vizualizujeme na obr. 9 a obr. 11 pre pw a na obr. 10 a obr. 12 pre h štandardizáciu na dvoch zvolených regiónoch.

5.4 SHViTAE+SE

Druhou variantou je enkóder s korekciou pomocou enkódera statických veličín, dekóder s korekciou pomocou (samostatného) enkódera statických veličín.

Výsledku vizualizujeme na obr. 13 a obr. 15 pre pw a na obr. 14 a obr. 12 pre h štandardizáciu.

Obe varianty sme optimalizovali s využitím pw aj h štandardizácie, s využitím L_1, L_{c1}, a L_{c2}.

Pri hlavnom experimente sme použili veľkosť latentnej reprezentácie $|Z| = 256$. Táto hodnota vychádzala z pozorovania kvality výstupov v predexperimente.

6 Diskusia a záver

Medzi metódy predspracovania, ktoré sme zvažovali patria tzv. robustné škálovanie (centrovanie podľa mediánu, škálovanie podľa interkvartilového rozsahu), t-skóre, kvantilové mapovanie. Keďže v praxi sa najčastejšie vyskytuje štandardizácia, rozhodli sme sa preskúmať jej varianty, a porovnanie s inými metódami ponechávame na budúci výskum.

Pri komponentoch PCA pre konkrétne spôsoby štandardizácie môžeme vidieť, že charakter vzniknutých dekompozícií vie byť značne odlišný. Podobne zreteľné sú na priestorovej distribúcii chyby, či priestorovej distribúcii štandardnej odchýlky chyby výstupov neurónových sietí.

Všetky siete konvergovali pomerne rýchlo, a pravdepodobne je možné pri dômyselnejšej optimalizačnej stratégií dosiahnuť lepšie výsledky. V tejto práci sme sa sústredili na preskúmanie metód a dosiahnutie stabilnej optimalizácie bez overfitu.

Pri výbere optimalizovaných metrík sme vychádzali z bežnej praxe v DL, kde najčastejšie je využívaná L_2. V prípade, že výsledok by mal dosahovať dobrý detail na maloškálovej štruktúre, typicky sú už využívané sofistikovanejšie metódy. Nakoľko však aj tie sú zväčša postavené na vhodne zvolenej základnej neurónovej sieti, je vhodné preskúmať vhodnosť takých sietí, ktoré dobre škálujú aj pre väčší priestorový rozsah alebo rozlíšenie.

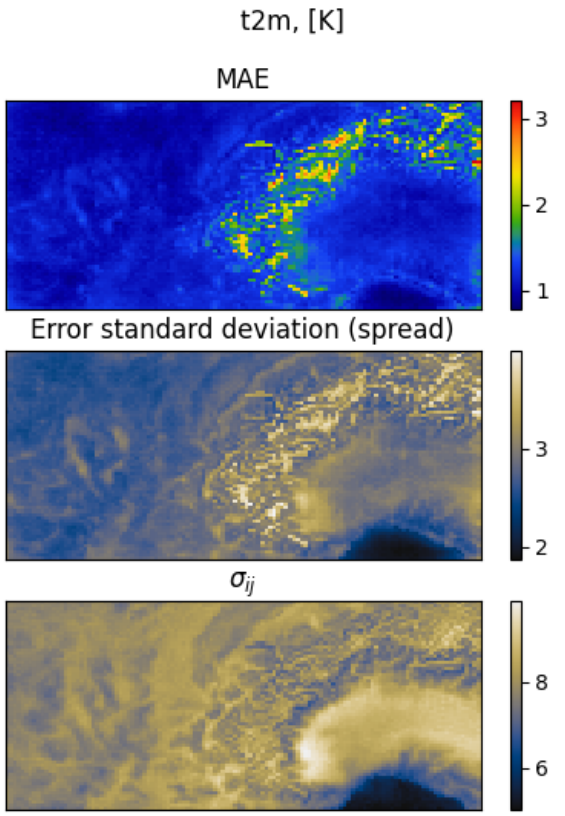
Napriek tomu, že na individuálnych výstupoch rôznych modelov (optimalizovaných inou metrikou) boli nepatrné rozdiely, výsledné MAE aj štandardná odchýlka chyby boli skrz celé množiny dát len s nepatrnými rozdielmi.

Môžeme pozorovať, že chyba na trénovacej a testovacej množine je podobnej škály. Pri SHViTAE+SE je celková MAE na testovacej množine horšia.

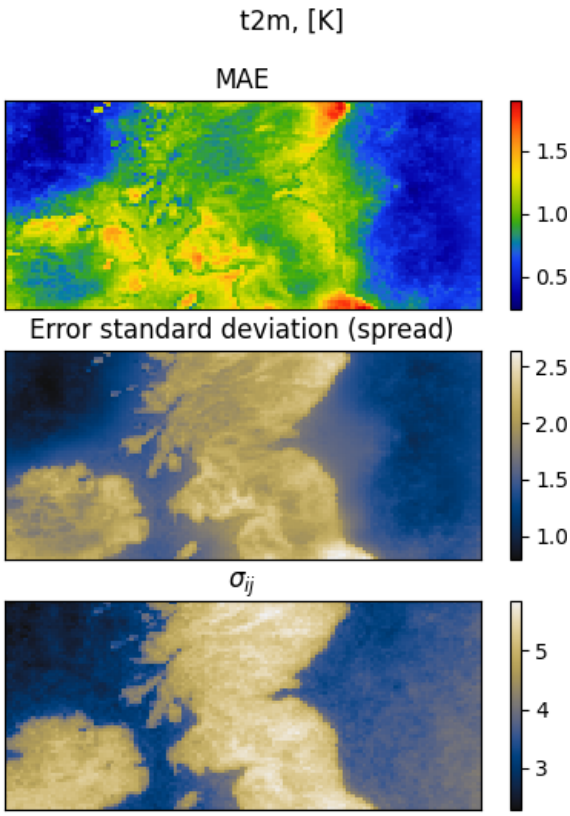
Na doméne z trénovacej množiny rozdiel medzi pw a h metódou štandardizácie nepozorujeme, resp. len minimálny. Na lokalite z testovacej množiny je rozdiel zreteľnejší a to na priestorovom rozložení MAE aj štandardnej odchýlky chyby. Obe sú rovnomernejšie rozdelené medzi morom a pevninou. pw štandardizácia aj pri tejto lokalite pomerne presne kopíruje priestorové rozloženie štandardnej odchýlky veličiny. Škálovanie s priestorovo priemerovanou hodnotou považujeme za vhodný podnet pre ďalší výskum.

Poďakovanie

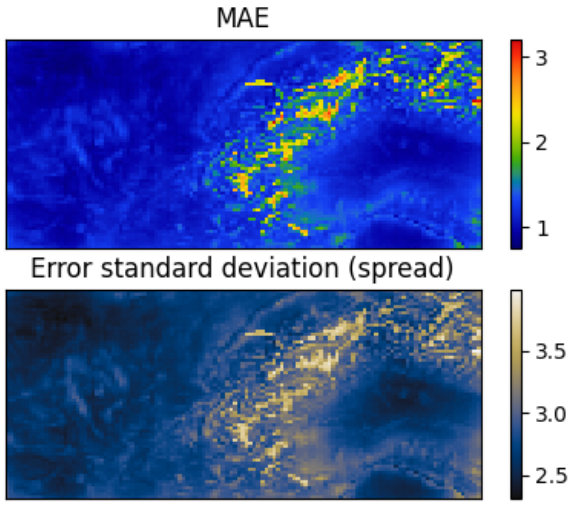
Školiteľovi, IBL, SHMÚ, FMFI UK



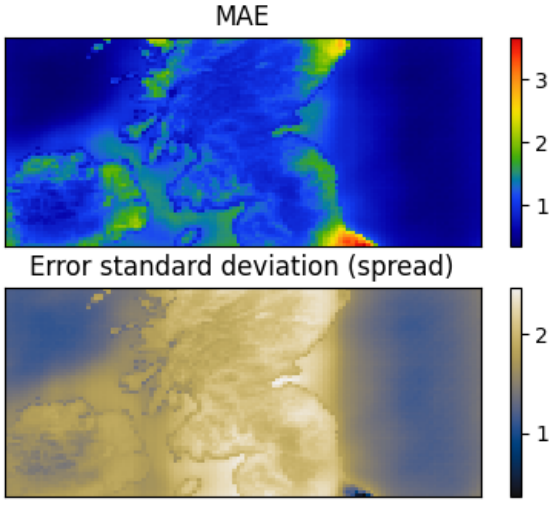
Obr. 9: SHViTAE: pw štandardizácia
Polia strednej absolútnej chyby (MAE), štandardnej odchýlky absolútnej chyby, a σ_{ij} pre teploty vo výške 2 m v lokalite západných Álp z trénovacej množiny.



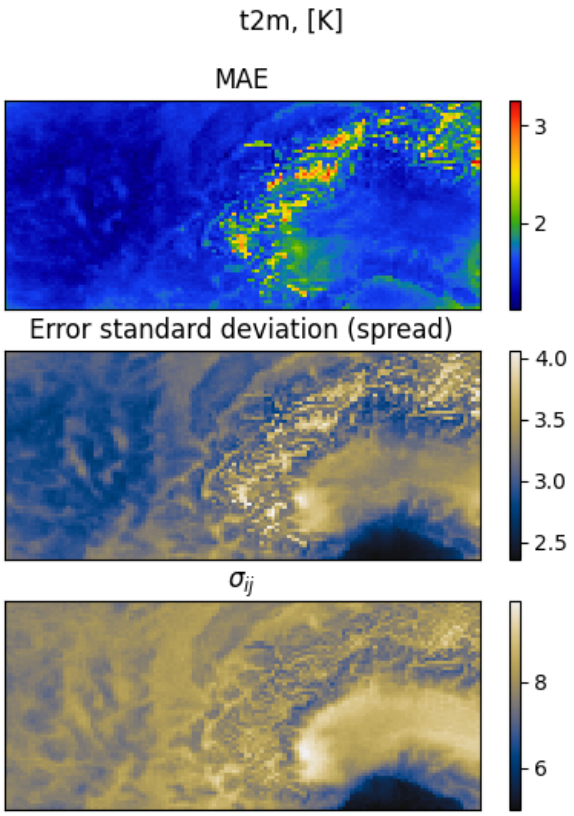
Obr. 11: SHViTAE: pw štandardizácia
Polia strednej absolútnej chyby (MAE), štandardnej odchýlky absolútnej chyby, a σ_{ij} teploty vo výške 2 m v lokalite Britských ostrovov z testovacej množiny.



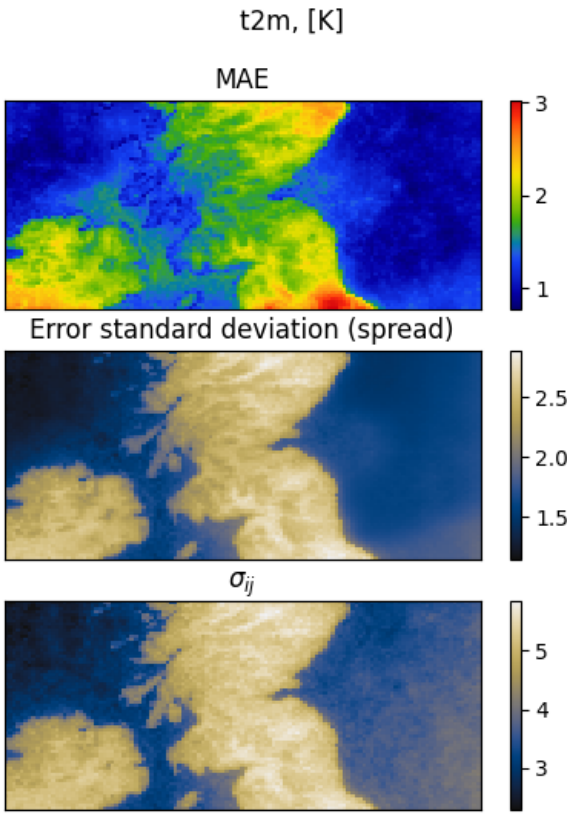
Obr. 10: SHViTAE: h štandardizácia
Polia strednej absolútnej chyby (MAE) a štandardnej odchýlky absolútnej chyby pre u teploty vo výške 2 m v lokalite západných Álp z trénovacej množiny.



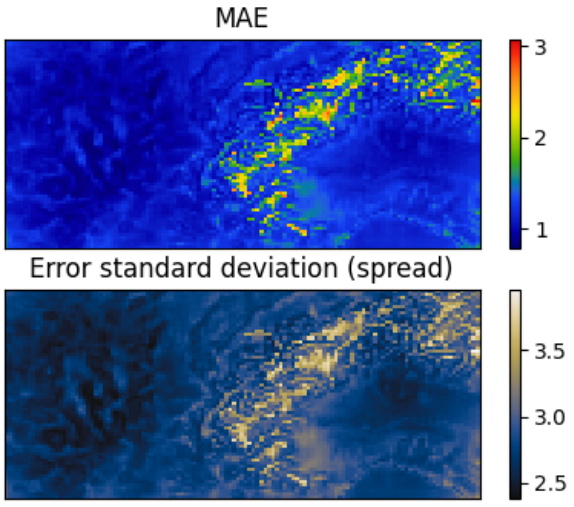
Obr. 12: SHViTAE: h štandardizácia
Polia strednej absolútnej chyby (MAE) a štandardnej odchýlky absolútnej chyby teploty vo výške 2 m v lokalite Britských ostrovov z testovacej množiny.



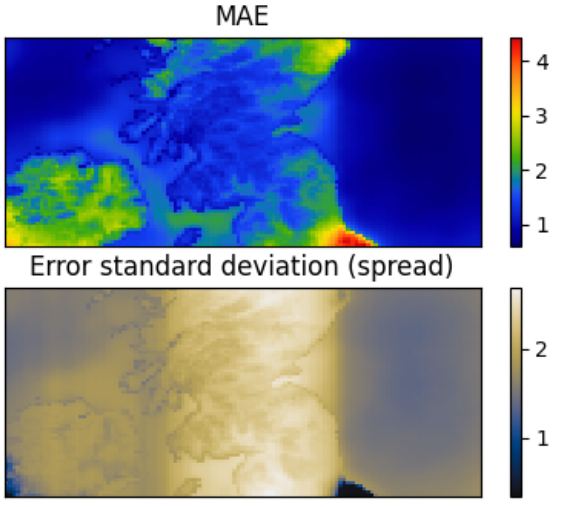
Obr. 13: SHViTAE+SE: pw štandardizácia
Polia strednej absolútnej chyby (MAE), štandardnej odchýlky absolútnej chyby, a σ_{ij} pre teploty vo výške 2 m v lokalite západných Álp z trénovacej množiny.



Obr. 15: SHViTAE+SE: pw štandardizácia
Polia strednej absolútnej chyby (MAE), štandardnej odchýlky absolútnej chyby, a σ_{ij} teploty vo výške 2 m v lokalite Britských ostrovov z testovacej množiny.



Obr. 14: SHViTAE+SE: h štandardizácia
Polia strednej absolútnej chyby (MAE) a štandardnej odchýlky absolútnej chyby pre u teploty vo výške 2 m v lokalite západných Álp z trénovacej množiny.



Obr. 16: SHViTAE+SE: h štandardizácia
Polia strednej absolútnej chyby (MAE) a štandardnej odchýlky absolútnej chyby teploty vo výške 2 m v lokalite Britských ostrovov z testovacej množiny.

Literatúra

[1] S. Lang, M. Alexe, M. Chantry, J. Dramsch, F. Pinault, B. Raoult, M. C. A. Clare, C. Lessig, M. Maier-Gerber, L. Magnusson, Z. B. Bouallègue, A. P. Nemesio, P. D. Dueben, A. Brown, F. Pappenberger, and F. Rabier, "Aifs – ecmwf's data-driven forecasting system," 2024. [Online]. Available: https://arxiv.org/abs/2406.01465

[2] R. Keisler, "Forecasting global weather with graph neural networks," 2022. [Online]. Available: https://arxiv.org/abs/2202.07575

[3] S. Lang, M. Alexe, M. C. A. Clare, C. Roberts, R. Adewoyin, Z. B. Bouallègue, M. Chantry, J. Dramsch, P. D. Dueben, S. Hahner, P. Maciel, A. Prieto-Nemesio, C. O'Brien, F. Pinault, J. Polster, B. Raoult, S. Tietsche, and M. Leutbecher, "Aifs-crps: Ensemble forecasting using a model trained with a loss function based on the continuous ranked probability score," 2024. [Online]. Available: https://arxiv.org/abs/2412.15832

[4] A. Allen, S. Markou, W. Tebbutt, J. Requeima, W. P. Bruinsma, T. R. Andersson, M. Herzog, N. D. Lane, M. Chantry, J. S. Hosking, and R. E. Turner, "End-to-end data-driven weather prediction," *Nature*, 2025. [Online]. Available: https://doi.org/10.1038/s41586-025-08897-0

[5] A. Dosovitskiy, L. Beyer, A. Kolesnikov, D. Weissenborn, X. Zhai, T. Unterthiner, M. Dehghani, M. Minderer, G. Heigold, S. Gelly, J. Uszkoreit, and N. Houlsby, "An image is worth 16x16 words: Transformers for image recognition at scale," 2021. [Online]. Available: https://arxiv.org/abs/2010.11929

[6] S. Yun and Y. Ro, "Shvit: Single-head vision transformer with memory efficient macro design," 2024. [Online]. Available: https://arxiv.org/abs/2401.16456

[7] H. Hersbach, B. Bell, P. Berrisford, S. Hirahara, A. Horányi, J. Muñoz-Sabater, J. Nicolas, C. Peubey, R. Radu, D. Schepers, A. Simmons, C. Soci, S. Abdalla, X. Abellan, G. Balsamo, P. Bechtold, G. Biavati, J. Bidlot, M. Bonavita, G. De Chiara, P. Dahlgren, D. Dee, M. Diamantakis, R. Dragani, J. Flemming, R. Forbes, M. Fuentes, A. Geer, L. Haimberger, S. Healy, R. J. Hogan, E. Hólm, M. Janisková, S. Keeley, P. Laloyaux, P. Lopez, C. Lupu, G. Radnoti, P. de Rosnay, I. Rozum, F. Vamborg, S. Villaume, and J.-N. Thépaut, "The era5 global reanalysis," pp. 1999–2049, 2020. [Online]. Available: https://cds.climate.copernicus.eu/cdsapp#!/dataset/reanalysis-era5-single-levels

[8] S. Schimanke, M. Ridal, P. Le Moigne, L. Berggren, P. Undén, R. Randriamampianina, U. Andrea, E. Bazile, A. Bertelsen, P. Brousseau, P. Dahlgren, L. Edvinsson, A. El Said, M. Glinton, S. Hopsch, L. Isaksson, R. Mladek, E. Olsson, A. Verrelle, and Z. Wang, "Cerra sub-daily regional reanalysis data for europe on single levels from 1984 to present," 2021, accessed on 26-03-2025. [Online]. Available: https://doi.org/10.24381/cds.622a565a

[9] R. Lagerquist, D. Turner, I. Ebert-Uphoff, J. Stewart, and V. Hagerty, "Using deep learning to emulate and accelerate a radiative-transfer model," *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 2021.

[10] P. Kovesi, "Good colour maps: How to design them," 2015. [Online]. Available: https://arxiv.org/abs/1509.03700

[11] S. Lerch and K. L. Polsterer, "Convolutional autoencoders for spatially-informed ensemble post-processing," 2022. [Online]. Available: https://arxiv.org/abs/2204.05102

[12] S. Woo, S. Debnath, R. Hu, X. Chen, Z. Liu, I. S. Kweon, and S. Xie, "Convnext v2: Co-designing and scaling convnets with masked autoencoders," 2023. [Online]. Available: https://arxiv.org/abs/2301.00808

[13] A. L. Samuel, "Some studies in machine learning using the game of checkers," *IBM Journal of Research and Development*, vol. 3, no. 3, pp. 210–229, 1959.

[14] I. Goodfellow, Y. Bengio, and A. Courville, *Deep Learning*. MIT Press, 2016, http://www.deeplearningbook.org.

[15] G. H. Golub and C. F. Van Loan, *Matrix Computations*, 4th ed. Baltimore, MD: Johns Hopkins University Press, 2013.

[16] A. Monahan, J. Fyfe, M. Ambaum, D. Stephenson, and G. North, "Empirical orthogonal functions: The medium is the message," *Journal of Climate*, vol. 22, 12 2009.

[17] R. R. Curtin, J. R. Schaul, P. V. Jamkhedkar, M. Edel, S. Agrawal, S. Zhang, Y. Chowdhury, S. Tu, and A. Gray, "Kernel principal component analysis in mlpack," *arXiv preprint arXiv:1511.03084*, 2015. [Online]. Available: https://www.mlpack.org/papers/kpca.pdf

[18] F. Hallgren and P. Northrop, "Incremental kernel pca and the nyström method," *arXiv preprint arXiv:1802.00043*, 2018.

[19] K. He, X. Zhang, S. Ren, and J. Sun, "Deep residual learning for image recognition," *CoRR*, vol. abs/1512.03385, 2015. [Online]. Available: http://arxiv.org/abs/1512.03385

[20] Z. Liu, H. Mao, C.-Y. Wu, C. Feichtenhofer, T. Darrell, and S. Xie, "A convnet for the 2020s," 2022. [Online]. Available: https://arxiv.org/abs/2201.03545

[21] F. Rosenblatt, "The perceptron: A probabilistic model for information storage and organization in the

brain," *Psychological Review*, vol. 65, no. 6, pp. 386–408, 1958.

[22] D. Hendrycks and K. Gimpel, "Gaussian error linear units (gelus)," 2023. [Online]. Available: https://arxiv.org/abs/1606.08415

[23] D. P. Kingma and J. Ba, "Adam: A method for stochastic optimization," 2017. [Online]. Available: https://arxiv.org/abs/1412.6980

[24] I. Loshchilov and F. Hutter, "Decoupled weight decay regularization," 2019. [Online]. Available: https://arxiv.org/abs/1711.05101

[25] S. J. Reddi, S. Kale, and S. Kumar, "On the convergence of adam and beyond," in *International Conference on Learning Representations*, 2018. [Online]. Available: https://openreview.net/forum?id=ryQu7f-RZ

[26] A. Pérez, M. S. Cruz, and J. Diez, "Deepr: Deep reanalysis," 2023, accessed: 2025-03-22. [Online]. Available: https://github.com/ECMWFCode4Earth/DeepR

[27] Z. Wang, E. P. Simoncelli, and A. C. Bovik, "Multiscale structural similarity for image quality assessment," in *Thirty-Seventh Asilomar Conference on Signals, Systems & Computers, 2003*. IEEE, 2003, pp. 1398–1402.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 26–35
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Martin Petrovič

Asimilácia satelitných údajov a bias korekcia v numerickom modeli ALADIN/SHMU

Martin Petrovič[1]*
Školiteľ: Martin Gera
[1] Oddelenie meteorológie a klimatológie, KAFZM, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

Hlavným nástrojom na numerickú predpoveď počasia v Slovenskom hydrometeorologickom ústave je predpovedný systém ALADIN/SHMU. Pre analýzu a asimiláciu dát v predpovedných modeloch počasia tzv. konvektívnej mierky (horizontálny krok 2-5 km) je kľúčové použitie vstupných dát s vysokým priestorovým a časovým rozlíšením. Súčasnosti je nová predpoveď modelu počítaná každých 6 hodín na 3 dni s intervalom 1 hodina, v priestorovej mriežke 4.5 km. Dostupnosť aktuálnych meraní je rádovo vyššia. Napríklad satelitné merania s frekvenciou 15 minút. Asimilácia satelitných meraní zohráva kľúčovú úlohu pri zlepšovaní kvality numerických predpovedí počasia. Jednou z hlavných výziev je systematická chyba v satelitných meraniach, ktorá môže negatívne ovplyvniť analýzu modelu. V tomto príspevku sa zameriavame na metódu Variational Bias Correction (VarBC), ktorá dynamicky odhaduje a koriguje systematické chyby v rámci asimilácie údajov v modeli ALADIN/SHMU. VarBC metóda aktualizuje bias koeficienty spolu s modelovým stavom. Existujú viaceré možnosti inicializácie metódy VarBC. Venujeme sa komparácii dvoch stratégií nezávislého cyklenia korekčných koeficientov, ktoré vychádzali z nulového počiatočného stavu. Skúmame cyklenie s každým asimilačným krokom a podľa dennej stratégie. Príspevok analyzuje časový vývoj korekčných koeficientov pre údaje z prístroja SEVIRI na geostacionárnej družici Meteosat Second Generation, demonštruje ich stabilizáciu v priebehu času a celkový vplyv asimilácie satelitných údajov na kvalitu predpovedí. Výsledky ukazujú, že správne nastavenie VarBC výrazne ovplyvňuje efektivitu korekcie biasu a tým aj kvalitu analýzy a predpovedí modelu.

Kľúčové slová: Asimilácia dát, satelitné merania, variačná korekcia biasu, model ALADIN/SHMU

1 Úvod do problematiky

Asimilácia údajov je proces, ktorý kombinuje informácie z numerických modelov a pozorovaní s cieľom vytvoriť čo najpresnejší popis aktuálneho stavu systému. Výsledkom procesu asimilácie je analýza počiatočného stavu, predstavujúca najpresnejší odhad stavu atmosféry v danom čase. V procese asimilácie údajov sa do modelovej mriežky modelu zavádzajú meteorologické pozorovania atmosféry. To sa deje úpravou počiatočných podmienok numerického modelu tak, aby zodpovedali dostupným pozorovaniam. Krátkodobé predpovede pochádzajú z numerických modelov a predstavujú predbežný stav atmosféry (angl. background field). Počas procesu asimilácie sa predbežné pole kombinuje určitými metódami s meteorologickými pozorovaniami. Opakovaním takéhoto postupu v pravidelných intervaloch, vzniká asimilačný cyklus. Z praktických dôvodov sa táto štúdia zaoberá trojrozmernou variačnou metódou asimilácie (3D-Var), ktorá je najčastejšie používanou metódou v systémoch numerickej predpovede počasia s limitovanou oblasťou výpočtu (modelová doména je zacielená na konkrétnu, ohraničenú oblasť zemegule). Zhrnutie : Predbežné pole (predpoveď, platná pre termín spustenia) vstupuje do asimilačného procesu, pričom výstupom je analýza počiatočného stavu, ktorá sa používa na integráciu predpovedí.

Variačný prístup je základnou metódou asimilácie údajov, ktorá zahŕňa nájdenie optimálneho stavu systému minimalizáciou nákladovej funkcie. Základom tohto prístupu je definícia nákladovej funkcie, ktorá meria rozdiel medzi stavom modelu a pozorovaniami a stavom pozadia (= predbežného poľa).

$$J(x) = \big(y - H(x)\big)^T R^{-1}\big(y - H(x)\big) + (x - x_b)^T B^{-1}(x - x_b), \qquad [1]$$

Riešením rovnice je nájsť taký stav modelu $\boldsymbol{x}$, čo minimalizuje nákladovú funkciu. Prvý člen predstavuje odchýlku, teda prírastok pozorovaní, medzi vektorom $\boldsymbol{y}$ pozorovanej veličiny a stavu modelu, ktorý poskytuje operátor pozorovania $\boldsymbol{H(x)}$ (dopredný operátor poskytujúci interpoláciu modelových polí na miesta pozorovaní a simuláciu nameraných premenných, z parametrov predbežného poľa). Druhý člen určuje odchýlku alebo prírastok analýzy medzi súčasným stavom modelu a odhadom skutočného stavu (Derková, 2008). Kovariančné matice $\boldsymbol{R}$ a $\boldsymbol{B}$ nákladovej funkcie určujú váhu jednotlivých príspevkov z predbežného poľa a pozorovaní, popisom ich chýb a vzájomných

* petrovic48@uniba.sk

závislostí, čím umožňujú optimálnu kombináciu stavu modelu a pozorovaní. Výpočet kovariančných matíc je náročný, najmä časovo náročný, ktorým sa však v tejto práci nebudeme podrobnejšie zaoberať.

2 Satelitné pozorovania

Satelitné pozorovania poskytujú kľúčové informácie pre numerické modely predpovede počasia (angl. NWP) tým, že ponúkajú plošné pokrytie atmosférických premenných. V našom výskume boli testované satelitné údaje z geostacionárneho satelitu druhej generácie Meteosat (MSG-10). Nachádza sa v nadmorskej výške 36 000 km a 0° zemepisnej dĺžky. Samotné pozorovania (údaje) pochádzajú z prístroja na satelite, optického zobrazovacieho rádiometra SEVIRI (angl. Spinning Enhanced Visible and InfraRed Imager). Tento senzor dokáže skenovať v 12 spektrálnych kanáloch (viditeľné - VIS, blízko-infračervené - NIR, infračervené - IR a viditeľné spektrum s vysokým rozlíšením - HRV), Tabuľka 1 (Aminou, 2002). Satelitné kanály, z ktorých boli údaje asimilované, sú označené zelenou farbou.

Číslo kanála	Stredná vlnová dĺžka	Popis
X	0,6 µm	VIS
X	0,8 µm	VIS
X	1,6 µm	NIR
01	3,9 µm (IR)	Absorpčný pás CO2
02	6,2 µm (IR)	Absorpčný pás vodnej pary
03	7,3 µm (IR)	Absorpčný pás vodnej pary
04	8,7 µm (IR)	„Atmosferické okno“ H2O
05	9,7 µm (IR)	Absorpčný pás Ozónu
06	10,8 µm(IR)	„Atmosferické okno“ H2O
07	12 µm (IR)	„Atmosferické okno“ H2O
08	13,4 µm (IR)	Absorpčný pás CO2
X	0,3 - 1 µm	HRV

Tabuľka 1 Spektrálne kanály prístroja SEVIRI. Červeno sfarbené kanály nie sú (zatiaľ) dostupné v súboroch údajov, ktoré prijíma systém ALADIN/SHMU; zatiaľ čo zelené sa používali pri asimilácii dát.

Základnou veličinou popisujúcou zaznamenané elektromagnetické žiarenie je radiancia $\boldsymbol{L_\lambda}$ [W.m^{-2}.sr^{-1}.nm^{-1}]. Radiancia vyjadruje špecifické žiarenie povrchového zdroja a vzťahuje sa na konkrétnu časť elektromagnetického spektra. Za predpokladu, že nedochádza k rozptylu vyžarovaného žiarenia, je možné odvodiť vzťah na výpočet množstva radiancie (Benáček a Mile, 2019). Radiancie získané zo satelitov sú priamo asimilované. Preto je potrebné vypočítať hodnoty radiancie v bodoch merania zo stavových premenných modelu

$$y_b = H(x_b), \qquad [2]$$

kde $\boldsymbol{y_b}$ sú hodnoty radiancie v bodoch merania a $\boldsymbol{x_b}$ je vektor predbežného poľa. Operátor $\boldsymbol{H}$ vytvára prechod z priestoru modelových premenných do priestoru pozorovaní. V prípade satelitných meraní zahŕňa nielen interpoláciu, ale aj rovnicu prenosu žiarenia.

Satelitné senzory nie sú dokonalé a ich merania podliehajú chybám.

3 Bias

Zahrnutie satelitných údajov do asimilácie vyžaduje starostlivé zaobchádzanie so systematickými chybami (bias), chybami pozorovania a modelovaním prenosu žiarenia, aby sa získané informácie správne interpretovali. Bias môže byť priestorovo premenlivý, sezónny, denný alebo dokonca závislý od situácie. Ak pripustíme určitú flexibilitu, pokiaľ ide o pojem modelu (alebo pozorovacieho systému) ako odhadu a s definíciou priemerovania, potom akúkoľvek zložku chyby, ktorá je systematická v nejakom dobre definovanom zmysle, možno považovať za bias (Dee, 2005). V praxi mnohé pozorovania obsahujú významné systematické chyby.

$$\langle \epsilon_o \rangle = \langle y - H(x) \rangle \neq 0$$

Veľkosť $\langle \boldsymbol{\epsilon_o} \rangle$ sa často označuje ako "bias pozorovaní", pretože $\langle\,\rangle$ predstavuje časové priemerovanie. V každom prípade predpokladajme, že chyby systematického pozorovania možno opísať z hľadiska obmedzeného súboru koeficientov $\boldsymbol{\beta}$. Potom môžeme nastaviť operátor pozorovania $\boldsymbol{H(x)}$ nasledujúco

$$\langle \epsilon_o \rangle = \langle y - H(x;\beta) \rangle = 0,$$

pre nejaký (zatiaľ neznámy) parameter $\boldsymbol{\beta}$. V praxi to znamená, že začleňujeme určité stupne voľnosti operátora pozorovaní, ktoré sú upravené tak, aby sa znížil bias. Modifikovaný operátor pozorovania by mohol byť definovaný pomocou lineárneho prediktorového modelu, ako je model

$$H(x;\beta) = H(x) + \sum_{i=0}^{N} \beta_i p_i(x), \qquad [3]$$

kde N-prediktorov $\boldsymbol{p_i(x)}$ predstavujú vybrané charakteristiky. Prediktory popisujú závislosť niekoľkých atmosférických parametrov (napr. $p_0 = 1$ (konštanta); p_1 = 1000-300 hPa hrúbka; p_2 = 200-50 hPa hrúbka; p_3 = povrchová teplota; p_4 = celkový vodný stĺpec;…), ktoré dobre korelujú s nameranými radianciami a ich výber závisí od jednotlivých pozorovacích prístrojov (Dee, 2004).

4 Variačná korekcia

Bias vyžaduje detekciu a nápravu vhodnými metódami. V zásade existujú dva typy metódy korekcie odchýlok, ktoré sa používajú na satelitné merania vo (3D/4D) variačnej schéme asimilácie dát: statická a variačná.

Metóda variačnej korekcie biasu (angl. Variational Bias Correction) aktualizuje koeficienty spolu so stavom modelu v rámci variačného asimilačného systému. Koeficienty modifikovaného operátora pozorovaní možno odhadnúť spolu so stavom modelu, pretože závislosti medzi parametrami a komponentmi stavu sú dobre definované. Na účely odhadu biasu možno zadefinovať rozšírený riadiaci vektor

$$z^T = [x^T \beta^T],$$

ktorý obsahuje koeficienty $\boldsymbol{\beta}$ a modelový stav $\boldsymbol{x}$ (Dee, 2005). Následná analýza sa dosiahne minimalizáciou nákladovej funkcie upravenej pre vyššie uvedený rozšírený riadiaci vektor.

$$J(z) = \big(y - H(z)\big)^T R^{-1}\big(y - H(z)\big) + (z - z_b)^T Z^{-1}(z - z_b) \quad [4]$$

Kovariančná matica $\boldsymbol{Z}$ predstavuje rozšírenú chybovú maticu predbežného poľa ($\boldsymbol{B}$) a chybovú maticu koeficientov $\boldsymbol{\beta}$ ($\boldsymbol{B_\beta}$). Analogický prepis možno použiť aj na definovanie odhadu predbežného poľa $\boldsymbol{z_b}$ rozšíreného o koeficienty z predbežného poľa $\boldsymbol{\beta_b}$. Zároveň používame operátor pozorovaní modifikovaný koeficientmi $\boldsymbol{\beta}$, o ktorom sme hovorili v predchádzajúcej podkapitole, $\boldsymbol{H(x,\beta)}$. Kovariančná matica $\boldsymbol{B_\beta}$ predstavuje odchýlku chyby bias koeficientov predbežného poľa $\boldsymbol{\sigma^2_{\beta_b}}$.

$$J(x;\beta) = (y - H(x;\beta))^T R^{-1}(y - H(x;\beta)) + (x - x_b)^T B^{-1}(x - x_b) + (\beta - \beta_b)^T B_\beta^{-1}(\beta - \beta_b) \quad [5]$$

Zároveň je potrebné si uvedomiť, že sa jedná o iteratívny postup. Bias nie je úplne aktualizovaný v jednom asimilačnom kroku, ale odhaduje sa postupne počas niekoľkých asimilačných cyklov.

4.1 Inicializácia VarBC schémy

V zásade je možné použiť dve odlišné inicializácie VarBC metódy, skúmané v systéme mezoškálového modelu 3D-Var:

a) Prevziať koeficienty $\boldsymbol{\beta_b}$ z riadiaceho modelu (tzv. “Warm start”)
b) Použiť nulové koeficienty $\boldsymbol{\beta_b}$ (tzv. “Cold start”)

Prvá možnosť môže byť časovo výhodná, pretože nie je potrebné "zahrievať" schému a preto je možné koeficienty priamo použiť pri plne aktívnej asimilácii dát. Na druhej strane vyžaduje informačný kanál, ktorý spája dva rôzne NWP systémy, aby sa zabezpečil rýchly a spoľahlivý prenos dát (koeficientov). Ďalším faktorom, ktorý treba zvážiť, je, že modely NWP nemusia používať rovnaké pozorovania. Aj keď ide o rovnaký typ údajov (satelitné pozorovania, radiancia), je potrebné brať do úvahy rozdiely meracích prístrojov na jednotlivých typoch satelitov.

Druhá možnosť skúma nezávislé (v zmysle iného NWP modelu) použitie koeficientov. Pri spustení korekčnej schémy sú $\boldsymbol{\beta_b}$ koeficienty spočiatku nulové a je potrebné ich "zahriať".

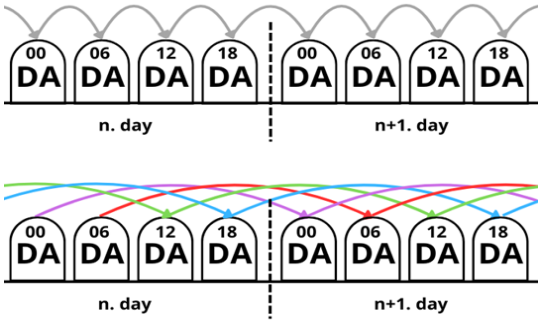
Metóda VarBC je súčasťou systému 3D-Var, ktorý zahŕňa rozšírenú nákladovú funkciu pomocou koeficientov $\boldsymbol{\beta}$, a na výpočet týchto koeficientov je potrebné zahrnúť satelitné merania do procesu asimilácie minimalizácie (rovnica [5]). Asimilácia takýchto údajov má však vplyv na výslednú analýzu. Negatívny vplyv, ak do procesu minimalizácie zahrnieme dáta so systematickou chybou bez vhodnej metódy korekcie. Potom, výsledkom môže byť počiatočná analýza ovplyvnená biasom (potrebná na prípravu predpovedí, a môže ovplyvniť ďalšie asimilačné procesy), ktorá sa viac zhoduje so satelitnými meraniami a zároveň znižuje zjavný bias v odchýlkach. Ak je však korekcia biasu aktívna a správne nastavená, proces asimilácie môže zmierniť systematické chyby. Preto je potrebné „zahrievacie“ obdobie, ktoré možno dosiahnuť pasívnou asimiláciou, kedy sa používa neovplyvnené predbežné pole vstupujúce do asimilačného procesu z predchádzajúceho asimilačného procesu. V tomto prístupe, asimilované pozorovania ovplyvňujú proces odhadu korekcie biasu, a zároveň analýzy počiatočného stavu, potrebného pre prípravu predpovedí. Avšak namiesto použitia analýzy počiatočného stavu na integráciu predpovedí, sa pasívna asimilácia spolieha na integráciu predbežného poľa, ktoré bolo použité v danom asimilačnom kroku a nie je ovplyvnené pozorovaniami. Tým sa zabezpečí stabilná referencia na vyhodnotenie vývoja biasu.

4.2 Stratégia cyklenia koeficientov $\boldsymbol{\beta}$

Ďalším krokom je výber stratégie cyklenia $\boldsymbol{\beta}$. V akých časových intervaloch v asimilačnom cykle sa budú bias koeficienty aktualizovať. V zásade existujú dve možnosti, za predpokladu, že satelitné pozorovania vstúpia do asimilácie:

1) S každým spustením asimilačného procesu sa aktualizujú hodnoty $\boldsymbol{\beta}$ (Obrázok 1, hore). Čo znamená, že napríklad pri 6 hodinovom asimilačnom cykle, je sada koeficientov aktualizovaná s každým spustením asimilácie.
2) Denná stratégia cyklenia $\boldsymbol{\beta}$ (Obrázok 1, dole). Koeficienty sa cyklia v 24-hodinovom intervale. To znamená, že koeficienty z termínu 00 UTC, sú aktualizované vždy o deň neskôr pre rovnaký termín výpočtu 00 UTC.

Prvá stratégia cyklenia $\boldsymbol{\beta}$ je používaná najmä v nastaveniach globálnych modelov, kde sú koeficienty $\boldsymbol{\beta}$ odvodené zo štatistiky celej zemegule. Denná stratégia $\boldsymbol{\beta}$ poskytuje lepšiu korekciu biasu pre modely na ohraničenej oblasti, kde štatistika je limitovaná konkrétnym geografickým priestorom počas špecifickej sezóny (Randriamampianina et al., 2011).



Obrázok 1 Dve stratégie cyklenia VarBC metódy. Cyklenie s každým asimilačným krokom (hore) a denné cyklenie koeficientov (dole).

5 Najnovší vývoj v oblasti asimilácie údajov

Zatiaľ čo globálne modely, ako napríklad modely prevádzkované ECMWF, UK Met Office a Météo-France, úspešne integrovali pokročilé asimilačné techniky pre satelitné pozorovania, regionálne modely stále čelia obmedzeniam pri úplnom využívaní týchto pozorovaní. Systém ALADIN/SHMU sa v súčasnosti do značnej miery spolieha na konvenčné pozorovania, ale na plné využitie údajov z vysokofrekvenčného diaľkového snímania sú potrebné ďalšie vylepšenia.

Randriamampianina et. al. (2011) zamerali svoju štúdiu na asimiláciu infračervených meraní z prístroja IASI (angl. Infrared Atmospheric Sounding Interferometer) a skúmali vplyv korekčných koeficientov denného cyklenia v regionálnych modeloch s vysokým rozlíšením. Kľúčovým zistením bolo, že koeficienty VarBC v ohraničených modeloch majú významnú dennú variabilitu, najmä v regiónoch s dynamicky premenlivými podmienkami (napr. predikcia polárnych cyklón). Autori zistili, že odchýlka satelitných meraní sa mení s denným chodom, čo naznačuje, že statické korekcie odchýlky nie sú dostatočne účinné. Z tohto dôvodu testovali denné cyklenie koeficientov.

Podľa Eyrea (2016) sa v moderných asimilačných systémoch metóda VarBC osvedčila pri korekcii biasu v rôznych satelitných kanáloch, pričom sa zdôrazňuje dôležitosť dlhodobého sledovania zmien korekcií biasu v priebehu času. Tento článok porovnáva statické a variačné metódy korekcie. Poukázal tiež na starostlivý výber množstva prediktorov. Príliš veľa prediktorov vedie k nejednoznačným korekciám a naopak, príliš málo prediktorov môže neefektívne korigovať bias.

Podobný výskum urobili aj Benáček a Mile (2019), ktorí sa zaoberali adaptivitou koeficientov metódy VarBC. Odporúčajú aplikovať metódu VarBC s nezávislým cyklením koeficientov v systémoch pracujúcich na ohraničenej oblasti a používať stratégiu denného cyklenia.

6 Metodika

Metodika sa riadi štruktúrovaným pracovným postupom pozostávajúcim z niekoľkých kľúčových etáp:

1. **Získavanie údajov –** Prvý krok zahŕňa zber satelitných pozorovaní, zabezpečenie ich konzistentnosti so systémom NWP. Získajú sa SEVIRI radiancie, ktoré tvoria základ pre ďalšie spracovanie.
2. **Predspracovanie a kontrola kvality** – Pozorovania podliehajú filtračným technikám a opatreniam kontroly kvality, aby sa odstránili nezrovnalosti a veľké odchýlky.
3. **Proces asimilácie** – Pozorovania sú integrované do modelu ALADIN pomocou trojrozmernej variačnej asimilačnej metódy (3D-Var). Štúdia skúma rôzne stratégie cyklenia koeficientov, ore potrebu korekciu biasu, vrátane experimentov s pasívnou asimiláciou, ktoré pomáhajú posúdiť vplyv novo asimilovaných údajov.
4. **Validácia a hodnotenie vplyvu** – Výkonnosť asimilačného systému sa hodnotí pomocou nástrojov na validáciu, ako sú štatistiky : pozorovania mínus predbežné pole (OMB) a pozorovania mínus analýza (OMA), ktoré kvantifikujú zníženie systematických chýb. Okrem toho sa vykonávajú verifikačné testy využívajúce skóre predpovedí. Slúžia na porovnanie operatívneho a experimentálneho nastavenia, a pozorovaní, pričom sa hodnotí vplyv asimilovaných údajov.
5. **Analýza výsledkov** – Záverečná fáza sa zameriava na interpretáciu výsledkov prostredníctvom prípadových štúdií (napr. vizualizácia vybraných meteorologických prvkov), aby sa zistilo, ako asimilácia satelitných údajov ovplyvňuje kvalitu predpovedí.

7 Predbežné výsledky

V tejto kapitole sú rozobrané použité metódy na hodnotenie kvality asimilácie údajov a ich dopad na modelové analýzy, predpovede a doterajšie výskumné kroky.

Odchýlky predbežného poľa (OMB)

Jednou zo základných ukazovateľov kvality je okamžitý rozdiel medzi použitými meraniami a

vstupujúcou krátkodobou predpoveďou (predbežné poľe). Niektorí autori používajú označenie OMB (angl. Observations Minus Background), s ktorým budeme aj my ďalej pracovať. Tento rozdiel možno popísať upravenou rovnicou (o korekciu biasu) na kvalitatívny popis odchýlok pozorovaní:

OMB = Pozorovania – (Predbežné pole + Bias korekcia)

Väčšie hodnoty OMB indikujú nezrovnalosti medzi polom pozorovaní a predbežným poľom modelu.

Odchýlyk analýzy (OMA)

Ďalším ukazovateľom kvality je rozdiel medzi použitými pozorovaniami a výstupnou analýzou. Opäť existuje viacero pomenovaní, no my si vystačíme s anglickým Observation Minus Analysis (OMA).

OMA = Pozorovania – Analýza

Smerodajná odchýlka (STD)

Smerodajná odchýlka rozdelenia pozorovaní od background field v jednoduchosti vyjadruje variabilitu odchýlok. Čiže ako sa jednotlivé rozdiely, OMB alebo OMA, líšia od ich príslušnej priemernej hodnoty.

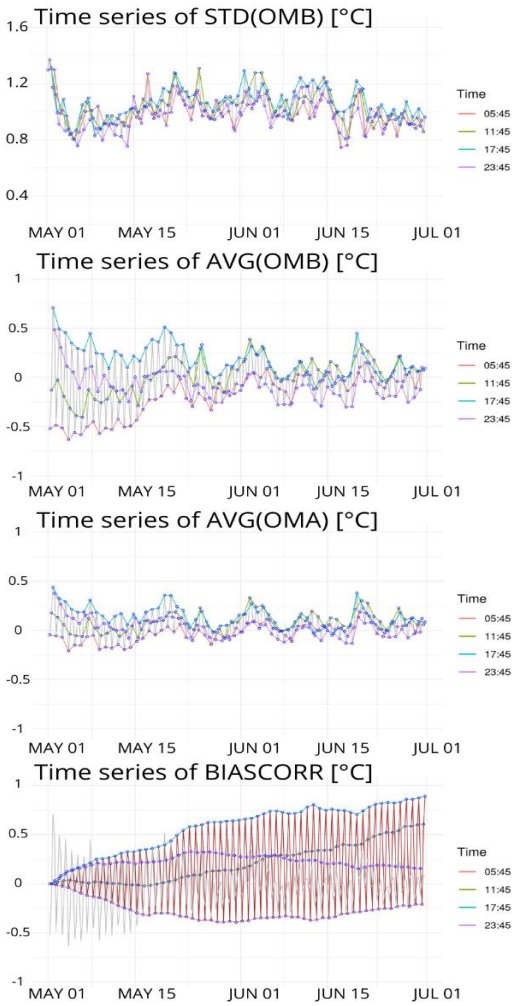
Experimentálne nastavenie

Cieľom je otestovať prínos satelitných pozorovaní z prístroja SEVIRI, a zároveň overiť funkčnosť metódy VarBC pri korekcii biasu v experimentálnom nastavení. Experimentálne nastavenie má identické konfigurácie ako model ALADIN/SHMU, verzia kódu cy46t1_bf07, s horizontálnym rozlíšením 4.5 km a so 63 vertikálnymi hladinami, so stredom nad územím Strednej Európy (Derková, 2017). Satelitné pozorovania vstupujú do procesu asimilácie a používa sa metóda korekcie VarBC. V kontexte metódy VarBC boli aktualizované koeficienty spojené so štyrmi prediktormi (konštanta, hrúbka vrstvy 1000-300 hPa, hrúbka vrstvy 200-50 hPa a celkový vodný stĺpec). Experimentálne nastavenie pracuje na 6-hodinovom asimilačnom cykle s maximálnou dĺžkou predpovedí 72 hodín. Pri pasívnej asimilácii predbežné pole pochádza z operatívneho modelu ALADIN/SHMU a korekcia biasu sa teda odvodzuje voči „nezaujatému predbežnému polu“.

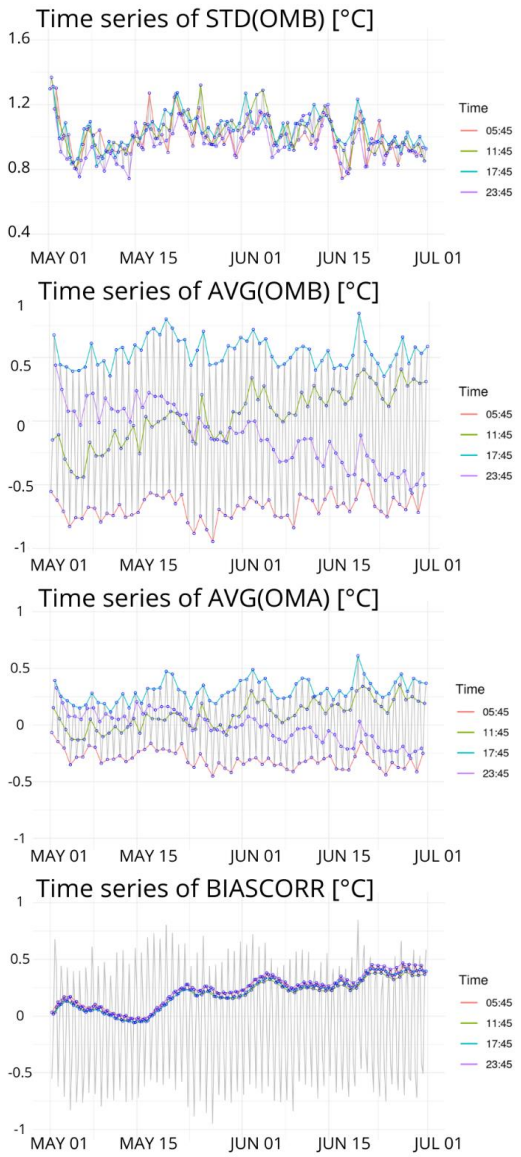
7.1 Prípadová štúdia I

V rámci funkcionality metódy VarBC sme sa zamerali na tzv. *Cold start* s nulovými počiatočnými koeficientmi, pomocou pasívnej asimilácie. Následne sme porovnali dva spôsoby cyklenia β koeficientov (denná a asimilačná stratégia) v experimentálnych nastaveniach.

Získané výsledky poukazujú na rozdielnu účinnosť dvoch stratégií cyklenia β (denná – Obrázok 2, asimilačná – Obrázok 3). Priložené hodnoty STD(OMB), AVG(OMB), AVG(OMA), BIASCORR v každom dátume výpočtu reprezentujú priemerné hodnoty pre kanál 2, skratka AVG (angl. Average). Pre grafy hodnôt STD(OMB), AVG(OMB), AVG(OMA) šedá čiara na pozadí predstavuje vývoj v reálnom čase, ale nie nevyhnutne priamu výpočtovú postupnosť (denná stratégia). Najdôležitejšia vec, ktorú si treba na obrázku všimnúť, je vývoj hodnôt AVG(OMB), nakoľko sme v inicializačnej fáze metódy VarBC. Hodnoty OMB sú na začiatku oboch experimentov približne rovnaké. Po týždni sa výsledky výrazne líšia. Pri hodnotení parametra OMB sa ako limit používa hodnota 0,5 °C, ktorá vychádza zo štatistickej analýzy presnosti satelitných meraní a modelového systému. Lepšiu, nižšiu hodnotu OMB má experimentálne nastavenie s dennou stratégiou cyklenia; po približne dvoch týždňoch je to menej ako 0,5 °C. Zatiaľ čo pre cyklenie s každým krokom asimilácie ani po dvoch mesiacoch výpočtov neposkytol hodnoty nižšie ako 0,5 °C.

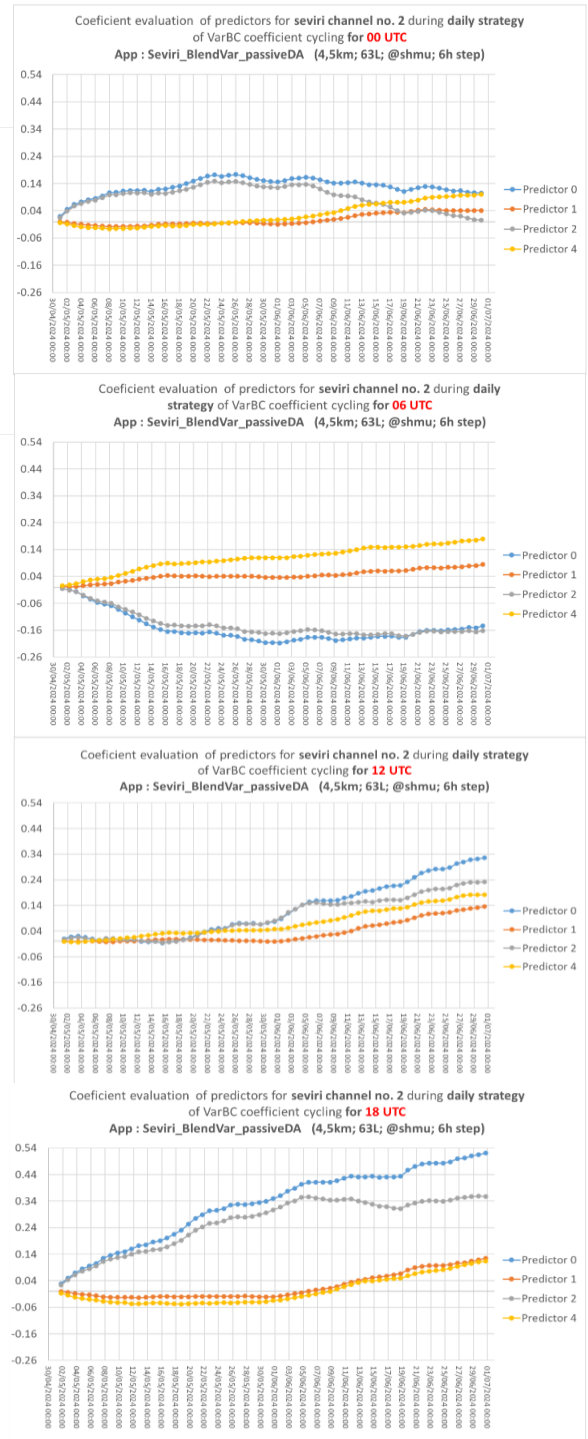


Obrázok 2 Dvojmesačná štatistika pasívneho experimentu pre kanál 2 s denným cyklením. Jednotlivé farebné čiary predstavujú časy výpočtu počas dňa.



Obrázok 3 Dvojmesačná štatistika pasívneho experimentu pre kanál 2 s asimilačným cyklením. Jednotlivé farebné čiary predstavujú časy výpočtu počas dňa.

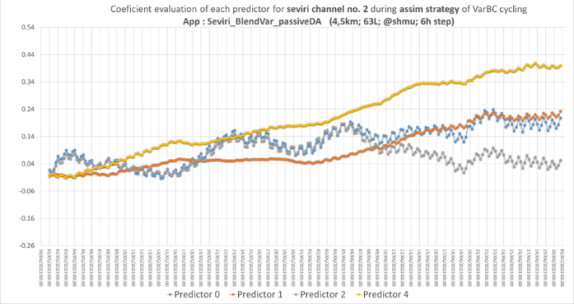
Nasledujúce grafy (Obrázok 4, obrázok 5) ukazujú vývoj koeficientov pre štyri prediktory kanála 2 pre dve stratégie cyklenia metódy VarBC. V prípade dennej stratégie (Obrázok 4), sme sa rozhodli vizualizovať vývoj koeficientov pre každý termín dňa samostatne, aby to bolo prehľadné a aby bolo možné sledovať vývoj koeficientov každého prediktora. Možno si všimnúť, že niektoré koeficienty (pre hodiny 00 a 06 UTC) majú takmer stabilnú hodnotu alebo okolo nej oscilujú. Na druhej strane (pre hodiny 12 a 18 UTC) možno pozorovať jasné trendy vo vývoji. Tieto rozdiely môžu naznačovať vplyv denných zmien v atmosfére, ktoré ovplyvňujú korekciu biasu odlišne v každej hodine dňa. Relatívna stabilizácia koeficientov na 00 a 06 UTC naznačuje, že korekcie biasu zostávajú relatívne konštantné, zatiaľ čo trendy pozorované počas denných hodín (12 a 18 UTC) môžu naznačovať zmeny v odchýlke.



Obrázok 4 Dvojmesačné vyhodnotenie β koeficientov prediktorov pre kanál 2 s dennou stratégiou, samostatne pre každú hodinu dňa (00, 06, 12, 18 UTC).

Obrázok 5 zobrazuje vyhodnotenie štyroch prediktorov so stratégiou asimilačného cyklu. Na rozdiel od dennej stratégie cyklenia, kde sa

koeficienty vyvíjajú oddelene pre rôzne hodiny dňa, pri tomto prístupe môžeme v priebehu času pozorovať neustály vývoj. Najvýraznejšou vlastnosťou sú oscilácie koeficientov. Oscilácie odrážajú denné zmeny v atmosfére, ktoré môžu ovplyvniť odchýlku.



Obrázok 5 Dvojmesačné vyhodnotenie β koeficientov prediktorov pre kanál 2 s asimilačnou stratégiou, samostatne pre každú hodinu dňa (00, 06, 12, 18 UTC).

7.2 Prípadová štúdia II

V septembri 2024 bol zvolený termín prechodu tlakovej níže Boris cez územie stredoeurópskych krajín ako prípadová štúdia. Počas týchto dní boli, na zrážkomernej sieti, zaznamenané extrémne vysoké až rekordné kumulatívne zrážky. Nadmerné zrážky spôsobili vyliatie vodných tokov a následne materiálne škody. Experimenty prebiehali v plnej aktívnej asimilácii (analýza počiatočného stavu je použitá na prípravu predpovedí), preto predpokladáme použitie „zahriatych“ koeficientov. Sledované obdobie bolo od 3. do 16. Septembra.

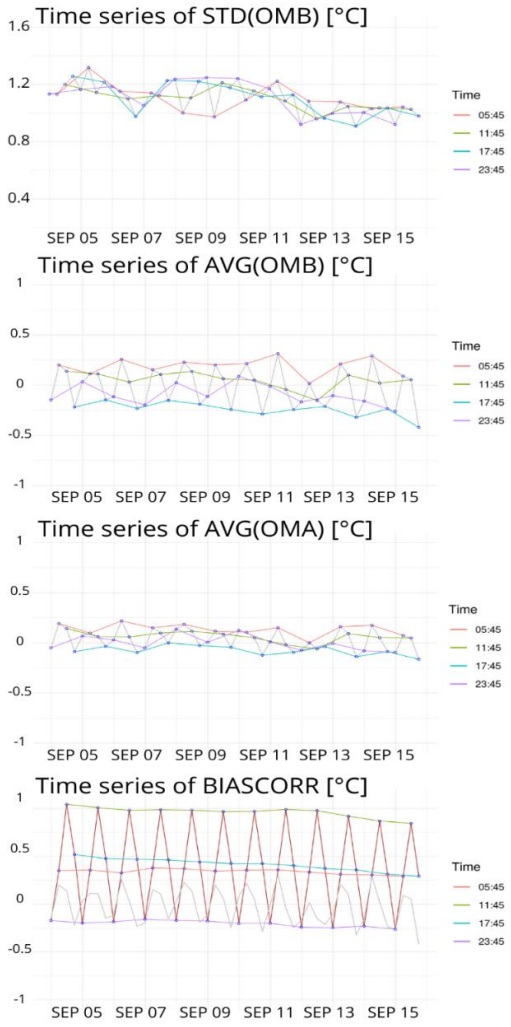
Experimentálne nastavenie s údajmi SEVIRI (a metódou VarBC s dennou stratégiou) je označené ako Exp. Označenie Oper je pre operatívny model ALADIN/SHMU a INCA je súbor programov, ktorý slúži na analýzu aktuálneho stavu parametrov atmosféry a veľmi krátkodobú predpoveď. Systém INCA kombinuje merania z radarov a kumulatívnych zrážok z automatických meteostaníc. Podrobnejšie na stránke Slovenského Hydrometeorologického ústavu, INCA-CE popis https://www.shmu.sk/sk/?page=1757.

Z hľadiska efektívnosti metódy VarBC bol overený vplyv použitia rôzne získaných β koeficientov. Prvou možnosťou bolo stavať na pasívnej asimilácii z leta. Použitie koeficientov, ktoré sa priebežne aktualizovali počas celého leta (Obrázok 6). Druhou možnosťou bolo použiť koeficienty posledného júnového výpočtu (Obrázok 7). V druhom prípade možno pozorovať negatívny (vo význame zhoršenia) nárast hodnôt STD(OMB), AVG(OMB) a AVG(OMA) a možno pozorovať pokles BIASCORR. Tento rozdiel môže súvisieť s neaktuálnosťou júnových koeficientov. Keďže koeficienty boli vypočítané v rôznych atmosférických podmienkach.

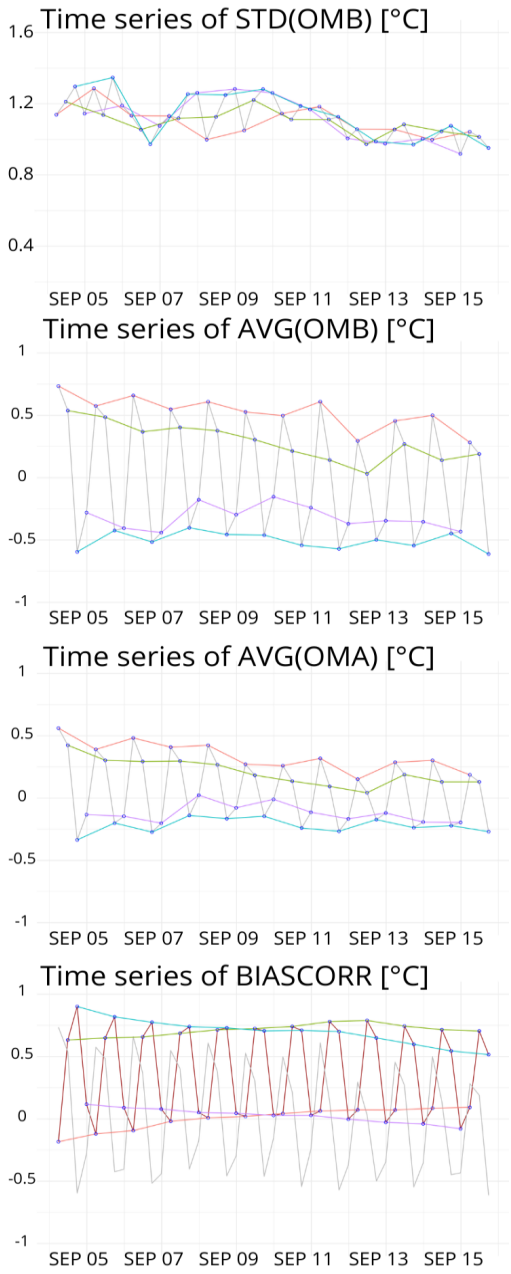
Použitie júnových koeficientov v septembri spôsobilo nesprávne korekcie a veľké chyby AVG (OMB), pretože sa zmenili sezónne podmienky. Cez leto aktualizované koeficienty boli efektívnejšie, nakoľko si myslíme, že odrážali kontinuálne zmeny v atmosfére počas leta. Je teda možné pozorovať závislosť a sledovať vývoj koeficientov β od sezóny (sezónny chod atmosférických charakteristík).

Vzniká tak otázka, ako dlho je možné používať zastarané koeficienty, aby analýza a následná predpoveď neboli zaťažené biasom?

Experimentálne bol simulovaný výpadok údajov SEVIRI počas dvoch týždňov. Ak údaje nie sú k dispozícii, koeficienty β sa neaktualizujú. Po dvoch týždňoch (náhodný letný dátum) sme pozorovali menší nárast hodnôt STD(OMB) a AVG(OMB). Tieto hodnoty však boli menšie ako 1,2 pre STD a 0,5 °C pre OMB. Tieto výsledky neuvádzame.



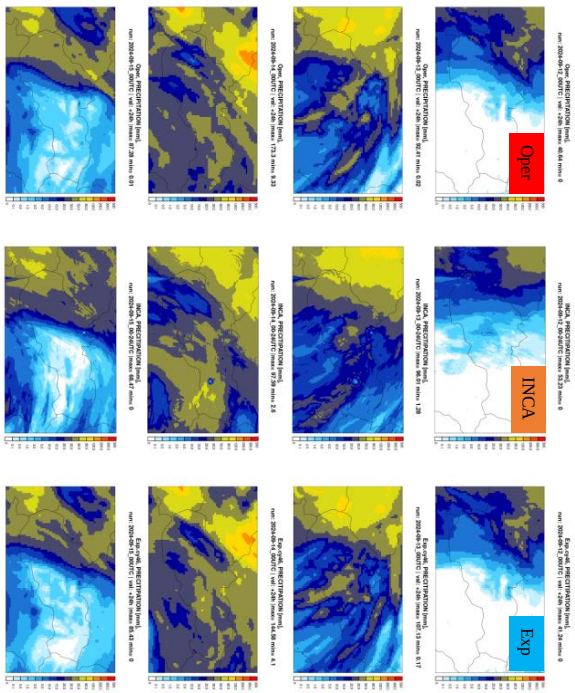
Obrázok 6 Dvojtýždňová štatistika aktívnych asimilačných experimentov pre kanál 2 s počiatočnými koeficientmi prepojenými s letným cyklením.



Obrázok 7 Dvojtýždňová štatistika aktívnych asimilačných experimentov pre kanál 2 s počiatočnými koeficientmi z Júna (posledné koeficienty z inicializačnej fázy).

Z hľadiska príspevku satelitných pozorovaní bol znovu analyzovaný prechod tlakovej níže Boris. Primárne sme sa zamerali na kumulatívne zrážky (za 24 – 72 hodín), veterné pole, vlhkosť a teplotu. Pre prehľadnosť uvedieme len výsledky z predpovedaných kumulatívnych zrážok za 24 hodín.

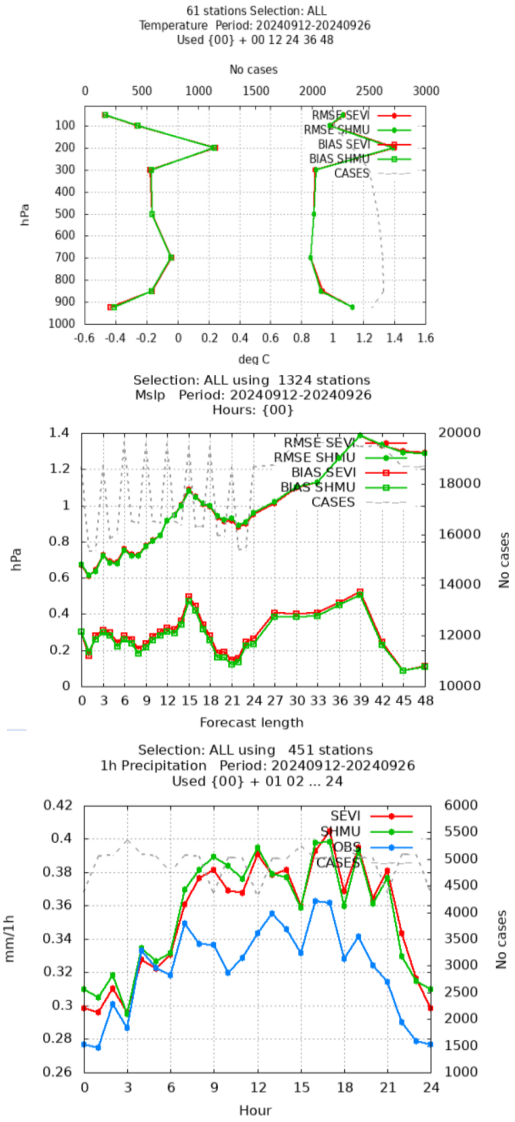
Obrázok 8 zobrazuje predpovedané úhrny zrážok nad Slovenskom z dátumu 12.-15.9.2024. Podrobnejšia analýza ukazuje, že v prípade predpovede z 13.09.2025 (druhý riadok) sú výrazné rozdiely v predikcii každého nastavenia (Oper, INCA, Exp) nad Východoslovenskou nížinou. Zrážkomerné stanice Milhostov a Kamenica nad Cirochou zaznamenali za deň 13.09. približne 30 mm / 24 hodín. Predpoveď z operatívneho modelu v tomto prípade lepšie zodpovedá realite (údaje zo staníc). Ak sa zameriame na česko-slovenské pohraničie, konkrétne severnú časť pohraničia, pre deň 14.9. (tretí radok), tak na českej stanici Lysá hora bolo zaznamenaných 168 mm / 24 hod. V tomto prípade predpoveď z experimentálneho nastavenia lepšie zodpovedá realite. Podobným prístupom by sme mohli analyzovať aj iné regióny. Subjektívnym porovnaním výsledkov je možné sledovať rozdiel v maximálnych hodnotách úhrnov, a taktiež priestorovo-časový posun úhrnu zrážok.



Obrázok 8 Porovnanie predpovedí kumulatívnych úhrnov zrážok (za 24h): operatívneho modelu ALADIN/SHMU (Oper, ľavý stĺpec), systému INCA (stredný stĺpec) a experimentálneho nastavenia so SEVIRI a VarBC (Exp, pravý stĺpec). V jednotlivých riadkoch sú dni výpočtov kumulatívnych úhrnov (12.9. – 15.9.2024).

Výsledky verifikačného skóre slúžia na vzájomné porovnanie jednotlivých experimentov (Oper a Exp), ich porovnanie voči súboru meraní a ako kontrola vyššie uvedených záverov. Výsledky z verifikácie sú z obdobia 12-26.9.2024, z hodín 00 a 12 UTC pre 48-hodinové predpovede. V prípade vertikálneho teplotného profilu (Obrázok 9, hore) sú rozdiely medzi Oper a Exp minimálne. Verifikačné skóre pre redukovaný tlak na hladinu mora (Obrázok 9, v strede) ukazuje veľmi malý rozdiel medzi experimentálnym a operatívnym nastavením. Pri porovnaní skóre hodinových zrážok (Obrázok 9, dole) nepozorujeme jednoznačné zlepšenie počas celej platnosti predpovede. Mierne zlepšenie je

viditeľné v prvých dvoch hodinách a následne medzi 4. a 13. hodinou platnosti predpovede. Ostatné analyzované parametre vykazovali podobné trendy, a preto nie sú uvedené. Vo všeobecnosti verifikačné testy nepreukázali významné zlepšenie kvality experimentálnych predpovedí. Nenaznačujú však zhoršenie kvality predpovedí.



Obrázok 9 Ukazuje verifikačné skóre dvoch nastavení: SEVI (Exp) a SHMU (Oper) za obdobie 12.9.2024 – 26.9.2024. Meteorologické premenné (vertikálny teplotný profil, redukovaný tlak a hodinové zrážky) sú hodnotené na základe porovnania s pozorovanými údajmi.

8 Záver a diskusia

V rámci príspevku, ktorý je parcialnou časťou dizertečnej práce autora, bola skúmana asimilácia satelitných údajov a ich korekcia pomocou variačnej korekcia biasu (VarBC). Najskôr bola skúmana inicializačná fáza korekčnej metódy, pomocou pasívnej asimilácie dát počas dvojmesačného obdobia. Následne sme rozoberali vplyv VarBC metódy s dennou stratégiou na konkrétnej prípadovej štúdii, na termíne prechodu tlakovej níže Boris cez územie Strednej Európy.

Výsledky boli porovnávané s modelovými predpoveďami z operatívneho modelu ALADIN/SHMU a s pozorovaniami. Na základe výsledkov, denná stratégia cyklenia naznačuje rýchlejšiu stabilizáciu koeficientov a hodnôt OMB, na rozdiel od asimilačnej stratégii. Je to v súlade so zahraničnými štúdiami, zameraných na korekciu biasu satelitných údajov v rámci modelov pracujúcich na ohraničených oblastiach. Jedným z možných vplyvov, je výrazný denný prieheh atmosférických prvkov, čo môže ovplyvniť následné použitie koeficientov po istom čase ich neaktualizácie.

Z hľadiska príspevku satelitných meraní na kvalitu predpovedí, nebolo preukázane jednoznačné zlepšenie, avšak ani zhoršenie kvality predpovedí. Výsledky plánujeme podrobnejšie verifikovať.

Ďalšou, neskúmanou, premennou môže byť uhol snímania a dĺžka atmosférickej dráhy žiarenia, ktorá môže mať vplyv na kvalitu údajov a teda následnú kontrolu kvality údajov. Zároveň budú nasledujúce kroky výskumu zamerané na adaptivitu parametra rýchlosti adaptivity koeficientov VarBC metódy, vyhodnotenie efektivity nastavení metódy korekcie VarBC a vplyv satelitných pozorovaní na predpovede na iných prípadových štúdiách.

Poďakovanie

Touto cestou by som sa chcel **poďakovať** Mgr. Márii Derkovej PhD. a jej kolegom zo SHMÚ za cenné rady, sprístupnené údaje a trpezlivosť.

Literatúra

[Aminou, 2002] Aminou, D. (2002). *MSG's SEVIRI Instrument.* Netherlands: The ESA bulletin. Retrieved from https://www.esa.int/esapub/bulletin/bullet111/chapter4_bul111.pdf

[Benáček a Mile, 2019] Benáček, P. and Mile, M. 2019. *Satellite bias correction in the regional model ALADIN/CZ: Comparison of Dfferent VarBC Approaches.* s.l.: American Meteorological Society, 2019. https://doi.org/10.1175/MWR-D-18-0359.1.

[Dee, 2004] Dee, D. P. (2004). Variational bias correction of radiance data in the ECMWF system. 2004.

[Dee, 2005] Dee, D. P. (2005). Bias and data assimilation. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*.

[Derková, 2008] Derková, M. (2008). Algoritmy mezoškálovej asimilácie dát v modeli na ohraničenej oblasti. *Dizertačná práca*. Bratislava: GEOFYZIKÁLNY ÚSTAV SAV BRATISLAVA.

[Derková, 2017] Derková, M., et al. 2017. Recent improvements in the ALADIN/SHMU operational system. s.l. : *Meteorologický časopis*, vol. 20, no. 2, p45-52, 2017.

[Randriamampianina et al., 2011] Randriamampianina, R., Iversen, T., & Storto, A. (2011). Exploring the assimilation of IASI radiances in forecasting polar lows. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*. doi:10.1002/qj.838

[Eyre, 2016] Eyre, J. R. 2016. *Observation bias correction schemes in data assimilation systems: a theoretical study of some of their properties.* Exeter UK : *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 2016. DOI: 10.1002/qj.2800.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 36–41
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Tomáš Vörös

A GUI tool for modelling of the atmospheric flight of meteors

Tomáš Vörös[1*]

Supervisor: Juraj Tóth[1†]

Department of Astronomy, Physics of the Earth, and Meteorology, FMPH CU, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstract: The AMOS network of all-sky cameras is currently operating in six countries, spanning both hemispheres. In the past years we have collected vast amounts of data that contain precious information about meteors. Using double-station observations, we can calculate their atmospheric trajectory, from which the position and luminosity as functions of time are inferred. Numerical modelling of the meteor observations allows us to determine the physical properties of the original bodies, which in turn can help us learn about comets, asteroids, and evolution of the Solar system. For that, we have developed a simple GUI tool that implements the model of meteoroid erosion suitable for fainter meteors [Borovička et al., 2007]. It is written in Python, while all numerical calculations are performed in C++. The user can effortlessly look through the plots of observed speed and luminosity of meteors, and pick those that exhibit sufficient deceleration, which is an important aspect of numerical modelling. The ultimate goal is to find physical parameters that offer the best fit to the observation, which includes determining the density, ablation coefficient, or fine-tuning the observed entry speed. We showcase this workflow on some recent meteors observed by our cameras.

Keywords: meteors, meteoroids, GUI, numerical modelling

1 Motivation

Meteoroids are small bodies in the Solar system with sizes ranging from 30 µm to 1 m. Usually they originate from comets or active asteroids and form streams of particles that orbit around the Sun on orbits similar to their parent body. When the Earth crosses such stream, the meteoroids enter the atmosphere, start heating up due to friction and subsequently evaporate. This is observed as a meteor shower. By analysing the observations of individual meteors belonging to a shower, we can determine the physical properties of the meteoroids that caused them, such as density or material strength, and find whether the parent body is rather homogeneous or not. This is a cheap alternative to expensive in-situ or sample-return space probes that are designed to visit comets or asteroids.

Some meteoroids cannot be assigned to any known meteor stream. These are called sporadic. Some of them were originally stream meteoroids but after a long time, gravitational and non-gravitational perturbations changed their orbits significantly, so that they are not similar to the orbit of their parent body any more. Other mechanisms that generate sporadic meteoroids include collisions of asteroids, rotational disruptions of fast rotators, or thermal cracking of the surface of asteroids with low perihelion distances. Sporadic meteoroids with aphelia inside of the orbit of Jupiter are usually denser and have higher material strengths than those coming from far regions of the Solar system. There are some outliers, however, and constraining the amount of rocky material on near-parabolic can help develop cosmogonic models.

2 AMOS all-sky cameras and data reduction

In this work we use the observations from the All-sky Meteor Orbit System (AMOS) network of all-sky cameras operated by the Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, Comenius University in Bratislava. Since 2007, the network has been expanding until its current state, which comprises of 6 subnetworks – Slovakia, Canary Islands, Hawaii, Chile, South Africa and Australia. The cameras operate autonomously during every night with favourable weather. Using a fish-eye lens, the field of view is $180^\circ \times 140^\circ$ resulting in the image resolution of around $6.75'$ per pixel. At 20 frames per second, the limiting magnitude for stars is +5, while for meteors it is approximately +4. The optical system is protected by a housing which is open when the Sun is at least 12° below the horizon. During wet conditions, the rain and humidity sensor gives command to close

*tomas.voros@fmph.uniba.sk
†juraj.toth@fmph.uniba.sk

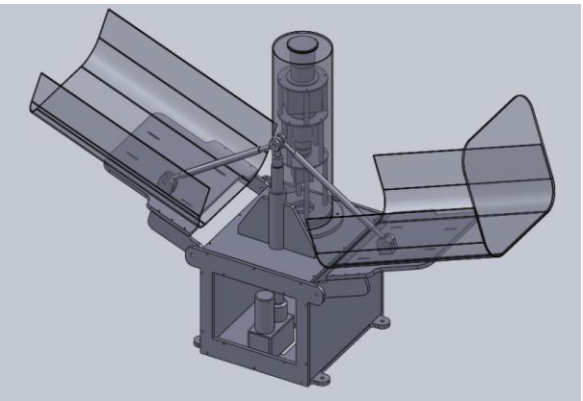


Figure 1: Illustration of the AMOS all-sky camera with open housing.

the protective housing. An illustration of the AMOS all-sky camera with open housing is in the Figure 1. A more detailed description of the system is given by [Tóth et al., 2019].

The raw footage is processed by a detection software developed by the Kvant company, which extracts the position with sub-pixel precision, and intensity of a meteor from each frame of the video. This serves as an input to the MT (Meteor Trajectory) software [Ďuriš et al., 2019] which calculates the real position and luminous power as functions of time during the entirety of the luminous trajectory. The orbital parameters of the meteoroid before encountering the Earth are determined too.

3 Luminous trajectory

Upon entering the atmosphere of the Earth, the meteoroid collides with the molecules of the air, and momentum and kinetic energy is transferred. After a sufficient temperature is reached, the meteoroid starts radiating light, which we observe as a meteor. The transferred momentum translates into the deceleration of the meteoroid, whereas the transferred energy is used to evaporate meteoroidal material, which is called ablation. The luminous power of meteor is assumed to be proportional to the loss of kinetic energy of meteoroid. Therefore, the three basic equations describing the luminous phase of atmospheric flight [Ceplecha et al., 1998] are as follows.

- The law of conservation of momentum

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = -Km^{-1/3}\rho_{\mathrm{a}}v^2, \tag{1}$$

  where the derivative of speed v of the meteoroid with respect to time t on the left-hand side is related to the shape-density coefficient K, mass of the meteoroid m, and air density ρ_{a}.

- The law of conservation of energy

$$\frac{\mathrm{d}m}{\mathrm{d}t} = -K\sigma m^{2/3}\rho_{\mathrm{a}}v^3, \tag{2}$$

  where, in addition to the previously mentioned quantities, σ is the ablation coefficient.

- The luminosity equation

$$I = -\tau\frac{\mathrm{d}E_{\mathrm{k}}}{\mathrm{d}t} = -\tau\left(\frac{v^2}{2}\frac{\mathrm{d}m}{\mathrm{d}t} + mv\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t}\right), \tag{3}$$

  where τ is the luminous efficiency.

These basic equations are called the single-body equations since they do not take into account the fragmentation of meteoroid that occurs due to the dynamic pressure exerted by the colliding air molecules. To include fragmentation, the so-called model of meteoroid erosion was introduced [Borovička et al., 2007], which assumes that the meteoroid loses mass not only through evaporation, but also by release of small grains from the surface, which is called erosion. The equation of mass loss through erosion is

$$\frac{\mathrm{d}m}{\mathrm{d}t} = -K\eta m^{2/3}\rho_{\mathrm{a}}v^3, \tag{4}$$

which is analogous to the Equation 2, the only change is the introduction of the erosion coefficient η. The real rate of mass loss is then the sum of the right-hand sides of the Equations 2 and 4, since the processes of evaporation and erosion are simultaneous. The grains in simulation may all have the same mass, or the masses can lie within some interval.

4 Simulation and GUI

In order to run simulations as described in the Section 3, we must know the atmospheric density ρ_{a} for the given time, place, and altitude where meteor was observed. For that, we use the NRLMSISE-00 atmospheric model [Picone et al., 2002] implemented in the `pyatmos` Python package. In our work we are interested mostly in faint meteors, and therefore we use the luminous efficiency τ which was empirically deduced for such meteors [Vida et al., 2024].

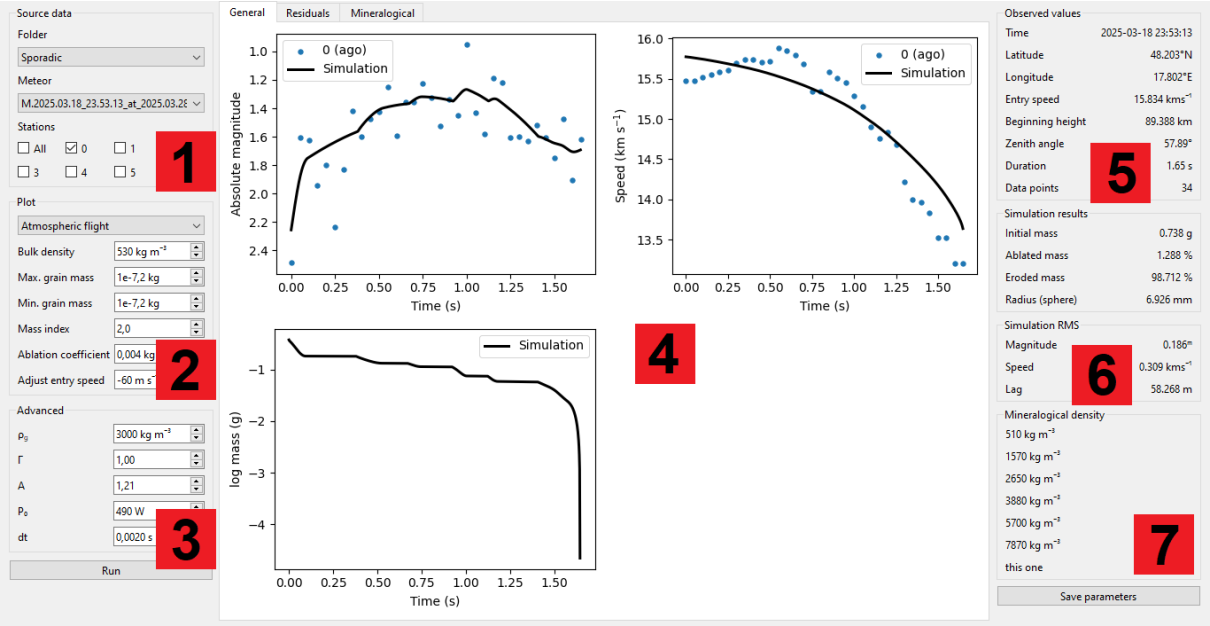


Figure 2: A view of the GUI with *General* window in the central panel.

Since small meteoroids evaporate completely, we require that the simulated meteor evaporates too. This assumption is used to choose the initial mass. Additionally, we allow the erosion coefficient η to vary. The simulation is successful once a set of free parameters (shape-density coefficient K, ablation coefficient σ, grain masses, fine-tuned entry speed) is found so that the simulated position and luminosity fits the observed values well. Finally, the density of meteoroid is calculated from the known value of K. The entry speed is also treated as a free parameter so it can be fine-tuned to match the observed position of meteor mainly in the first half of the luminous trajectory.

To make the process of running simulations and fitting the observed data as user-friendly as possible, we have made a graphical user interface in Python using the `PyQt6` package, where the user can easily browse through the plots of observed speed and luminosity. This is important because it lets the user to decide whether the data for the particular meteor has sufficient quality and whether the meteor had observable deceleration, since the aim is to fit both observed position and luminosity.

Before the simulation is run, the user must manually choose the values of free parameters. The GUI then calls an executable file that solves the differential equations from the Section 3. The executable file was compiled from a C++ code due to its fast execution speed. The results are then sent back to the GUI where they are displayed in the form of plots and root mean square errors between the observed and simulated values.

The GUI comprises of three panels. The left-hand side panel has three parts, which are here numbered as in the Figure 2:

1. *Source data*: Here, the user chooses a meteor of interest. Additionally, the checkboxes can be used to choose data only from certain stations. Usually we choose the station that is closest to the meteor since it has the highest measurement accuracy.

2. *Plot*: This is used to plot the observed data, or plot the simulated atmospheric flight. In the case of simulation, the user must manually choose values of free parameters.

3. *Advanced*: These parameters are fixed and are changed very rarely.

The central panel, labelled with number 4 in the Figure 2, has three windows that can be viewed by clicking on their name at the very top of the panel:

- *General*: This shows plots of the observed absolute magnitude and speed. After a simulation is

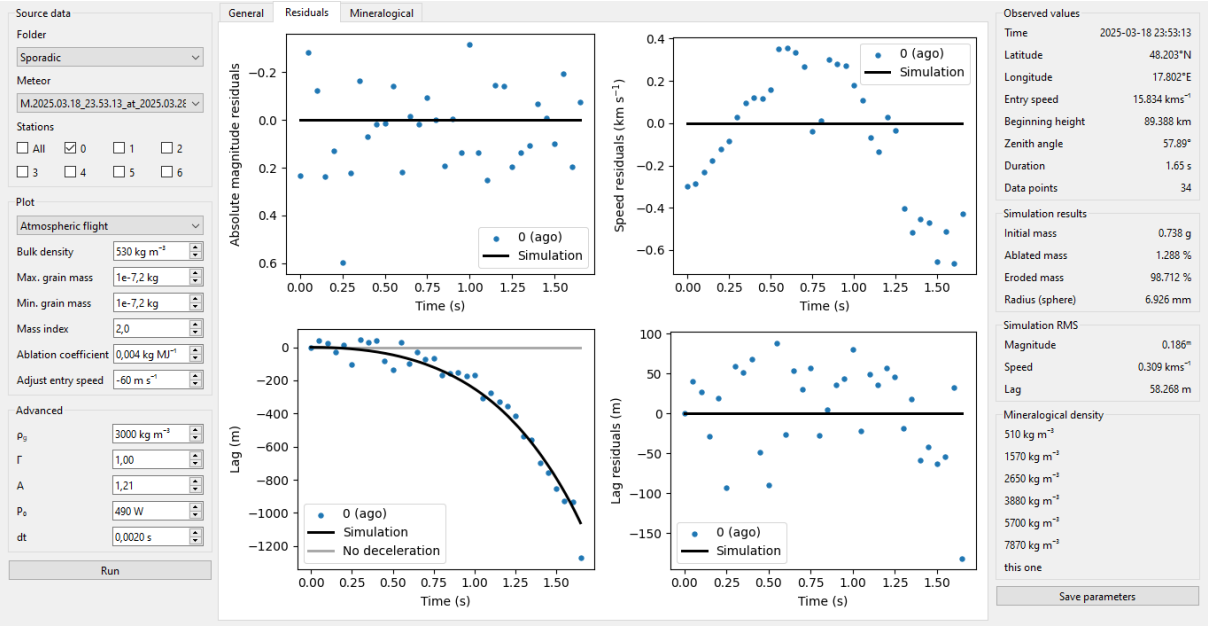


Figure 3: A view of the GUI with *Residuals* window in the central panel.

run, the black line shows the simulated values, and a third plot in the bottom left corner of the panel appears and shows how the mass of the simulated meteoroid decreased in time.

- *Residuals*: Shown in the Figure 3, the top row of plots shows the difference between measured and simulated values of absolute magnitude and speed. The bottom left plot shows lag – the difference between the observed travelled distance and the distance that would a non-decelerating meteoroid travel. The bottom right plot shows the difference between observed and simulated lag.
- *Mineralogical*: This window shows results of the simulation of the preheating phase. It is out of the scope of this article, but a brief description can be found in [Vörös, 2024].

The right-hand side panel has three parts too:

5. *Observed values*: Basic information is displayed here.
6. *Simulation results* and *Simulation RMS*: The results of the simulation and the root mean square errors are shown here.
7. *Mineralogical density*: Here are the results of the simulation of the preheating phase. Again, this is out of the scope of this article.

Our aim is to minimise the root mean square error of lag, since it is simply a different way of expressing the position of meteor, which can be directly measured from the video frames. The speed displayed in the plots is not a raw measurement, but a smoothed fit. Therefore we regard the speed to be only of an informative nature. Finally, the observed absolute magnitude of the meteor must be fitted well by the simulation, too.

4.1 Meteor 1

As an example in the Figures 2 and 3, we have chosen a meteor that was observed above western Slovakia on the 18th March 2025 at 23:53:13 UTC. It entered the atmosphere of the Earth at $15.8\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ and became visible at 89.4 km. Then the meteoroid travelled 24.8 km before completely evaporating at the height of 76.7 km. At maximum brightness, it reached the absolute magnitude of $+1$. Before encountering the Earth, the meteoroid was orbiting the Sun on an elliptical orbit with eccentricity 0.904, with perihelion at 0.996 au and aphelion at around 19.8 au – near the orbit of Uranus. The inclination was 4.2° which means that the orbital plane of the meteoroid was almost identical to the orbital plane of the Earth. Knowledge of the original orbit of the meteoroid gives a good idea for the first guess of the free parameters.

Meteor	Material	Density ($\mathrm{kg\,m^{-3}}$)	Ablation coeff. ($\mathrm{kg\,MJ^{-1}}$)	Grain mass (kg)	Eroded mass (%)
1	cometary	530	0.004	6.3×10^{-8}	99
2	asteroidal	3550	0.004	1.6×10^{-7}	95

Table 1: Properties of the two analysed meteoroids.

For modelling of the luminous trajectory we have chosen to use the measurements from the station internally labelled with number 0, which in the case of this meteor is the AMOS station situated at the Astronomical and Geophysical observatory (AGO) in Modra. A practised eye would notice in the plot of the observed speed, that the deceleration is rather high given the length of the luminous trajectory. This suggests low density and indeed, according to the results of our simulation, the density of the meteoroid was $530\,\mathrm{kg\,m^{-3}}$ and comprised of grains with mass of $6.3 \times 10^{-8}\,\mathrm{kg}$ with ablation coefficient of only $0.004\,\mathrm{kg\,MJ^{-1}}$. From the original mass of around 0.7 g, almost 99 % was lost through erosion. If we assume spherical shape, the diameter of the meteoroid was approximately 1.4 cm.

In the Figure 3, apart from one outlier, the residuals of absolute magnitude are less than 0.3, which is well within the photometric accuracy of AMOS cameras. Similarly, all but one lag residual are smaller than 100 m. To compare it with the resolution of the AMOS cameras, we can simply calculate that the resolution of $6.75'$ per pixel translates to the resolution of 157 m at the distance of 80 km. The real resolution is, however, better than that since the position of meteor is extracted from the footage with sub-pixel precision. Nevertheless, the lag root mean square error of 58 m means that the simulation is a good fit of the observed meteor.

This meteoroid consisted most likely of cometary material since it had low density and was very crumbly, which is evidenced by the fact that almost all of the original mass was lost through erosion. Also the grains were rather fine, which is typical for low density meteoroids [Buccongello et al., 2024]. The original orbit with perihelion at the Earth and aphelion near Uranus, and low inclination suggests that the meteoroid was a small fragment of a short-periodic comet.

4.2 Meteor 2

Another meteor that we have analysed was observed by AMOS cameras at Mauna Kea and Haleakala on Hawaii. It entered the atmosphere of the Earth on the 24th March 2025 at 10:59:01 UTC at the speed of $13.6\,\mathrm{km\,s^{-1}}$. Its luminous trajectory began at 82.4 km and ended at 62.6 km. At maximum brightness, it reached the absolute magnitude of -0.6. This meteoroid also had low inclination of 5.2° and perihelion near the Earth at 0.997 au, but the aphelion was at the heliocentric distance of 3.8 au – not far behind the outer part of the main asteroid belt.

Since this meteoroid was on a typical asteroidal orbit, it is no wonder that the simulation resulted in the density of $3550\,\mathrm{kg\,m^{-3}}$. It was composed of coarser grains with the mass of $1.6 \times 10^{-7}\,\mathrm{kg}$, and ablation coefficient was $0.004\,\mathrm{kg\,MJ^{-1}}$, the same as in the case of Meteor 1. Before encountering the Earth, its mass was around 6 g and during the luminous phase 95 % of its mass eroded, suggesting a stronger and less crumbly material. Overall, this meteoroid was most likely a piece of material that originated from an asteroid in the main belt.

With the lag root mean square error of 104 m, the results of this simulation are less accurate that those of the Meteor 1. This is caused mainly by geometry – at the Haleakala station, the Meteor 2 was observed relatively close to the horizon with its ending point 28° above the horizon. This resulted in lower precision in determining the meteor position, since it was far from the camera and also the distortion caused by the fish-eye lens became more pronounced. Still, the simulation accuracy was good and clearly shows the differences between the cometary and asteroidal material summarised in the table 1.

5 Conclusion

We have developed a user-friendly GUI tool that is used for modelling of the atmospheric flight of meteors, which utilises the data collected by the AMOS cameras. It implements the model of meteoroid ero-

sion to calculate the luminosity and position of the meteor as functions of time. The user is tasked with finding a set of free parameters that produces the best fit of the observation – usually it is the minimal root mean square error in position of meteor during its luminous trajectory. As a result, the initial mass, density, ablation coefficient, grain mass, and mass lost through erosion is determined.

We have showcase the GUI tool on analysis of two meteors. We have determined that they were composed of different materials – one was cometary and the other was asteroidal. The most obvious difference between them is their density, but the cometary one was composed of finer dust and was more crumbly. The physical parameters of the meteoroids agreed with what one would expect based on their original orbits. The accuracy of simulation was reasonably good as it was comparable with the image resolution of the AMOS cameras.

Given that we choose the free parameters manually, we cannot say that the set of free parameters found in this work is the best fit to the observations, but from our experience we expect that the best possible fit is achieved with a set of free parameters that differs only minimally from the set that we have found. In the future, we aim to make the process of fitting the observations even easier. User will be required to find free parameters that are only a rough fit of the observation, with the rest being left to an optimisation algorithm.

References

[Borovička et al., 2007] Borovička, J., Spurný, P., and Koten, P. (2007). Atmospheric deceleration and light curves of draconid meteors and implications for the structure of cometary dust. *Astronomy & Astrophysics*, 473:661–672.

[Buccongello et al., 2024] Buccongello, N., Brown, P. G., Vida, D., and Pinhas, A. (2024). A physical survey of meteoroid streams: Comparing cometary reservoirs. *Icarus*, 410.

[Ceplecha et al., 1998] Ceplecha, Z., Borovička, J., Elford, W. G., ReVelle, D. O., Hawkes, R. L., Porubčan, V., and Šimek, M. (1998). Meteor phenomena and bodies. *Space Science Reviews*, 84:327–471.

[Picone et al., 2002] Picone, J. M., Hedin, A. E., Drob, D. P., and Aikin, A. C. (2002). Nrlmsise-00 empirical model of the atmosphere: Statistical comparisons and scientific issues. *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, 107:SIA–15.

[Tóth et al., 2019] Tóth, J., Šilha, J., Matlovič, P., Kornoš, L., Zigo, P., Világi, J., Kalmančok, D., Šimon, J., and Vereš, P. (2019). Amos – the slovak worldwide allsky meteor detection system. In *Proceedings of the 1st NEO and Debris Detection Conference, Darmstadt, Germany, 2019*.

[Vida et al., 2024] Vida, D., Brown, P. G., Campbell-Brown, M. D., and Egal, A. (2024). First holistic modelling of meteoroid ablation and fragmentation: A case study of the orionids recorded by the canadian automated meteor observatory. *Icarus*, 408.

[Vörös, 2024] Vörös, T. (2024). Determining the mineralogical density of meteoroids. In *Študentská vedecká konferencia, FMFI UK, Bratislava, 2024, Zborník príspevkov*, page 4.

[Ďuriš et al., 2019] Ďuriš, F., Kornoš, L., and Tóth, J. (2019). Mt: Software for calculating meteor trajectories and orbits from multiple-stations observations. In *Proceedings of the International Meteor Conference, Pezinok-Modra, Slovakia, 2018*, pages 127–128.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 42
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Filip Janák

Analyzing the HI content of galaxies with machine learning

Filip Janák[1]*

Supervisor: Boris Deshev,[2]† Roman Nagy[1]‡

[1] Department of Astronomy, Physics of the Earth, and Meteorology, FMPH CU, Mlynska dolina, 84248 Bratislava
[2] Tartu Observatory, Faculty of Science and Technology, University of Tartu, 61602 Tõravere alevik

HI content of galaxies can serve as an important tracer that enables us to probe the galaxy environment and evolution. More precisely, the HI deficiency is closely related with environmental effects which are significant within large groups and clusters.

In this work we created a machine learning random forest (RF) model based on isolated ALFALFA sources, which can predict an expected HI content of a galaxy with given optical quantities. Our model performs much better (RMSE ≈ 0.23 dex, $R^2 \approx 0.78$) than the popular approach where HI mass is linearly related with the optical size (both on logarithmic scale), resulting in RMSE ≈ 0.32 dex, $R^2 \approx 0.57$.

We used the ALFALFA [Haynes et al., 2018] catalog as a source of the HI mass (target variable of our model) combined with the SDSS [Blanton et al., 2017] photometric catalog, which provided optical data that served as features for our predictive model. We selected petrosian magnitudes, petrosian radii, petrosian radii containing 50% and 90% of the total flux (each of them in g, r and i bands). We also included calculated concentration and color indices. Finally, we incorporated an information about galactic environment from a spectroscopic catalog by [Tempel et al., 2017].

We trained our RF model on the sample of isolated galaxies and predicted the expected HI mass of non-isolated galaxies. We calculated the HI deficiency as the difference between predicted and observed HI mass. Fig. 1 shows a calculated median of the HI deficiency for the subsample of low-mass galaxies (orange) and high-mass galaxies (green) with respect to four environmental tracers: the number of galaxies N within a group, the estimated mass of the group a galaxy belongs to M_{200} and the normalized environmental density of the galaxy for smoothing scales 3 and 10 Mpc. The HI deficiency is related with the galactic environment, with the median value increasing from around -0.05 dex at sparse environments up to 0.1 dex at densest environments. The

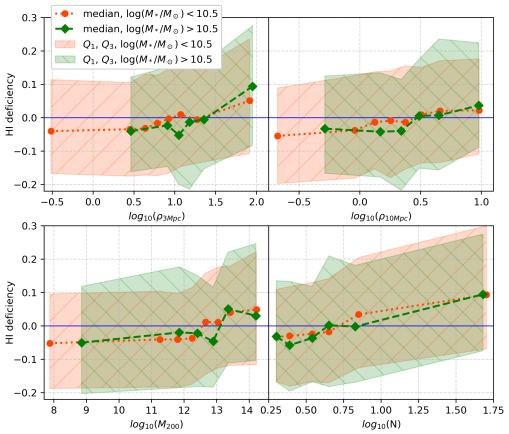


Figure 1: HI deficiency vs environment

scatter is huge (difference between the first quartile (Q1) and the third quartile (Q3) around 0.3 dex). The sparse environment edges of high-mass curves start below or around the low-mass curves, but finish above them (except for the $\log_{10}(M_{200})$ environmental tracer). Although the HI deficiency with respect to various tracers expresses moderately different profiles, the prevailing growing tendency with an environment is evident. This indicates, that the environment depletes the neutral hydrogen gas from galaxies.

***Acknowledgments**: This work was supported by the VEGA - the Slovak Grant Agency for Science, grant No. 1/0481/25 and by the Visegrad Fund grant No. 22210105.*

References

[Blanton et al., 2017] Blanton et al. (2017). Sloan Digital Sky Survey IV: Mapping the Milky Way, Nearby Galaxies, and the Distant Universe. *Astron. J.*, 154(1):28.

[Haynes et al., 2018] Haynes et al. (2018). The Arecibo Legacy Fast ALFA Survey: The ALFALFA Extragalactic H I Source Catalog. *Astrophys. J.*, 861(1):49.

[Tempel et al., 2017] Tempel et al. (2017). Merging groups and clusters of galaxies from the SDSS data. The catalogue of groups and potentially merging systems. *Astron. Astrophys.*, 602:A100.

*filip.janak@fmph.uniba.sk
†boris.deshev@ut.ee
‡roman.nagy@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 43
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Katarína Sabolová, Jiří Šilha

Color index evolution of CZ-3B rocket bodies due to space weathering

Katarína Sabolová[1*] Jiří Šilha[1†‡]

Department of Astronomy, Physics of the Earth, and Meteorology, FMPH UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Space weathering affects all objects exposed to the space environment, including artificial satellites and space debris. High-energy particles, micrometeoroids, and atmospheric particles deteriorate the outer surface of objects, leading to detectable changes in material properties over time. This includes oxidation, increased surface roughness, and paint peeling, all of which affect the object's reflectivity. Laboratory simulations show that materials commonly used in space missions darken when exposed to space, with the extent varying by material and wavelength [Engelhart et al., 2019]. Understanding the impact of space weathering on artificial space objects is crucial for their long-term monitoring and classification.

The research utilizes the 70 cm aperture Newtonian reflector (AGO70) at the Astronomical and Geophysical Observatory (AGO) in Modra, Slovakia. AGO70, equipped with Johnson-Cousins photometric filters (BVR_cI_c), is designed to observe space debris and near-Earth objects. The color indices $(B-V)$, $(V-R_c)$, etc., are obtained from the object's brightness in individual filters [Zigo et al., 2023].

Given the high frequency of rocket launches, objects such as the CZ-3B upper stages are ideal candidates for studying space weathering. The color indices were obtained from objects that had been in orbit for a few months up to 2.5 years. The phase angle and the rotational period were considered in the analysis.

Data from seven CZ-3B upper stages were collected over several nights, with multiple measurements averaged for each object. The showcase BVR_cI_c light curves are shown in Fig. 1. The average color index trends in units [mag / year] presented in Fig. 2 show that $d(B-V) = -0.32$, $d(V-R_c) = -0.09$, $d(R_c-I_c) = -0.05$, and across the entire visible spectrum $d(B-I_c) = -0.46$, suggesting that shorter wavelengths are more strongly affected by space weathering than longer wavelengths, making the white-painted CZ-3B upper stages appear "bluer" over time.

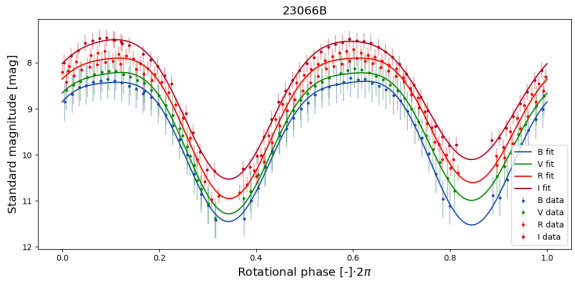


Figure 1: Fit of BVR_cI_c folded light curves over one period of object 2023-066B.

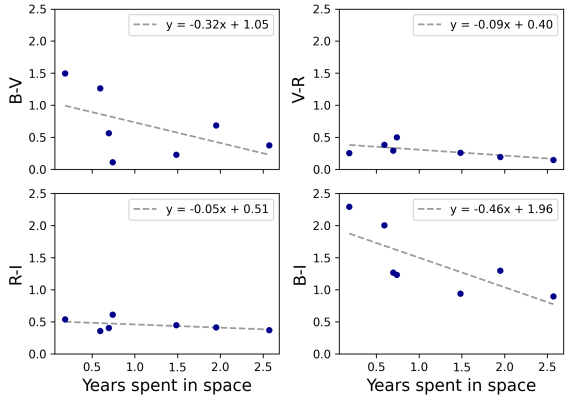


Figure 2: Evolution of color indices of CZ-3B upper stages.

References

[Engelhart et al., 2019] Engelhart, D., Cooper, R., Cowardin, H., Maxwell, J., Plis, E., Ferguson, D., Barton, D., Schiefer, S., and Hoffmann, R. (2019). Space weathering experiments on spacecraft materials. *The Journal of the Astronautical Sciences*, 66(2):210–223.

[Zigo et al., 2023] Zigo, M., Šilha, J., Hrobár, T., and Jevčák, P. (2023). Space debris surface characterization through bvr_ci_c photometry. *Advances in Space Research*, 72(9):3802–3817.

*sabolova76@uniba.sk
†jiri.silha@fmph.uniba.sk
‡Supervisor

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 44
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Emma Račáková

Extrasolárne planéty v zóne života

Emma Račáková[1]*
Školiteľ: Juraj Tóth
[1] Nad potokom 10, 900 31 Stupava

Abstrakt

Prehľad metód detekcie exoplanét, definovanie zóny života, analýza vzorca na výpočet rovnovážnej povrchovej teploty planéty. Overenie vzorca na planétach solárnej sústavy a porovnávanie so skutočným stavom. Výpočet rovnovážnej povrchovej teploty pre všetky známe exoplanéty a určenie, ktoré z nich spadajú do zóny života.
Kľúčové slová: Exoplanéta, Detekčné metódy, Zóna života, Rovnovážna povrchová teplota

1 Detekcia exoplanét

Extrasolárne planéty, skrátene exoplanéty, sú planéty, ktoré nepatria do slnečnej sústavy ale obiehajú inú hviezdu.
Najznámejšie metódy detekcie exoplanét:

- **Metóda radiálnych rýchlosti** funguje na základe zachytávania jemného kolísania hviezdy ovplyvneného gravitáciou exoplanéty.
- **Metóda pomocou tranzitu** funguje na princípe zachytávania poklesu svetla hviezdy keď pred ňou prejde exoplanéta.
- **Priame pozorovanie exoplanét** je možné iba pomocou najpresnejších teleskopov ak zakryjeme svetlo materskej hviezdy adaptívnou optikou.
- **Gravitačné mikrošošovkovanie** funguje na schopnosti gravitácie ohýbať svetlo, a tak zväčšuje jas exoplanéty nachádzajúcej sa za hviezdou.
- **Detekcia pomocou astrometrie**, kedy sledujeme pravidelné kolísanie polohy planéty v porovnaní s polohami iných hviezd.

2 Zóna života

Zóna života ,známa aj ako Goldicková zóna, je oblasť okolo hviezdy, kde podmienky umožňujú existenciu kvapalnej vody na povrchu exoplanéty. To znamená že ich povrchová teplota je v rozsahu 0 až 100°C.

3 Rovnovážna povrchová teplota

Rovnovážna teplota planéty T_{eq} je teoretická teplota planéty, kedy sa energia (z hviezdy) absorbovaná planétou rovná energií, ktorú planéta vyžaruje do priestoru.

Je dôležité si uvedomiť že veľkosť planéty vplýva na veľkosť absorbovanej energie z hviezdy, ale zároveň vplýva aj na veľkosť energie vyžiarenej planétou. V konečnom dôsledku sa veľkosť planéty „vykráti“ a o planéte potrebujeme vedieť iba jej vzdialenosť od hviezdy.

$$T_{\mathrm{eq}} = \left(\frac{L\,(1 - A_B)}{16\sigma\pi a^2} \right)^{1/4}$$

Výpočet T_{eq} pre planéty slnečnej sústavy:

- Merkúr T_{eq}= 163°C, reálna teplota= 179°C, mimo zóny života
- Venuša T_{eq}= -44°C, reálna teplota= 464°C
- Zem T_{eq}= -19°C, reálna teplota= 15°C
- Mars T_{eq}= -63°C, reálna teplota= -65°C

Ďalšie planéty sú ďaleko mimo zónu života: Jupiter= -171°C, Saturn= -192°C, Urán= -215°C, Neptún= -226°C.

Reálna teplota planét je vyššia od T_{eq} najmä z dôvodu skleníkového efektu, ktorý bráni vyžarovaniu energie planéty, čím zvyšuje ich priemernú povrchovú teplotu.

4 Exoplanéty v zóne života

Z doteraz objavených exoplanét (k 1. 1. 2025) má 4118 planét známe parametre pre výpočet T_{eq}. Podľa vypočítanej T_{eq} 421 exoplanét spadá do zóny života. To predstavuje relatívne malý podiel 5,7% z celkového počtu objavených exoplanét.

Poďakovanie

Poďakovanie pre Doc. RNDr. Juraj Tóth, PhD., za inšpiráciu a odborné vedenie.

Literatúra

[Račáková, 2025] Račáková E. (2025). Extrasolárne planéty v zóne života, Stredoškolská odborná činnosť

* emma.racakova@gmail.com

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 45–49
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Hana Škúciová, Andrej Krafčík

Automatic Segmentation and Quantification of Morphological Structures in Patients' MRI Data Using Artificial Intelligence

Hana Škúciová[1*] Andrej Krafčík[1†‡]

[1] Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava, Slovenská republika
[2] Ústav merania SAV, Dúbravská cesta 9, 841 04 Bratislava, Slovenská republika

Abstract: This study presents a U-Net based convolutional neural network for the automatic segmentation of morphological structures in MRI data. The model demonstrates promising accuracy and reproducibility, while highlighting challenges such as overfitting and the complex segmentation of subcutaneos and visceral fat. Future work will focus on enhancing data augmentation, fine-tuning the network architecture, and validating the approach on larger datasets.

Keywords: MRI data, convolutional neural network, visceral fat

1 Introduction

Manual segmentation of MRI data is a time-consuming and highly ineffective method of data acquisition in medicine. There is a need to develop a method of data segmentation that is quick, reproducible, and reliable. That is when artificial intelligence (AI) takes place.

In our research, we developed a fully functional U-Net model. U-Net is a convolutional neural network (CNN) architecture specifically designed for biomedical image segmentation. It was introduced by Olaf Ronneberger et al. in 2015 [Ronneberger et al., 2015] and has since become a widely used model in medical imaging due to its effectiveness and efficiency.

In our study, we adapted the U-Net model to segment morphological structures in patients' MRI data. By leveraging its ability to handle complex and variable medical images, our model achieved reliable and reproducible results, addressing the limitations of manual segmentation methods.

*skuciova3@uniba.sk
†andrej.krafcik@savba.sk
‡Supervisor

2 Methodology

2.1 Data acquisition

The data was provided by a research team from the Medical University of Vienna, High Field MR Center, Internal Medicine III. The center operates several whole-body MRI scanners dedicated to research, including a 3 Tesla PrismaFit (Siemens Healthineers, Erlangen, Germany).We received abdominal MRI scans from 51 patients representing diverse age groups, sex, and body fat percentages. These are all factors that were needed to be taken into consideration. All information was anonymized before use.

Firstly, we manually segmented each patient's scan using ImageJ 1.54p (Java 1.8.0_ 322, 64-bit) with additional plugins to create masks of visceral and subcutaneous adipose tissue.

We also selected scans from the lumbar area of the abdomen. Specifically, we opted for scans of the vertebrae in the lumbar section: L2-L3, L3-L4, and L4-L5. This resulted in a sufficiently large data set of training data.

2.2 Proposed Approach: U-net model

Among the different methods for semantic segmentation, the U-Net architecture stands out for its ability to accurately identify fine details in complex scenes, even with limited training data [Abdi et al., 2018]. The U-Net architecture consists of two main parts: an encoder (contracting path) and a decoder (expansive path). The encoder captures the context of the input image by progressively reducing its spatial dimensions while increasing the number of feature channels. The decoder, on the other hand, enables precise localization by upsampling the feature maps and combining them with high-resolution features from the encoder through skip connections. This unique structure allows U-Net to produce highly accurate segmentation masks, even with limited training data

[Zhou et al., 2020, Chollet, 2021]. Using customized U-Net architecture allowed us to capture both low-level and high-level features effectively.

The model is built using a Keras framework with Tensorflow backend, consisting of these main parts:

- **Encoder blocks:** Used for extracting features from the input image and downsampling the feature maps. Each block consists of a 2D convolutional layer followed by batch normalization and ReLU activation. MaxPooling is applied for further downsampling.
- **Bottleneck:** After the encoder layers, a series of convolutional layers are applied to capture the most abstract features of the image.
- **Decoder blocks:** These blocks perform upsampling using transposed convolutions and include concatenation with the corresponding encoder block outputs to refine the features.

The final layer is a 2D convolutional layer with a softmax activation function to produce the segmented output. The architecture of our model is represented Figure 1.

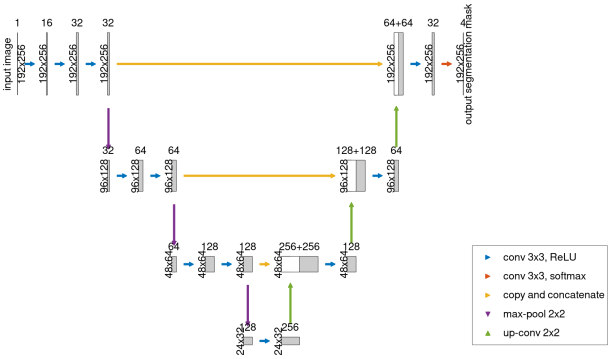


Figure 1: Architecture of U-Net model

We also used Random Zoom as part of data augmentation to enhance the model's generalization capabilities.

2.3 Training and validation

The data was divided into three subsets: 34 patients for training, 9 for validation, and 8 for testing. The model was trained using adaptive learning rates based on the gradient of the loss function, which combined cross-entropy. Training took place over 300 epochs, with each epoch involving a series of steps where the model's parameters were updated based on the gradient of the loss function. During the training process, the model's performance was monitored using metrics such as accuracy and loss, which were evaluated after each epoch. The training loop shuffled the data and processed batches of images and labels, making predictions, calculating the loss, and updating the model weights. After each training step, the model was evaluated on the validation dataset, with validation loss and accuracy being tracked to determine when to save the best-performing model. The filters in the convolutional layers controlled the number of feature maps learned at each layer, while a dropout layer with a probability of 0.5 was used before the output layer to prevent overfitting. MaxPooling was utilized for downsampling the feature maps in the encoder blocks, with alternative strided convolutions used when MaxPooling was disabled. Finally, after training, the model was evaluated on the test set to assess its generalization ability.

2.4 Implementation

The implementation was carried out on a machine with a NVIDIA GeForce RTX 4060 GPU (8 GB of memory) to speed up the training process. The environment was set up using Anaconda to manage dependencies, ensuring that the required and compatible versions of Python (3.12.2) and TensorFlow (2.17.0). We ran the code in JupyterLab, a powerful interactive computing environment. This setup enabled us to visualize the output in real-time, test various model configurations, and perform data analysis efficiently.

3 Results

Our first approach was to run a functional CNN capable of identifying adipose tissue in MRI scans without previous data adaptation. The model of this CNN is provided below.

The results we got from this U-Net were acquired in 300 epochs within 7.62 minutes with training and validation loss and accuracy represented in Figure 2 and Figure 3. After testing, the model provided figures for each training patient. The appendix (Figure 4) provides a comparisons of raw

data, data segmented manually and data segmented automatically.

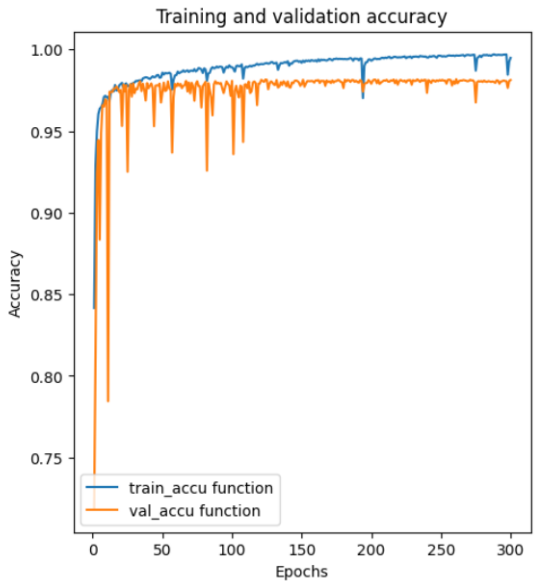


Figure 2: Training and validation accuracy of U-Net model

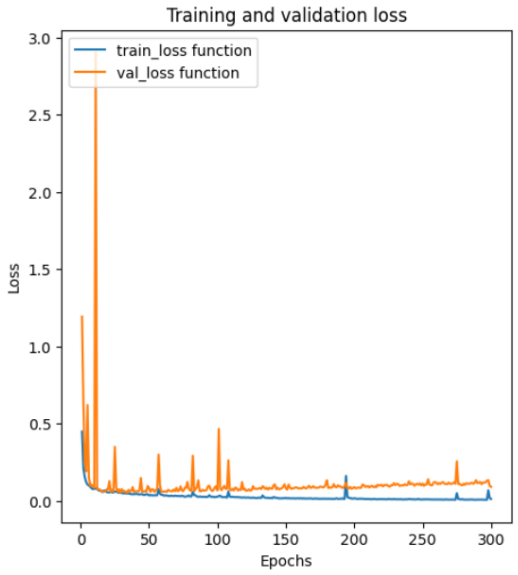


Figure 3: Training and validation loss function of U-Net model

To evaluate segmentation accuracy, we used two metrics [Eelbode et al., 2020]: the Dice Similarity Coefficient (DSC) and the Jaccard Index (JI), as summarized in Tabel 1. Let A be the set of pixels (or voxels) in the predicted segmentation and B be the set in the manual (ground truth) segmentation.

$$\mathrm{DSC}(A,B) = \frac{2 \cdot |A \cap B|}{|A| + |B|} \tag{1}$$

$$\mathrm{JI}(A,B) = \frac{|A \cap B|}{|A \cup B|} \tag{2}$$

Here, $|A|$ and $|B|$ represent the number of elements in each set. Higher DSC and JI values indicate a better overlap between the predicted segmentation and the ground truth, with DSC ranging from 0 (no overlap) to 1 (perfect overlap).

Method	DSC (Subcut.)	DSC (Visc.)	JI (Subcut.)	JI (Visc.)
U-Net	0.96 ± 0.04	0.83 ± 0.16	0.92 ± 0.07	0.74 ± 0.20

Table 1: Dice Similarity Coefficient (DSC) and Jaccard Index (JI) for subcutaneous (Subcut.) and visceral (Visc.) adipose tissue of subset of 8 patients asigned as testing data

4 Discussion

The results of our study indicate that the U-Net model is capable of accurately segmenting morphological structures in MRI data.

However, the overfitting observed after the 50th epoch (Figures 2 and 3) suggests that, despite a well-designed architecture, the model begins to memorize the training data rather than generalizing to unseen data, an overfit. This issue underlines the need for enhanced regularization strategies. In future work, implementing additional data augmentation techniques, such as random rotations, cut-out, and contrast adjustments, could help increase the variability of the training dataset, thus reducing overfitting.

Additionally, a difference in performance metrics between subcutaneous and visceral adipose tissue segmentation is observed. The higher Dice and Jaccard similarity scores for subcutaneous tissue (Tab 1) indicate that the model more reliably segments these regions compared to visceral areas. This discrepancy might be attributed to the intrinsic variability and complexity of visceral fat distributions. The solution could be to divide the dataset into three classes: one exclusively for L2-L3, another for L3-L4, and a final one for L4-L5.

While the U-Net model performed well within the confines of this study, future research should focus on enlarging the dataset and including images acquired from different MRI scanners and protocols.

Lastly, the example shown in Appendix (Figure 4) highlights that data quality can significantly influence the segmentation results.

In summary, while the adapted U-Net model demonstrates promising results in automating the segmentation of MRI data, overcoming challenges related to overfitting, data diversity, and varying image quality will be essential for future developments. Addressing these issues will not only improve the segmentation accuracy but also move AI closer to reliable clinical applications in medical imagining.

5 Conclusion

In conclusion, the performance of our U-Net model demonstrates its effectiveness in segmenting morphological structures in MRI data. Future work will focus on further reducing overfitting through advanced data augmentation techniques and exploring more robust architectural variations to enhance the overall segmentation performance.

Acknowledgments

We would like to express our sincere gratitude to the team at the Medical University of Vienna, High Field MR Center, Internal Medicine III for providing the MRI datasets used in this study. I also wish to thank my supervisor RNDr. Andrej Krafčík, PhD. for his valuable feedback and technical assistance. This work was supported by the by the Comenius University.

References

[Abdi et al., 2018] Abdi, G., Samadzadegan, F., and Reinartz, P. (2018). Deep learning decision fusion for the classification of urban remote sensing data. *Journal of Applied Remote Sensing*, 12(1):016038.

[Chollet, 2021] Chollet, F. (2021). *Deep Learning with Python*. Manning Publications, second edition.

[Eelbode et al., 2020] Eelbode, T., Bertels, P., Berman, J., Vandersteen, M., Maes, M., Bisschops, D., Drozdzal, M., Blaschko, M. B., Maes, F., Van Paesschen, W., and Vanslembrouck, J. (2020). Optimization for medical image segmentation: Theory and practice when evaluating with dice score or jaccard index. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 39(11):3679–3690.

[Ronneberger et al., 2015] Ronneberger, O., Fischer, P., and Brox, T. (2015). U-net: Convolutional networks for biomedical image segmentation. In *Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention (MICCAI)*.

[Zhou et al., 2020] Zhou, Z., Siddiquee, M. M. R., Tajbakhsh, N., and Liang, J. (2020). UNet++: Redesigning Skip Connections to Exploit Multiscale Features in Image Segmentation. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 39(6):1856–1867.

Appendix

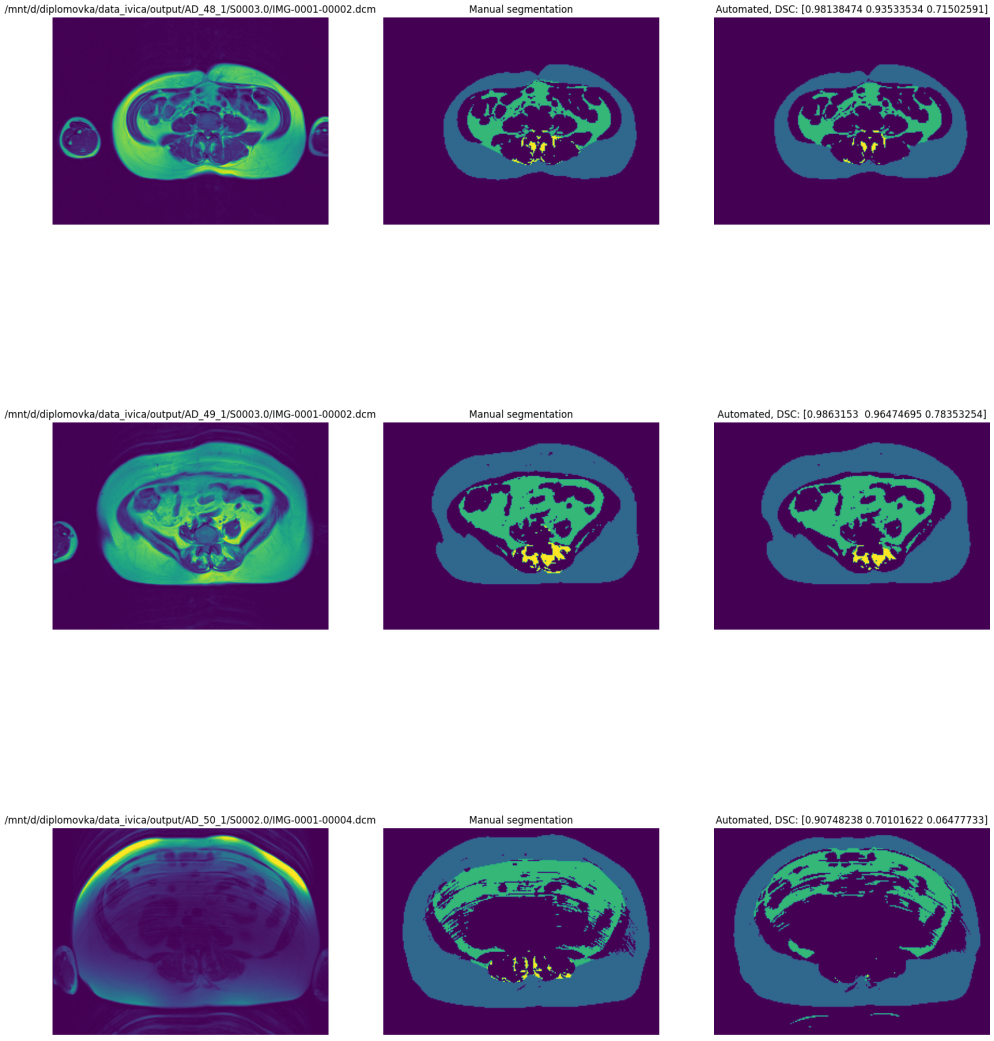


Figure 4: Comparison of segmentation results.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 50–61
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Katarína Purdjaková, Martin Kopáni

Vyšetrovanie prítomnosti železa v mozgu

Katarína Purdjaková [1]* Martin Kopáni [2‡§]
[1] Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2] Ústav lekárskej fyziky a biofyziky, LF UK, Sasinkova 2, 813 72 Bratislava

Abstrakt

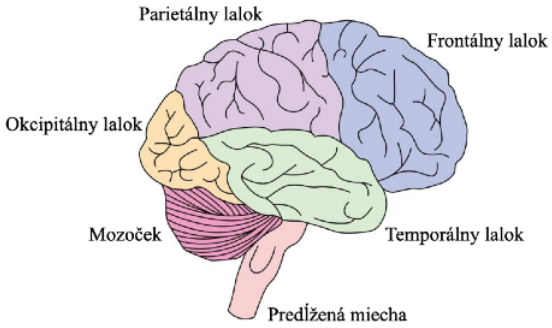
V posledných rokoch dosahuje významnú vedeckú pozornosť práve pozorovanie a diagnostika prítomnosti železa v mozgu. Je dokázané, že zvýšené koncentrácie tohto prvku môžu mať súvis s rozvojom neurodegeneratívnych ochorení ako je Alzheimerova choroba (AD), Parkinsonova choroba (PD) alebo demyelinizačná skleróza multiplex (SM) a starnutím, zatiaľ čo znížené hladiny sa vyskytujú napríklad pri rôznych anémiách alebo v dôsledku nedostatočného príjmu zo stravy. Prítomnosť železa bola pozorovaná prostredníctvom viacerých experimentálnych metód. Analýzou globus pallidus externus (GPe) ľudského mozgu bola určená lokalizácia železa využitím svetelného (SMK), ako aj skenovacieho elektrónového mikroskopu (SEM). Pozorovania získané SMK uvádzajú, že nervové bunky vykazujú fyziologickú veľkosť a morfológiu. Využitím energeticky disperznej röntgenovej spektroskopie (EDX) bola dokázaná prítomnosť železa a iných prvkov prítomných v ľudskom GPe. Prostredníctvom mapy rozloženia prvkov, SEM–EDX, bolo zobrazené fokálne rozloženie železa a kyslíka v centrálnej časti agregátu. Metódou transmisnej elektrónovej mikroskopie (TEM) boli identifikované štruktúry hipokampu, extrahované z myších vzoriek, s následným prvkovým rozložením jednotlivých elementov prítomných v časticiach. Využitím metódy TEM spolu s metódou SEM–EDX bola potvrdená prítomnosť železa. Je pozorované, že uvedená prítomnosť depozitov železa je vyvolaná samotnou metabolickou aktivitou a neurotransmiterovou reguláciou bazálnych ganglií. V oblasti hipokampu má tento prvok opodstatnenie pri neurotransmiterovej homeostáze, synaptickej plasticite, ako aj pri metabolizme mitochondrií. Predpokladá sa, že pozorovanie akumulácie železa v mozgu môže v budúcnosti, naopak, slúžiť aj ako biomarker, umožňujúci monitorovanie, diagnostiku a sledovanie progresie chorôb.

Kľúčové slová: železo v mozgu, globus pallidus, hipokampus, neurodegeneratívne ochorenia

1. Úvod do problematiky

Mozog je orgán s hmotnosťou približne 1,5 kg, rozdelený na dve hemisféry [Javaid, 2020]. Predstavuje 2 % celkovej hmotnosti tela, pričom až 60 % tvorí tuk a 40 % voda, sacharidy a soli. Obsahuje krvné cievy, neuróny a gliové bunky [Basnet, 2023]. Centrálny nervový systém (CNS) pozostáva z mozgu a miechy, ktoré zabezpečujú vnímanie, pohyb, emócie a rozum (Obr. 1). Lebka chráni mozog, zatiaľ čo chrbtica miechu [DeSesso 2009].

Rozdelenie mozgu zahŕňa tri hlavné časti, predný mozog, medzimozog a mozgový kmeň, pričom každá časť má odlišnú štruktúru a funkciu [Pagán 2019]. Tento orgán tvorí telencephalon (koncový mozog), diencephalon [medzimozog], mesencephalon (stredný mozog), rhombencephalon (zadný mozog) a myelencephalon (miechový mozog). Hemisféry sú rozdelené na laloky ohraničené brázdami [Wróbel, 2018]. CNS obsahuje bielu a sivú hmotu [Basnet, 2023], pričom sivá hmota pokrýva hemisféry a biela hmota sa nachádza vo vnútri. V mieche je usporiadanie obrátené [Basnet, 2023].

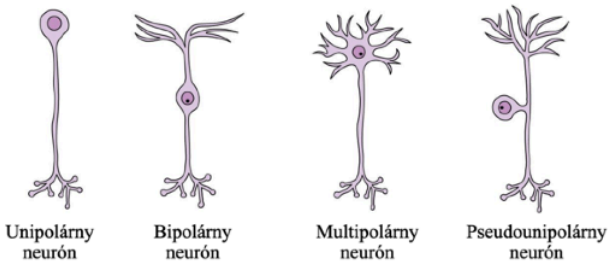


Obr. 1: Schématické znázornenie jednotlivých mozgových lalokov. Vlastný zdroj.

Základnou stavebnou jednotkou mozgu je neurón [Ackerman, 1992; Mehta et al. 2020]. Neurón obsahuje axón (jeden, dlhý) a dendrity (viacero, krátke) [Mehta et al. 2020; Ostatníková et al. 2017]. Funkcia neurónu závisí od jeho štruktúry [Henley and Lansing, 2021]. Úlohou neurónov je

* purdjakova1@uniba.sk
‡ martin.kopani@fmed.uniba.sk
§ Školiteľ

prijímať, viesť a prenášať signály zo zmyslových orgánov do CNS, kde sú analyzované a následne je produkovaná odpoveď odoslaná k svalom a žľazám. Neuróny pozostávajú z bunkového tela (obsahuje jadro), dendritov (prijímajú signály), axónu (vedie signály von) a nervových zakončení (Obr. 2). Dĺžka axónu sa pohybuje od menej ako 1 mm do 1 m, pričom priemer dosahuje 0,1 µm – 20 µm [Friedman, 2005]. Väčší priemer axónu predstavuje rýchlejšie šírenie signálu [Henley and Lansing 2021].



Obr. 2: Grafické zobrazenie rozdielov v štruktúre výbežkov unipolárnych, bipolárnych, multipolárnych a pseudounipolárnych neurónov. Vlastný zdroj.

Samotná komunikácia neurónov prebieha prostredníctvom synapsií [Ackerman, 1992]. Rozlišujeme dva základné typy, chemické a elektrické synapsie [Ostatníková et al. 2017]. Chemická synapsa prevádza elektrický signál na chemický [Ackerman, 1992]. V presynaptických zakončeniach sa nachádzajú neurotransmitery v synaptických vezikulách, ktoré sa uvoľňujú pri excitácii postsynaptického neurónu. Akčný potenciál otvára vápnikové [Ca^{2+}] kanály, čo zvyšuje intracelulárnu koncentráciu Ca^{2+} a spôsobuje exocytózu neurotransmiterov. Platí, že sila signálu ovplyvňuje frekvenciu akčných potenciálov (AP), ako aj množstvo uvoľnených neurotransmiterov [Ackerman, 1992; Ostatníková et al. 2017].

V pokoji si neurón udržiava záporný náboj okolo -70 mV. Membrána je nepriepustná pre Na^+ ióny. Po dosiahnutí prahovej hodnoty sa otvárajú Na^+ kanály a Na^+ prúdi dovnútra, čím vzniká depolarizácia [okolo 30 mV]. Po dosiahnutí transpolarizácie sa Na^+ kanály zatvárajú, K^+ kanály sa otvárajú a K^+ prúdi von, čím nastáva repolarizácia. Po krátkej hyperpolarizácii na -80 mV sa membrána vráti do pokojového stavu a môže prijať nový podnet, čím sa cyklus opakuje [Ackerman, 1992; Ostatníková et al. 2017].

Železo je najrozšírenejším prechodným kovom v mozgu a patrí medzi základné prvky práve z oblasti vývoja a funkčnosti mozgu [Hare et al. 2013; Levi et al. 2024]. Železo je životne nevyhnutné pre vývoj neurónov, myelinizáciu, syntézu, katabolizmus neurotransmiterov a transport elektrónov. Anomálie v distribúcii a koncentrácii tohto prvku lokalizovanom v mozgovom tkanive, sú spájané s neurodegeneratívnymi ochoreniami [Spence et al. 2020]. Vysoké koncentrácie železa, rovnako ako aj nízka distribúcia tohto prvku majú výrazné dôsledky pre samotnú existenciu buniek. Obe uvedené odchýlky prispievajú k smrti neurónov rôznymi spôsobmi, ako je napríklad oxidačné poškodenie, strata integrity membrány a proteostázy [Ashraf et al. 2019; Levi et al. 2024]. Pri zvýšení reaktívnych foriem kyslíka (ROS), ktoré prekonávajú antioxidačnú kapacitu organizmu dochádza k vzniku tzv. oxidačného stresu, ktorý sa zhoršuje akumuláciou železa a môže viesť k rýchlejšej degenerácii tkanív. V prípade vyvolaného oxidačného stresu môže nastať poškodenie lipidov, bielkovín, ako aj DNA [Hare et al. 2013; Levi et al. 2024].

Regionálna distribúcia železa v mozgu zdravého dospelého človeka je heterogénna. Najvyššie koncentrácie železa sú pozorované v bazálnych gangliách (GPe), zatiaľ čo nižšie koncentrácie sú pozorované v kortikálnej šedej hmote, bielej hmote, strednom mozgu a mozočku [Levi et al. 2024]. V mozgu zdravého dospelého človeka je celková koncentrácia železa v GP v rozmedzí od 0 do 200 µg/g tkaniva. Nižšia distribúcia sa nachádza v bielej hmote a sivej hmote, kde hodnoty sú menej ako 60 µg/g tkaniva [Spence et al. 2020]. Vyšetrovanie prostredníctvom MRI, rovnako ako aj posmrtné štúdie odhalili, že celková koncentrácia železa s postupujúcim vekom v špecifických oblastiach mozgu nadobúda vyššie hodnoty. Presná príčina tohto nárastu je v súčasnej dobe stále nejasná [Levi et al. 2024; Spence et al. 2020; Stankiewicz et al. 2007]. Počas starnutia dochádza k fyziologickému ukladaniu železa, a tým aj k jeho vyšším koncentráciám [Ward et al. 2014]. Pri výraznejšej akumulácii železa je možné predpokladať súvislosť s ochoreniami, ako sú AD, PD alebo roztrúsená SM [Koroshetz et al. 2024]. Abnormálna akumulácia železa bola pozorovaná pri mnohých ochoreniach, ako je Alzheimerova choroba (AD), Parkinsonova choroba (PD) a Hallervorden-Spatz syndróm. Pri demyelinizačných ochoreniach, napríklad skleróza multiplex (SM), bola podobne dokázaná nejasná súvislosť s prítomnosťou železa v mozgu [Pinero and Connor, 2000]. Alois Alzheimer definoval AD ako tzv. senilnú demenciu, teda progresívne neurologické ochorenie, ktoré vedie k postupnému zhoršovaniu fyzického aj duševného zdravia (Singh et al. 2024), väčšinou postihujúce mediálny spánkový lalok a asociatívne neokortikálne štruktúry [De-Paula et al. 2012]. Pri tomto ochorení sú typicky prítomné neuritické plaky a neurofibrilárne spleti, spôsobené hromadením amyloid-beta peptidu v mozgových tkanivách v dôsledku nadmernej fosforylácie tau

proteínu [De-Paula et al. 2012; Zhang et al. 2024]. PD je druhou najrozšírenejšou neurodegeneratívnou poruchou [Dou et al. 2025], kedy dochádza k degenerácii, k postupnému zániku dopamínergných neurónov v oblasti substantia nigra pars compacta s tvorbou tzv. Lewyho teliesok [Grimes and Bulman, 2002; Laurell et al. 2025]. V súčasnej dobe však liečba neumožňuje spomaliť ani predísť progresii tohto ochorenia [Dou et al. 2025]. Ako najčastejšie neurologické ochorenie postihujúce mladých ľudí, 20 – 40 rokov, je považovaná práve SM [Rivera, 2025]. Je to chronické autoimunitné ochorenie poškodzujúce myelínový obal, ktorý pokrýva axóny. Tento proces spôsobuje narušenie prenosu nervových vzruchov, čo vedie až k strate funkcie rôznych nervových vlákien, axónov [Chopra and Kataria, 2021]. SM postihuje jednotlivcov väčšiny etník, čo predstavuje výraznú záťaž v širokej škále geografických oblastí [Patti et al. 2022; Zachariou et al. 2024].

Svetelný mikroskop (SMK) je považovaný za ikonu vedy [Sanderson, 2020]. Patrí k najmenej invazívnym technikám, ktoré umožňujú prístup k informáciám z rôznych biologických meradiel v živých bunkách [Michel et al. 2013]. SMK sa riadi fyzikálnymi zákonmi definujúcimi interakciu svetla s pozorovanou vzorkou [Sanderson, 2020]. SMK pozostáva z objektívu umiestneného blízko vzorky a okuláru pri oku [Kopáni and Polák, 2022]. Princíp SMK spočíva v prechode svetla z jedného média do druhého s vyšším indexom lomu, čo vedie k zmene jeho smeru podľa Snellovho zákona. Energia fotónu (E) je daná vzťahom:

$$E = \frac{hc}{\lambda}$$

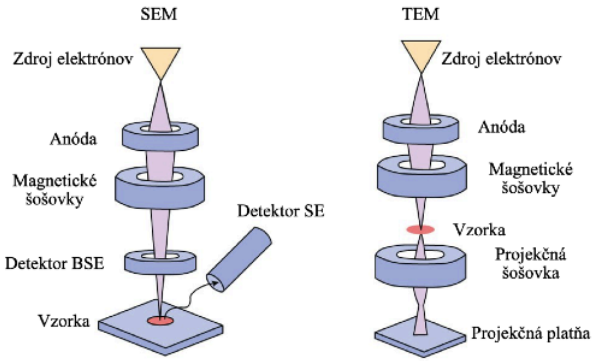
[kde h = Planckova konštanta, 6,626 × 10–34 Js]. Energie fotónov sa merajú v elektrónvoltoch [eV] a sú nepriamo úmerné vlnovej dĺžke (λ) [Sanderson 2020]. Tri dôležité vlastnosti SMK sú zväčšenie, rozlíšenie a kontrast. Zväčšenie je určené okulárom (5-30x) a objektívom (4-100x). Celkové zväčšenie (M) je dané vzťahom:

$$M = M_{\text{okulára}} \cdot M_{\text{objektívu}}$$

Rozlišovacia schopnosť je vzdialenosť dvoch bodov, ktoré je možné rozpoznať ako oddelené [Zvarík and Waczulíková, 2022]. Pri SMK môžu vzniknúť rôzne aberácie, ako napr. sférická a chromatická vada alebo zakrivenie poľa. Kontrast je kľúčový pre vizualizáciu detailov, keďže biologické vzorky sú transparentné. Používajú sa histologické farbivá (hematoxylín, eozín) a fluorescenčné metódy, no mnohé farbivá sú toxické [Foltinová and Polák, 2013].

EM vznikla ako odpoveď na limity SMK, keďže využíva elektróny namiesto fotónov [Kopáni and Polák, 2022]. EM dosahuje väčšie zväčšenie a lepšiu rozlišovaciu schopnosť a rozlišuje sa na transmisnú (TEM) a skenovaciu (SEM) elektrónovú mikroskopiu [Kannan, 2018].

SEM analyzuje organické aj anorganické materiály v rozsahu od nanometrov po mikrometre. Pracuje so zväčšením 5x - 300 000x [Mohammed and Abdullah 2019]. Vzorka musí byť suchá, mechanicky stabilná a elektricky vodivá, aby sa zabránilo akumulácii elektrického náboja [Kopáni and Polák, 2022]. Elektrónový lúč skenuje povrch vzorky bod po bode, čo vedie k vzniku obrazu [Mohammed and Abdullah 2019]. Na detekciu sa používajú sekundárne (SE) a spätne rozptýlené elektróny (BSE). SE vznikajú pri nepružných zrážkach primárnych elektrónov s elektrónmi vzorky, zatiaľ čo BSE vznikajú pri pružných zrážkach s jadrami atómov [Kopáni and Polák, 2022]. Napätie pod 5 kV poskytuje informácie o povrchu, zatiaľ čo napätia 15-30 kV prenikajú hlbšie do vzorky. SEM je často kombinovaná s energeticky disperznou röntgenovou spektroskopiou (EDX) na chemické analýzy [Rísová et al. 2023].



Obr. 3: Zloženie SEM a TEM a schématické znázornenie rozdielov medzi nimi. Vlastný zdroj.

TEM odhaľuje vnútorné štruktúry pevných látok prenosom elektrónov cez ultratenké rezy vzorky [Tomaiuolo et al. 2020]. Na rozdiel od SEM, kde sa obraz vytvára emisiou SE, TEM pracuje na princípe transmisie primárnych elektrónov [Kopáni and Polák, 2022]. Používa sa pri štúdiu biomolekúl, bioštruktúr a farmaceutických kryštálov [Mohanta 2021]. Vzorka v TEM (hrúbka < 200 nm) je bombardovaná vysoko zaostreným elektrónovým lúcom, ktorý je zväčený elektromagnetickými šošovkami [Mohanta, 2021]. TEM vyžaduje malé monokryštály (25-500 nm) a minimálne množstvo materiálu [Kopáni and Polák, 2022]. Podobne ponúka rozlišovaciu schopnosť < 0,3 nm, čo je podstatne lepšie ako pri SEM [Goodhew, 2011].

2. Materiál a metódy

2.1. Svetelná mikroskopia

Rezy mozgového tkaniva izolované z *globus pallidus externus* (GPe) boli získané počas pitvy na Ústave patologickej anatómie LF UK v Bratislave. Tkanivá boli odobraté jednotlivcom bez klinických nálezov. Bolo použitých 6 vzoriek (Tabuľka 1). Veľkosť vzoriek bola 2 x 2 x 2 cm^3. Všetky postupy boli vedené v súlade s Helsinskou deklaráciou. Snímky boli spracované prostredníctvom softvéru slúžiaceho na úpravu vektorovej grafiky Adobe Ilustrator (verzia V29.3.1).

Vzorka	Pohlavie	Vek	Príčina úmrtia	Interval po smti [hod]
1	Muž	52	Gastritída	11
2	Muž	53	Cirhóza pečene	7
3	Muž	66	Tubointersticiálna nefritída	9
4	Žena	69	Srdcové zlyhanie	10
5	Muž	73	Tukový embolizmus	8
6	Žena	83	Srdcové zlyhanie	8

Tabuľka 1: Charakteristika extrahovaných ľudských vzoriek pri pozorovaní GPe.

Po samotnom odbere tkaniva bolo potrebné zdokumentovať charakteristiky vzoriek. Protokol bol pripravený a realizovaný na Ústave histológie a embryológie LF UK v Bratislave. Vzorky z GPe boli fixované počas 24 hodín v 10% formaldehyde (Centralchem, Slovensko). Následne bol vykonávaný proces excidácie na požadovanú hrúbku 5 mm. Vypieranie vzoriek prebiehalo prostredníctvom destilovanej vody po dobu 30 minút a pozorované rezy boli počas 19 hodín vložené do autotechnikona (Myr, Slovensko). Odvodnenie bolo vykonávané prostredníctvom vzostupnej rady alkoholov 70%, 80%, 96% a 100% (Centralchem, Slovensko). Presýtenie vzoriek bolo realizované pomocou xylénu (Centralchem, Slovensko), kde boli vzorky následne prenesené do tekutého parafínu zahriateho v termostate (Biosan, Litva) pri teplote 58°C. Po stuhnutí parafínu boli tkanivá narezané prostredníctvom ultramikrotómu (Zeiss, Nemecko) na hrúbku 5 µm. Pri teplote 50°C bola použitá inkubačná piecka (Betip, Slovensko). Pozorovaný materiál bol inkubovaný v termostate pri teplote 37°C počas noci. Následne prebiehal proces odparafínovania (Obr. 11) prostredníctvom xylénu (20 minút), 96%, 70% alkoholom a destilovanou vodou, pričom každý z uvedených roztokov bol aplikovaný po dobu 3 minút. Samotné farbenie vzoriek bolo vykonávané prostredníctvom farbenia hematoxylín-eozín (HE). Vodný roztok v podobe hematoxylínu (BD Bamed, Slovensko) bol aplikovaný počas 5 minút. Následne boli rezy opláchnuté pod tečúcou vodou v podobe 5 minút a ponorené do 70% a 96% alkoholu po dobu 2 minút. Aplikácia eozínu (BD Bamed, Slovensko) prebehla opäť po dobu 2 minút. Tkanivové rezy určené na detekciu železa Fe^{3+} boli zafarbené prostredníctvom techniky, Perlsovej metódy. Proces oplachovania bol realizovaný dvakrát prostredníctvom 96% alkoholu. Ako posledným z roztokov slúžiacich na odstránenie prebytočných farbív bol využitý xylén po dobu 5 minút). Záverečným krokom prípravy vzoriek bolo montovanie preparátov využitím krycích sklíčok (VWR, Slovensko) na podložné sklá s pozorovaným tkanivom, aplikované prostredníctvom montovacieho média Entellan (Merck, Slovensko) po dobu jednej hodiny. Vzorky boli skúmané na Ústave histológie a embryológie LF UK v Bratislave pod svetelným mikroskopom Eclipse E50i (Nikon, Slovensko) s použitím zväčšenia objektívu v rozsahu od 4x do 20x.

2.2 Elektrónová mikroskopia

2.2.1 Príprava vzoriek pomocou SEM

Nekroptické rezy mozgového tkaniva z GPe (Obr. 12) boli rutinne získavané počas pitvy, určené na diagnostiku na Ústave patologickej anatómie LF UK v Bratislave. Samotné tkanivá boli odobraté jednotlivcom bez klinických nálezov akýchkoľvek motorických abnormalít, metabolizmu železa, pohybov končatín, tváre a jazyka. Bolo použitých 6 vzoriek. Veľkosť vzoriek bola 2 x 2 x 2 cm^3. Snímky boli spracované prostredníctvom softvéru slúžiaceho na úpravu vektorovej grafiky Adobe Ilustrator (verzia V29.3.1).

Protokol bol pripravený a realizovaný na Ústave histológie a embryológie LF UK v Bratislave. Vzorky mozgového tkaniva boli počas troch hodín fixované v 3% glutaraldehyde (Electron Microscopy Sciences, USA) v 0,2 mol/l fosfátovom tlmivom roztoku pri izbovej teplote v rozmedzí od 20 do 25°C. Nasledovne boli vzorky opláchnuté v 0,05 mol/l fosfátovom tlmivom roztoku (Merck, Slovensko) a ponechané v chladničke. Postfixácia prebiehala za prítomnosti karcinogénneho oxidu osmičelého (1% roztok OsO_4) vo fosfátovom roztoku (Merck, Slovensko) po dobu 2 hodín. Po uplynutí stanoveného času boli pozorované vzorky trikrát opláchnuté v redestilovanej vode, vždy po dobu 10 minút. Na odvodnenie bol použitý vzostupný rad alkoholov (Merck, Slovensko) vo viacerých koncentráciách, ako je 15% (15 minút), 30% (15 minút), 45% (15 minút), 50% (15 minút), 60% (15 minút), 70% (15 minút), 75% (15 minút), 80% (10 minút), 85% (10 minút), 90% (10 minút), 96% (10 minút) a 100% (10 minút). Nasledovalo

sušenie na vzduchu a pokrytie vrstvou uhlíka hrúbky 20 nm. Vzorky bez krycieho skla boli pozorované SEM EVO LS 15 (Zeiss, Nemecko) s urýchľovacím napätím 15 kV a analyzované pomocou EDX s EDS Element Silicon Drift Detector (Ametek, USA) (Obr. 13). Zobrazenie máp výskytu prvkov bolo vytvorené pomocou systému TEAM™ EDS (Ametek, USA).

2.2.2 Príprava vzoriek pomocou TEM

Rezy mozgového tkaniva izolované z oblasti *hippocampus* boli spracované a analyzované na Ústave histológie a embryológie LF UK. Bolo použitých 12 vzoriek geneticky intaktných kontrol (WTs), BL6 základ (C57BL/6). V rámci pohlavia boli pozorované 3 samice a 3 samce vo veku 12 mesiacov s rozmerom vzorky 2 x 2 x 2 mm^3. Snímky boli spracované a popísané prostredníctvom softvéru slúžiaceho na úpravu vektorovej grafiky Adobe Ilustrator (verzia V29.3.1) a online grafického editora Photopea (verzia 5.6).

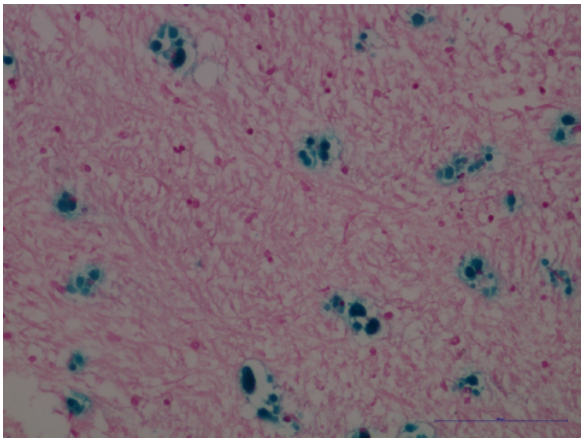
Protokol bol pripravený a realizovaný na Ústave histológie a embryológie LF UK v Bratislave. Materiál bol počas troch hodín fixovaný v 3% roztoku glutaraldehydu (Electron Microscopy Sciences, USA) v 0,2 mol/l fosfátovom pufri s pH 7,3 pri izbovej teplote. Vypieranie, premytie, vzorky z dôvodu možnej prítomnosti artefaktov bolo vykonávané prostredníctvom 0,1 mol/l fosfátového pufru súčasne s 10% sacharózou (pH 7.3) (Merck, Slovensko) po dobu 30 minút. Tento postup vypierania bol opakovaný trikrát a následne bola vzorka ponechaná v chladničke po dobu 4 a pol hodín. V druhom kroku bola vykonaná postfixácia počas 2 hodín za prítomnosti oxidu osmičelého, 1% roztok OsO_4 (Merck, Slovensko), vo fosfátovom roztoku s pH 7,3. Následne boli vzorky trikrát opláchnuté, pričom každé vypieranie prebiehalo v rozsahu 15 minút. Na odvodnenie bol použitý vzostupný rad alkoholov (Merck, Slovensko) počas rozličnej doby s koncentráciou 50% (15 minút), 70% (15 minút), 80% (15 minút), 96% (15 minút) a trikrát 100% (trikrát po 30 minút). Na odstránenie vody zo vzorky bol okrem radov alkoholov dvakrát použitý aj propylénoxid (Merck, Slovensko), ktorý je miešateľný s alkoholom, a to po dobu 15 a 30 minút. Počas noci bola vzorka inkubovaná v roztoku propylénoxidu a živice v pomere 1:1, čím bol dokončený proces odvodnenia. Nasledovalo presycovanie vzorky v Durcupan I (Merck, Slovensko) po dobu 2 hodín pri teplote 50°C. Po uplynutí stanoveného času bolo vykonávané opätovné presycovanie, a to pomocou Durcupan II (Merck, Slovensko) po dobu 3 hodín pri teplote 40°C a na záver bol opäť použitý Durcupan II (Merck, Slovensko) po dobu 2 hodín pri teplote 40°C. Zalievanie do blokov prebiehalo prostredníctvom chemickej látky Durcupan II a proces polymerizácie bol uskutočnený v termostate 72 hodín pri 60°C.

Vzorky boli narezané na hrúbku 200 nm pomocou ultramikrotómu so skleneným nožom (C. Reichert, Rakúsko). Nekontrastné ultratenké rezy boli namontované na medené mriežky a skúmané H-7650 TEM (Hitachi, Nemecko) s akceleračným napätím 100 kV (Obr. 14). Na identifikáciu fázového zloženia oxidu železa bola využitá chemická analýza metódou EDX.

3. Výsledky

3.1. Pozorovanie pomocou SMK

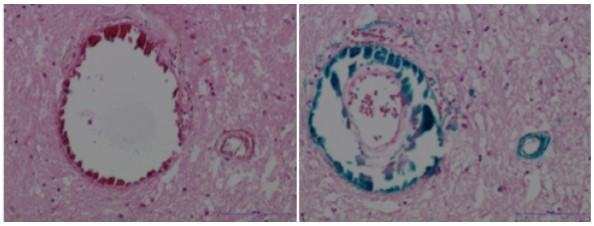
Prítomnosť železa v oblasti GPe ľudského mozgu bola preukázaná pomocou histologického farbenia, Perlsovej reakcie, a následne bola vizualizovaná prostredníctvom SMK. Zobrazené modro sfarbené depozity železa (Obr. 4), sa prevažne vyskytovali v zhlukoch pozostávajúcich z 2-7 guľovitých ložísk. Priemer jednotlivých ložísk dosahoval veľkosť v rozmedzí od 5 do 20 µm. Prítomné Fe^{3+} globulárne štruktúry vo vzorkách boli spozorované v blízkosti gliových buniek.



Obr. 4: Využitie Perlsovej reakcie v GPe ľudského mozgu. Modré zafarbenie je spôsobené prítomnosťou nehémových (Fe^{3+}) iónov v blízkosti gliových buniek. Zväčšenie 20x. Mierka 100 µm.

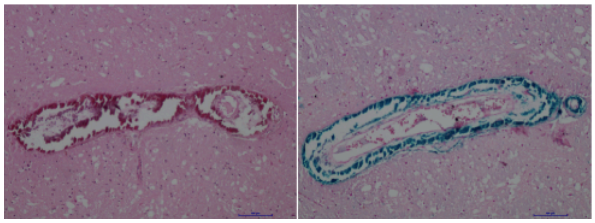
Obr. 5 znázorňuje cievu obklopenú nervovým tkanivom v oblasti GPe ľudského mozgu, pozorovanú pod SMK. Snímka na ľavej strane zobrazuje cievu s použitím farbenia HE. Výskyt depozitov železa bol pozorovaný práve v blízkosti cievy, ktoré boli v kontraste s okolitými nervovými bunkami a medzibunkovou hmotou. Snímka na pravej strane zobrazuje prítomnosť Fe^{3+}, teda nehémového železa, ktoré bolo zaznamenané charakteristickým modrým zafarbením, ktoré vzniklo v dôsledku histologického farbenia, Perlsovej reakcie.

V blízkosti cievy boli depozity železa usporiadané do súvislej vrstvy, zatiaľ čo vo väčšej vzdialenosti nadobúdali granulárny charakter. Pozorovania pod SMK s prítomnosťou mierky 100 µm uvádzajú, že nervové bunky vykazujú fyziologickú veľkosť, ako aj morfológiu, pričom počas autopsie neboli zaznamenané žiadne známky neuropatologických zmien.



Obr. 5: GPe ľudského mozgu so zameraním na cievu. Snímka na ľavej strane zobrazuje cievu so zafarbením prostredníctvom HE. Snímka na pravej strane vykazuje cievu s Perlsovou reakciou, kde tmavomodré sfarbenie potvrdzuje prítomnosť depozitov železa v tkanive. Zväčšenie 10x. Mierka 100 µm.

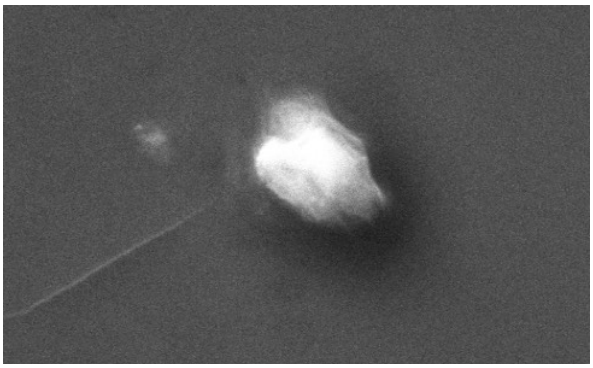
Na obr. 6 je zaznamenaný lumen cievy. Pozorovaná snímka lokalizovaná na ľavej strane bola zobrazená prostredníctvom aplikácie farbenia HE, zatiaľ čo pri snímke na pravej strane bolo zobrazenie získané pomocou Perlsovej reakcie s prítomnými viditeľnými depozitmi železa a ich charakteristickou tmavomodrou farbou. V okolí cievy bola pozorovaná lokalizácia nervových buniek.



Obr. 6: GPe ľudského mozgu so zameraním na lumen cievy. Snímka na ľavej strane zobrazuje cievu so zafarbením prostredníctvom HE. Snímka na pravej strane vykazuje cievu s Perlsovou reakciou, kde tmavomodré sfarbenie potvrdzuje prítomnosť depozitov železa v tkanive. Zväčšenie 20x. Mierka 100 µm.

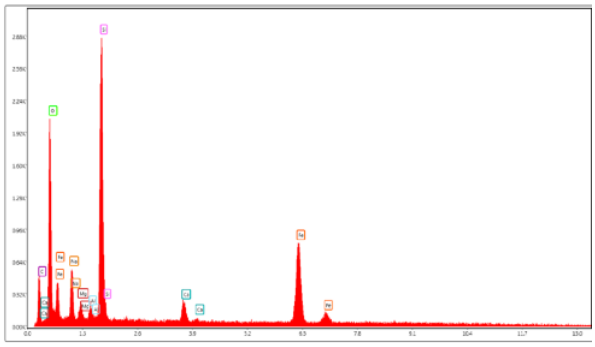
3.2 Pozorovanie pomocou SEM

Vo vzorkách GPe bola spozorovaná prítomnosť častice s vysokým obsahom železa, nepravidelného tvaru, zaznamenaná prostredníctvom SEM pri použití urýchľovacieho napätia 20 kV (Obr. 7).



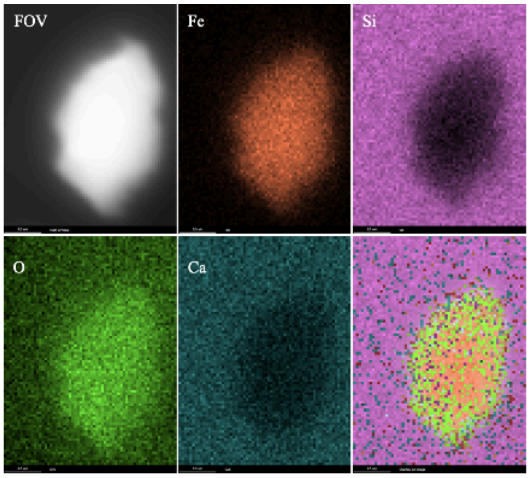
Obr. 7: Spozorovaná mikročastica železa v GPe pri analýze prostredníctvom SEM. Použité urýchľovacie napätie 20 kV. Mierka 2 µm.

Počas doby 6,4 sekúnd zhromažďovania röntgenových signálov bola v závislosti od EDX analýzy potvrdená prítomnosť železa vo vzorke, rovnako ako aj prítomnosť rôznych chemických prvkov, ako je uhlík, vápnik, kyslík, sodík, horčík, hliník a kremík. Vysoká koncentrácia kremíka bola výsledkom použitia kremíkovej podložky v rámci experimentálneho merania (Graf 1).



Graf 1: Potvrdenie prítomnosti železa vo vzorke GPe prostredníctvom využitia EDX analýzy. Spektrum rovnako vykazuje prítomnosť iných chemických prvkov, ako je C, Ca, O, Na, Mg, Al a Si. Doba zbierania dát 6,4 sekúnd.

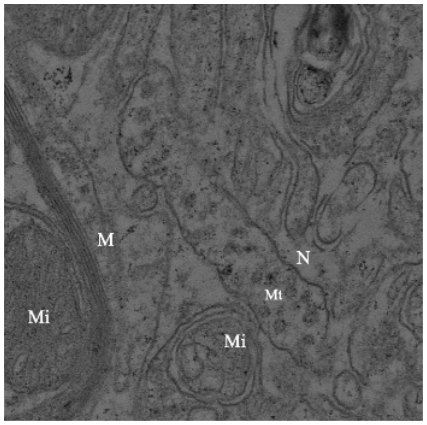
Pozorovaný agregát na obr. 8 získaný z GPe ľudského mozgu, bol znázornený v podobe mapy s využitím SEM–EDX. Z mapy bolo pozorované nerovnomerné, ohniskové rozloženie rôznych chemických prvkov, ako sú Fe, Si, O a Ca. Označenie FOV predstavuje oblasť mapovania rozloženia vzorky. Bola analyzovaná mapa s celkovým rozložením chemických prvkov v agregáte. Agregát je heterogénny z hľadiska minerálneho zloženia s rôznym veľkostným rozdelením a zle definovanou morfológiou.



Obr. 8: Fokálne rozloženie niektorých chemických prvkov v agregáte. Bola potvrdená prítomnosť prvkov Fe, Si, O, Ca. Označenie FOV na prvom obrázku predstavuje oblasť mapovania rozloženia vzorky. Posledný obrázok znázoňuje mapu všetkých skúmaných chemických prvkov prítomných v agregáte. Mierka 0,5 µm.

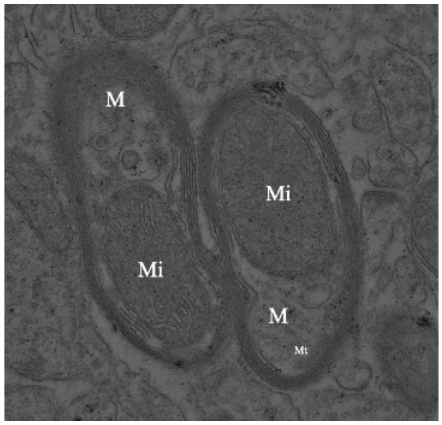
3.3 Pozorovanie pomocou TEM

Na obr. 9 bolo zobrazené nervové tkanivo hipokampu myší. V prevažnej časti snímky sú zobrazené myelinizované a nemyelinizované nervové vlákna. Podobne boli spozorované viaceré kompartmenty, ako sú mitochondrie lokalizované v bunkovej membráne a mikrotubuly patriace do cytoskeletárnych štruktúr.



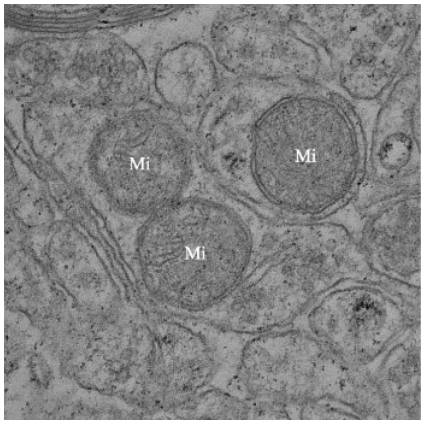
Obr. 9: TEM snímka nervového tkaniva hipokampu so zobrazením viacerých štruktúr. Mi, mitochondrie; M, myelinizované axóny (vlákna); N, nemyelinizované axóny (vlákna); Mt, mikrotubuly. Zväčšenie 20000x. Napätie 100 kV. Mierka 100 nm.

Detailné zobrazenie myelinizovaných nervových vlákien bolo zachytené na obr. 10. Vo vnútri axónu bola spozorovaná prítomnosť viacerých mitochondrií, podobne ako aj mikrotubúl.



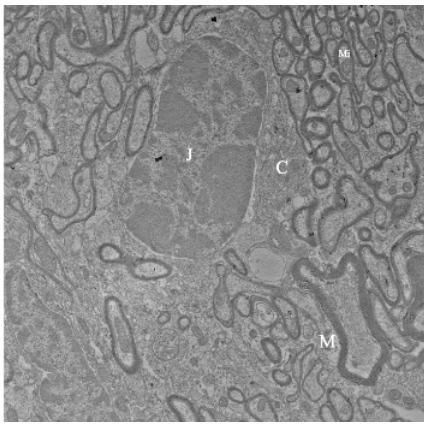
Obr. 10: TEM snímka nervového tkaniva hipokampu s detailným zobrazením myelínu. Mi, mitochondrie; M, myelinizované axóny (vlákna); Mt, mikrotubuly. Zväčšenie 15000x. Napätie 100 kV. Mierka 500 nm.

Pri zväčšení 25000x bolo identifikované detailné zobrazenie mitochondrií s viditeľnými kristami a dvojvrstvovou membránovou štruktúrou (Obr. 11). Mitochondrie boli lokalizované vo vnútri axónu.

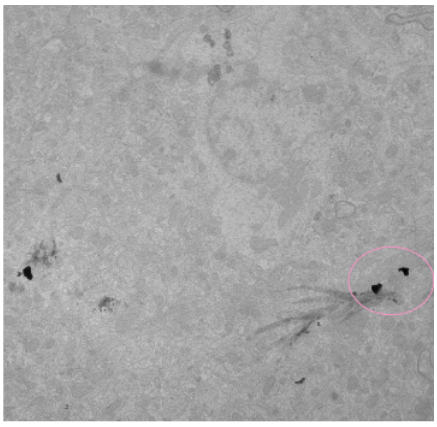


Obr. 11: TEM snímka nervového tkaniva hipokampu s detailným zobrazením mitochondrií. Mi, mitochondrie. Zväčšenie 25000x. Napätie 100 kV. Mierka 100 nm.

Obr. 12 identifikuje potvrdenie prítomnosti gliovej bunky s viditeľným jadrom a cytoplazmou s využitím zväčšenia 2500x. V okolí jadra boli zobrazené početné myelinizované nervové vlákna, spolu s prítomnosťou viacerých mitochondrií.



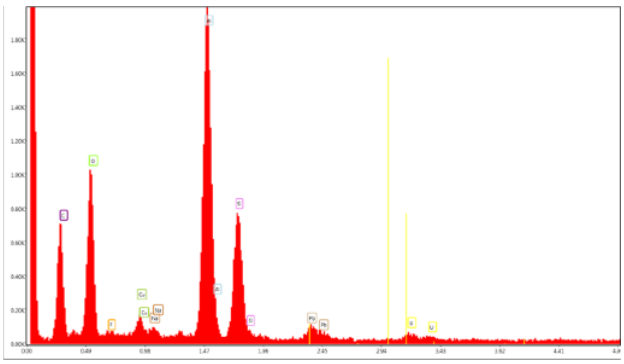
Obr. 12: TEM snímka nervového tkaniva hipokampu s detailným zobrazením štruktúr. Mi, mitochondrie; J, jadro; M, myelinizované nervové vlákna; C, cytoplazma. Zväčšenie 2500x. Napätie 100 kV. Mierka 2 µm.



Obr. 13: Pozorovanie častíc prítomných vo vzorke hipokampu prostredníctvom metódy TEM z dôvodu následného monitorovania pomocou EDX analýzy. Pozorované častice EDX analýzou boli vyznačené špeciálnym tvarom, kruhom, v ružovej farbe. Použité zväčšenie 1500x. Mierka 2 µm.

3.4 Analýza prvkov hipokampu

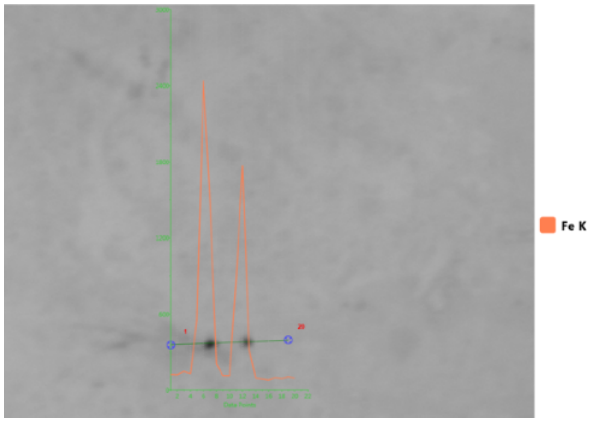
Graf 2 zobrazuje EDX analýzu chemického zloženia prvkov v oblasti hipokampu. Bola dokázaná prítomnosť viacerých chemických prvkov vrátane C, O, F, Cu, Na, Al, Si, Pb, U. Výskyt železa vo vzorke však nebol potvrdený.



Graf 2: Prítomnosť chemických prvkov vo vzorke hipokampu prostredníctvom využitia EDX analýzy. Spektrum rovnako vykazuje prítomnosť prvkov, ako je C, O, F, Cu, Na, Al, Si, Pb a U. Doba zbierania dát bola 41,1 s.

Na obr. 26 boli zobrazené častice monitorované prostredníctvom metódy TEM. Pri pozorovaní bolo použité zväčšenie 1500x. Prítomnosť železa bola jednoznačne potvrdená v časticiach označených na obrázku špeciálnym tvarom, kruhom, zaznamenaným ružovou farbou, na základe vykonanej SEM–EDX analýzy.

Graf 3 prezentuje potvrdenie prítomnosti chemického prvku, železa, vo vzorkách hipokampu myší, zobrazených prostredníctvom metódy EDX. Boli dokázané vysoké koncentrácie železa v oblasti pozorovaných častíc vzorky.



Graf 3: Potvrdenie prítomnosti železa vo vzorkách hipokampu. Boli identifikované vysoké koncentrácie tohto prvku na základe pozorovania pomocou metódy EDX. Mierka 2 µm.

4. Diskusia

Hlavným cieľom výskumu tejto problematiky bolo potvrdiť a lokalizovať prítomnosť železa v mozgu. V analyzovaných vzorkách sa nám prostredníctvom farbenia s využitím histologických metód a SMK podarilo identifikovať prítomnosť depozitov železa vyskytujúcich sa v ľudských tkanivách GPe. Hallgren a Sourander, 1958, vo svojom článku potvrdili prítomnosť železa v mozgu, kde zároveň

vyjadrili predpoklad, že práve GPe vykazuje najvyššie koncentrácie železa v porovnaní s ostatnými oblasťami mozgu. Počas experimentov zistili, že tieto koncentrácie úplne nesúvisia s celkovými zásobami železa v organizme.

V našej pozorovanej oblasti GPe boli prítomné depozity železa zoskupené v okolí vybraných buniek. Predpokladáme, že uvedené zoskupenie týchto depozitov je vyvolané samotnou prítomnosťou gliových buniek, ktoré sa v týchto lokalitách pravdepodobne podieľajú na akumulácii železa. Prítomnosť železa v oblasti ľudského GPe, bola najprv analyzovaná pomocou SMK. Prostredníctvom obrázka číslo 4 môžeme potvrdiť prítomnosť železa v GPe s použitím histologickej techniky, Perlsovej reakcie. Pozorované modré zafarbenie je spôsobené prítomnosťou nehémových Fe^{3+} iónov v blízkosti gliových buniek [Kopáni and Polák, 2022]. Železo v mozgu je základným aj toxickým redoxným aktívnym prvkom. Práve gliové bunky obsahujú v porovnaní s inými bunkami v mozgu najviac železa. V predošlých rokoch sa pozorovalo, že homeostáza železa, ktorá vedie k neurodegenerácii, nemusí pochádzať len z neurónov, ale aj z gliových buniek [Reinert et al. 2019]. Podobne, aj ďalšie experimenty zamerané na oblasť GPe ľudského mozgu, konkrétne na cievy a ich lumen (Obr. 5, Obr. 6), zobrazujú cievnu štruktúru obklopenú nervovým tkanivom v GPe. Snímka na ľavej strane znázorňuje cievu s použitím farbenia HE, pričom snímka na pravej strane zobrazuje prítomnosť Fe^{3+}, v dôsledku Perlsovej reakcie. Výskyt depozitov železa bol pozorovaný práve v blízkosti cievy, ktoré boli v kontraste s okolitými nervovými bunkami a medzibunkovou hmotou. Depozity železa sa vyskytujú na miestach s vysokou metabolickou aktivitou okolo gliových buniek a fyziologicky sú hromadené v závislosti od veku [Connor et al. 2001]. S využitím vyšetrovacej metódy SEM sa nám podarilo potvrdiť prítomnosť železa sledovaného v agregáte pri urýchľovacom napätí 20 kV (Obr. 7). Pozorovaná prítomnosť železa je viditeľná ako svetlá oblasť v danej mikročastici. Graf 1 potvrdzuje prítomnosť železa vo vzorke prostredníctvom EDX analýzy. Počas doby 6,4 sekúnd zhromažďovania röntgenových signálov bola lokalizovaná prítomnosť železa vo vzorke, rovnako ako aj prítomnosť rôznych chemických prvkov, ako je C, Ca, O, Na, Mg, Al, Si. Najvyššiu koncentráciu z oblasti všetkých pozorovaných prvkov dosahoval práve kremík. Táto vysoká koncentrácia bola výsledkom použitia kremíkovej podložky počas experimentálneho merania. Druhú najvyššiu koncentráciu dosahuje kyslík. Ďalšou experimentálnou časťou bolo zobrazenie fokálneho rozloženia niektorých chemických prvkov v agregáte. Na obr. 8 bola znázornená prítomnosť prvkov ako sú Fe, Si, O, Ca. Pozorovaný agregát v oblasti GPe bol zaznamenaný v podobe mapy s využitím metódy SEM–EDX. Mapa zobrazuje nerovnomerné rozloženie rôznych biogénnych prvkov. Agregát je heterogénny z hľadiska minerálneho zloženia s rôznym veľkostným rozdelením a zle definovanou morfológiou. Označenie FOV predstavuje oblasť mapovania rozloženia vzorky. Posledný obrázok znázoňuje mapu všetkých skúmaných chemických prvkov prítomných v agregáte, teda Fe, Si, O, Ca. V centrálnej časti agregátu sme spozorovali prítomnosť železa a kyslíka, pričom v okolí agregátu môžeme potvrdiť lokalizáciu kremíka a vápnika. Na základe realizovaného experimentu sme zistili, že identifikovaný agregát obsahoval vysoké koncentrácie železa. Pri zobrazovaní pomocou TEM sme analyzovali nervové tkanivo hipokampu extrahované z 12 myších vzoriek. Pri priečnom a pozdĺžnom priereze boli zachytené myelinizované a nemyelinizované nervové vlákna, mitochondrie a mikrotubuly so zväčšením 20000x (Obr. 9). Prostredníctvom zväčšenia 15000x, znázornené na obr. 10, sme získali detailné zobrazenie myelinizovaných a nemyelinizovaných nervových vlákien. Vo vnútri axónov sme zaznamenali prítomnosť viacerých mitochondrií, čo môže byť spôsobené práve tým, že samotnou funkciou mitochondrií je zabezpečenie energie, ATP, potrebnej na tvorbu a údržbu myelínových vrstiev [Harris and Attwell, 2013]. Význam prítomnosti mikrotubúl vo vnútri axónov je z dôvodu ich štrukturálnej podpory neurónov a funkcie vnútrobunkového trasportu [Jang et al. 2024]. Predpokladáme, že nami zachytené nejasné štruktúry spozorované na obr. 10 nachádzajúce sa v oblasti myelínu môžu byť spôsobené ich zlou organizáciou z dôvodu postupného rozpadávania sa, tzv. autolýzy. Pri pozorovaní so zväčšením 25000x sme získali detailný obraz dôležitých bunkových kompartmentov, mitochondrií. Spozorované mitochondrie sme zachytili a rozpoznali vďaka ich dvojvrstvovej membránovej štruktúre a viditeľnými kristami (Obr. 11). Mitochondrie sú lokalizované vo vnútri axónov. Obr. 12 zobrazuje gliovú bunku, kde sa nám podarilo zachytiť a zaznamenať jadro spolu s cytoplazmou. V okolí jadra môžeme pozorovať myelinizované nervové vlákna s početnými mitochondriami pri použití zväčšenia 2500x. Predpokladáme, že metóda TEM je považovaná za výbornú metódu zobrazovania organel alebo štruktúr gliových buniek či už z dôvodu diagnostiky neurodegeneratívnych ochorení alebo zápalových procesov vyskytujúcich sa v organizme. V ďalšom meraní sme sa zamerali na detailnú chemickú analýzu prvkov nachádzajúcich sa v pozorovanej vzorke s využitím EDX analýzy v rámci pozorovaných vzoriek prostredníctvom metódy TEM. Potvrdili sme prítomnosť viacerých chemických prvkov vrátane C, O, F, Cu, Na, Al, Si, Pb a U (Graf 2). Výskyt železa vo vzorke však

nebol potvrdený. Pomerne prekvapujúcou prítomnosťou chemického prvku lokalizovanom v tkanive hipokampu bol urán. V článku [Dinocourt et al. 2015; Vellingiri, 2023] je uvádzané, že práve mozgová štrukúra je považovaná ako terč toxických znečisťujúcich látok vyskytujúcich sa v životnom prostredí. Tieto toxické látky môžu priamo ovplyvňovať viaceré mozgové funkcie, čo môže viesť až k neurobehaviorálnym poruchám, čo zahŕňa napríklad zvýšenú pohybovú aktivitu, narušenie cirkadiánneho rytmu alebo rozvoj úzkosti a psychických porúch [Dinocourt et al. 2015; Vellingiri, 2023]. No, presný mechanizmus faktora neurotoxicity uránu je však stále nejasný (Jang et al. 2022]. Predpokladáme, že prítomnosť uránu vo vzorke hipokampu mohla byť spôsobená práve kontamináciou mozgového tkaniva u pozorovaných myší. Na obr. 13 sú zaznamenané častice slúžiace na analýzu chemických prvkov pomocou TEM s využitím 1500 násobného zväčšenia. Prostredníctvom metódy EDX bola potvrdená prítomnosť železa v skúmaných časticiach vzoriek hipokampu u zdravých myší (Graf 3). Domnievame sa, že nerovnomerný výskyt železa v oblasti hipokampu (Graf 2, Graf 3) môže byť zapríčinený bunkovým metabolizmom a vyššími energetickými nárokmi buniek, ako je napr. syntéza neurotransmiterov.

5. Záver

V posledných rokoch bolo pozorované a dokázané, že prítomnosť vysokých koncentrácií, ako aj zvýšená akumulácia železa v mozgu úzko súvisí s neurodegeneratívnymi a kognitívnymi poruchami [Qin et al. 2022]. Vychádzajúce teórie uvádzajú, že práve ukladanie železa môže byť príčinou smrti neurónov pri niektorých neurodegeneratívnych ochoreniach, vrátane AD, PD alebo demyelinizačnej SM [Chen et al. 2025; Sato et al. 2022].

Bola potvrdená prítomnosť železa v mozgu, konkrétne v oblasti GPe s využitím metódy SMK a SEM. Viditeľné depozity železa s guľovitým tvarom vo veľkosti 5 až 20 μm boli prostredníctvom Perlsovej reakcie pozorované v blízkosti gliových buniek. EDX analýza v oblasti ľudského GPe identifikovala okrem železa aj výskyt iných chemických prvkov, ako je C, Ca, O, Na, Mg, Al a Si. Prostredníctvom mapy analýzy prvkov boli zobrazené chemické prvky prítomné v agregáte. V centrálnej časti pozorovaného agregátu bola potvrdená prítomnosť železa a kyslíka, s vysokou koncentráciou, pričom v okolí agregátu bola zobrazená lokalizácia kremíka a vápnika. Pri analýze hipokampu boli identifikované viaceré myelinizované a nemyelinizované nervové vlákna, ako aj viaceré bunkové kompartmenty, ktoré zahŕňajú jadro, cytoplazmu a mitochondrie. Podobne boli analyzované cytoskeletárne štruktúry, mikrotubuly. Chemická identifikácia prítomnosti prvkov, metóda EDX, v štruktúre hipokampu potvrdila prítomnosť železa, ako aj C, O, F, Cu, Na, Al, Si, Pb a U.

Z hľadiska stáleho zvyšujúceho sa trendu priemernej dĺžky života je rovnako pravdepodobný nárast výskytu neurodegeneratívnych ochorení úzko súvisiacich s prítomnosťou železa v mozgu [Zecca et al. 2004]. Faktory ako sú vek, diabetes mellitus a fajčenie, podľa aktuálnych štúdií, môžu mať súvis so zvýšeným hromadením železa v bazálnych gangliách, podobne ako aj s kognitívnym poklesom [Gao et al. 2025]. Ostáva však otázne či akumulácia tohto prvku bude zároveň v budúcnosti považovaná práve ako biomarker, teda perspektívny cieľ pre preventívne a terapeutické stratégie [Chen et al. 2025].

Literatúra

[Ackerman,1992] Ackerman, Sandra. (1992). Discovering The Brain. B.M.: *National Academy Press*. Isbn 0309572304.

[Ashraf et al., 2019] Ashraf, A., Michaelides, C., Walker, T. A., Ekonomou, A., Suessmilch, M., Sriskanthanathan, A., Et Al. (2019). Regional Distributions Of Iron, Copper And Zinc And Their Relationships With Glia In A Normal Aging Mouse Model. *Frontiers In Aging Neuroscience*, *11*. Doi: 10.3389/Fnagi.2019.00351

[Basnet, 2023] Basnet, Mohan. (2023). Brain Anatomy And How The Brain Works. Https://Www.Researchgate.Net/Publication/370056012

[Chen et al., 2025] Chen, L., Shen, Q., Liu, Y., Zhang, Y., Sun, L., Ma, X., Et Al. (2025). Homeostasis And Metabolism Of Iron And Other Metal Ions In Neurodegenerative Diseases. *Signal Transduction And Targeted Therapy*, *10*(1), 31. Doi: 10.1038/S41392-024-02071-0

[Chopra and Kataria, 2019] Chopra, Madhav And Stephen Kataria (2021). Multiple Sclerosis : A Review. *International Journal Of Scientific Research In Science And Technology*. Pages 193-211. Doi: 10.32628/Ijsrst218131

[Connor et al., 2001] Connor, J. R., Menzies, S. L., Burdo, J. R., & Boyer, P. J. (2001). Iron And Iron Management Proteins In Neurobiology. *Pediatric Neurology*, *25*(2), 118–129. Https://Doi.Org/10.1016/S0887-8994(01)00303-4

[Dinocourt et al., 2015] Dinocourt, C., Legrand, M., Dublineau, I., & Lestaevel, P. (2015). The Neurotoxicology Of Uranium. *Toxicology*, *337*, 58–71. Https://Doi.Org/10.1016/J.Tox.2015.08.004

[Desesso, 2009] Desesso, John M. (2009). Functional Anatomy Of The Brain. V: Metabolic

Encephalopathy [Online]. B.M.: *Springer New Yor*.P. 14. Doi:10.1007/978-0-387-79112-8_1

[De-Paula et al., 2012] De-Paula, Vanessa J., Marcia Radanovic, Breno S. Diniz A Orestes V. Forlenza. (2012). Alzheimer's Disease. *Subcellular Biochemistry*. Pages 329–352. Doi:10.1007/978-94-007-5416-4_14

[Friedman, 2005] Friedman,, Avner. (2005). Introduction To Neurons. B.M.: *Springer Verlag*. Isbn 3540238581. Doi:10.1007/978-3-540-31544-5_1

[Dou et al., 2025] Dou, Lijun, Zhenxing Xu, Jielin Xu, Chengxi Zang, Chang Su, Andrew A. Pieper, James B. Leverenz, Fei Wang, Xiongwei Zhu, Jeffrey Cummings A Feixiong Cheng. (2025). A Network-Based Systems Genetics Framework Identifies Pathobiology And Drug Repurposing In Parkinson's Disease. *Npj Parkinson's Disease* Doi:10.1038/S41531-025-00870-Y

[Gao et al., 2025] Gao, Y., Liang, C., Zhang, Q., Zhuang, H., Sui, C., Zhang, N., Et Al. (2025). Brain Iron Deposition And Cognitive Decline In Patients With Cerebral Small Vessel Disease : A Quantitative Susceptibility Mapping Study. *Alzheimer's Research & Therapy*, *17*(1), 17. DoI: 10.1186/S13195-024-01638-X

[Goodhew, 2011] Goodhew Peter J. (2011). General Introduction To Transmission Electron Microscopy Tem. B.M.: *John Wiley And Sons*. Doi:10.1002/9781119978848.Ch1

[Grimes and Bulman, 2002] Grimes, D. A. A D. E. Bulman, 2002. Parkinson's Genetics - Creating Exciting New Insights. *Parkinsonism And Related Disorders* [Online]. 2002, Roč. 8, Č. 6, S. 459–464 [Cit. 25.1.2025]. Issn 13538020. Dostupné Na: Doi:10.1016/S1353-8020(02)00030-5

[Hallgren and Sourander, 1958] Hallgren, B.; Sourander, P. (1958). The Effect Of Age On The Non-Haemin Iron In The Human Brain. Journal Of Neurochemistry. Doi:10.1111/J.1471-4159.1958.Tb12607.X

[Hare et al., 2013] Hare, D., Ayton, S., Bush, A., & Lei, P. (2013). A Delicate Balance: Iron Metabolism And Diseases Of The Brain. *Frontiers In Aging Neuroscience*. Doi: 10.3389/Fnagi.2013.00034

[Harris et al., 2013] Harris, J. J., & Attwell, D. (2013). Is Myelin A Mitochondrion? *Journal Of Cerebral Blood Flow And Metabolism*, *33*(1), 33–36. Doi: 10.1038/Jcbfm.2012.148

[Henley, 2021] Henley, Casey A East Lansing. (2021). Foundations Of Neuroscience Open Edition.

[Jang et al., 2024] Jang, E.-H., Choi, H., & Hur, E.-M. (2024). Microtubule Function And Dysfunction In The Nervous System. *Molecules And Cells*, *47*(10), 100111. Doi: 10.1016/J.Mocell.2024.100111

[Javaid, 2020] Javaid, Hafiza Iqra, 2020. Anatomy And Physiology Of Brain In Context Of Learning: A Review From Current Literature. Biomedical Journal Of Scientific & Technical Research [Online]. 2020, Roč. 26, Č. 5. Dostupné Na: Doi:10.26717/Bjstr.2020.26.004415

[Kannan, 2018] Kannan M. (2018). Scanning Electron Microscopy: Principle, Components And Applications. A Textbook On Fundamentals And Applications Of Nanotechnology. Pages. 81-92.

[Kopáni and Polák, 2022] Kopáni, Martin, Štefan, Polák. (2022). Úvod Do Mikroskopických Techník. Pages. 14-63. ISBN 978-80-973980-6-4.

[Koroshetz et al., 2022] Koroshetz, Tsunehiko, A Nishimura, Sorensen Gregory, Robert M Komili, Bruce R Weisskoff, Walter J Kei Rosen, R Yamada, Leif Gilberto Gonzalez, Suzanne Østergaard, Kei Yamada, R Gilberto Gonzalez, Leif Østergaard, Suzanne Komili, Robert M Weisskoff, Bruce R Rosen, Walter J Koroshetz, Tsunehiko Nishimura A A Gregory Sorensen. (2022). *Contrast-Enhanced Mr Perfusion Images Flow And Volume On Dynamic Susceptibility Globus Pallidus Causes Underestimation Of Iron-Induced Susceptibility Effect At The Iron-Induced Susceptibility Effect At The Globus Pallidus Causes Underestimation Of Flow And Volume On Dynamic Susceptibility Contrast-Enhanced Mr Perfusion Images*. Http://Www.Ajnr.Org/Content/23/6/

[Laurell et al., 2025] Laurell, Axel A.S., Elijah Mak A John T. O'brien. (2025). A Systematic Review Of Diffusion Tensor Imaging And Tractography In Dementia With Lewy Bodies And Parkinson's Disease Dementia. B.M.: *Elsevier Ltd*. Doi:10.1016/J.Neubiorev.2025.106007

[Levi et al., 2024] Levi, S., Ripamonti, M., Moro, A. S., & Cozzi, A. (2024, April 1). Iron Imbalance In Neurodegeneration. *Molecular Psychiatry*. Springer Nature. Doi: 10.1038/S41380-023-02399-Z

[Mehta et al., 2020] Mehta, Arpan R., Puja R. Mehta, Stephen P. Anderson, Barbara L.H. Mackinnon A Alastair Compston. (2020). Grey Matter: Etymology And The Neuron(E). B.M.: *Oxford University Press*. Doi:10.1093/Brain/Awz367

[Michel et al., 2013] Michel, Paul, Aloyse Antony, Christophe Trefois, Aleksandar Stojanovic, Aidos Sagatovich Baumuratov A Karol Kozak. (2013). Light Microscopy Applications In Systems Biology: Opportunities And Challenges. Http://Www.Biosignaling.Com/Content/11/1/24

[Mohanta, 2021] Mohanta, Sehasree. (2021). Transmission Electron Microscopy. Doi:10.13140/Rg.2.2.21280.71681

[Mohammed and Abdullah 2019] Mohammed, Azad A Avin Abdullah. (2019). Scanning Electron Microscopy (Sem): A Review. Https://Www.Researchgate.Net/Publication/330168803

[Ostatníková et al., 2017] Ostatníková, Daniela, Babinská, Katarína, Mravec, Boris, Radošinská, Jana, Važan, Rastislav. (2017). Základy Lekárskej Fyziológie. Pages. 13-25. ISBN 978-80-223-4744-0

[Qin et al., 2022] Qin, Z., Wu, W., Liu, D., Zheng, C., Kang, J., Zhou, H., Et Al. (2022). Quantitative Susceptibility Mapping Of Brain Iron Relating To Cognitive Impairment In Hypertension. *Journal Of Magnetic Resonance Imaging*, *56*(2), 508–515. Doi: /10.1002/Jmri.28043

[Pagán, 2019] Pagán, Oné R. (2019). The Brain: A Concept In Flux [Online]. B.M.: *Royal Society Publishing*. Dostupné Na: Doi:10.1098/Rstb.2018.0383

[Patti et al., 2022] Patti, Francesco, Mario Alberto Battaglia A Steven Simoens. (2022). Societal Economic Burden Of Multiple Sclerosis And Cost-Effectiveness Of Disease-Modifying Therapies. Doi: 10.3389/Fneur.2022.1015256

[Pinero and Connor, 2000] Pinero, D. J. A J. R. Connor. (2000). Iron In The Brain: An Important Contributor In Normal And Diseased States. B.M.: *Sage Publications Inc*. Doi:10.1177/107385840000600607

[Reinert et al., 2019] Reinert, A., Morawski, M., Seeger, J., Arendt, T., & Reinert, T. (2019). Iron Concentrations In Neurons And Glial Cells With Estimates On Ferritin Concentrations. *Bmc Neuroscience*, *20*(1). Doi: 10.1186/S12868-019-0507-7

[Rísová et al., 2023] Rísová, Vanda, Polakovičová, Simona, Líška, Ján, Kopáni Martin, Polák, Štefan. (2023). Histológia Pre Študentov Biomedicínskej Fyziky. Pages 16-24. ISBN 978-80-973980-7-1

[Rivera, 2025] Rivera, Victor M. (2025). Advances In Multiple Sclerosis. *Biomedicines*. *13*(2), Pages. 266. ISSN 2227-9059.Doi:10.3390/Biomedicines13020266

[Sanderson, 2020] Sanderson Jeremy (2020). Fundamentals Of Microscopy. *Current Protocols In Mouse Biology*. *10*(2). ISSN 21612617. Doi:10.1002/Cpmo.76

[Sato et al., 2022] Sato, T., Shapiro, J. S., Chang, H. C., Miller, R. A., & Ardehali, H. (2022). Aging Is Associated With Increased Brain Iron Through Cortex-Derived Hepcidin Expression. *Elife*, *11*. Doi: 10.7554/Elife.73456

[Rajani, 2021] Singh Rajani (2021). Cerebellum: Its Anatomy, Functions And Diseases. V: Neurodegenerative Diseases - Molecular Mechanisms And Current Therapeutic Approaches. B.M.: *Intechopen*. Doi:10.5772/Intechopen.93064

[Spence et al., 2020] Spence, H., Mcneil, C. J., & Waiter, G. D. (2020). The Impact Of Brain Iron Accumulation On Cognition: A Systematic Review. *Plos One*. Public Library Of Science. Doi: 10.1371/Journal.Pone.0240697

[Stankiewicz et al., 2007] Stankiewicz, James, S Scott Panter, Mohit Neema, Ashish Arora, Courtney E Batt A Rohit Bakshi. (2007). *Iron In Chronic Brain Disorders: Imaging And Neurotherapeutic Implications*.

[Vellingiri, 2023] Vellingiri, B. (2023). A Deeper Understanding About The Role Of Uranium Toxicity In Neurodegeneration. *Environmental Research*, *233*, 116430. Doi: 10.1016/J.Envres.2023.116430

[Ward et al., 2014] Ward, Roberta J., Fabio A. Zucca, Jeff H. Duyn, Robert R. Crichton A Luigi Zecca (2014). The Role Of Iron In Brain Ageing And Neurodegenerative Disorders. *The Lancet Neurology*. *13*(10). Pages. 1045–1060. ISSN 1474-4422. Doi:10.1016/S1474-4422(14)70117-6

[Wróbel, 2018] Wróbel,, Grzegorz. (2018). The Journal Has Had 7 Points In Ministry Of Science And Higher Education Parametric Evaluation. *Journal Of Education*. Pages 2391–8306. Doi:10.5281/Zenodo.1145427

[Zachariou et al., 2024] Zachariou, Valentinos, Christopher E. Bauer, Colleen Pappas A Brian T. Gold. (2024). A Review Of The Association Between Dietary Intake And Brain Iron Levels In Older Adults: Preliminary Findings And Future Directions B.M.: *Multidisciplinary Digital Publishing Institute (Mdpi)*. Doi:10.3390/Nu16234193

[Zecca et al., 2004] Zecca, L., Youdim, M. B. H., Riederer, P., Connor, J. R., & Crichton, R. R. (2004). Iron, Brain Ageing And Neurodegenerative Disorders. *Nature Reviews Neuroscience*. Doi:10.1038/Nrn1537

[Zhang et al., 2024] Zhang, Jifa, Yinglu Zhang, Jiaxing Wang, Yilin Xia, Jiaxian Zhang A Lei Chen. (2024). Recent Advances In Alzheimer's Disease: Mechanisms, Clinical Trials And New Drug Development Strategies B.M.: *Springer Nature*. Doi:10.1038/S41392-024-01911-3

[Zvarík and Waczulíková, 2022] Zvarík, Milan A Iveta Waczulíková. (2022). Univerzita Komenského V Bratislave. ISBN 9788081471285.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 62–67
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Petra Mušinková, Dávid Janko, Natália Andelová, Veronika Farkašová, Táňa Ravingerová, Miros Ferko, Iveta Waczulíková

Analýza mitochondriálnych uncoupling proteínov: Vplyv hypoxie na ROS signalizáciu

Petra Mušinková[1*] Dávid Janko[2‡§] Natália Andelová[2]
Veronika Farkašová[2] Táňa Ravingerová[2] Miroslav Ferko[2] Iveta Waczulíková[1]
[1] Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2] Centrum experimentálnej medicíny, Ústav pre výskum srdca, SAV, v. v. i., 841 04 Bratislava

Abstrakt

Kardiovaskulárne ochorenia a diabetes mellitus patria medzi najrozšírenejšie a vysoko patologické ochorenia súčasnosti. Sú úzko spojené so závažnými metabolickými poruchami, ktoré významne zvyšujú energetické nároky srdcového svalu. Zvýšené energetické nároky sú v mitochondriách úzko spojené so zvýšenou tvorbou reaktívnych foriem kyslíka (ROS), čo môže viesť k oxidačnému stresu a poškodeniu bunkových štruktúr. Pre zachovanie funkcie a ochrany myokardu dochádza k aktivácii kompenzačných a adaptačných mechanizmov, ktorých základom je regulácia mitochondriálnych funkcií. Experimentálne je možné adaptačné mechanizmy indukovať obmedzením prístupu kyslíka (hypoxia) a akútnou fázou diabetu. *Uncoupling* proteín UCP3 reaguje na zvýšené hladiny ROS svojou expresiou, pričom jeho ochranný mechanizmus znižujúci tvorbu ROS spočíva v katalýze protónového úniku. Cieľom tejto štúdie bolo využiť spektroskopické metódy na analýzu a kvantifikáciu koncentrácií UCP3 v mitochondriách myokardu po indukcii prerušovanej hypoxie a v akútnej fáze diabetu. Doterajšie experimentálne dáta ukazujú, že akútna fáza diabetu a *pseudohypoxia*, ktorá je týmto stavom vyvolaná, zvyšuje odolnosť myokardu voči ischemicko-reperfúznemu (I/R) poškodeniu. Časť ochranných mechanizmov zahŕňa prevenciu zvýšenej hladiny ROS, a to neutralizáciou už vzniknutých ROS, napr. zvýšenou aktivitou antioxidačného enzýmu MnSOD (mangán-superoxidismutáza), alebo zamedzením ich vzniku prostredníctvom uncoupling aktivity UCP3. Analyzovali sme aj vplyv samotnej hypoxie s cieľom zistiť, či je schopná znížiť produkciu ROS po I/R poškodení. Z nameraných údajov sme zistili, že hladina proteínu UCP3 v diabetickej skupine (D) nebola štatisticky odlišná od hladiny tohto proteínu v skupine zdravých subjektov (K). Naše výsledky podporujú tvrdenie, že počas akútnej fázy diabetu sú aktivované mechanizmy, ktoré udržiavajú tvorbu ROS na nízkej úrovni. Porovnanie skupiny s indukovaným I/R poškodením (IR) so skupinou s indukovanou prerušovanou hypoxiou a následným I/R poškodením (HIR), nepreukázalo štatisticky významný pokles proteínu UCP3, ktorý by mal reagovať na tvorbu ROS formou negatívnej spätnej väzby. Individuálne výsledky v skupine HIR a IR však vykazovali významne vyšší rozptyl oproti výsledkom v skupine D + K, čo môže byť dôsledkom rozdielnej individuálnej odpovede organizmov na stresové podmienky I/R. Tieto výsledky poukazujú na komplexnosť biologických reakcií a možné zapojenie ďalších premenných, ktoré túto reakciu modulujú. Identifikácia individuálnych faktorov ovplyvňujúcich odpoveď na poškodenie by mohla prispieť k lepšej kontrole experimentálnych podmienok. Ich následná kvantifikácia by súčasne umožnila presnejšie modelovanie výstupov z meraní a zlepšila pochopenie adaptácie na stresové podmienky.

Kľúčové slová: uncoupling proteíny, mitochondrie, hypoxia, diabetes mellitus, signalizácia

1 Úvod do problematiky

Mitochondrie sú seminautonómne organely, obsahujúce kľúčové molekuly pre produkciu energie vo forme adenozíntrifosfátu (ATP) procesom oxidačnej fosforylácie [Murphy et al. 2016]. Tento proces je podmienený funkciou dýchacieho reťazca, prebiehajúcom na vnútornej mitochondriálnej membráne, ktorý využíva enzýmové komplexy na prenos elektrónov na molekulárny kyslík. Počas tohto transportu dochádza k súčasnému presunu vodíkových protónov z matrix mitochondrií do medzi-membránového priestoru, čím sa na vnútornej mitochondriálnej membráne vytvára elektro-chemický protónový gradient nevyhnutný pre tvorbu ATP [Lekárska biochémia I, 2016]. Avšak využitie kyslíka ako konečného príjemcu elektrónov v komplexoch dýchacieho reťazca robí súčasne z mitochondrií zdroj reaktívnych foriem kyslíka (ROS) [Siasos et al. 2018]. Za fyziologických podmienok môžu ROS zohrávať

* musinkova2@uniba.sk
‡ david.janko@savba.sk
§ Školiteľ

významnú úlohu ako signálne molekuly, pričom ich hladina je regulovaná antioxidačnými mechanizmami mitochondrií. Ak však produkcia ROS presiahne fyziologickú úroveň a prekročí detoxifikačnú kapacitu bunky [Bou-Teen et al. 2021], môže to viesť k oxidačnému poškodeniu mitochondriálnych proteínov, lipidových membrán a DNA, čo narúša mitochondriálne funkcie a negatívne ovplyvňuje široké spektrum metabolických dráh [Murphy 2009].

Patologické stavy ako sú diabetes mellitus a kardiovaskulárne ochorenia zvyšujú energetické nároky myokardu, čo spôsobuje zmeny v mitochondriálnej dynamike [García-Peña et al. 2024]. Poruchy cirkulácie vyvolané kardiovaskulárnymi ochoreniami vedú k tkanivovej hypoxii [Abe et al. 2017]. Stav podobný hypoxii, tzv. *pseudohypoxia*, je asociovaný s hyperglykémiou, ktorá predstavuje primárny klinický prejav diabetu. Pseudohypoxia vzniká v dôsledku zrýchlenej redukcie NAD^+ na NADH, čím sa spomaľuje tok elektrónov v dýchacom reťazci, čo napodobňuje účinky hypoxie na vaskulárny a nervový systém, hoci parciálny tlak kyslíka v tkanivách je v norme [Williamson et al. 1993]. Stav hypoxie sa spája s nadmernou produkciou ROS, pretože nedostatok kyslíka ako príjemcu elektrónov, vedie k neefektívnosti ich prenosu cez elektrónový transportný reťazec [Kung-Chun Chiu et al. 2019]. Produkcia ROS môže prebiehať aj v cytozole prostredníctvom NADPH oxidáz, kde je ich aktivácia regulovaná podjednotkou hypoxiou-indukovaného faktora 1 [Görlach et al. 2015].

Na obnovenie tkanivovej homeostázy po ischémii alebo hypoxii je nevyhnutné obnoviť prietok krvi (reperfúzia) a kyslíka, čo môže viesť k ischemicko-reperfúznemu (I/R) poškodeniu. Reperfúzia, z dôvodu náhleho a masívneho prísunu kyslíka, vyvoláva intenzívnu nekontrolovateľnú tvorbu ROS, tzv. „výbuch“ ROS, a to z rôznych zdrojov, vrátane mitochondrií, NADPH oxidázy a neviazanej syntázy oxidu dusnatého [Zhang et al. 2024]. Avšak bolo dokázané, že počas hypoxie sa na kompenzáciu nedostatku kyslíka v tkanivách aktivujú ochranné a adaptačné mechanizmy. Hlavnú úlohu v týchto mechanizmov zohrávajú hypoxiou indukovateľné faktory (HIF), ktoré riadia transkripciu proteínov podieľajúcich sa na regulácii ROS. Regulácia expresie génov závislých od HIF je modulovaná intenzitou, trvaním a lokalizáciou hypoxie [Lucero García Rojas et al. 2021].

Aj napriek mnohým nežiaducim účinkom diabetu bolo dokázané, že jeho akútna fáza dokáže zvýšiť toleranciu myokardu voči I/R poškodeniu. Táto zvýšená tolerancia zdieľa niekoľko molekulárnych mechanizmov ochrany s ischemickým *preconditioningom* (forma predtrénovania), preto bola označená ako *metabolický preconditioning* [Muráriková et al. 2017].

Mitochondriálna oxidačná fosforylácia nie je dokonale spojená s tvorbou ATP, pretože časť energie z protónového gradientu sa využíva na tvorbu tepla opätovným vstupom protónov do matrix cez dráhy nezávislé od ATP syntázy. Tento proces zahŕňajúci protónový únik sa nazýva *uncoupling* [Brand a Esteves, 2005]. Indukovateľný protónový únik je akútne kontrolovaný, pričom kľúčovú úlohu zohrávajú rozpojovacie proteíny (UCP) [Divakaruni a Brand 2011]. Uncoupling proteín 3 (UCP3) sa primárne nachádza v kostrovom svale, ale aj v hnedom tukovom tkanive a srdci [Boss et al. 1997]. Zvýšené hladiny tohto proteínu boli zaznamenané počas intenzívnej fyzickej námahy, hladovania, hypoxie a ischemických stavoch. Dôležitým faktorom regulácie expresie UCP3 pri týchto stavoch je skutočnosť, že všetky sú spojené so zvýšenou hladinou voľných mastných kyselín a ROS [Zhou et al. 2000]. Ochranná funkcia UCP3 proti ROS spočíva v miernom uncouplingu, ktorý vedie k poklesu transmembránového potenciálu [Nabben et al. 2011]. Tento proces znižuje protónový gradient, čím sa obmedzuje množstvo mitochondriálneho superoxidu na komplexe I v mitochondriálnom dýchacom reťazci, ktorého produkcia je na tomto gradiente silne závislá [Cadenas 2018].

2 Materiály a metódy

Experiment bol realizovaný na samcoch potkanov kmeňa Wistar vo veku 12 – 15 týždňov pochádzajúcich z chovnej stanice Dobrá voda, Slovenská republika.

2.1 Model prerušovanej hypoxie

Podmienky prerušovanej hypoxie boli vytvorené pomocou hypoxickej komory Coy model 30 (Coy Laboratory Products factory, USA), kde boli potkany vložené na osem hodín denne, raz do týždňa, po dobu štyroch týždňov. Hladina kyslíka bola znížená na 10 %.

2.2 Navodenie ischemicko-reperfúzneho poškodenia

Navodenie I/R poškodenia pozostávalo z 15 minútovej stabilizačnej fázy, 30-minútovej fázy globálnej ischémie, ktorá bola navodená zastavením prítoku perfúzneho roztoku a následne obnovením koronárneho prietoku, čím bolo srdce vystavené 40-minútovej reperfúzii. Tento postup prebiehal na srdci, ktoré bolo prestrihnutím bránice vybrané z hrudníka a okamžite prenesené na perfúznu aparatúru Langendorffovho prístroja (AD Instruments, Nemecko). Získané srdce bolo následne kanylované cez vypreparovanú aortu a perfundované Krebs-Henseleitovým tlmivým

roztokom pri teplote 37 °C, konštantnom perfúznom tlaku 70 mmHg a saturované zmesou plynov O_2 a CO_2 (95 %:5 %). Pred zákrokom excízie srdca boli zvieratá anestetizované intraperitoneálnym podaním tiopentalu (50 – 60 mg/kg) aplikovaného s heparínom (500 IU).

2.3 Model experimentálneho diabetu

Akútny diabetes bol u potkanov vyvolaný osem dní pred plánovaným experimentom jednorazovým podaním streptozotocínu (65 mg/kg telesnej hmotnosti), ktorý bol rozpustený v 0,1 M citrátovom pufri (pH 4). Vývoj ochorenia bol sledovaný monitorovaním glykozúrie pomocou diagnostických prúžkov Gluko PHAN (Pliva-Lachema, Česká republika) počas ôsmich dní až do plne rozvinutého štádia diabetu (akútna fáza). Glukóza, cholesterol a triacylglyceroly v krvi boli stanovené po excízii srdca z krvi odobratej z chvostovej žily pomocou diagnostického prístroja MultiCare (Biochemical system international, Taliansko) a testovacích prúžkov.

2.4 Izolácia mitochondrií

Vzorky srdc boli skladované pri teplote -80°C a na izoláciu mitochondrií bola použitá metóda diferenciálnej centrifugácie pri 4 °C. Najprv sa odstránili tukové časti a aorta, potom sa srdcové tkanivo rozomlelo a homogenizovalo v izolačnom roztoku č. 1. Po dvoch krokoch centrifugácie (1000 g a 6200 g, 10 minút) sa získal sediment, ktorý sa premiešal s izolačným roztokom č. 2. Po finálnej 10 minútovej centrifugácii pri 6200 g sa získala mitochondriálna frakcia, ktorá sa následne zriedila a homogenizovala.

Izolačný roztok č. 1:

- KCl (chlorid draselný, 180 mM; Sigma-Aldrich, USA),
- EDTA (kyselina etyléndiamíntetraoctová, 4 mM; Sigma-Aldrich, USA)
    - pH 7,4 Tris/HCl, 4 °C,
- BSA (hovädzí sérový albumín, g/1 dH_2O; Serva, Nemecko),

Izolačný roztok č. 2:

- KCl (chlorid draselný, 180 mM; Sigma-Aldrich, USA),
- EDTA (kyselina etyléndiamíntetraoctová, 4 mM; Sigma-Aldrich, USA)
    - pH 7,4 Tris/HCl, 4 °C

2.5 Stanovenie koncentrácie UCP3

Na stanovenie koncentrácie proteínu UCP3 bol použitý Rat Ucp3 (Mitochondrial uncoupling protein 3) ELISA Kit značky FineTest. Po príprave vzoriek daným kitom bola meraná absorbancia pri 450 nm pomocou spektrofotometra *Microplate reader* (Biotek, USA). Koncentrácie proteínu sa stanovila na základe kalibračnej krivky, na ktorej vytvorenie bola použitá online platforma ELISA Data Analysis. (Boster Bio, 2021)

3 Výsledky a diskusia

V predkladanej práci bola experimentálna časť realizovaná na 22 vzorkách, pričom 6 vzoriek pochádzalo zo srdc, v ktorých bolo indukované I/R poškodenie, 6 vzoriek bolo vystavených prerušovanej hypoxii s následnou indukciou I/R poškodenia (HIR), 5 vzoriek pochádzalo zo srdc so streptozotocínom indukovaným diabetom (D) a 5 vzoriek tvorilo kontrolnú skupinu (K). Na základe nameraných údajov absorbancie a následnej aplikácii kalibračnej krivky sme kvantifikovali koncentrácie proteínu UCP3 v jednotlivých vzorkách. Na zistenie štatistického rozdielu priemerov medzi skupinami sme vykonali dvojvýberový t-test. Test bol vykonaný medzi skupinami HIR a IR, a medzi skupinami K a D. Priemerné koncentrácie uvádzame v tabuľke 1 a porovnanie priemerov koncentrácií medzi skupinami zobrazuje tabuľka 2.

Tabuľka 1: Priemerné hodnoty koncentrácii UCP3 v experimentálnych skupinách

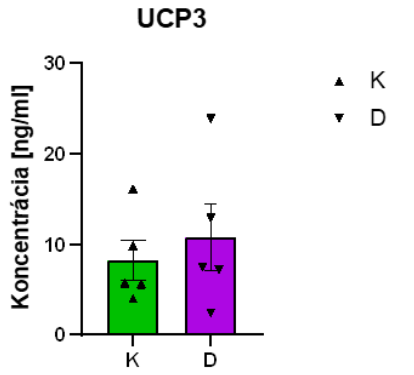
Skupina	Priemer (ng/ml)
HIR	22,57
IR	28,99
D	8,25
K	10,80

Priemerná koncentrácia UCP3 proteínu vo vzorkách HIR bola 22,57 ng/ml, vo vzorkách IR dosiahla hodnotu 28,99 ng/ml. V diabetických vzorkách sa priemerná koncentrácia UP3 pohybovala na úrovni 10,80 ng/ml, čo predstavuje minimálny rozdiel v porovnaní s kontrolnou skupinou, ktorá mala priemernú koncentráciu proteínu 8,25 ng/ml.

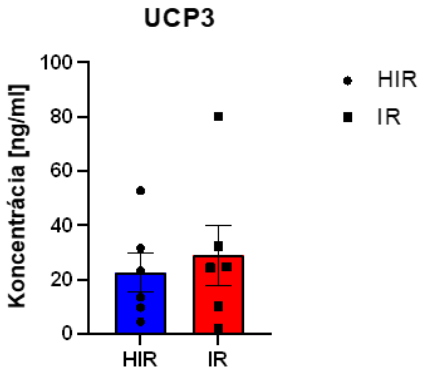
Tabuľka 2: Porovnanie parametrov skupín HIR – IR a K – D, p-hodnota z t-testu.

Skupina	HIR – IR	K – D
Rozdiel priemerov	22,57 – 28,99	8,25 – 10,80
Rozdiel mediánov	18,37 – 24,60	5,61 – 7,22
P- hodnota	0,639	0,568

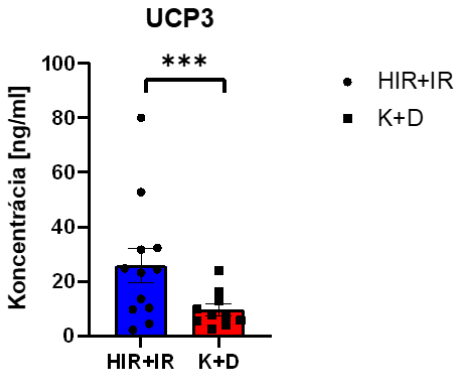
Medzi skupinami HIR a IR, ako aj medzi D a K, nebol preukázaný štatisticky významný rozdiel v priemerných koncentráciách UCP3 ($p > 0,05$). Na základe týchto výsledkov nie je možné tvrdiť, že hypoxia má vplyv na hladinu ROS počas I/R poškodenia. V akútnej fáze diabetu bola koncentrácia proteínu UCP3 porovnateľná s hladinami u zdravých subjektov (K), čo naznačuje, že hladiny ROS boli aj napriek stresovým podmienkam udržiavané v bezpečných fyziologických hodnotách.



Graf 1: Koncentrácia UCP3 v experimentálnych skupinách K a D. Chybové úsečky: ±SEM



Graf 2: Koncentrácia UCP3 v experimentálnych skupinách HIR a IR. Chybové úsečky: ±SEM



Graf 3: Testovanie rozdielu variancie medzi spojenými skupinami HIR + IR a K + D. Chybové úsečky: ±SEM. ***p-hodnota < 0,001

Tabuľka 3: Výstup F-testu a testov homogenity variancie: porovnanie HIR + IR a K + D

Skupina	Variancia	P-hodnota
HIR+IR	492,964	0,001
K+D	42,421	

Vzhľadom na nízky počet jedincov v jednotlivých skupinách sme pristúpili k zlúčeniu skupín HIR a IR, ako aj skupín D a K a zamerali sme sa na analýzu variancie. Zlúčenie bolo možné z dôvodu absencie štatisticky významného rozdielu priemerov ($p > 0,05$) medzi spájanými skupinami a 95% intervalu spoľahlivosti zahŕňajúceho nulu. Porovnaním zlúčených skupín sme dostali štatisticky dôkaz o tom, že variancia skupiny HIR + IR (492,964 $(ng/ml)^2$) sa signifikantne líši od variancie skupiny D + K (42,42 $(ng/ml)^2$).

4 Záver

V tejto experimentálnej štúdii sme sa venovali analýze prítomnosti a kvantifikácii koncentrácie proteínu UCP3 v mitochondriách myokardu po indukcii prerušovanej hypoxie a v akútnej fáze diabetu. V predošlých štúdiách bolo dokázané, že proteín UCP3 má schopnosť katalyzovať protónový únik, čo vedie k zníženiu mitochondriálneho elektrochemického gradientu. Tento proces, nazývaný uncoupling, by mal spôsobiť zníženie tvorby ROS, ktoré v nadmerných koncentráciách vedú k poškodeniu tkanív a bunkových štruktúr. Naším cieľom bolo porovnať koncentrácie proteínu UCP3 v diabetických vzorkách s kontrolnou skupinou a overiť, či počas akútnej fázy diabetu sú aktivované ochranné mechanizmy udržujúce hladinu ROS v bezpečných hodnotách. Druhým cieľom bolo overiť, či náš model prerušovanej hypoxie dokáže znížiť produkciu ROS po I/R poškodení, podobne, ako to bolo pozorované

v iných modeloch preconditioningu. Porovnaním priemerných hodnôt koncentrácií UCP3 medzi skupinou s akútnou fázou diabetu a kontrolnou skupinou sme nezistili medzi týmito skupinami štatisticky významný rozdiel. Na základe týchto výsledkov sa domnievame, že akútna fáza diabetu skutočne spúšťa mechanizmy, ktoré zabezpečujú ochranu srdca aj pri zvýšených energetických nárokoch, pričom predpokladáme, že na tejto ochrane sa podieľa aj proteín UCP3. Následne sme sa zamerali na koncentrácie UCP3 vo vzorkách iba s indukovaným I/R poškodením a kombinovaným I/R poškodením a hypoxiou. Pokles UCP3 nebol natoľko významný, aby sme mohli tvrdiť, že náš model prerušovanej hypoxie ovplyvňuje mieru I/R poškodenia v srdcovom svale prostredníctvom zapojenia UCP3 do regulácie ROS. Predpokladáme, že jedným z dôvodov, kvôli ktorému sa neprejavil adaptačný mechanizmus hypoxie, je nedostatočný aktivačný hypoxický stimul. Vzhľadom na takmer desaťnásobný rozptyl v zlúčenej skupine HIR + IR v porovnaní so zlúčenou skupinou D + K predpokladáme, že v skupine HIR + IR boli prítomné, alebo indukované dodatočné faktory, ktoré zvýšili medzi subjektovú variabilitu výsledkov v týchto experimentálnych podmienkach. Medzi tieto faktory môžu patriť hormóny, ako napr. inzulín a hormóny štítnej žľazy, alebo zložky imunitného systému – zápalové cytokíny.

Poďakovanie

Tento výskum bol uskutočnený vďaka podpore grantov APVV-22-0264, VEGA 2/0016/23.

Literatúra

[Abe et al. 2017] Abe, Hajime, Hiroaki Semba a Norihiko Takeda, 2017. The Roles of Hypoxia Signaling in the Pathogenesis of Cardiovascular Diseases. Journal of Atherosclerosis and Thrombosis [online]. 2017, roč. 24, č. 9, s. 884–894. ISSN 1880-3873. Dostupné na: doi:10.5551/jat.RV17009

[Boss et al. 1997] Boss, Olivier, Sonia Samec, Ariane Paoloni-Giacobino, Colette Rossier, Abdul Dulloo, Josiane Seydoux, Patrick Muzzin a Jean-Paul Giacobino, 1997. Uncoupling protein-3: a new member of the mitochondrial carrier family with tissue-specific expression. FEBS Letters [online]. 1997, roč. 408, č. 1, s. 39–42. ISSN 0014-5793, 1873-3468. Dostupné na: doi:10.1016/S0014-5793(97)00384-0

[Bou-Teen et al. 2021] Bou-Teen, Diana, Nina Kaludercic, David Weissman, Belma Turan, Christoph Maack, Fabio Di Lisa a Marisol Ruiz-Meana, 2021. Mitochondrial ROS and mitochondria-targeted antioxidants in the aged heart. Free Radical Biology and Medicine [online]. 2021, roč. 167, s. 109–124. ISSN 08915849. Dostupné na: doi:10.1016/j.freeradbiomed.2021.02.043

[Brand a Esteves, 2005] Brand, Martin D. a Telma C. Esteves, 2005. Physiological functions of the mitochondrial uncoupling proteins UCP2 and UCP3. Cell Metabolism [online]. 2005, roč. 2, č. 2, s. 85–93. ISSN 15504131. Dostupné na: doi:10.1016/j.cmet.2005.06.002

[Cadenas 2018] Cadenas, Susana, 2018. Mitochondrial uncoupling, ROS generation and cardioprotection. Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Bioenergetics [online]. 2018, roč. 1859, č. 9, s. 940–950. ISSN 00052728. Dostupné na: doi:10.1016/j.bbabio.2018.05.019

[Divakaruni a Brand 2011] Divakaruni, Ajit S. a Martin D. Brand, 2011. The Regulation and Physiology of Mitochondrial Proton Leak. Physiology [online]. 2011, roč. 26, č. 3, s. 192–205. ISSN 1548-9213, 1548-9221. Dostupné na: doi:10.1152/physiol.00046.2010

[García-Peña et al. 2024] García-peña, Luis Miguel, E. Dale Abel a Renata O. Pereira, 2024. Mitochondrial Dynamics, Diabetes, and Cardiovascular Disease. Diabetes [online]. 2024, roč. 73, č. 2, s. 151–161. ISSN 0012-1797. Dostupné na: doi:10.2337/dbi23-0003

[Görlach et al. 2015] Görlach, Agnes, Elitsa Y. Dimova, Andreas Petry, Antonio Martínez-Ruiz, Pablo Hernansanz-Agustín, Anabela P. Rolo, Carlos M. Palmeira a Thomas Kietzmann, 2015. Reactive oxygen species, nutrition, hypoxia and diseases: Problems solved? Redox Biology [online]. 2015, roč. 6, s. 372–385. ISSN 22132317. Dostupné na: doi:10.1016/j.redox.2015.08.016

[Kung-Chun Chiu et al. 2019] Kung-Chun Chiu, David, Aki Pui-Wah Tse, Cheuk-Ting Law, Iris Ming-Jing Xu, Derek Lee, Mengnuo Chen, Robin Kit-Ho Lai, Vincent Wai-Hin Yuen, Jacinth Wing-Sum Cheu, Daniel Wai-Hung Ho, Chun-Ming Wong, Huafeng Zhang, Irene Oi-Lin Ng a Carmen Chak-Lui Wong, 2019. Hypoxia regulates the mitochondrial activity of hepatocellular carcinoma cells through HIF/HEY1/PINK1 pathway. Cell Death & Disease [online]. 2019, roč. 10, č. 12, s. 934. ISSN 2041-4889. Dostupné na: doi:10.1038/s41419-019-2155-3

[Lekárska biochémia I, 2016] Kolektív autorov 2016. Lekárska biochémia I. 2016. B.m.: Bratislava: Univerzita Komenského v Bratislave, 2016. 244 s. ISBN 978-80-223-3985-8ISBN 978-80-223-3985-8

[Lucero García Rojas et al. 2021] Lucero García Rojas, Emilio Y., Cleva Villanueva a Richard A. Bond, 2021. Hypoxia Inducible Factors as Central Players in the Pathogenesis and Pathophysiology of Cardiovascular Diseases. Frontiers in Cardiovascular Medicine [online]. 2021, roč. 8, s. 709509. ISSN 2297-055X. Dostupné na: doi:10.3389/fcvm.2021.709509

[Muráriková et al. 2017] Muráriková, Martina, Miroslav Ferko, Iveta Waczulíková, Magdaléna Jašová, Ivana Kancirová, Jana Murínová a Táňa Ravingerová, 2017. Changes in mitochondrial properties may contribute to enhanced resistance to ischemia–reperfusion injury in the diabetic rat heart. Canadian Journal of Physiology and Pharmacology [online]. 2017, roč. 95, č. 8, s. 969–976. ISSN 0008-4212, 1205-7541. Dostupné na: doi:10.1139/cjpp-2017-0211

[Murphy et al. 2016] Murphy, Elizabeth, Hossein Ardehali, Robert S. Balaban, Fabio Dilisa, Gerald W. Dorn, Richard N. Kitsis, Kinya OTSU, Peipei Ping, Rosario Rizzuto, Michael N. SACK, Douglas Wallace a Richard J. Youle, 2016. Mitochondrial Function, Biology, and Role in Disease: A Scientific Statement From the American Heart Association. Circulation Research [online]. 2016, roč. 118, č. 12, s. 1960–1991. ISSN 0009-7330, 1524-4571. Dostupné na: doi:10.1161/RES.0000000000000104

[Murphy 2009] Murphy, Michael P., 2009. How mitochondria produce reactive oxygen species. The Biochemical Journal [online]. 2009, roč. 417, č. 1, s. 1–13. ISSN 1470-8728. Dostupné na: doi:10.1042/BJ20081386

[Nabben et al. 2011] Nabben, Miranda, Irina G. Shabalina, Esther Moonen-Kornips, Denis Van Beurden, Barbara Cannon, Patrick Schrauwen, Jan Nedergaard a Joris Hoeks, 2011. Uncoupled respiration, ROS production, acute lipotoxicity and oxidative damage in isolated skeletal muscle mitochondria from UCP3-ablated mice. Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Bioenergetics [online]. 2011, roč. 1807, č. 9, s. 1095–1105. ISSN 00052728. Dostupné na: doi:10.1016/j.bbabio.2011.04.003

[Siasos et al. 2018] Siasos, Gerasimos, Vasiliki Tsigkou, Marinos Kosmopoulos, Dimosthenis Theodosiadis, Spyridon Simantiris, Nikoletta Maria Tagkou, Athina Tsimpiktsioglou, Panagiota K. Stampouloglou, Evangelos Oikonomou, Konstantinos Mourouzis, Anastasios Philippou, Manolis Vavuranakis, Christodoulos Stefanadis, Dimitris Tousoulis a Athanasios G. Papavassiliou, 2018. Mitochondria and cardiovascular diseases—from pathophysiology to treatment. Annals of Translational Medicine [online]. 2018, roč. 6, č. 12, s. 256–256. ISSN 23055839, 23055847. Dostupné na: doi:10.21037/atm.2018.06.21

[Williamson et al. 1993] Williamson, Joseph R, Katherine Chang, Myrto Frangos, Khalid S Hasan, Yasuo Ido, Takahiko Kawamura, Jens R Nyengaard, Maria Van Den Enden, Charles Kilo a Ronald G Tilton, 1993. Hyperglycemic Pseudohypoxia and Diabetic Complications. Diabetes [online]. 1993, roč. 42, č. 6, s. 801–813. ISSN 0012-1797, 1939-327X. Dostupné na: doi:10.2337/diab.42.6.801

[Zhang et al. 2024] Zhang, Ying, Mantang Jiang a Tao Wang, 2024. Reactive oxygen species (ROS)-responsive biomaterials for treating myocardial ischemia-reperfusion injury. Frontiers in Bioengineering and Biotechnology [online]. 2024, roč. 12, s. 1469393. ISSN 2296-4185. Dostupné na: doi:10.3389/fbioe.2024.1469393

[Zhou et al. 2000] Zhou, Min, Bao-Zhen LIN, Sean Coughlin, Gino Vallega a Paul F. Pilch, 2000. UCP-3 expression in skeletal muscle: effects of exercise, hypoxia, and AMP-activated protein kinase. American Journal of Physiology-Endocrinology and Metabolism [online]. 2000, roč. 279, č. 3, s. E622–E629. ISSN 0193-1849, 1522-1555.Dostupné na: doi:10.1152/ajpendo.2000.279.3.E622

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 68–75
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Jakub Lešťák, Marek Tatarko, Tibor Hianik

Štúdium mechanizmov interakcie bakteriálnych lipopolysacharidov s DNA aptamérmi a s antimikrobiálnym peptidom polymyxínom B pomocou metódy QCM-D

Jakub Lešťák* Marek Tatarko† Tibor Hianik‡
KJFB, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

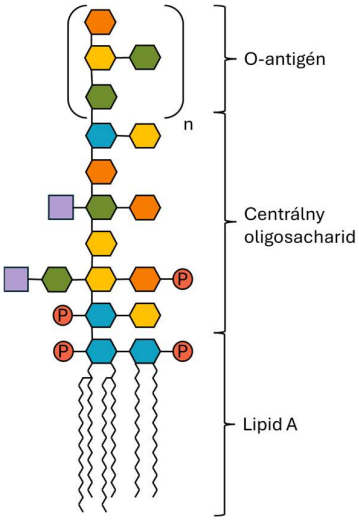
Predkladaná práca je zameraná na štúdium mechanizmov interakcie bakteriálnych lipopolysacharidov (LPS) s DNA aptamérmi a na štúdium interakcie LPS s antimikrobiálnym peptidom polymixínon B pomocou kremenných kryštalických mikrováh s monitorovaním rozptylu energie (QCM-D). LPS sú endotoxíny, nachádzajúce sa na vonkajšej membráne gram-negatívnych baktérií (G-baktérie). Medzi tieto baktérie patria napríklad *Salmonella typhimurium*, alebo *Escherichia coli*. Primárnou úlohou LPS je udržiavanie štrukturálnej integrity vonkajšej membrány baktérií. Takáto membrána potom slúži ako bariéra proti cytotoxickým látkam akými sú antibiotiká a obranným mechanizmom hostiteľa. LPS v nižších koncentráciách pôsobí aktivačne na imunitný systém hostiteľa. Vo vysokých koncentráciách sú LPS hematotoxické. Pre vývoj nových metód detekcie baktérií je potrebné poznať mechanizmy ich interakcie s možnými receptormi takými ako DNA aptaméry a lektíny. Doposiaľ však mechanizmy týchto interakcií neboli v dostatočnej miere študované. Pri zachytení LPS na povrchu piezokryštálu modifikovaného DNA aptamérmi by bolo možné sledovať interakciu LPS s antimikrobiálnym peptidom polymyxínom B. Štúdium týchto interakcií je veľmi aktuálne v dôsledku rastúceho množstva multirezistentných kmeňov patogénnych baktérií.

Keywords: lipopolysacharid, DNA aptamér, kremenné kryštalické mikrováhy, polymyxín B

1 Úvod do problematiky

1.1 Lipopolysacharidy

Lipopolysacharidy sú špecifické nízkomolekulárne látky nachádzajúce sa vo vonkajšej membráne gram-negatívnych baktérií (G-baktérie). LPS tvoria väčšinu molekúl vonkajšej monovrstvy G-baktérií (Raina 2023), čo spôsobuje odlišnosti vo vlastnostiach vonkajšej a vnútornej bunkovej membrány. Oproti pomerne flexibilnej a fluidnej vnútornej membráne je vonkajšia membrána pevnejšia a organizovanejšia štruktúra. Táto vlastnosť je dôsledok tesného usporiadania reťazcov mastných kyselín lipidu A, ktoré medzi sebou pôsobia silnými hydrofóbnymi interakciami. Ďalej k týmto vlastnostiam napomáhajú interakcie fosfátových skupín LPS s dvojmocnými katiónmi (Mg^{2+} a Ca^{2+}) ktoré elektrostatickými interakciami navzájom stabilizujú polárne časti LPS, čo značne zvyšuje hustotu usporiadania molekúl v membráne. (Adams et al. 2014). Vďaka týmto vlastnostiam plní vonkajšia membrána úlohu bariéry chrániacej baktériu pred látkami inak voľne prestupujúcimi fosfolipidovými membránami. Tomuto účelu napomáha aj hydrofilný O-antigén, ktorý vystupuje z membrány. Výsledkom je zvýšená rezistivita G-baktérií proti antimikrobiálnym látkam. Medzi ďalšie funkcie LPS patrí ochrana pred fagocytózou pomocou dlhej hydrofilnej molekuly O-antigénu, ktorá zabraňuje obklopeniu fagocytovanej častice. O-antigén môže slúžiť aj na ochranu pred komplementovým systémom (enzymatická kaskáda nachádzajúca sa v sére hostiteľa, ktorej výsledkom je lýza terčovej bunky) hostiteľa, medzibunkovou komunikáciou, adhéziou a kolonizáciou (Di Lorenzo et al. 2022; Kamio a Nikaido 1976; Wilson a Ruiz 2021).



Obrázok 1. Schéma štruktúry bakteriálneho lipopolysacharidu

* lestak1@uniba.sk
† marek.tatarko@fmph.uniba.sk
‡ tibor.hianik@fmph.uniba.sk

Molekula lipopolysacharidu sa skladá z troch primárnych jednotiek: lipidu A, centrálnej polysacharidovej časti a O-antigénu tvoreného polysacharidovým reťazcom (Obrázok 1).

1.1.1 Lipid A

Lipid A slúži na ukotvenie LPS vo vonkajšej cytoplazmatickej membráne. Základom je disacharid zložený z dvoch molekúl D-glukosamínu viazaných β-1,6-glykozidovou väzbou. Tieto molekuly sú fosforylované na prvom uhlíku pre blízky α-D-glukozamín a na pozícii 4 pre vzdialený β-D-glukozamín. Kostra disacharidu má na druhom a treťom uhlíku každej sacharidovej podjednotky naviazané dva reťazce 3-hydroxy mastných kyselín, ktoré sú spojené amidovými alebo esterovými väzbami. Na hydroxidové skupiny primárnych reťazcov sa môžu viazať aj sekundárne reťazce. Počet reťazcov mastných kyselín je variabilný podľa druhu baktérie a býva v rozsahu štyroch až siedmych reťazcov (Knirel a Valvano 2011).

1.1.2 Centrálny polysacharid

Centrálny polysacharid je zložený z monosacharidov usporiadaných vo forme vetviacich sa štruktúr. Ide zväčša o hexózy, menovite glukózu, galaktózu, N-acetylglukózamín a N-acetylgalaktozamín. Typický je negatívny náboj tejto časti molekuly zapríčinený prítomnosťou fosfátových skupín. To má za následok elektrostatické interakcie medzi molekulami LPS, ktoré sú sprostredkované katiónmi Mg^{2+} a Ca^{2+}. Dôsledkom je pevné usporiadanie molekúl vonkajšej membrány (Knirel a Valvano 2011; Di Lorenzo et al. 2022).

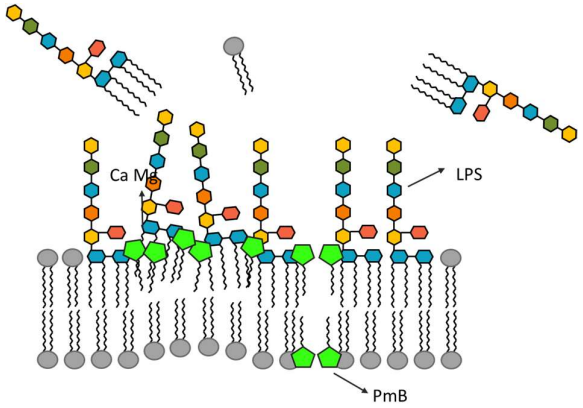
1.1.3 O-antigén

O-antigén je dlhý polysacharidový reťazec vystupujúci z vonkajšej membrány do extracelulárneho priestoru. Ide o najvariabilnejšiu časť molekuly LPS z hľadiska zloženia a štruktúry, využíva sa preto na sérologickú typizáciu kmeňov baktérií. Funkciou O-antigénu je ochrana bunky pred imunitnými mechanizmami hostiteľa ako napríklad komplementový systém a fagocytóza. Ochrana pred fagocytózou spočíva v hydrofilnej povahe O-antigénu, ktorá ju sťažuje. O-antigén vzniká skladaním menších oligosacharidových podjednotiek (O-jednotiek). O-jednotky sú zložené z dvoch až ôsmich monosacharidov alebo ich derivátov. Dĺžka O-antigénových reťazcov nemusí byť nutne uniformná. Molekuly O-antigénov môžu byť tvorené rôznym počtom O-jednotiek v rozmedzí od 1 – 50 (Knirel a Valvano 2011; Di Lorenzo et al. 2022; Goode et al. 2021).

1.2 Polymyxín B

Polymyxíny sú malé cyklické polykatiónové lipopeptidové molekuly zložené z katiónového peptidového kruhu. Ten sa skladá z ôsmich až desiatich aminokyselín, zvyškov kyseliny 2,4-diaminomaslovej a hydrofóbneho reťazca tvoreného karboxylovou kyselinou. Takáto štruktúra molekuly má amfifilný charakter umožňujúci rozpustnosť vo vodnom prostredí aj v lipidových membránach (Evans et al. 1999; Trimble et al. 2016). Pôvodným prekurzorom je molekula prirodzene syntetizovaná baktériou *Bacillus polymyxa* (Ainsworth et al. 1947). Do druhej polovice minulého storočia boli polymyxíny klinicky využívané. Avšak v dôsledku pomerne vysokej neuro- a nefrotoxicity boli z klinickej praxe vyradené. V súčasnosti vzrastá záujem o tieto látky v súvislosti s rapídne zväčšujúcim sa počtom multirezistentných kmeňov G- baktérií. Avšak kvôli ich toxicite sú používané iba ako posledná možnosť liečby (Vattimo et al. 2016; Goode et al. 2021).

Účinok polymyxínov spočíva v rozrušovaní bakteriálnej membrány. Výsledkom sú zmeny permeability membrány a následná bunková smrť. Katiónový kruh polymyxínu-B (PmB) interaguje so záporne nabitými fosfátovými skupinami LPS. Tam nahrádza Mg^{2+} a Ca^{2+} mostíky stabilizujúce štruktúru membrány a dochádza aj k interakcii hydrofóbnych častí oboch molekúl (Schindler a Osborn 1979; Evans et al. 1999). Týmito interakciami sa PmB včleňuje do membrány a rozrušuje ju (**Obrázok 2**).



Obrázok 2: Mechanizmus účinku PmB na vonkajšiu bakteriálnu membránu

Vďaka zmenám v štruktúre membrány a jej permeabilite dochádza k prestupu PmB periplazmatickým priestorom a následnej k interakcii s vnútornou membránou. Upravený PmB bez reťazca mastnej kyseliny (PmB nonapeptid/PMBN) stráca antibiotické účinky, ale zachováva si schopnosť väzby, narušenia usporiadania a zmeny permeability membrány. Efektívnosť účinku PMBN je ale limitovaná na vyššie koncentrácie látky. Dokazuje to teda predpoklad, že primárna interakcia prebieha medzi molekulami vonkajšej membrány a peptidovým kruhom PmB. Avšak na vstup PmB do

periplazmatického priestoru a narušenie energetického metabolizmu bunky je potrebný karboxylový reťazec (Zhang et al. 2000; Lu et al. 2014; Trimble et al. 2016).

Bolo tiež preukázané, že pri správnom dávkovaní a v súčinnosti s inými antibiotikami dochádza k zníženiu toxického účinku PmB (Bergen et al. 2015; Zhang et al. 2000; Nation et al. 2015). PmB zostáva zatiaľ relevantnou antimikrobiálnou látkou a vzhľadom na náročný vývoj nových antimikrobiálnych látok je výskum mechanizmu účinku tejto molekuly stále potrebný.

2 Materiály a metódy

2.1 Použité chemikálie

Použité chemikálie

Na prípravu roztokov bola použitá deionizovaná voda (Merný odpor: 18 MΩ.cm, Purelab Classic-UV (ELGA, UK)). Všetky chemikálie boli čistoty p.a.: fosfátový pufor (Phosphate Buffered Saline (PBS) tablets, pH 7,4) boli zakúpené v Sigma Aldrich (Nemecko), $MgCl_2$ (Mh = 95,211 g/mol), etanol (Mh = 46,07 g/mol), amoniak (Mh = 17,03 g/mol), peroxid vodíka (30% H_2O_2, Mh = 34,017 g/mol), kyselina chlorovodíková (HCl, 1M) (Slavus, Slovensko).

V experimentoch boli použité tlmivé roztoky:

PBS – 1 tableta rozpustená v 200 ml deionizovanej vody (0,01 M $NaHPO_4$ / 0,01 M NaH_2PO_4, 2,7 mM KCl, 0,137 M NaCl, pH 7,4) a do roztoku bol pridaný 1 mM $MgCl_2$

Na prípravu amino-reaktívnej vrstvy biosenzora boli použité:

11-merkaptoundekánová kyselina (MUA, Mh = 218,36 g/mol, 99%), hydrochlorid, N-(3-dimetylaminopropyl)-N´-etylkarbodiimid (EDC, Mh = 191,7 g/mol), N-hydroxysukccinimid (NHS, Mh = 115,09 g/mol)

Na prípravu bunkových kultúr boli použité:

Bunky *Salmonella enterica typhimorium* boli cez noc inkubované v pufrovanej peptónovej vode (Biokar, Francúzsko) a následne pomocou Bligh-Dyerovej metódy z nich bolo extrahované LPS a Lipid A (Príloha 1). Koncentrácia baktérií bola kontrolovaná počítaním kolónií v Petriho miskách a taktiež pomocou merania optickej hustoty UV-Vis spektrofotometrom (Thermo Fischer, USA). Množstvo lipidu A bolo stanovené vážením sušiny.

V experimentoch sme použili DNA aptamér špecifický k LPS zo *Salmonelly typhimurium* (Sal-LPS) modifikovaný amino skupinou na 5' konci: 5´-C6 Amino-CCT TCT AAC AGA ATG TTG TTA GAT AGC-3´. Aptamér bol zakúpený z Genecust, Francúzsko.

Aptamér bol rozpustený v TE pufri (10 mM Tris-HCl, 1 mM EDTA, pH 8) v koncentrácii 0.1 mM. Pracovný roztok aptaméra rozpustený v PBS mal koncentráciu 2 μM. Pre zabezpečenie optimálneho skladania aptamérov bol tento roztok zohriaty na teplotu 90°C a postupne schladený do 20°C. Následne bol dodaný na povrch QCM kryštála s MUA vrstvou s aktivovanými karboxylovými skupinami, na dobu 16 hod.

2.2 Metóda QCM-D

Metóda kryštalických mikrováh s meraním rozptylu energie (QCM-D) umožňuje meranie rezonančnej frekvencie a rozptylu (disipácie) v dôsledku zmien hustoty vrstiev na povrchu piezokryštálu a vplyvu viskozity prostredia. Ide o veľmi citlivú metódu schopnú detegovať mechanické a chemické zmeny, ktoré sa na povrchu senzora dejú. Senzor monitoruje zmeny frekvencie a disipácie v reálnom čase (Tonda-Turo et al. 2018).

Piezoelektricita je jav pôvodne pozorovaný ako akumulácia elektrického náboja na povrchu piezoelektrického materiálu na ktorý pôsobí mechanická sila. Tento jav funguje recipročne. V tomto prípade sa materiál pri vystavení elektrickému poľu mechanicky deformuje. Pri použití striedavého napätia je možné v piezoelektrickom materiáli vyvolať mechanické oscilácie. Využitím teórie ekvivalentných obvodov je možné dať do súvislosti elektrický odpor, vodivosť a kapacitu s mechanickými veličinami akými sú elasticita a viskozita. (Cooper a Singleton 2007). Tento jav umožňuje štúdium afinitných interakcií na povrchu piezokryštálu medzi imobilizovanými receptormi, napríklad DNA aptamérmi, a cieľovými molekulami takými ako LPS (Cooper a Singleton 2007; Guha et al. 2022).

Ako prvý popísal zmeny signálu vzťahujúce sa na adsorbovanú hmotu na ploche senzora G. Sauerbrey:

$$\Delta f_m = -\frac{2f_0^2}{A\sqrt{\rho_q \mu_p}}\Delta m$$

Kde Δf je zmena frekvencie, f_0 je fundamentálna rezonančná frekvencia, Δm je zmena plošnej hustoty na povrchu senzora, A je efektívna plocha senzora, ρ_q je hustota a μ_q modul pružnosti v šmyku piezoelektrického materiálu (Sauerbrey 1959). Táto rovnica platí iba pre tenké rigidné vrstvy vo vákuu.

Graf 1. Kinetika zmien normalizovanej 3., 5., 7. a 9. vyššej harmonickej frekvencie a rozptylu energie po pridaní LPS a polymyxínu B na povrch obsahujúci aptamér špecifický pre LPS zo Salmonella Enterica Typhimorium

Pre piezokryštály s vrstvami kontaktujúcimi s vodnými roztokmi sú potrebné ďalšie úpravy:

$$\Delta f = -f_0^{\frac{3}{2}}\left(\frac{\eta_k \rho_k}{\pi \mu_q \rho_q}\right)^{\frac{1}{2}}$$

Kde ρ_k je hustota a η_k je dynamická viskozita kvapaliny ktorá je v kontakte so senzorom (Kanazawa a Gordon 1985). Metóda QCM je ďalej doplnená meraním disipácie (D), kde predpokladáme, že pri štúdiu vrstiev s viskoelastickými vlastnosťami bude oscilácia rezonátora tlmená. Miera tlmenia sa prejaví na veličine D.

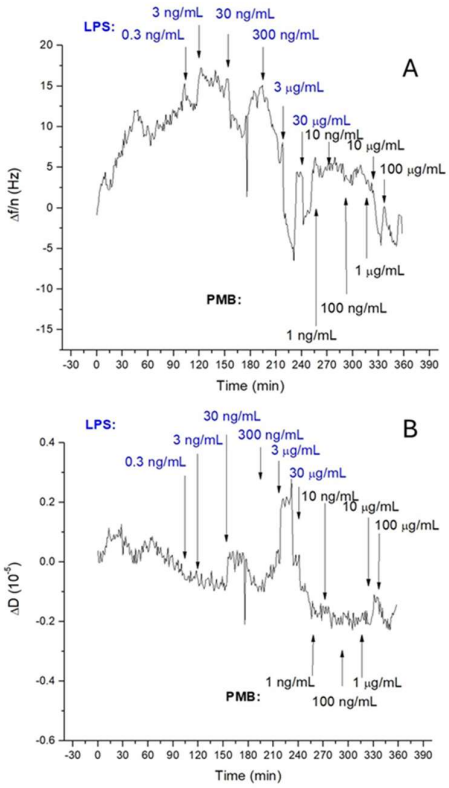
Disipácia, D, je definovaná ako pomer odovzdanej energie počas jednej oscilácie a celkovej energie oscilátora (Cooper a Singleton 2007):

$$D = \frac{E_{stratená}}{2\pi E_{celková}}$$

3 Výsledky a diskusia

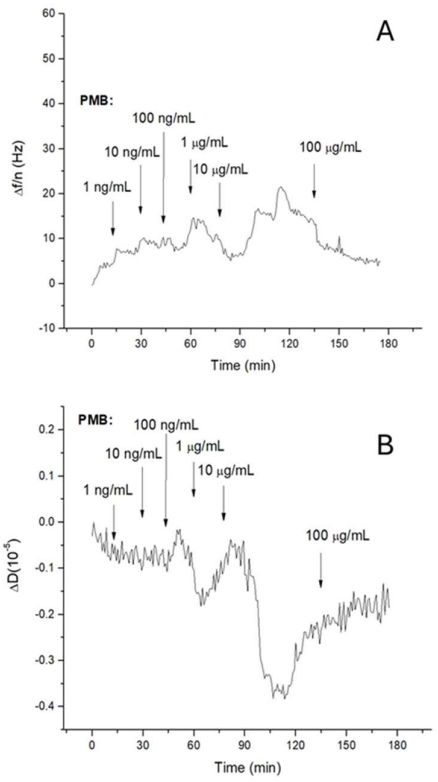
V predkladanej práci sme študovali interakcie DNA aptamérov imobilizovaných na povrchu piezokryštálu s LPS Použili sme DNA aptamér špecifický pre LPS zo Salmonella enterica Enteritidis. Venovali sme sa aj štúdiu interakcie LPS s PmB. V meraniach sme používali kremenný kryštál s vlastnou frekvenciou 8 MHz. Zlatý povrch piezokryštálu bol najskôr modifikovaný MUA prostredníctvom tiolových skupín tejto látky. Karboxylové skupiny MUA boli aktivované EDC/NHS, čo umožnilo kovalentné pripojenie amino-skupinami modifikovaných DNA aptamérov.

V prvom experimente sme sledovali zmeny rezonančnej frekvencie a disipácie piezokryštálov modifikovaných DNA aptamérmi po pridaní rôznych koncentrácií LPS izolovaných z baktérií Salmonella enterica Enteritidis. LPS sme pridávali na povrch titračnou metódou v prietoku pomocou striekačkovej pumpy s rýchlosťou prietoku 50 µL/min. Kinetika zmien normalizovanej frekvencie pre rôzne harmonické frekvencie a disipáciu je uvedená na Grafe 1 A a B. Kvôli prehľadnosti uvádzame len 3. vyššiu harmonickú frekvenciu. Po každom dodaní LPS bol povrch senzora premytý PBS. Významný pokles frekvencie Δf = 7,40 ±0,35 Hz po premytí PBS sme pozorovali až po pridaní LPS s koncentráciou 300 ng/mL a vyššou. Predpokladáme že pokles frekvencie súvisel s naviazaním LPS na DNA aptaméry. Disipácia energie mala počas aplikácie LPS mierne klesajúcu tendenciu, avšak výraznejšie zmeny nastali po aplikácií PmB a celkovo klesla o ΔD = -0,132 ±0,021. Po pridaní LPS v koncentrácii 30 µg/ml a ustálení frekvencie sme pridávali PmB v rôznych koncentráciách v intervale 1 ng/ml -100 µg/mL. Prvé výrazné poklesy rezonančnej frekvencie Δf=3.01±0.28 Hz sme pozorovali pri koncentráciách 1 µg/mL a 10 µg/mL, ktoré rádovo korešpondujú s maximálnou koncentráciou PmB v sére (~2–14 µg/mL) pri klinickej liečbe G- bakteriálnych infekcií (Avedissian et al. 2019). Uvedené zmeny frekvencie svedčia o interakcii PmB s LPS. Prvotný nárast frekvencie pri pridávaní prvých vzoriek PmB mohol byť spôsobený rozrušovaním nadbytočných štruktúr LPS vytvorených na povrchu senzora.



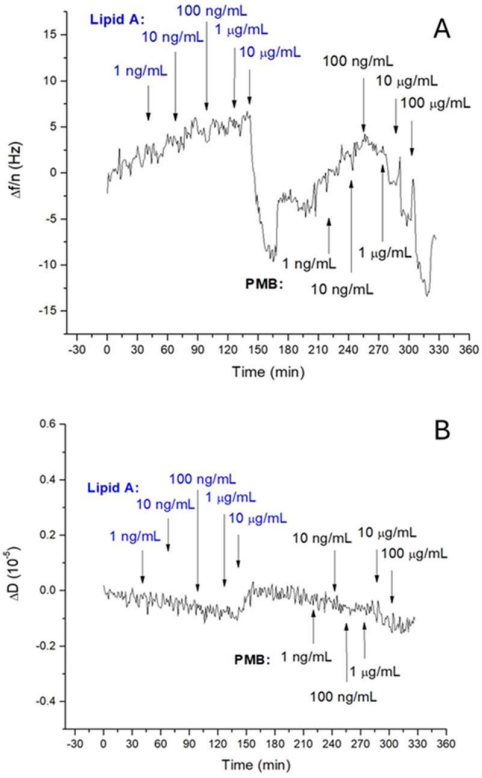
Graf 1: Kinetika zmien normalizovanej 3. vyššej harmonickej frekvencie (A) a rozptylu energie (B) po pridaní LPS a polymyxínu B na povrch obsahujúci aptamér špecifický pre LPS zo Salmonella enterica Enteritidis. Momenty pridania koncentrácií LPS (modrá) a PmB (čierna) sú vyznačené šípkami.

Vykonali sme taktiež experiment s cieľom zistiť či PmB interaguje s vrstvou MUA s aktivovanými karboxylovými skupinami bez aptamérov. Na takýto povrch MUA sme postupne pridávali v prietoku PmB v intervale koncentrácií 1 ng/mL - 100 µg/mL. Tieto výsledky sú uvedené na Grafe 2 (3. harmonická frekvencia). Na grafe sú v časoch pridania vzoriek evidentné poklesy frekvencie senzora. Predpokladáme, že došlo k nešpecifickému naviazaniu PmB na povrch MUA. Po premytí PBS ale dochádzalo k návratu na pôvodnú frekvenciu. Nedochádzalo teda k žiadnej výraznej interakcii. Zmeny disipácie vidíme hlavne pre vyššie koncentrácie, avšak taktiež ako v prípade frekvencie sa hodnoty disipácie vracali na pôvodné hodnoty.



Graf 2: Kinetika zmien normalizovanej 3. vyššej harmonickej frekvencie (A) a rozptylu energie (B) po pridaní polymyxínu B na povrch obsahujúci aktivovanú MUA. Momenty pridania PmB sú vyznačené šípkami.

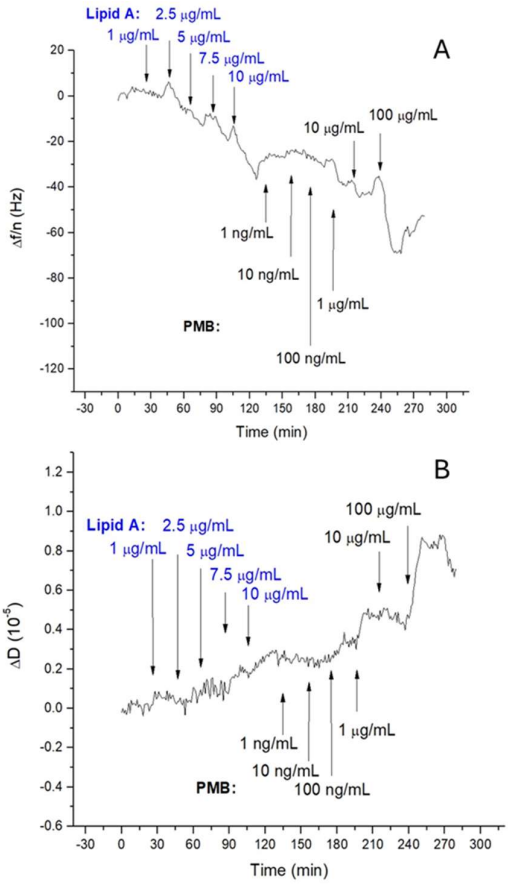
V ďalšom experimente sme namiesto celého komplexu LPS použili iba izolovanú lipidovú časť (lipid A) ktorá by mala špecificky interagovať s DNA aptamérmi. Vzorky sme pridávali titračnou metódou so zvyšujúcimi sa koncentráciami vo vzorkách v dekadickej škále v intervale 1 ng/mL-10 μg/mL. Pri koncentrácii 10 μg/mL pozorujeme výrazný pokles frekvencie senzora, čo korešponduje s kritickou koncentráciu LPS pre tvorbu miciel (Noronha et al. 2023), čo by mohlo znamenať naväzovanie väčšieho množstva materiálu (Graf 3). Tento predpoklad ďalej podporuje skutočnosť, že pri pridávaní PmB sme pozorovali vyšší nárast frekvencie senzora, čo interpretujeme ako rozrušovanie vytvorených miciel pôsobením PmB. Rovnaký jav môžeme pozorovať aj pri sledovaní disipácie (Graf 3 B) kde je najvyšší nárast disipácie (pri pridávaní vzoriek LPS) pozorovateľný práve pri koncentrácii 10 μg/mL. Čo implikuje vplyv naviazaného materiálu na rast povrchovej viskozity vrstvy na povrchu piezokryštálu. Pri aplikácii PmB môžeme následne pozorovať pokles v disipácii, čo môže byť interpretované ako odbúravanie materiálu z povrchu, na povrchu zostáva len vrstva viazaná s aptamérom. Pri aplikácii vyšších koncentrácií PmB potom dochádza k špecifickej väzbe na lipid A a disipácia opäť narastá. Nemôžme však posúdiť, či v tomto prípade ide výhradne o interakcie s lipidom A vzhľadom na relatívne nízku čistotu vzoriek. Vzorky okrem lipidu A a môžu obsahovať aj iné lipidy a nukleové kyseliny, ktoré môžu vytvárať krížové interakcie. Pre ďalšie merania s použitím lipidu A bude potrebné zefektívniť izoláciu vzoriek a overenie presnej koncentrácie vo vzorke (chromatografia na tenkej vrstve).



Graf 3: Kinetika zmien normalizovanej 3. vyššej harmonickej frekvencie (A) a rozptylu energie (B) po pridaní lipidu A a polymyxínu B na povrch obsahujúci aptamér špecifický pre LPS zo Salmonella enterica Enteritidis. Momenty pridania koncentrácií LPS (modrá) a PmB (čierna) sú vyznačené šípkami.

Pre lepšie pozorovanie hraničnej koncentrácie interakcie LPS s DNA aptamérmi sme v ďalšom experimente použili pri titrácii užšiu škálu koncentrácií (1 μg/mL-10 μg/mL), kde sme pozorovali výrazný pokles frekvencie Δf=28,84 ±1,42 Hz (pre 3. harmonickú frekvenciu) po premytí PBS pri koncentrácii LPS 2.5 μg/mL. PmB sme následne pridali titračnou metódou s koncentráciami v dekadickej škále (rovnaké koncentrácie ako v prvom meraní). Významné zmeny frekvencie sme pozorovali opakovane pri koncentráciách PmB 1 μg/mL a 10 μg/mL (Graf 4). Podľa konštantného poklesu frekvencie a konštantného poklesu disipácie (mimo pridania najnižších koncentrácií PmB) dochádzalo k špecifickým interakciám medzi DNA

aptamérom a lipidom A a následne medzi lipidom A a PmB. Prvotný nárast frekvencie a pokles disipácie interpretujeme ako odbúranie nadpočetných molekúl lipidu A ktoré neboli priamo viazané na aptamér ale boli viazane na povrchu senzora vo väčších štruktúrach.



Graf 4: Kinetika zmien normalizovanej 3. vyššej harmonickej frekvencie (A) a rozptylu energie (B) po pridaní lipidu A a polymyxínu B na povrch obsahujúci DNA aptamér špecifický pre LPS zo Salmonella enterica Enteritidis. Momenty pridania koncentrácií LPS (modrá) a PmB (čierna) sú vyznačené šípkami.

4 Záver

Chemickou modifikáciou sme vytvorili na povrchu piezoelektrického senzora vrstvu schopnú viazať LPS. Rovnako sa nám podarilo pozorovať interakciu LPS a PmB *in vitro*. Titrovacou metódou sa nám podarilo určiť hraničné koncentrácie LPS a PmB pri ktorých nastávali molekulové interakcie.

Poďakovanie

Táto práca bola uskutočnená vďaka grantovej podpore výskumného a inovačného programu Európskej únie Horizont 2020, SAFEMILK, číslo projektu 10100729 a projektu VEGA 1/0445/23.

Litratúra

ADAMS, Peter G., Loreen LAMOUREUX, Kirstie L. SWINGLE, Harshini MUKUNDAN a Gabriel A. MONTAÑO, 2014. Lipopolysaccharide-Induced Dynamic Lipid Membrane Reorganization: Tubules, Perforations, and Stacks. *Biophysical Journal* [online]. 2014, roč. 106, č. 11, s. 2395–2407. ISSN 00063495. Dostupné na: doi:10.1016/j.bpj.2014.04.016

AINSWORTH, G. C., ANNIE M. BROWN a G. BROWNLEE, 1947. 'Aerosporin', an Antibiotic Produced by Bacillus aerosporus Greer. *Nature* [online]. 1947, roč. 160, č. 4060, s. 263–263. ISSN 1476-4687. Dostupné na: doi:10.1038/160263a0

BERGEN, Phillip J., Zackery P. BULMAN, Sarith SAJU, Juergen B. BULITTA, Cornelia LANDERSDORFER, Alan FORREST, Jian LI, Roger L. NATION a Brian T. TSUJI, 2015. Polymyxin Combinations: Pharmacokinetics and Pharmacodynamics for Rationale Use. *Pharmacotherapy: The Journal of Human Pharmacology and Drug Therapy* [online]. 2015, roč. 35, č. 1, s. 34–42. ISSN 02770008. Dostupné na: doi:10.1002/phar.1537

COOPER, Matthew A. a Victoria T. SINGLETON, 2007. A survey of the 2001 to 2005 quartz crystal microbalance biosensor literature: applications of acoustic physics to the analysis of biomolecular interactions. *Journal of Molecular Recognition* [online]. 2007, roč. 20, č. 3, s. 154–184. ISSN 0952-3499, 1099-1352. Dostupné na: doi:10.1002/jmr.826

DI LORENZO, Flaviana, Katarzyna A. DUDA, Rosa LANZETTA, Alba SILIPO, Cristina DE CASTRO a Antonio MOLINARO, 2022. A Journey from Structure to Function of Bacterial Lipopolysaccharides. *Chemical Reviews* [online]. 2022, roč. 122, č. 20, s. 15767–15821. ISSN 0009-2665, 1520-6890. Dostupné na: doi:10.1021/acs.chemrev.0c01321

EVANS, Martin E, David J FEOLA a Robert P RAPP, 1999. Polymyxin B Sulfate and Colistin: Old Antibiotics for Emerging Multiresistant Gram-Negative Bacteria. *Annals of Pharmacotherapy* [online]. 1999, roč. 33, č. 9, s. 960–967. ISSN 1060-0280, 1542-6270. Dostupné na: doi:10.1345/aph.18426

GOODE, Alice, Vivien YEH a Boyan B. BONEV, 2021. Interactions of polymyxin B with lipopolysaccharide-containing membranes. *Faraday Discussions* [online]. 2021, roč. 232, s. 317–329. ISSN 1359-6640, 1364-5498. Dostupné na: doi:10.1039/D1FD00036E

GUHA, Arnab, Niklas SANDSTRÖM, Victor P. OSTANIN, David KLENERMAN a Sourav K. GHOSH, 2022. Simpler and faster quartz crystal microbalance for macromolecule detection using fixed frequency drive. *Sensors and Actuators B: Chemical* [online]. 2022, roč. 358, s. 131442. ISSN 09254005. Dostupné na: doi:10.1016/j.snb.2022.131442

KAMIO, Yoshiyuki a Hiroshi NIKAIDO, 1976. Outer membrane of Salmonella typhimurium: accessibility of phospholipid head groups to phospholipase C and cyanogen bromide activated dextran in the external medium. *Biochemistry* [online]. 1976, roč. 15, č. 12, s. 2561–2570. ISSN 0006-2960, 1520-4995. Dostupné na: doi:10.1021/bi00657a012

KANAZAWA, K. Keiji. a Joseph G. GORDON, 1985. Frequency of a quartz microbalance in contact with liquid. *Analytical Chemistry* [online]. 1985, roč. 57, č. 8, s. 1770–1771. ISSN 0003-2700, 1520-6882. Dostupné na: doi:10.1021/ac00285a062

KNIREL, Yuriy A. a Miguel A. VALVANO, ed., 2011. *Bacterial Lipopolysaccharides* [online]. Vienna: Springer Vienna [cit. 21.3.2025]. ISBN 978-3-7091-0732-4. Dostupné na: doi:10.1007/978-3-7091-0733-1

LU, Shun, Grant WALTERS, Richard PARG a John R. DUTCHER, 2014. Nanomechanical response of bacterial cells to cationic antimicrobial peptides. *Soft Matter* [online]. 2014, roč. 10, č. 11, s. 1806. ISSN 1744-683X, 1744-6848. Dostupné na: doi:10.1039/c3sm52801d

NATION, Roger L, Jian LI, Otto CARS, William COUET, Michael N DUDLEY, Keith S KAYE, Johan W MOUTON, David L PATERSON, Vincent H TAM, Ursula THEURETZBACHER, Brian T TSUJI a John D TURNIDGE, 2015. Framework for optimisation of the clinical use of colistin and polymyxin B: the Prato polymyxin consensus. *The Lancet Infectious Diseases* [online]. 2015, roč. 15, č. 2, s. 225–234. ISSN 14733099. Dostupné na: doi:10.1016/S1473-3099(14)70850-3

RAINA, Satish, 2023. Lipopolysaccharides: Regulated Biosynthesis and Structural Diversity. *International Journal of Molecular Sciences* [online]. 2023, roč. 24, č. 8, s. 7498. ISSN 1422-0067. Dostupné na: doi:10.3390/ijms24087498

SAUERBREY, Günter, 1959. Verwendung von Schwingquarzen zur Wägung dünner Schichten und zur Mikrowägung. *Zeitschrift für Physik* [online]. 1959, roč. 155, č. 2, s. 206–222. ISSN 1434-6001, 1434-601X. Dostupné na: doi:10.1007/BF01337937

SCHINDLER, Melvin a M. J. OSBORN, 1979. Interaction of divalent cations and polymyxin B with lipopolysaccharide. *Biochemistry* [online]. 1979, roč. 18, č. 20, s. 4425–4430. ISSN 0006-2960, 1520-4995. Dostupné na: doi:10.1021/bi00587a024

TONDA-TURO, Chiara, Irene CARMAGNOLA a Gianluca CIARDELLI, 2018. Quartz Crystal Microbalance With Dissipation Monitoring: A Powerful Method to Predict the in vivo Behavior of Bioengineered Surfaces. *Frontiers in Bioengineering and Biotechnology* [online]. 2018, roč. 6, s. 158. ISSN 2296-4185. Dostupné na: doi:10.3389/fbioe.2018.00158

TRIMBLE, Michael J., Patrik MLYNÁRČIK, Milan KOLÁŘ a Robert E.W. HANCOCK, 2016. Polymyxin: Alternative Mechanisms of Action and Resistance. *Cold Spring Harbor Perspectives in Medicine* [online]. 2016, roč. 6, č. 10, s. a025288. ISSN 2157-1422. Dostupné na: doi:10.1101/cshperspect.a025288

VATTIMO, Maria De Fátima Fernandes, Mirian WATANABE, Cassiane Dezoti DA FONSECA, Luciana Barros De Moura NEIVA, Edson Andrade PESSOA a Fernanda Teixeira BORGES, 2016. Polymyxin B Nephrotoxicity: From Organ to Cell Damage. *PLOS ONE* [online]. 2016, roč. 11, č. 8, s. e0161057. ISSN 1932-6203. Dostupné na: doi:10.1371/journal.pone.0161057

WILSON, Andrew a Natividad RUIZ, 2021. Transport of lipopolysaccharides and phospholipids to the outer membrane. *Current Opinion in*

Microbiology [online]. 2021, roč. 60, s. 51–57. ISSN 13695274. Dostupné na: doi:10.1016/j.mib.2021.01.006

ZHANG, Lijuan, Pawandeep DHILLON, Hong YAN, Susan FARMER a Robert E. W. HANCOCK, 2000. Interactions of Bacterial Cationic Peptide Antibiotics with Outer and Cytoplasmic Membranes of *Pseudomonas aeruginosa*. *Antimicrobial Agents and Chemotherapy* [online]. 2000, roč. 44, č. 12, s. 3317–3321. ISSN 0066-4804, 1098-6596. Dostupné na: doi:10.1128/AAC.44.12.3317-3321.2000

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 76
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Tomáš Niedl, Milan Zvarík, Lucia Noskovičová, Soňa Balogová

Rádiomická analýza funkčného obrazu pozitrónovej emisnej tomografie s fludeoxyglukózou (18F)

Tomáš Niedl[1]* Milan Zvarík[1†] Lucia Noskovičová [2¤] Soňa Balogová[2‡§]
[1] Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2] Klinika nukleárnej medicíny LF UK, Nemocnica Bory a.s., Ivana Kadlečíka 2, 841 Bratislava

1 Úvod

Rádiomická analýza predstavuje moderný kvantitatívny prístup hodnotenie medicínskych obrazov využívajúci veľké dáta a metódy umelej inteligencie. Pri tomto postupe sa z obrazu extrahujú informácie, ktoré sú pre ľudské schopnosti a zmysly skryté, avšak v obraze už existujú [1]. Tento proces je logickým dôsledkom posunu vedeckej paradigmy k výsledkom získavaných analýzou veľkého počtu dát a predstavuje krok k precíznej medicíne. V štúdii sa postupovalo podľa štandardného protokolu rádiomickej analýzy na hodnotenie dát z pozitrónovej emisnej tomografie (PET) s 18F-fludeoxyglukózou. Cieľom štúdie bolo identifikovať rozdiely v rádiomických vlastnostiach mozgu v závislosti od pohlavia a veku. Model na predikciu veku sme aplikovali na porovnanie mozgu pred a po neoadjuvantnej chemoterapii, pri ktorej sa často pozoruje zníženie kognitívnej výkonnosti ako nežiaduci účinok, ktorý môže byť spojený so zvýšenými biomarkermi starnutia [2].

2 Metódy

Získavanie obrazu: Obraz bol získaný v rámci rutinnej praxe na oddelení nukleárnej medicíny na PET kamere Biograph Vision 450.
Segmentácia a predspracovanie obrazu: V tejto štúdii bol segmentovaný celý mozog pomocou poloautomatickej segmentácie. PET obraz bol následne kvantizovaný na 64 úrovní odtieňov sivej a bolo použité absolútne preškálovanie intenzity.
Extrakcia rádiomických vlastností: Segmentácia aj extrakcia boli vykonané v softvéri LIFEx7.7.0 [3]. Extrahované boli všetky vlastnosti prvého rádu založené na morfológii a histograme intenzity, ako aj vlastnosti druhého rádu charakterizujúce vzájomné vzťahy medzi voxelmi.
Redukcia počtu dimenzií: Výber iba dôležitých rádiomických vlastností je kľúčový z hľadiska výpočtovej náročnosti a prevencie pretrénovania modelu. Analyzovali sme vzájomné korelácie medzi vlastnosťami a na ich výber sme využili Boruta algoritmus. Ako alternatívu sme použili analýzu hlavných komponent (PCA).
Budovanie a validácia modelu: V rámci tejto štúdie sme implementovali niekoľko modelov strojového učenia, ako lineárnu regresiu (LR), náhodný les (RF), podporné vektorové stroje (SVM), podpornú vektorovú regresiu (SVR) a neurónové siete (NN). Modely boli validované viacerými metódami, vrátane krížovej validácie.

3 Výsledky a záver

Model Boruta/SVM dosiahol najlepšiu výkonnosť pri klasifikácii pohlavia s hodnotou AUC = 0,904 (95% CI: 0,846–0,962). Najlepší výkon pri predikcii veku dosiahol model PCA/LR, s Pearsonovým korelačným koeficientom (r) = 0,715, priemernou absolútnou chybou (MAE) = 0,121 a strednou kvadratickou chybou (MSE) = 0,027. Modely v priemere predikovali po neoadjuvantnej chemoterapii vyšší vek mozgu ako pred, avšak rozdiel nebol štatisticky signifikantný. Práca poukazuje na potenciál rádiomiky v medicíne.

Literatúra

[1] Mayerhoefer ME, Materka A, Langs G, Häggström I, Szczypiński P, Gibbs P, et al. Introduction to Radiomics. *Journal of Nuclear Medicine*. apríl 2020;61(4):488–95.
[2] Nioche C, Orlhac F, Boughdad S, Reuzé S, Goya-Outi J, Robert C, et al. LIFEx: A Freeware for Radiomic Feature Calculation in Multimodality Imaging to Accelerate Advances in the Characterization of Tumor Heterogeneity. *Cancer Res*. 15. august 2018;78(16):4786–9.
[3] Hurria A, Jones L, Muss HB. Cancer Treatment as an Accelerated Aging Process: Assessment, Biomarkers, and Interventions. *American Society of Clinical Oncology Educational Book*. máj 2016;(36):e516–22.

* niedl1@uniba.sk
† milan.zvarik@fmph.uniba.sk
¤ lucia.noskovicova@fmed.uniba.sk
‡ sona.balogova@fmed.uniba.sk
§ Školiteľ

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 77
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Zuzana Okruhlicová, Karol Hensel, Zuzana Lukačová

Optimalizácia aplikácií plazmou aktivovanej vody na zlepšený rast a antioxidačnú kapacitu hybridov kukurice

Zuzana Okruhlicová[1]*, Zuzana Lukačová[2†], Karol Hensel[2‡§]
[1] Oddelenie environmentálne fyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2] Katedra fyziológie rastlín, PriF UK, Ilkovičova, 841 04 Bratislava

Tradičné poľnohospodárstvo čoraz viac čelí mnohým výzvam v dôsledku rastu populácie a strát úrody spôsobených klimatickými a stresovými faktormi. Je nevyhnutné hľadať udržateľné prístupy na zvýšenie výnosov s minimálnym dopadom na životné prostredie. Jedným z potenciálnych riešení by mohlo byť využitie studenej plazmy a jej derivátu – plazmou aktivovanej vody (PAV) [Puač et al. 2018]. Studená plazma môže byť priamo (elektrický výboj) alebo nepriamo (PAV) aplikovaná na semená, sadenice a rastliny a zlepšiť ich klíčenie, rast či toleranciu voči stresu. Reaktívne formy kyslíka a dusíka (RONS) vznikajúce pri generovaní plazmy vo vzduchu alebo vode a podporujú klíčenie semien, rast rastlín a zlepšenie tolerancie voči stresu [Mitra et al. 2014].

Nepriama aplikácia studenej plazmy prostredníctvom PAV mení chemické vlastnosti vody a zvyšuje jej obsah RONS, najmä H_2O_2, NO_2^-, NO_3^- [Thirumdas et al. 2018], ktoré majú pozitívne účinky na rast rastlín. Plazma pôsobí ako primingový faktor, ktorý zvyšuje odolnosť rastlín voči stresu prostredníctvom aktivácie adaptačných signálnych dráh [Holubova et al. 2020]. Nadmerné množstvo RONS však môže spôsobiť oxidačný stres a negatívne ovplyvniť rastliny a ich vývoj.

Cieľom tejto práce bolo preskúmať účinky PAV na vybraných hybridoch kukurice (*Zea mays* L.), pričom sme sa zamerali na tri rôzne spôsoby aplikácie PAV, vrátane primingu zŕn, krátkodobého pestovania a foliárnej aplikácie. PAV bola tvorená v systéme systéme s cirkulujúcou vodou zabezpečenou peristaltickou pumpou, kde výboj prechodovej iskry bol generovaný jednosmerným vysokonapäťovým zdrojom.

Použitie PAV spôsobom primingu zŕn významne podporilo sledované rastové parametre (dĺžku primárneho koreňa a výhonku, plochu listov, čerstvú hmotnosť) a taktiež sme zaznamenali zrýchlenú lignifikáciu bunkových stien koreňa. Priming zŕn v PAV taktiež významne podporil zvýšenie koncentrácie karotenoidov a fenolických zlúčenín v listoch počas dlhšej kultivácie.

Pri aplikácii PAV počas krátkodobého pestovania sme pozorovali len minimálne zlepšenia v porovnaní s pestovaním vo vodovodnej vode. Naše výsledky naznačujú, že dlhšia expozícia PAV, môže viesť k zvýšenému oxidačnému stresu a k negatívnym výsledkom vzhľadom k rastovým parametrom. Zaznamenali sme však zvýšený podiel biomasy pri týchto variantoch. Reakcie rastlín na PAV sa však líšia na úrovni hybridov.

Naopak, foliárna aplikácia PAV – postrek listov, viedla k zvýšeniu obsahu karotenoidov v listoch, čím sa zvýšila ich antioxidačná kapacita. Táto metóda aplikácie PAV priniesla najvýraznejšie výsledky z hľadiska rastových parametrov a koncentrácie karotenoidov.

Tieto zistenia spoločne naznačujú, že PAV môže byť prospešná pri zvyšovaní antioxidačnej kapacity kukurice a potenciálne zlepšovať jej odolnosť voči abiotickému stresu. Ďalší výskum optimalizácie zloženia PAV a načasovanie jej aplikácie by mohol maximalizovať tieto prínosy a prispieť k udržateľnejšej rastlinnej výrobe.

Literatúra

[Puač et al., 2018] Puač, N., Gherardi, M., and Shiratani, M. (2018). Plasma agriculture: A rapidly emerging field *Plasma Process. Polym.* 15(2) 1700174.

[Mitra et al., 2014] Mitra, A., Li, Y. F., Klämpfl, T. G., Shimizu, T., Jeon, J., Morfill, G. E. and Zimmermann, J. L. (2014) Inactivation of surface-borne microorganisms and increased germination of seed specimen by cold atmospheric plasma *Food Bioprocess. Technol.* 7 645-653.

[Thirumdas et al., 2018] Thirumdas, R., Kothakota, A., Annapure, U., Siliveru, K., Blundell, R., Gatt, R. and Valdramidis, V. P. (2018) Plasma activated water (PAW): Chemistry, physico-chemical properties, applications in food and agriculture *Trends Food Sci. Technol.* 77 21-31.

[Holubova et al., 2020] Holubova, Ľ., Kyzek, S., Ďurovcová, I., Fabová, J., Horváthová, E., Ševčovičová, A. and Gálová, E. (2020) Non-thermal plasma—A new green priming agent for plants? *Int. J. Mol. Sci.* 21 (24) 9466.

* zuzana.okruhlicova@fmph.uniba.sk
† zuzana.lukacova@uniba.sk
‡ karol.hensel@fmph.uniba.sk
§ Školiteľ

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 78–89
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Mariia Saprykina

Implementácia Rumsfeldovej matice do teórie vyučovania fyziky

Mariia Saprykina[1]*
Školiteľ: Peter Demkanin[1†]
[1] KDFMI, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

Moderné vzdelávanie čelí problému klesajúcej kognitívnej činnosti žiakov, čo súvisí s rozšíreným využívaním digitálnych technológii a systémov umelej inteligencie, ktoré za nich vykonávajú analytické a výpočtové úlohy. To vedie k strate spôsobilostí samostatného myslenia, analýzy a kritického myslenia. V príspevku je navrhnutý vzdelávací model založený na adaptovanej Rumsfeldovej didaktickej matici, v ktorej sa za kognitívny vývoj považuje prechod štyrmi fázami pochopenia hraníc vlastného poznania a nevedomosti, ktorých absolvovanie vedie k vytvoreniu postoja „chcem vedieť viac“. Model sa realizuje prostredníctvom inštrumentálneho skefoldingu - postupnej podpory, ktorá sa oslabuje s rastúcou samostatnosťou žiaka. Model je prispôsobený vyučovaniu fyziky: pre každú kognitívnu fázu sú vypracované typy úloh, ktoré odrážajú úroveň kognitívneho rozvoja.
Kľúčové slová: Teória skefoldingu, Rumsfeldova matica, Kognitívne štádia, Vyučovanie fyziky.

1 Úvod

Moderné vzdelávanie prechádza v dôsledku rýchleho rozvoja digitálnych technológií a umelej inteligencie obdobím hlbokej transformácie. Na jednej strane sa tým otvárajú nové možnosti prístupu k vedomostiam, individualizácie vzdelávania a zvyšovania jeho efektívnosti. Na druhej strane sa prejavuje znepokojujúci trend - pokles kognitívnej činnosti žiakov.

Ďalším aspektom, ktorý zhoršuje situáciu, je skutočnosť, že technický pokrok, ktorý dal ľudstvu novú úroveň materiálnych statkov, viedol k výraznému skomplikovaniu takých vied, ako je fyzika, informatika a chémia. Vznikli nové odvetvia, ktoré spájajú niekoľko oblastí, napríklad biofyzika, biochémia, inžinierska informatika, ktoré si vyžadujú hlboké znalosti viacerých disciplín súčasne [Zafitri et al., 2019].

Učiaci sa čoraz častejšie odmietajú samostatne myslieť a radšej sa spoliehajú na digitálne zdroje, ktoré za nich vykonávajú nielen technické operácie, ale aj intelektuálne úlohy: od riešenia matematických príkladov až po písanie esejí a formulovanie záverov. Toto nahrádzanie osobnej poznávacej činnosti technológiami vedie k oslabovaniu kľúčových vzdelávacích funkcií - rozvoja myslenia, analýzy, reflexie a schopnosti formulovať vlastné otázky a závery.

Vzniká rozpor: na jednej strane sa školy a iné vzdelávacie inštitúcie snažia zavádzať inovatívne technológie, ktoré prispievajú k optimalizácii vyučovacieho procesu, a na druhej strane tie isté technológie môžu spomaliť alebo dokonca zastaviť rozvoj kognitívnej samostatnosti žiakov. Vzniká problém: aké pedagogické prístupy, didaktické stratégie a modely môžu stimulovať kognitívnu iniciatívu, povzbudzovať študentov k bádaniu a formovaniu vlastného chápania učebnej látky v podmienkach bezpodmienečnej dostupnosti informácií.

Práve v tomto kontexte sa stáva mimoriadne aktuálnou úloha vypracovať vzdelávací model, ktorý zabezpečí rovnováhu medzi využívaním digitálnych zdrojov a rozvojom aktívnej poznávacej pozície žiaka. Riešenie tohto problému si vyžaduje prehodnotenie prístupov k organizácii vyučovacieho procesu, zameraného nielen na odovzdávanie vedomostí, ale aj na prebudenie vnútorného záujmu žiaka o predmet, na rozvoj jeho schopnosti vedomého učenia sa.

V rámci tohto výskumu bol formulovaný cieľ: vytvoriť a teoreticky zdôvodniť vzdelávací model zameraný na zvyšovanie poznávacej aktivity žiakov prostredníctvom uvedomovania si a akceptovania hraníc medzi poznaným a nepoznaným, prechádzajúc kognitívnymi fázami poznávania v súlade s adaptovanou Rumsfeldovou maticou, prostredníctvom inštrumentálneho skefoldingu ako metodického základu podpory žiaka v procese učenia sa na príklade vyučovania fyziky.

Na dosiahnutie cieľa stanoveného v štúdii boli formulované tieto čiastočne ciele :

1. Analyzovať súčasné problémy a trendy vyučovania fyziky na strednej škole a určiť význam fyziky ako disciplíny, ktorá rozvíja vedecké

* saprykina1@uniba.sk
† peter.demkanin@fmph.uniba.sk

myslenie žiakov v podmienkach digitálnej transformácie vzdelávania.

2. Analyzovať potenciál inštrumentálneho skefoldingu ako prostriedku postupnej pedagogickej podpory vo vyučovaní fyziky, ktorý prispieva k formovaniu samostatnosti pri učení a zmysluplnému prístupu k riešeniu úloh.

3. Vypracovať a teoreticky zdôvodniť edukačný model založený na koncepcii hraníc známeho a neznámeho a adaptácii Rumsfeldovej matice na proces vyučovania fyziky prostredníctvom systému štruktúrovaných úloh zodpovedajúcich rôznym kognitívnym fázam.

Ako výsledok riešenia stanovených čiastkových cieľov bol navrhnutý vzdelávací model založený na modifikovanej Rumsfeldovej matici. Je založený na myšlienke kognitívneho vývoja ako prechodu jednotlivými fázami uvedomovania si hraníc vlastnej nevedomosti. Model zahŕňa štyri kľúčové etapy poznávania: „neviem, čo neviem“, „viem, čo neviem“, „viem, čo viem“ a „neviem, že viem“. Konečným cieľom je vytvorenie postoja „chcem vedieť viac“ - trvalého záujmu o učenie, ktorý je vnímaný ako vnútorne významná hodnota.

Jednou z techník realizácie navrhovaného modelu je skefolding- metóda postupnej podpory žiaka, ktorá sa postupne oslabuje s jeho zvyšujúcou sa samostatnosťou pri učení. Tento prístup zabezpečuje logickú a psychologickú konzistenciu pri osvojovaní učebnej látky a umožňuje žiakovi prejsť z fázy prijímania vonkajšej pomoci do fázy vedomého a samostatného konania. To je obzvlášť dôležité v modernom vzdelávacom prostredí, kde sa schopnosť samostatného učenia stáva jednou z kľúčových zručností.

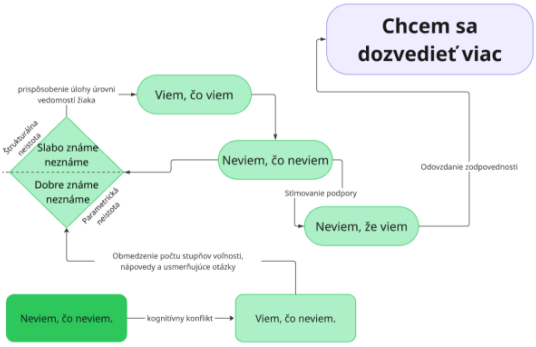
Navrhovaný teoretický model je ilustrovaný na materiáli školského kurzu fyziky. V rámci štúdie sú vypracované typy úloh zodpovedajúce jednotlivým kognitívnym etapám modelu. Predpokladáme, že takéto štruktúrovanie úloh prispieva nielen k hlbšiemu osvojeniu si fyzikálnej podstaty, ale stimuluje aj poznávaciu činnosť žiakov, formuje u žiakov zručnosti akademickej samostatnosti a snahu o rozširovanie vlastných vedomostí.

2 Rumsfeldova didaktická matica a teória distributívneho skefoldingu ako metóda formovania poznávacej činnosti žiakov

Matica priorít, známa aj ako Eisenhowerova matica, je nástroj na stanovenie dôležitosti úloh na základe ich váhy a súrnosti. Donald Rumsfeld ako minister obrany USA v roku 2002 prispôsobil túto maticu a navrhol, aby sa strategické rozhodovanie vnímalo ako prechod štyrmi kognitívnymi fázami: (1) „neviem, čo neviem“, (2) „viem, čo neviem“, (3) „viem, čo viem“, (4) „neviem, že viem“. Pôvodný citát D. Rumsfelda znel: „Existujú známe vedomosti; sú veci, o ktorých vieme, že ich vieme. Vieme tiež, že existujú známe neznáme; to znamená, že vieme, že existujú veci, ktoré nevieme. Existujú však aj neznáme neznáme - tie, o ktorých nevieme, že o nich nevieme.“ [Rumsfeld, 2002] Táto koncepcia sa následne stala všeobecne uznávanou v riadení podnikov, politike a vojenskej stratégii na identifikáciu a riešenie neistôt a rizík. V teórii vzdelávania vo všeobecnosti, a najmä v teórii fyzikálneho vzdelávania, sa však Rumsfeldova matica predtým nevyužívala.

Prispôsobme Rumsfeldovu maticu teórii vyučovania riešenia problémov vo fyzike a doplňme ju prvkami skefoldingu s cieľom vytvoriť individuálnu vzdelávaciu cestu prispôsobenú potrebám žiaka s dosiahnutím novej úrovne vedomostí aj kognitívnych kompetencií.

Za vstupnú fázu budeme považovať počiatočný bod v tvare „neviem, čo neviem“ (obr.1). Môže to byť nevedenie o existencii fotónov, atmosférického tlaku, magnetického poľa v blízkosti vodiča s prúdom. Kvadrant neviem - neviem: tieto riziká predstavujú základné predpoklady rozvoja kognitívneho záujmu, nepredvídateľné a nepoznané prvky, ktoré vytvárajú najhlbšiu neistotu a formujú trajektóriu budúceho kognitívneho rozvoja. Ich nepredvídateľnosť žiakom naznačuje, že je tu vedecké objavovanie, že existuje niečo, čo nepoznáme alebo čomu nerozumieme. Ponorenie do stavu „viem, že neviem“ sa uskutočňuje štandardným spôsobom: vytvorením problémovej situácie, kognitívneho konfliktu alebo v rámci diskusie napr.: ako fungujú solárne články („fotoelektrický jav“), prečo sa nedá uvariť vajce v horách („atmosférický tlak“), prečo sú kovové piliny pri vodiči s prúdom usporiadané do kruhu?...



Obr. 1: Rumsfeldova matica doplnená o teóriu skefoldingu (zdroj: Autor)

Po uvedomení si existencie neznámej oblasti sa neznámy kvadrant transformuje na známe neznáme. Tento kvadrant zahŕňa oblasti, o ktorých študent teraz vie, že existujú, ale stále nemá úplné pochopenie zákonov, ktoré vysvetľujú pozorované javy. Tieto oblasti sa často nazývajú „medzery“. Tieto medzery si vyžadujú ďalšie štúdium, experimenty a dodatočný matematický aparát. Prítomnosť takýchto medzier je navyše charakteristická tak pre hľadanie v oblasti vzdelávania, ako aj pre vedecké hľadanie vo všeobecnosti. Oboznamovanie sa s neznámymi poznatkami vzďaľuje žiaka od úplného poznania okolitého sveta a vytvára odrazový mostík pre ďalší poznávací skok.

V tretej algoritmickej fáze sa Rumsfeldova didaktická matica rozvetvuje (obr. 1) na dve oblasti: slabo známa neznáma a dobre známa neznáma. Do prvého štádia patria žiaci, ktorí majú povrchné predstavy o predmete skúmania, ale už si uvedomujú, že predtým získané vedomosti alebo životné skúsenosti nestačia na riešenie úlohy (videli solárne panely, ale nerozumejú, ako fungujú). Na druhom stupni sú žiaci, ktorí sa predmetom štúdia zaoberali už skôr, ale teraz vidia predmet v inej podobe, vedomosti je potrebné prehĺbiť, objasniť (vedia, že základom solárnych panelov je premena svetelnej energie na elektrickú, poznajú zákony elektrického prúdu, ale nepoznajú Einsteinovu teóriu vysvetľujúcu fotoelektrický jav z kvantového hľadiska). Prechod z prvej úrovne je možný do prvého stupňa druhej úrovne a potom do druhej alebo hneď do druhej. Nie je však vylúčený ani opačný prechod: z druhého do prvého. Aby tento proces nebol taký cyklický a aby sa skrátil čas vzdelávacieho hľadania, mal by učiteľ znížiť počet stupňov voľnosti žiaka, t. j. obmedziť vzdelávacie hľadanie na konkrétne otázky, pripravené výskumy, virtuálne alebo reálne experimenty. Zároveň by mal učiteľ v triede využívať vopred pripravené materiály s plánovanou podporou a jej utlmovaním – inštrumentálny skefolding - ako aj viesť žiakov priamo v priamej interakcii v triede. Systém týchto dvoch typov pomoci opisuje teória distributívneho skefoldingu. Proces poznávania učiva v tejto fáze by mal byť nenápadne riadený. V tomto štádiu je pri učení sa nových pojmov dôležité, aby žiaci začínali s úzkym súborom parametrov a dobre definovanou štruktúrou úlohy, aby sa znížila kognitívna záťaž. Keď materiál pochopia, učebné úlohy sa stávajú zložitejšími zavedením ďalších pojmov a rozšírením kontextu. Týmto spôsobom učiteľ najprv obmedzuje študenta vytvorením jasného rámca a potom postupne odstraňuje obmedzenia a dáva študentovi čoraz väčšiu samostatnosť pri riešení komplexných problémov.

Fáza „viem, že viem“ (obr. 1) transformuje kvadrant „viem čo neviem“ do stavu „viem čo viem“: tato oblasť obsahuje údaje, ktoré sú teraz pochopené. Žiak sa dostáva do čiastočne falošnej situácie, v ktorej sa mu zdá, že kognitívny konflikt je úplne vyčerpaný. V tomto bode je nevyhnutné vytvoriť novú úroveň kognitívneho konfliktu tým, že sa ponúknu úlohy s rôznou úrovňou náročnosti. Neznáme-neznáme: položky v tejto oblasti sú otázky, ktoré sú nevedome zakotvené v našom vedomí alebo skúsenosti, ale často sú ignorované alebo neobjavené, niekedy sa považujú za «tiché» znalosti používané v každodennom živote. Prechod novej úrovne z kvadrantu neznáme-neznáme do kvadrantu známe-neznáme prebieha od nenápadne kontrolovaného až po úplne nezávislý, t. j. počet navádzajúcich otázok a nápovedí učiteľa sa od úlohy k úlohe postupne sa znižuje až na nulu. V tomto momente sa žiak dostáva do poslednej fázy didaktickej matice „neviem, že viem“ (obr.1), t. j. vytvára sa skúsenosť s poznávaním neznámeho, rozvíja sa kognitívna kompetencia žiaka, čo je cieľom učenia sa vo všeobecnosti. Najvyšším cieľom takejto práce je dosiahnuť úroveň „chcem vedieť viac“ a akceptovať situáciu existencie formátu „neviem čo neviem“ ako nevyhnutnú podmienku poznávania sveta.

Práve tento prístup umožňuje individualizovať proces učenia v závislosti od poznávacích schopností žiakov a zamerania triedy.

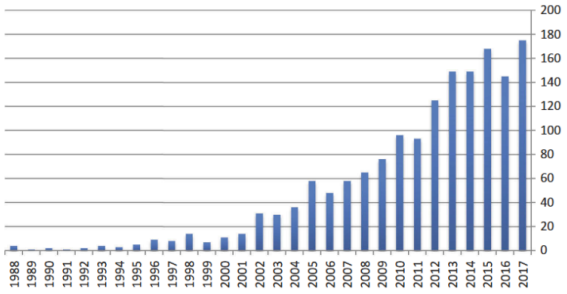
3 Fyzikálne úlohy ako nástroj realizácie teórie skefoldingu v rámci Rumsfeldovej matice

Koncepcia zóny proximálneho vývinu (ZPV), ktorú navrhol L. S. Vygotský, sa stala základom pre pochopenie dynamiky učenia. Vygotský definoval ZPV ako rozdiel medzi aktuálnymi a potenciálnymi schopnosťami žiaka dosahovanými s podporou

dospelého alebo kompetentnejšieho rovesníka [Vygotsky, 1978]. Tento princíp sa stal základom stratégie skefoldingu (angl. scaffolding) , ktorú vyvinul D. Bruner, D. Wood a G. Ross v roku 1976. Skefolding je postupná pedagogická podpora, ktorá umožňuje žiakovi sústrediť sa na kľúčové prvky úlohy a postupne rozvíjať samostatnosť [Wood et al., 1976].

Dôležitú úlohu pri vývoji koncepcie skefoldingu zohral výskum fyziológa N. A. Bernsteina v oblasti motorickej regulácie. Ukázal, že osvojenie si nových zručností si vyžaduje najprv obmedzenie stupňov voľnosti a potom ich postupné zvyšovanie [Bernshtein, 1967]. Tento princíp sa uplatňuje aj pri učení: na začiatku sa študentom ponúkajú jasne štruktúrované úlohy s minimálnou kognitívnou záťažou a potom sa postupne zvyšuje ich náročnosť.

Hoci sa koncept skefoldingu objavil už v minulom storočí, záujem oň v posledných rokoch rýchlo rastie, o čom svedčí aj štatistika publikácií v databáze Scopus (obr. 2) len v oblasti spoločenských vied a psychológie [Shvarts and Bakker, 2019].



Obr. 2: Počet publikácií, v ktorých sa v názve alebo kľúčových slovách používa termín skefolding podľa databázy Scopus. *Vyhľadávanie bolo obmedzené na tematické oblasti spoločenských vied a psychológie.*

Súčasný výskum, vrátane práce Van de Pol, potvrdzuje účinnosť skefoldingu vo vyučovaní aj STEM predmetov. Vo svojej práci identifikovala tri kľúčové charakteristiky tejto metódy [van de Pol et al., 2010]:

1. **Prispôsobivosť (Contingency)** - úroveň podpory sa mení v závislosti od aktuálnych vedomostí žiaka.
2. **Stlmovanie (Fading)** - keď študent zvládne látku, vonkajšia podpora sa znižuje, čo podporuje samostatnosť.
3. **Odovzdanie zodpovednosti (Transfer of responsibility)** - študent preberá plnú zodpovednosť za úlohu.

Edukačná psychológia identifikuje niekoľko typov skefoldingu vrátane inštrumentálneho a distributívneho. Inštrumentálny skefolding zahŕňa používanie špeciálne navrhnutých úloh s nápovedami a navádzajúcimi otázkami, ktoré pomáhajú žiakovi riešiť úlohy krok za krokom [Belland, 2017]. Takéto úlohy môžu obsahovať čiastočné riešenia alebo vedúce položky v zátvorkách, čo uľahčuje zvládnutie náročného materiálu. Tento prístup bude účinný ako súčasť prechodu z úrovne „viem, že neviem“ Rumsfeldovej matice na úroveň „viem, že viem“. Distributívne skefoldovanie nadväzuje na aplikáciu týchto úloh v triede s postupným znižovaním podpory, kde učiteľ aktívne uľahčuje žiakom adaptáciu na čoraz komplexnejšie učebné prostredie. Postupné ubúdanie vonkajšej pomoci podporuje rozvoj samostatnosti pri riešení problémov. Tento prístup zodpovedá prechodu z úrovne „viem, čo viem“ na úroveň „neviem, čo viem“.

V rámci implementácie Rumsfeldovej matice metódami skefoldingu máme teda tieto kľúčové fázy:

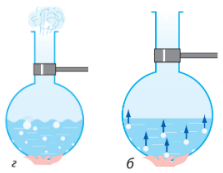
1. Počiatočný stupeň: **„neviem, čo neviem“**
2. Prechod do stavu **„viem, čo neviem“.**
3. Prechod do stavu **„viem, čo viem“**
4. Didaktický návrat do stavu **„neviem, čo neviem“**
5. Úroveň **„neviem, že viem“** a potenciálna snaha **„chcem vedieť viac“.**

V tabuľke sú uvedené možné príklady typov učebných úloh a príklady ich realizácie na jednotlivých úrovniach kognitívneho vývoja.

Tab.1: Príklady štruktúrovaných úloh s využitím Rumsfeldovej didaktickej matice a teórie inštrumentálneho skefoldingu *(Niektoré úlohy sú prevzaté zo zbierok Rymkevicha A.P., Bar'yakhtara V.H., K.Velmovskej a V.Lapitkovej)*

Počiatočný stav: **„neviem, čo neviem“** prechod do stavu → **„viem, čo neviem“** vytvorením kognitívneho konfliktu, problémovej situácie alebo v rámci diskusie	
Téma školského kurzu fyziky	Príklad úlohy/otázky
Zákony sčítania vektorov posunutí a rýchlostí	Ak ste niekedy preplávali rieku s prúdom, mohli ste si všimnúť zvláštnu vec: plávate akoby rovno, ale ocitnete sa oveľa nižšie po prúde. Prečo sa to deje, ak ste sa neodchýlili od kurzu? A teraz si predstavte, že ste sa rozhodli zísť po eskalátore, ktorý ide dole. Logicky, že sa dostanete rýchlejšie. Ale tu je otázka: ak sa pohybujete nadol po pohyblivom eskalátore, ako určíte svoju rýchlosť a vzdialenosť? Čo sa stane, ak pôjdete nahor po eskalátore, ktorý sa pohybuje nadol? Prečo pri rovnakých rýchlostiach môžete zostať na mieste? Zdá sa to nelogické:

	pohybujete sa, ale neposúvate sa z miesta.
Vyparovanie a kondenzácia	V horúci letný deň je vzduch rozpálený a slnko pečie. Prečo teda, keď vyjdeme z teplej vody, náhle pocítime chlad, hoci je okolo nás teplejšie ako vo vode? Tento efekt sa zdá byť rozporný: veď sme sa ocitli v teplejšom prostredí, a pritom cítime chlad. Podobný paradox možno pozorovať aj u psov – v horúčave vystrkujú jazyk a často dýchajú. Ale ako im to pomáha ochladiť sa, keď je okolo nich horúčava? Ďalšia otázka: ak budeme vodu ohrievať stále viac, bude stále teplejšia? Je možné dosiahnuť jej teplotu napríklad 200°C za bežných podmienok? Alebo existuje nejaká hranica?
Základné princípy molekulovo-kinetickej teórie	Už od čias Demokritosa z Abdér ľudia verili, že látky sa skladajú z najmenších, nedeliteľných častíc – atómov. Súčasní žiaci vedia, že atómy a molekuly skutočne existujú, ale vnímajú ich ako abstrakciu: niečo tak malé, že si to nedokážu predstaviť. Kognitívny konflikt však vzniká, keď sa žiak pokúsi túto vedomosť porovnať s realitou: ako je možné hovoriť o niečom, čo nie je viditeľné ani pod najsilnejším mikroskopom? Ako je možné zmerať veľkosť niečoho, čo je „neviditeľné“? A ak je v jednej pohári vody viac molekúl ako ľudí na Zemi, ako môžu vedci vôbec vypočítať tento počet?
Vlnová optika	Starší žiaci zvyčajne vedia, že svetlo sa šíri priamo. Táto predstava je podložená každodennými pozorovaniami: lúč baterky, tieň od predmetu, slnečné svetlo prenikajúce cez štrbinu – to všetko sa zdá byť potvrdením geometrickej optiky. Preto si žiaci vytvárajú logickú, ale neúplnú predstavu: ak osvetlíme úzku štrbinu, za ňou by sa na obrazovke mala objaviť svetlá škvrna zodpovedajúca tvaru otvoru. Pri skutočnom experimente – napríklad pri pokuse s jednou alebo dvoma štrbinami – však pozorujú nielen škvrnu, ale interferenčný obraz: striedajúce sa svetlé a tmavé pruhy. Tento neočakávaný a na prvý pohľad nelogický jav je v rozpore s existujúcimi predstavami a vyvoláva kognitívny konflikt.
Protónovo-neutrónový model atómového jadra	Žiaci stredných škôl vedia, že atóm sa skladá z kladne nabitého jadra a záporných elektrónov a že opačne náboje sa musia priťahovať. Táto vedomosť v nich vytvára logickú, ale nesprávnu predstavu: elektróny by mali okamžite spadnúť na jadro. V praxi sa to však nedeje – a práve tento rozpor medzi očakávaným a skutočným vyvoláva kognitívny konflikt, ktorý podnecuje žiakov hľadať vysvetlenie stability atómu.
Rádioaktivita	Na hodinách chémie a fyziky sa žiaci dozvedia, že každý prvok je definovaný počtom protónov v jeho jadre: olovo má 82, zlato 79. Vytvára sa tak stabilná predstava, že jeden prvok nemožno premeniť na iný. To však odporuje myšlienke, o ktorú sa snažili alchymisti – premeniť olovo na zlato. A tu vzniká otázka: je naozaj nemožná transformácia jedného prvku na druhý? V skutočnosti v jadrovej fyzike existuje možnosť zmeniť zloženie atómového jadra, a teda – teoreticky – premeniť jeden prvok na druhý, aj keď s obrovskými energetickými nákladmi.
Jadrové reťazové reakcie	Žiaci vyšších ročníkov vedia, že jadrová energia je silný zdroj energie a často vnímajú štiepenie atómov ako riadený a kontrolovaný proces. Tu však vzniká kognitívny konflikt: ak je to skutočne kontrolovateľný proces, prečo došlo k havárii v Černobyle? Ako sa ukázalo, za určitých podmienok môže reťazová reakcia vymknúť spod kontroly. Pri každom štiepení atómu uránu sa uvoľňujú neutróny, ktoré môžu iniciovať nové štiepania. Ak počet nových štiepaní v každom cykle presiahne jednotku, reakcia sa stáva nekontrolovateľnou – dochádza k exponenciálnemu nárastu počtu rozpadov. Je jadrová energia skutočne bezpečná?
Prechod **„viem, čo neviem“ → „viem, čo viem“** (po vysvetlení novej látky učiteľom, práca v skupinách, používanie internetu, neurónových sietí...).	
Téma školského kurzu fyziky	Príklad úlohy/otázky
Zákony sčítania vektorov posunutí a rýchlostí	1. Loď s rýchlosťou 4,5 m/s pláva proti prúdu rieky s rýchlosťou 0,5 m/s Určte jej rýchlosť vzhľadom na breh. Akú vzdialenosť

	prejde od brehu za 5 minút? 2. Okrídlené semienko nadobudne konštantnú rýchlosť pádu 0,3 m/s takmer okamžite po tom, ako začne padať z vrcholu sekvoji. Ako ďaleko od základne stromu semeno spadne, ak vietor fúka vodorovne, jeho rýchlosť je 1 m/s a výška sekvoji je 50 m? Aké je posunutie semienka vzhľadom na zemský povrch?
Vyparovanie a kondenzácia	Experimentálna úloha: ako a prečo kvapalina vrie? Žiakom ponúkneme jednoduchý experiment - varenie vody v pohári. • Prečo sa bublinky objavia najskôr na stenách a dne banky? Aké plyny obsahujú? Prečo niektoré bublinky pri stúpaní zmiznú v horných vrstvách kvapaliny? • Čo sa stane s veľkosťou bublín, keď sa teplota hornej a dolnej vrstvy vyrovná? Prečo? • Čo sa deje s veľkosťou bublín, keď sa teploty horných a spodných vrstiev vyrovnajú? Prečo? • Čo sa stane, keď bubliny dosiahnu hladinu vody? • Od čoho závisí teplota varu vody? 
Základné princípy molekulovo-kinetickej teórie	1. Určite relatívnu molekulovú hmotnosť: a) oxidu uhličitého (CO_2); metánu (CH_4); c) vody (H_2O); d) oxidu kremičitého (SiO_2); e) vodíka (H_2). 2. Porovnajte počet molekúl v 1 móle vody a v 1 móle kyslíka. 3. Určte molárnu hmotnosť molekuly cukru ($C_{12}H_{22}O_{11}$).
Vlnová optika	1. V určitom bode priestoru sa pretínajú koherentné vlny s fázovým posunom 2,8 μm. Aký je výsledok interferencie v tomto bode, ak je vlnová dĺžka 560 nm?
	2. Do určitého bodu dopadajú dve koherentné svetelné vlny s fázovým posunom 1,2 μm. Vlnová dĺžka vo vákuu je 600 nm. Určite, či dochádza k zosilneniu alebo oslabeniu svetla v bode, ak sa svetlo šíri vo a) vákuu, b) vzduchu, c) vode, d) diamante.
Protónovo-neutrónový model atómového jadra	1. Koľko protónov a koľko neutrónov je v jadrách molybdénu $^{96}_{42}$Mo, rehnia $^{186}_{75}$Re a dubia $^{270}_{105}$Db? 2. Ako určiť počet elektrónov v atóme? 3. Jadro atómu určitého chemického prvku má 31 protónov a 39 neutrónov. Čo je to za prvok?
Rádioaktivita	1. Radónové jadro $^{220}_{86}$Rn emitovalo α-časticu. Na jadro akého prvku sa premenilo Radónové jadro? 2. Jadro ktorého prvku vzniklo z jadra izotopu kobaltu $^{60}_{27}$Co po uvoľnení β-častice? 3. Šesť α a dve β-rozpady viedli k vzniku jadra olova-209. Určte počiatočný prvok reakcie.
Jadrové reťazové reakcie	1. K akým procesom dochádza v dôsledku absorpcie neutrónov jadrom uránu? 2. Ako zistíte, koľko energie sa uvoľní pri akejkoľvek jadrovej reakcii? 3. Určte energetický výstup jadrovej reakcie, pri ktorej ako prvý vznikol neutrón. 4. Koľko energie sa uvoľní pri štiepení všetkých atómov U-235 obsiahnutých v 1,95 kg uránu? Predpokladajte, že pri každom štiepení sa uvoľní 200 MeV energie.
Didaktický návrat **„viem, čo viem“ → „neviem, čo neviem“** s postupným oslabovaním pomoci učiteľa (posledná úloha sa rieši samostatne)	
Téma školského kurzu fyziky	Príklad úlohy/otázky
Zákony sčítania vektorov posunutí a rýchlostí	1. Medzi dvoma bodmi vzdialenými od seba 100 km sa loď plaví po rieke a túto vzdialenosť prekoná za 4 hodiny, ak ide s prúdom, a za 10 hodín, ak ide proti prúdu. Nájdite rýchlosť prúdu a rýchlosť lode vzhľadom na vodu. 2. Eskalátor sa pohybuje rýchlosťou 0,75 m/s. Za aký čas vystúpi cestujúci na 50 m

	dlhý eskalátor, ak kráča v smere jeho pohybu rýchlosťou 0,25 m/s vzhľadom na pás pohyblivých schodov?
Vyparovanie a kondenzácia	1. V tlakovom hrnci voda vrie pri teplote približne 120°C. Hrniec je uzavretý pokrievkou, ktorá má ventil, ktorý uvoľňuje paru pri tlaku od 90 kPa. Vysvetlite, ako hrniec funguje. 2. Bude voda v pohári plávajúcom vo vriacej vode vrieť? 3. Jedna kanvica je naplnená surovou vodou a druhá prevarenou vodou rovnakej hmotnosti a teploty. Voda v ktorej kanvici sa uvarí ako prvá? Prečo?
Základné princípy molekulovo-kinetickej teórie	1. Ako sa častice pohybujú? Ako zmerať rýchlosť častíc? Čo je príčinou Brownovho pohybu? Prečo sa rýchlosť Brownovej častice zvyšuje s rastúcou teplotou kvapaliny? 2. Prečo oxid uhličitý, ktorý vydychujeme, nezostáva v našej blízkosti, ale rozptyľuje sa v priestore? 3. Zistilo sa, že cez steny kapilár v ľudskom tele sa za minútu presunie 60 litrov tekutiny. Aký fyzikálny jav je za to zodpovedný?
Vlnová optika	1. Je možné pozorovať interferenciu svetelných vĺn, ktoré vyžarujú dve žiarovky? Dve sviečky? Dve laserové ukazovátka? 2. Ako vysvetliť dúhové pruhy, ktoré sa pozorujú v tenkej vrstve benzínu na povrchu vody? 3. Do určitého bodu priestoru prichádzajú koherentné svetelné vlny s fázovým rozdielom 2 μm. Zosilnenie alebo oslabenie svetla nastáva v tomto bode, ak je dĺžka vlny: a) 600 nm; b) 400 nm;
Protónovo-neutrónový model atómového jadra	1. Ako vypočítať väzbovú energiu atómového jadra? 2. Ako rozumiete tomu, prečo pri niektorých jadrových reakciách dochádza k absorpcii energie, zatiaľ čo pri iných sa energia uvoľňuje? 3. Pomocou diagramu závislosti mernej väzbovej energie od hmotnostného čísla určte, či rozpad jadra zloženého z 240 nukleónov bude sprevádzať uvoľňovanie alebo pohlcovanie energie. Svoju odpoveď zdôvodnite.
Rádioaktivita	1. Je možné zistiť, ktoré jadro v určitej rádioaktívnej látke sa rozpadne ako prvé? Ktoré sa rozpadne ako ďalšie? Ktoré sa rozpadne ako posledné? 2. Ak je počet atómov uránu-238 a rádia-226 rovnaký, ktorá vzorka vyžiari za 1 s viac častíc α?
Jadrové reťazové reakcie	1. Ako môže prebiehať reťazová jadrová reakcia? Prečo nebola pozorovaná pri pokusoch s prírodným uránom? Čo je potrebné urobiť, aby reakcia prebehla? 2. Ako sa dá jadrová energia premeniť na iné druhy energie (teplo, elektrina)? 3. Čo by sa stalo, keby ste zobrali jadrá izotopov ľahkých prvkov, napríklad deutéria a trícia, a spojili ich?

Kognitívny skok **„neviem, čo neviem“ → „neviem, že viem“**	
Téma školského kurzu fyziky	Príklad úlohy/otázky
Zákony sčítania vektorov posunutí a rýchlostí	1. Čo znamená relatívnosť mechanického pohybu? 2. Aké vlastnosti mechanického pohybu sa menia pri prechode z jednej vzťažnej sústavy do druhej? 3. Ktoré zostávajú nezmenené? Uveďte príklady, ktoré potvrdzujú, že pohyb a pokoj sú relatívne.
Vyparovanie a kondenzácia	1. Čo sa nazýva vyparovanie? Aké sú vlastnosti vyparovania? 2. Aké faktory určujú rýchlosť vyparovania? Uveďte príklady. 3. Čo je to stav dynamickej rovnováhy? 4. Ktorá para sa nazýva nasýtená?
Základné princípy molekulovo-kinetickej teórie	1. Z akých častíc sa skladá molekula? Z čoho sa skladá atóm? 2. Je pravda, že rýchlosť pohybu molekúl určitého plynu pri rovnakej teplote je rovnaká? 3. Aké sú rozdiely medzi amorfným a kryštalickým skupenstvom látok?
Vlnová optika	1. Aké vlny sa nazývajú koherentné?

	2. Prečo je v optickom rozsahu ťažké vytvoriť zdroje koherentných vĺn? 3. Prečo majú tenké vrstvy pri určitých podmienkach dúhové sfarbenie?
Protónovo-neutrónový model atómového jadra	1. Z akých častíc sa skladá atómové jadro? 2. Ako určiť počet protónov a neutrónov v jadre? Uveďte príklad. 3. Čo je to hmotnostný úbytok a ako ho určiť? Definujte väzbovú energiu. Ako ju možno vypočítať? 4. Prečo sa energia uvoľňuje pri syntéze ľahkých jadier a pri štiepení ťažkých jadier?
Rádioaktivita	1. Ako bol objavený fenomén rádioaktivity? 2. Ako sa chrániť pred rádioaktívnym žiarením? 3. Čo sa deje s jadrom atómu pri vyžarovaní α-častíc? β-častíc?
Jadrové reťazové reakcie	1. Aké procesy prebiehajú v dôsledku absorpcie neutrónov jadrom uránu? 2. Môže v prírodnom uráne prebiehať jadrová reťazová reakcia? Prečo? 3. Odkiaľ získavajú hviezdy energiu?

Prechod „viem, čo neviem“ → „viem, čo viem“ didaktický návrat „viem, čo viem“ → „neviem, že neviem“ s postupným slabnutím pomoci učiteľa a kognitívny skok „neviem, čo neviem“ → „neviem, že viem“ sa realizujú pomocou inštrumentálneho a distributívneho skefoldingu. V procese takéhoto kognitívneho rozvoja na vyučovacích hodinách žiaci riešia výpočtové úlohy, vykonávajú reálne a virtuálne experimenty, formulujú hypotézy, overujú ich indukciou, dedukciou alebo abdukciou, následne analyzujú výsledky a vyvodzujú závery, o ktorých diskutujú v skupinách [Demkanin, 2018]. To im umožňuje naučiť sa jasne vyjadrovať, pracovať v skupinách (kooperatívne činnosti sú jednou z kľúčových vlastností skefoldingu) a prijímať spätnú väzbu od rovesníkov aj učiteľa [Alanazi et al., 2025].

Na všetkých úrovniach didaktickej matice je možné plne realizovať všetky kľúčové vlastnosti skefoldingu. V poslednej fáze sa zodpovednosť za úlohu plne prenáša na žiaka, čím sa podporuje nezávislosť a kritické myslenie a žiak sa môže dostať na novú úroveň metakognitívneho sebauvedomenia „chcem vedieť viac“.

4 Projektovanie a riešenie úlohy na základe Rumsfeldovej matice ako metodický príklad prechodu na úroveň „chcem vedieť viac“

Navrhnutý model - Rumsfeldovu vzdelávaciu maticu - premietnime na fyzikálny problém vyššej náročnosti, ktorému sa študenti spravidla vyhýbajú pre jeho neštandardnosť a potrebu uplatniť teoretické vedomosti aj logické myslenie. Ide o úlohu o Matifu a trení nite na valci: niť sa ovíja okolo valca a je potrebné určiť podmienky rovnováhy s prihliadnutím na sily trenia, ťahu a obvodové uhly. Takéto problémy presahujú štandardné školské algoritmy riešenia a vyžadujú si vytvorenie individuálnej stratégie myslenia. Práve tu je dôležité použiť Rumsfeldovu vzdelávaciu maticu, ktorá umožňuje žiakom rozpoznať svoju úroveň neznalosti a prejsť z jednoduchého „viem“ alebo „neviem“ do pozície „uvedomujem si, čo neviem, a chcem na to prísť“.

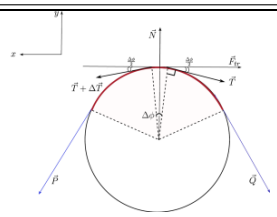
Aplikácia popísaného algoritmu kontexte tejto úlohy nám umožňuje organizovať proces učenia ako postupnosť vedomých kognitívnych prechodov: od neuvedomenej nevedomosti k formulovaniu otázok, hľadaniu chýbajúcich pojmov (napr. Amontonovho-Coulombovho zákona, pojmov "napnutie vlákna" a "obvodový uhol"), objasňovaniu podmienok použiteľnosti vzorcov a analýze hraníc aplikovateľnosti modelu. Takýto metodický model prispieva nielen k riešeniu konkrétneho problému, ale aj k formovaniu poznávacej činnosti, rozvíja zručnosť klásť otázky k látke a zvyšuje záujem o učenie - žiak začína vnímať komplexnú úlohu nie ako zdroj obáv, ale ako príležitosť „dozvedieť sa viac“.

V tab. 2 je uvedená projekcia Rumsfeldovho didaktického modelu na semináre fyziky v podľa metód skefoldingu. Plánovaný čas vyučovacej hodiny je 90 min.

Tab.2: Príklad realizácie časti hodiny pre maturitný seminár z fyziky podľa navrhnutej adaptovanej matici Rumsfelda

Počiatočný stav: **„neviem, že neviem“** prechod do stavu → **„viem, že neviem“** vytvorením kognitívneho konfliktu, problémovej situácie alebo v rámci diskusie	
Učebný materiál	Metodický komentár v rámci teórie skefoldingu
Žiaci čítajú úryvok z románu Julesa Verna o hrdinskom čine Matifu, kde hrdina drží potápajúcu loď pomocou jedného lana [Verne, 1999]. Vzniká pochybnosť: ako	Počiatočná fáza práce s úlohou je zámerne vytvorená prostredníctvom citovo bohatého literárneho kontextu, ktorý umožňuje

mohol človek zastaviť takú hmotnosť? To vyvoláva kognitívny konflikt, pretože intuitívne sa zdá nemožné udržať loď takej veľkosti len pomocou rúk [Perelman, 1991]. Celé tajomstvo spočíva v ovinutí lana okolo opory. Pri tom vznikalo trenie, ktoré bránilo zostupu člna, ale vzniká otázka: koľko závitov lana musel Matifu stihnúť urobiť, aby zastavil tragédiu, ktorá sa odohrávala pred očami celého mesta? Teoreticky zvážme podmienky rovnováhy bremena, ktoré je prehodené cez valec.	žiakom ponoriť sa do situácie neistoty a poznávacej zápletky. Čítanie úryvku z románu Julesa Verna vzbudzuje živý záujem žiakov, ale zároveň vytvára kognitívny konflikt: zjavná fyzická nemožnosť udržať loď len rukami je v rozpore s opisovaným hrdinským činom. Práve v tomto momente žiaci prechádzajú od „neviem, že neviem“ k „viem, čo neviem“ - vzniká kognitívny konflikt: ako je to vôbec možné z hľadiska fyziky? Tento moment sa stáva východiskovým bodom pre spustenie zmysluplného učenia a vyvolania záujmu o skúmanie.
Prechod **„viem, že neviem“ → „viem, že viem“** (po vysvetlení novej látky učiteľom, práca v skupinách, používanie internetu, neurónových sietí...).	
Učebný materiál	Metodický komentár v rámci teórie skefoldingu
Teoretická analýza úlohy: Nakreslime valček a niť, ktorá udržiava náklad v rovnováhe. Skúmajme extrémny prípad rovnováhy pre elementárnu časť tejto nite. Označme uhol $\Delta\phi$. Po dotyčnice ku kružnici zameriame sily $\vec{T}$ a $\vec{Q}$, a taktiež zobrazíme silu reakcie podložky $\vec{N}$. Silu trenia označíme $\overrightarrow{F_{tr}}$ a zameriame ju kolmo na silu reakcie podložky. Napíšeme rovnicu rovnováhy. Z podobnosti trojuholníkov vyberieme rovnaké uhly a označíme ich ako na obrázku. Napíšeme rovnicu projekcií na osi (Os x smeruje doľava a os y kolmo nahor). Potom je súčet projekcií síl na osi: $0x: (T+\Delta T)\cos\frac{\Delta\varphi}{2} - T\cos\frac{\Delta\varphi}{2} - F_{tr} = 0$ $Oy: N - T\sin\frac{\Delta\varphi}{2} - (T+\Delta T)\sin\frac{\Delta\varphi}{2} = 0$ Zjednodušíme výrazy a vyjadríme z rovníc N: $$N = T\Delta\varphi$$	Ďalším krokom je mäkké (soft) skefoldovanie: učiteľ vyzve žiakov, aby prešli od umeleckého opisu k fyzikálnemu modelu, pričom im predstaví pojem trenia a princíp pôsobenia lana omotaného okolo opory. Pritom sa konkrétne neposkytuje žiadne hotové vysvetlenie - žiaci sú vyzvaní, aby sformulovali vlastnú hypotézu o tom, aké fyzikálne sily mohli Matifovi „pomôcť“, a potom prejdú ku kvantitatívnej analýze. Položením výskumnej otázky - koľko otočení lana bolo potrebných na udržanie lode? - učiteľ vedie žiakov k nájdeniu a použitiu Eulerovho vzorca pre trenie lana, čo im umožňuje previesť umeleckú metaforu do exaktného modelu a dokončiť proces

 Spomenieme si, že $$\Delta T = F_{tr} = f.N$$ B tomto prípade predpokladáme malé veľkosti uhla, preto môžeme použiť tieto výrazy: $$\cos\frac{\Delta\varphi}{2} = 1, \sin\frac{\Delta\varphi}{2} = \frac{\Delta\varphi}{2}$$ $$\Delta T\frac{\Delta\varphi}{2}\ zanedbateľne$$ Prejdeme k limitnej hodnote tým, že rozdelíme obe strany rovnice na $\Delta\varphi$ a vezmeme integrál. Hranice integrácie budeme brať z toho, že sila sa mení od Q do P a uhol od 0 do α. $$\int_P^Q \frac{dT}{T} = \int_0^\alpha f.d\varphi$$ $$\ln\frac{P}{Q} = f.\alpha$$ Zlogaritmujeme obe strany rovnice a vyjadríme silu Q; $$\frac{P}{Q} = e^{f\alpha}$$ $Q = Pe^{-f\alpha}$ (Trenie niti na valci. Eulerova formula) Po analýze vstupných údajov môžeme konštatovať, že $\vec{P} = m\vec{g}$. Teda $\boldsymbol{Q = mg.e^{-f\alpha}}$, kde Q – sila, ktorou pôsobil Matifu f - koeficient trenia $\alpha = \frac{l}{R}\ [\alpha] = rad$ l- dĺžka nite kontaktujúcej s povrchom R - polomer valca Môžeme si všimnúť, že $\alpha = 2\pi$n, n – počet otáčok okolo valca. Teda $Q = mg.e^{-2\pi fn}$	realizácie: od prekvapenia k pochopeniu. V rámci pedagogickej diskusie kladie učiteľ tieto otázky: 1. Akú úlohu pri zastavení lode zohrala skutočnosť, že lano bolo omotané okolo opory? Čo sa dialo medzi lanom a potrubím? 2. Viete si predstaviť situáciu, v ktorej by človek s bežnou fyzickou silou mohol dosiahnuť rovnaký účinok ako Matifu? Od čoho to závisí? 3. Aké sily pôsobia na lano omotané okolo valca? Čo mu bráni vo voľnom posúvaní? 4. Myslíte si, že je možné vypočítať počet otáčok lana, potrebných na udržanie určitého zaťaženia? Od čoho by tento počet závisel?
Didaktický návrat **„viem, čo viem“ → „neviem, čo neviem“** s postupným oslabovaním pomoci učiteľa	
Učebný materiál	Metodický komentár v rámci teórie skefoldingu
Experimentálna časť: Závislosť ťahovej sily vlákna od počtu závitov nite. **Cieľ:** Zistiť, ako závisí veľkosť ťahovej sily potrebnej na udržanie	Experiment v tejto fáze je ilustráciou fázy „viem, čo viem“ - žiaci sú presvedčení o svojich vedomostiach o trecích silách, zákonoch

zaťaženia od počtu závitov vlákna okolo valcového telesa (sklenenej skúmavky) v podmienkach školského fyzikálneho experimentu. **Hypotéza**: S rastúcim počtom závitov vlákna okolo skleneného valca bude ťahová sila potrebná na udržanie rovnováhy klesať exponenciálne. **Pomôcky:** Sklenená skúmavka, stojan s uchyteniami, odolné vlákno, závažie, senzor sily (napr. 0663i, max. 5 N), pravítko. **Postup:** 1. Sklenenú skúmavku upevníme vodorovne do stojana vo výške pracovnej plochy. 2. Na jeden koniec vlákna pripevníme závažie. 3. Druhý koniec vlákna pripojíme k senzoru sily. 4. Pomaly a opatrne ťaháme za vlákno pomocou senzora, kým sa závažie nezačne pohybovať. 5. Zaznamenáme pomocou silomeru silu Q, ktorou sme prekonali trenie a uviedli závažie do rovnomerného pohybu. 6. Zopakujeme meranie pre rôzne počty závitov vlákna: 1, 1,125, 1,25, ... 2,125 a zaznamenajme do tabuľky. **Očakávané výsledky:** Graf závislosti ťahovej sily od počtu otáčok bude mať exponenciálny charakter podľa Eulerovej rovnice pre trenie vlákna: Ťahová sila bude prudko klesať s rastúcim počtom závitov.	mechaniky a sú schopní formálne použiť známy Eulerov vzorec. Zreprodukujú experiment, získajú očakávaný výsledok a potvrdia hypotézu. V tomto momente však učiteľ zámerne organizuje prechod do novej poznávacej situácie, v ktorej sa objavujú otázky presahujúce hranice bežných vedomostí - žiaci sa tak opäť dostávajú do zóny „neviem, čo neviem“. Takýto prechod sa spustí na podnet učiteľa rozšírením rozsahu úlohy: napríklad sa navrhne premýšľať, čo sa zmení, ak valec nebude sklenený, ale drsný; ak je vlákno pružné; ak sa bremeno pohybuje nerovnomerne. Vznikajú nové premenné, ktoré sa predtým nebrali do úvahy, a to staví žiakov do situácie čiastočného alebo úplného nepochopenia - ďalšej zóny proximálneho vývoja. 1. Čo by sa stalo s výsledkami, keby ste sklenenú trubicu nahradili gumovým, kovovým alebo zdrsneným valcom? Ako by to ovplyvnilo silu trenia *(Cieľom otázky je pochopiť význam koeficientu trenia a prejsť od abstraktného modelu k zmenným reálnym podmienkam).* *2.* Ak sa lano pri zaťažení mierne natiahne (napr. nahradí sa gumovým káblom), zachová sa exponenciálny vzťah? Prečo ? *(Povzbudí žiakov, aby prekročili rámec modelu pevného lana a premýšľali o fyzikálnych obmedzeniach vzorca).*

	3. Je možné pri znalosti koeficientu trenia a počtu závitov vypočítať maximálnu prípustnú hmotnosť záťaže? Aký vzorec na to potrebujete? *(Prechod od kvalitatívneho experimentu k myšlienkovému modelu.)*
Kognitívny skok **„neviem, čo neviem“ → „neviem, že viem“**	
Učebný materiál	Metodický komentár v rámci teórie skefoldingu
Predstavte si, že máte vyvinúť jednoduchý a bezpečný spôsob zabrzdenia lode v núdzovej situácii s použitím iba provizórnych materiálov. Nemôžete použiť brzdy ani elektroniku - iba lano, koly, tyče, kladky a manuálnu silu. • Navrhnite aspoň dva spôsoby, ako zastaviť pohyb lode alebo nákladu. • Vysvetlite, ktoré fyzikálne zákony intuitívne alebo vedome používate. • Premýšľajte, ktoré z týchto princípov ste už použili na predchádzajúcej hodine (alebo v tomto experimente), aj keď ste si to na prvý pohľad nevšimli. • Porovnajte svoje návrhy s reálnymi technickými riešeniami (napr. kotvenie, navijak, atď.)	Táto úloha zavádza žiakov do situácie, v ktorej majú pocit, že sú potrebné nové, doteraz neznáme vedomosti. Sú vo fáze „neviem, čo neviem“, keď sú konfrontovaní s technickou úlohou, ktorú vnímajú ako niečo úplne iné. V procese diskusie a analýzy si však postupne uvedomujú, že potrebné vedomosti už majú - uvedomujú si, že princípy trenia, ťahových síl, Eulerov vzorec, vplyv počtu otáčok - to všetko sa už naučili, len v inej podobe. Tento moment uvedomenia - prechod do fázy „neviem, že viem , - sa stáva kľúčovým “kognitívnym skokom“. Žiaci zažívajú skúsenosť znovuobjavenia už zvládnutých vedomostí v novom kontexte, čo posilňuje dôveru vo vlastné intelektuálne schopnosti a prispieva k formovaniu metakognitívnych zručností: modelovanie, formulovanie hypotéz. Učiteľ sa v tejto fáze obmedzuje na reflexívne otázky, ktoré pomáhajú žiakom pomenovať a rozpoznať aplikované vedomosti - neradí, ale usmerňuje: • Ktoré z vecí, ktoré ste práve urobili, vám boli známe - aj keď ste na ne najprv

	nepomysleli ? *(Pomáha odhaliť skryté vedomosti používané intuitívne.)* • Aké princípy alebo zákonitosti si použil pri riešení úlohy, hoci si si to spočiatku neuvedomili? *(Ukazuje skryté súvislosti medzi skúsenosťou a teóriou.)* • Kedy si si uvedomil, že tento problém dokážeš vyriešiť? Čo ti pomohlo si to uvedomiť? *(Zachytáva moment kognitívneho skoku a vnútornej istoty.)*
Prechod do novej fázy kognitívneho vývoja **„chcem vedieť viac“**	
Učebný materiál	Metodický komentár v rámci teórie skefoldingu
Projektové zadanie: Zistite, ako sa Eulerov vzorec, ktorý sme použili, uplatňuje v strojárstve, športe, medicíne, bezpečnosti alebo v ďalších neočakávaných oblastiach. Vyberte si jednu z týchto oblastí. Nájdite reálne príklady, kde sa využíva účinok ovinutia lana alebo povrazu okolo valca/opory (napríklad: horolezectvo, morské uzly, lanové navijaky, chirurgické nite, spojky v autách). 1. Vysvetlite, prečo je princíp exponenciálneho rastu sily taký dôležitý vo vami zvolenej oblasti. 2. Na základe zistených informácií sformulujte vlastnú otázku alebo hypotézu. 3. *(Nepovinné)* Navrhnite, ako by sa dal školský experiment vylepšiť, aby viac odrážal reálne podmienky vo vami zvolenej oblasti.	V tejto fáze sa žiaci dostávajú do zóny stabilnej vnútornej istoty - už neriešia len problém, nerealizujú len svoje vedomosti, ale snažia sa ísť nad rámec prebranej učebnej látky, klásť si vlastné otázky a skúmať nové oblasti. Toto je moment začlenenia vlastného zmyslu do vzdelávacích aktivít: žiak cíti, že môže aplikovať vedomosti do reálneho sveta a začať samostatnú cestu poznávania. Úlohou učiteľa je tu nezasahovať: minimalizovať vonkajšie usmerňovanie, poskytnúť slobodu výberu témy a prístupu, podporiť každú neštandardnú voľbu. V tejto fáze sa podpora v podobe skefoldingu končí: vzdelávacia štruktúra postavená učiteľom sa postupne odstraňuje, pretože žiak si začína budovať vlastné „opory“ - na bádanie, vyhľadávanie a tvorivosť. Toto je skutočný vzdelávací cieľ - rozvoj kognitívnej samostatnosti.

Navrhnutá úloha o trení vlákna o valec umožňuje demonštrovať implementáciu kognitívnych fáz poznávania obsiahnutých v upravenej Rumsfeldovej matici. Postupné prechádzanie jednotlivých etáp od realizácie už známeho k pochopeniu neznámeho s postupným znižovaním úrovne pedagogickej podpory prispieva k formovaniu samostatného myslenia a rozvoju udržateľnej poznávacej činnosti. Vznikajúci kognitívny konflikt sa nestáva prekážkou, ale podmienkou produktívneho porozumenia učebnej látky a záujmu o ďalšie učenie.

Mimoriadne cenná je skutočnosť, že navrhovaná úloha, začlenená do rozvíjajúceho sa edukačného prostredia, vytvára pre žiakov podmienky na prekročenie bežnej vzdelávacej skúsenosti, čím prispieva k formovaniu postoja „chcem vedieť viac“. Prechod od pasívneho vnímania informácií k aktívnemu konštruovaniu poznatkov a osobnému objavovaniu fyzikálnych zákonitostí podporuje rozvoj metakognitívnych kompetencií vrátane kritického myslenia a túžby po bádaní. Úloha teda plní nielen vzdelávaciu, ale aj rozvojovú funkciu, je účinným nástrojom na formovanie kognitívnej zrelosti žiakov.

5 Zaver

V podmienkach digitálnej transformácie vzdelávania a šírenia umelej inteligencie sa problém znižovania kognitívnej činnosti žiakov stáva obzvlášť aktuálnym. Na riešenie tohto problému sú potrebné nové vzdelávacie modely, ktoré sa zameriavajú nielen na predmetové, ale aj na metakognitívne zručnosti.

Tento článok navrhuje model založený na adaptovanej Rumsfeldovej matici, v rámci ktorej sa učenie považuje za prechod postupnými kognitívnymi štádiami - od nevedomej nevedomosti až po vnútorný záujem o učenie („chcem vedieť viac“). Metodickým nástrojom modelu je pedagogická podpora (skefolding), ktorej typ a intenzita sú prispôsobené úrovni kognitívneho rozvoja: od algoritmických podnetov v počiatočných štádiách až po sokratovské rozhovory a reflexívne úlohy v pokročilých.

Praktická implementácia modelu je ukázaná na príklade školského kurzu fyziky. Systém úloh štruktúrovaný podľa kognitívnych etáp s prihliadnutím na úroveň vzdelania žiakov. Takáto projekcia umožňuje cielene formovať kognitívnu iniciatívu a zručnosti samostatného myslenia.

Perspektívou ďalšieho výskumu je aprobácia modelu v edukačnej praxi, vytvorenie diagnostických nástrojov na hodnotenie kognitívnej úrovne žiakov. Z dlhodobého hľadiska je možné model adaptovať aj pre iné predmety, ako je biológia, matematika, dejepis alebo geografia, čo otvára cestu k formovaniu komplexného vzdelávacieho

prostredia, ktoré stimuluje kognitívnu aktivitu a udržateľný záujem o učenie.

Poďakovanie

Ďakujem doc. RNDr. Petrovi Demkaninovi PhD. za konštruktívnu kritiku a cenné rady, ktoré pomohli zlepšiť obsah článku. Tento príspevok je podporený EÚ NextGenerationEU prostredníctvom Plánu obnovy a odolnosti SR v rámci projektu č. 09I03-03-V04-00093.

Literatúra

[Alanazi et al., 2025] Alanazi, A., Osman, K., and Halim, L. (2025). Enhancing physics problem-solving skills through guided discovery and scaffolding strategies: Evidence from Saudi technical colleges. *LUMAT: International Journal on Math, Science and Technology Education*, 12(5).

[Bar′yakhtar et al., 2018] Bar′yakhtar, V. H., Dovhyy, S. O., Bozhynova, F. Ya., and Kir′yokhina, O. O. (2018). *Fizyka (riven' standartu, za navchal'noyu prohramoyu avtors'koho kolektyvu pid kerivnytstvom Lokteva V. M.) : pidruch. dlya 10 kl. zakl. zahal. sered. osvity*. Vyd-vo «Ranok», Kharkiv, 272 s.

[Bar′yakhtar et al., 2019] Bar′yakhtar, V. H., Dovhyy, S. O., Bozhynova, F. Ya., and Kir′yokhina, O. O. (2019). *Fizyka (riven' standartu, za navchal'noyu prohramoyu avtors'koho kolektyvu pid kerivnytstvom Lokteva V. M.) : pidruch. dlya 11 kl. zakl. zahal. sered. osvity*. Vyd-vo «Ranok», Kharkiv, 272 s.

[Belland, 2017] Belland, B. (2017). *Instructional Scaffolding in STEM Education*. Springer.

[Bernshtein, 1967] Bernshtein, N. A. (1967). *The Co-ordination and Regulation of Movements*. Pergamon Press, 1st English edition.

[Demkanin, 2018] Demkanin, P. (2018). *Didaktika fyziky: Pre študentov magisterského štúdia a učiteľov v praxi*. Fakulta matematiky, fyziky a informatiky Univerzity, Bratislava.

[Fischer et al., 2014] Fischer, F., Kollar, I., Ufer, S., Sodian, B., and Hussmann, H. (2014). Scientific reasoning and argumentation: Advancing an interdisciplinary research agenda in education. *Frontline Learning Research*, 2(3), 28–45. https://doi.org/10.14786/flr.v2i2.96.

[Rumsfeld, 2002] Rumsfeld, D. H. (2002). Department of Defense news briefing. *US Department of Defense*, Washington, DC, 12 February 2002.

[Rymkevich, 2013] Rymkevich, A. P. (2013). *Fizika. Zadachnik. 10–11 kl.: posobie dlya obshcheobrazovatel'nykh uchrezhdeniy*. Drofa, M., 17-e izd., stereotip. edition. (Zadachniki «Drofy»), il.

[Perelman, 1991] Perelman, Ya. I. (1991). *Zanimatel'naya fizika. V dvukh knigakh (Kniga 1 i Kniga 2)*. Nauka, Moskva.

[Shvarts and Bakker, 2019] Shvarts, A., Bakker, A. (2019). The early history of the scaffolding metaphor: Bernstein, Luria, Vygotsky, and Before. *Mind, Culture, and Activity*, 26(1):4–23. https://doi.org/10.1080/10749039.2019.1574306.

[van de Pol et al., 2010] van de Pol, J., Volman, M., and Beishuizen, J. (2010). Scaffolding in teacher–student interaction: A decade of research. *Educational Psychology Review*, 22:271–296.

[Velmovská and Lapitková, 2024] Velmovská, K., and Lapitková, V. (2024). *Pokusy pre učiteľa fyziky*. Knižničné a edičné centrum FMFI UK, Bratislava, druhé vydanie. ISBN 978-80-8147-141-4.

[Verne, 1999] Verne, J. (1999). *Mathias Sandorf*. Návrat, Bratislava.

[Vygotsky, 1978] Vygotsky, L. S. (1978). *Mind in Society: The Development of Higher Psychological Processes*. Harvard University Press, Cambridge.

[Wood et al., 1976] Wood, D., Bruner, J. S., and Ross, G. (1976). The role of tutoring in problem solving. *Journal of Child Psychology and Psychiatry*, 17:89–100.

[Zafitri et al., 2019] Zafitri, T. S., Siahaan, P., and Liliawati, W. (2019). Design of scientific reasoning test instruments on simple harmonic motion topics [Paper presentation]. *Journal of Physics: Conference Series (International Conference on Mathematics and Science Education (ICMScE 2018))*, 1157(64), 1–5. https://doi.org/10.1088/1742 6596/1157/3/032064.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 90–95
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Marek Králik

Skefolding v práci učiteľa fyziky na základnej škole

Marek Králik*
Školiteľ: Peter Demkanin[1]
[1] Katedra didaktiky matematiky, fyziky a informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

Vo vyučovaní fyziky v ostatných desaťročiach rastie dôležitosť komplexných problémov, ktoré majú žiaci na základných školách s primeranou podporou učiteľa riešiť. Žiak postavený pred komplexný problém identifikuje a rieši čiastkové problémy a popri tom zbiera informácie potrebné k riešeniu v dostupných zdrojoch informácií. Učiteľ má vďaka priamemu kontaktu so žiakmi možnosť poskytnúť im podporu. V tomto článku analyzujeme interakciu medzi učiteľom a žiakom v takejto situácii. Skúmame, ako učiteľ problém diagnostikoval, aký typ podpory žiak potrebuje, a akým spôsobom mu ju poskytol. Analyzujeme audiozáznam interakcie medzi učiteľom a žiakom a pomocou teórie skefoldingu vysvetľujeme stratégiu, akú učiteľ použil ako aj proces postupného odoberania podpory, aby žiak nakoniec dokázal podobne náročný problém zvládnuť samostatne.
Kľúčové slová: Skefolding, didaktika fyziky, základná škola

1 Úvod

Skefolding (z anglického Scaffolding) vychádza z sociálno-kultúrnej teórie Vygotského, ktorá kladie dôraz na naše sociálne interakcie, hlavne reč ako nástroj pre naše učenie.
V tomto príspevku priblížime historickú cestu skefoldingu a ukážku jeho využitia na hodinách fyziky na základnej škole na Slovensku, v interakcii žiaka a učiteľa.

2 Prvá zmienka

Ako prví tento koncept použili Wood, Bruner a Ross (Wood, Bruner, Ross, 1976), keď vo svojom článku študovali, akú rolu majú mať dospelí ľudia pri vzdelávaní detí, konkrétne v oblasti riešenia problémov. Skúmali 3-5 ročné deti a ich schopnosť riešiť problémy. Predpokladali, že dieťa nemusí riešiť problém samo, ale že mu niekto pomôže a podporí ho, aby úlohu zvládlo. Podpora a pomoc nemusí ale byť len cez modelovaný príklad alebo ukážku postupu, ktorý bude dieťa imitovať ale bude zahŕňať aj povzbudivé slová.
V ich výskume vytvorili špeciálne drevené kocky, ktoré sa vďaka dierkam a vytŕčajúcim kolíkom dali spájať a dokopy sa dali všetky poskladať ako puzzle do tvaru pyramídy. Postupne sledovali rôzne deti, ktoré boli v miestnosti s tútorom. Po chvíli, keď sa oboznámili s kockami, tak tútor sledoval ich prácu a v reakcii na ich spôsob riešenia ich postupne podporoval tromi spôsobmi, ktorých počet výskumníci merali:

a) priama asistencia (ukázanie správne poskladaného páru);
b) verbálne poukázanie na chybné poskladanie kociek – („Vyzerá toto chybné, ako moje správne?“);
c) priamočiara verbálna výzva („Vedel by si urobiť viac tohto?“).

3 Definícia skefoldingu

Ďalší významný príspevok priniesol Stone (1998), ktorý rozšíril a kriticky zhodnotil metaforu skefoldingu. Kriticky videl hlavne, že v metafore skefoldingu je prevažne jednostranná interakcia, dáva do popredia dospelých a zanedbáva rovesníkov a samostatnosť detí v procese učenia. Taktiež kritizoval, že skefolding predpokladá idealizovaný vzťah medzi žiakom a učiteľom, a že skefolding učiteľov zameriava na kvalitatívne výsledky a nie na kvantitatívne. Na druhú stranu ale videl hodnotu tejto metódy v tom, že zachytáva podstatný prvok učenia, a to vedenie a štruktúrovanie učenia dospelými, ktoré je v priebehu učenia niekedy viac, inokedy menej prítomné. Jeden z predpokladov na skefolding videl v tom, že úloha, pred ktorou dieťa stojí je komplexná. Pozitívne vlastnosti skefoldingu videl v odstupňovanej asistencii (gratuated assistance) a prenose zodpovednosti (transfer of responsibility), v ktorej videl najväčší význam. Týmto pohľadom zmenil metaforu skefoldingu postupne na nasledovnú. Dospelý alebo spolužiak s hlbšími vedomosťami v oblasti, ktorej sa práve venujú alebo s rozvinutejšou kompetenciou, zapojený do aktivity spolu s dieťaťom pri úlohe, ktorá je nad schopnosti a možnosti žiaka. Dospelý dáva pokračujúcu pomoc na zapojenie dieťaťa do úlohy, ale pracuje na tom aby prirodzene znížilo pomoc, ktorú dáva dieťaťu, tak aby dieťa postupne pracovalo úplne samostatne. Proces zahŕňa interakcie medzi dieťaťom a dospelým, verbálne aj neverbálne.
Neskôr skefolding Puntambekar, Hübsher (2005) preniesli z interakcie medzi skúsenejšou osobou a žiakom do rôznych nástrojov, zdrojov, rovesníkov

a celkového vzdelávacieho prostredia, ktoré samo dáva podporu žiakovi, keď ju potrebuje.
V tejto práci budeme chápať skefolding pokračujúc od Stonea ku Jenneke van de Pol (van de Pol, 2010), ktorá spracovala výber odbornej literatúry k téme skefoldingu od Wooda až po súčastnosť.
Skefolding chápeme ako interaktívny proces, ktorý nastáva medzi žiakom a učiteľom, v ktorom sa musia obaja aktívne zapájať. Cieľom je poskytnúť žiakovi dostatočnú podporu na to, aby zvládol úlohy, ktoré sú určitým spôsobom nad jeho sily. Medzi hlavné znaky, ktoré si van de Pol všimla, a ktoré nesmú absentovať, aby sme mohli hovoriť o skefoldingu sú nasledovné:

- Contingency – prispôsobivosť
- Fading – stlmovanie
- Transfer of responsibility – prenos zodpovednosti

3.1 Contingency - Prispôsobivosť

Prvou charakteristikou skefoldingu je prispôsobivosť. Chápeme pod tým schopnosť reagovať, prispôsobiť sa alebo našitú na mieru, upravenú, diferencovanú, nakalibrovanú podporu pre konkrétneho žiaka. Učiteľova podpora musí byť adaptovaná na aktuálny stav vedomostí a výkonu žiaka a mala by byť na rovnakom alebo vyššom leveli. Učiteľ sa prispôsobuje žiakovi alebo skupine žiakov. Predpokladom pre prispôsobivú podporu je poznanie úrovne, na ktorej sa žiak nachádza, poznať jeho kompetencie a vedomosti. S vedomím, že učiteľ vie ako je na tom žiak, môže byť podpora úplne prispôsobená. Niektorí autori považujú diagnostiku za jednu z kľúčových častí skefoldingu.
„Dynamické hodnotenie predpokladá že tútor – človek alebo počítač môže hodnotiť zmenu vo vedomostiach a výkone pokým žiaci sú stále v procese riešenia problémov, namiesto na konci úlohy. Okamžitá spätná väzba v podobe skefoldingu môže byť poskytnutá žiakom počas riešenia problémov, vtedy a tam kde potrebujú asistenciu. Zmyslom hodnotenia v týchto situáciach je zlepšiť učenie v kontexte riešenia problémov počas toho ako je úloha riešená.“ (Lajoie 2005, s.545)
V školách na Slovensku má podobnú úlohu formatívne hodnotenie žiaka, ktoré slúži na danie spätnej väzby žiakovi vo vyučovacom procese.

3.2 Fading - Stlmovanie

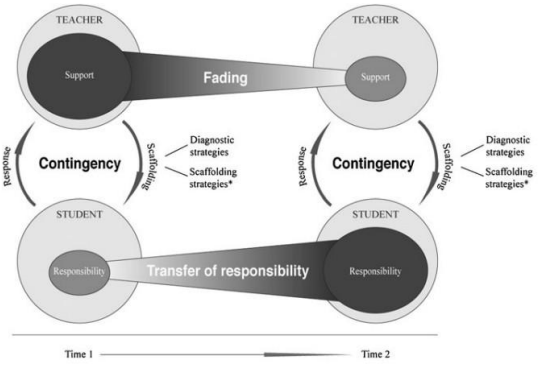
Druhou charakteristikou skefoldingu je postupné stlmovanie podpory, až jej úplne odobratie. Postup a intenzita stlmovanie závisí individuálne od dieťaťa, od jeho kompetencií a vedomostí. Učiteľ sa vzďaľuje, keď jeho podpora nie je už viacej potrebná alebo ju považuje v danom čase za dostatočnú.

3.3 Transfer of responsibility - Odovzdanie zodpovednosti

Tretia charakteristika je úzko prepojená s druhou. Cez postupné tlmenie podpory od učiteľa žiak začína postupne preberať zodpovednosť za svoje učenie. Zodpovednosť v tomto kontexte chápeme veľmi široko – od jeho kognitívnych alebo metakognitívnych aktivít, až po afektívnu stránku žiaka.
„Na rozdiel od iných autorov, ktorí kritizujú skefoldingovú metaforu pre sústredenie len na dokončenie úlohy, my chápeme skefolding ako metódu vyučovania, ktorá sa sústredí na rozvoj rôznych oblastí dieťaťa. Napríklad ak študent pracuje na sérii úloh a učiteľ ho podporí k jeho porozumeniu, učiteľ učí príležitostne. Ak študent dané problémy pochopí, učiteľ sťahuje svoju podporu v čase. Počas toho prenáša zodpovednosť na študenta, aby on prebral viac a viac kontroly nad svojím učením.“ (van de Pol, 2010, s. 275)

3.4 Priebeh Skefoldingu

Podľa van de Pol skefolding prebieha podľa priloženého obrázku. (Obr. 1) Na obrázku sú 4 kruhy, horné dva znázorňujú učiteľa a dolné dva žiaka. V kruhoch učiteľa sa nachádza vo vnútornom kruhu slovo podpora a veľkosť druhého kruhu znázorňuje veľkosť podpory. V kruhoch žiaka sa nachádza slovo zodpovednosť a veľkosť vnútorného kruhu, s týmto slovom vyjadruje veľkosť zodpovednosti ktorú ma žiak. Obrázok je delený aj na ľavú a pravú časť. Na ľavej je v kruhu učiteľa veľká podpora a v kruhu žiaka je malá zodpovednosť v kruhoch napravo je miera podpory a zodpovednosti vymenená. Proces zmenšenia podpory a zväčšenia zodpovednosti je vyjadrený čiarou ktorá slúži ako lievik medzi ľavou a pravou stranou. Učiteľov lievik uberá postupne podporu a žiakov postupne pridáva zodpovednosť. Medzi učiteľom a žiakom ale tiež prebieha interakcie cez interakciu. Od učiteľa smeruje skefolding v dvoch formách a od žiaka smeruje odpoveď. Učiteľov skefolding môže byť diagnostická stratégia – poznáva úroveň žiaka, alebo skefoldingová metóda, ktorá dáva konkrétnu podporu žiakovi.



Obr. 1 – skefolding (van de Pol, 2010, s. 274)

3.5 Metódy skefoldingu

O konkrétnej podobe skefoldingu rozhoduje učiteľ. Skefolding môže mať viaceré formy. Funkciami podpory môže učiteľ podporovať žiaka, priamo keď má problém alebo preventívne. V tejto prezentácii nás však obzvlášť zaujíma skefolding v interakcii medzi učiteľom a žiakom. Interakcia vyzerá poväčšine nasledovne:
Žiak rieši komplexnú úlohu pri ktorej sa dostane k určitému problému. Učiteľ diagnostikuje žiaka a identifikuje, kde konkrétne nastal problém. Na základe toho zvolí skefoldingovú stratégiu aby podporil žiaka. Stratégia pozostáva zo zámeru (intention) a z metódy (mean). Uvádzame anglický originál názvu metódy a zámeru od van de Pol a slovenský preklad od autora.

3.5.1 Intentions – Zámery

Tabuľka 1 – skefoldingové zámery (van de Pol, 2010, s.276)

Zameranie	Intentions	Zámer
Metakognícia	Direction maintenance	Zameranie na cieľ
Kognícia	Cognitive structuring	Usporiadanie doposiaľ naučeného
Kognícia	Reduction of degrees of freedom	Uľahčenie úlohy zjednodušením
Afektívne	Recruitment	Zvýšenie záujmu
Afektívne	Contingency management	Usmerňovanie správania cez tresty a odmeny
Afektívne	Frustration control	Zjemnenie frustrácie

3.5.2 Means – spôsoby

Tabuľka 2 – skefoldingové spôsoby (van de Pol, 2010, s.276)

Mean	Spôsob
Feeding back	Spätná väzba
The giving od hints	Poskytnutie nápovedí
Instructing	Zadanie jasných inštrukcií
Explaining	Vysvetľovanie
Modeling	Ukázanie príkladu
Questioning	Navádzanie zmysluplnými otázkami

4 Praktická časť

4.1 Charakteristika školy

V tomto článku prezentujeme praktickú ukážku využitia skefoldingu na vyučovaní fyziky na základnej škole. Výskumník bol v roli učiteľa na škole, ktorá má viaceré špecifiká. Heslom školy je: „Hľadaj, spoznávaj a ži.“ V tejto línii je aj zameranie školy na personalizované vzdelávanie, ktoré sa v škole prejavuje prácou učiteľov v úzkej spolupráci s rodinami žiakov, v tútoringu žiakov, osobnom sprevádzaní žiaka. Ďalšie špecifikum je malý počet žiakov v triede, čo je dôsledok novootvorenej školy, kedy najvyššie ročníky sú málopočetné a najnižšie sú už v plných počtoch.
Na hodinách, ktoré výskumník učil, sa zameral na kazuistiku metód skefoldingu v praxi na vyučovaní fyziky. Analyzovali sme hodiny v šiestej triede. Jedna vyučovacia hodina trvá 40 minút a dotácia hodín fyziky sú dve hodiny do týždňa, ktoré sú zaradené v rozvrhu hneď po sebe je to takzvaná dvojhodinovka v celkovom čase 90 minút uprostred ktorej je 10 minútová prestávka, zaradená podľa potreby. V triede je osem žiakov, z toho sedem chlapcov a jedno dievča. Fyzikálne vzdelávanie je postavené na konštruktivizme, ktorý sa hlavne prejavuje empirickým bádaním a žiaci si rozširujú alebo formalizujú svoje poznatky o vlastnostiach kvapalín, plynov, tuhých látok a o správaní týchto látok v kvapalinách a plynoch.
Z hodiny bol vykonaný zvukový záznam, na základe ktorého boli analyzované reakcie a správanie žiaka a učiteľa.

4.2 Príklad hodiny

Na tejto hodine sme spoločne so žiakmi skúmali správanie telies v kvapalinách. Skúmali sme, čo ovplyvňuje to, či teleso pláva alebo sa ponára, a

taktiež aká veličina ovplyvňuje to, ako veľmi sa ponára. Na to sme využili skupinovú prácu v dvojiciach pričom žiaci mali sledovať hĺbku ponorenia z jedného konca uzavretej slamky, pomocou oceľových brokov a zaznamenávať počty brokov potrebných na ponorenie slamky o určitý počet centimetrov. Žiaci mali na televízore premietanú prezentáciu, na ktorej boli pokyny, ako majú postupovať a taktiež mali vytlačený pracovný list, na ktorom bola tabuľka na zaznamenávanie nameraných dát a aj mriežka na následnú tvorbu grafov. Aktivita bola inšpirovaná metodickými materiálmi od Velmovskej (2022). Samotné meranie žiaci zvládli bez nutnej podpory učiteľa. Po meraní nasledovala tvorba grafov z nameraných dát a prepočet údajov z počtu guličiek na hmotnosť a prerobenie grafu z hĺbka ponorenia závislá od počtu guličiek na hĺbka ponorenia závislá od hmotnosti závažia. Podpora začala byť nutná, pretože sa jednalo o úlohu ktorá bola mierne náročnejšia ako tie s ktorými sa doteraz žiaci stretli.



Obr. 2. – aparatúra s ktorou pracovali žiaci (Autor)

4.3 Žiak Martin

Prinášame ilustráciu skefoldingu v konkrétnej situácii kedy žiak potreboval podporiť pri riešení komplexnej úlohy. Žiak, ktorého v tomto článku budeme prezývať Martin, má dobré známky v škole, na väčšine predmetov dáva pozor a je aktívny. Fyzika ho zaujíma, počas hodiny si zapisuje do zošita čo ho zaujme aj čo učiteľ označí za dôležité. Baví ho bádať, robiť experimenty a konfrontovať svoje predstavy s realitou. Občas sa nechá vyrušiť svojimi spolužiakmi a často rezignuje, keď sa mu niečo nedarí.

Počas hodiny pracoval v dvojici. Spoločne zvládli meranie hĺbky ponoru v závislosti od počtu závaží. Napokon však narazil na problém, pri ktorom nevedel ako má pokračovať ďalej. Nepochopil inštrukcie ako má pokračovať ďalej a prečo by mal prepočítavať počet závaží na hmotnosť. Zareagoval rezignáciou na prácu a snahu, čo sa prejavilo napríklad hojdaním na stoličke a verbálnym zahlásením, že niečomu nerozumie a má problém. Preto učiteľ najprv podporil jeho správanie, diagnostikoval, kde nastal v priebehu aktivity problém a adekvátne sa ho pokúsil podporiť, aby danú úlohu napokon zvládol. V tabuľke uvádzame celú interakciu žiaka s učiteľom a rozbor skefoldingových zámerov a metód.

Tabuľka 3 – interakcia učiteľ a žiak (Autor)

Žiakove reakcie	**Opis situácie a diagnostika**	**Reakcia učiteľa**	**Skefolding Zámer a spôsob**
„Ja tomu vôbec nerozumiem.“	Žiak rozhodil rukami, pred sebou má pracovný list. Musím zistiť viac o situácii, aby som na ňu mohol vedieť zareagovať.	„Čomu nerozumieš, Martin?“	Nie je.
„No čo máme merať?“	Žiak je trochu zmätený, potrebuje usmerniť ako má pokračovať ďalej	„Čiže nerozumieš, čo máš ďalej robiť?“	Nie je.
„No hej, že čo mám robiť“	Žiak potrebuje nasmerovať k zmyslu svojej práce a naviesť ku konkrétnym krokom ako má postupovať. Žiak vyzerá byť roztržitý, hojdá sa na	„Martin, tvojou úlohou, je v prvom rade sa prestať húpať “	Recruitment Instructing

	stoličke, preto najprv reagujem na správanie a sústredenosť.		
Žiak sa prestáva hojdať na stoličke a pozerá na učiteľa.	Žiak sústredí pozornosť na učiteľa, môže začať podpora na pokračovanie aktivity	„Povedali sme si, že hĺbku ponoru ovplyvňuje hmotnosť, ale my sme tu namerali len počet závaží nie ich hmotnosť. Čiže tvojou úlohou...“	Direction maintenance Questioning
Žiak sa stále pozerá na učiteľa.	Učiteľ prehodnotil, že sa pokúsi žiaka naviesť k riešeniu a nie mu ho prezradiť.	„Čo si myslíš, ako by sme mohli k tomu prísť? Nepoviem ti to napriamo.“	Direction maintenance Questioning
Žiak sa stále zmätene pozerá	Učiteľ položí jasnú otázku, na ktorú čaká odpoveď, napríklad: „vynásobím hmotnosťou jednej guličky počet guličiek“	„No chceme prepočítať počty závaží na to, koľko váži. Ako by sme to mohli spraviť“	Direction maintenance Questioning
Žiak sa spýta, stále zmätene: „Koľko váži?“		„Áno, koľko váži“	Direction maintenance Instructing
„Čo koľko váži?“		„Tie guličky, koľko váži.“	Reduction of degrees of freedom Hints
„No a viem zistiť, koľko váži jedna gulička?“	Učiteľ ukáže na tabuľu, kde je spolužiakmi vypočítaná hmotnosť jednej guličky.	„No a to vieš zistiť z toho údajú čo sme napísali na tabuľu“	Reduction of degrees of freedom Hints
„Ahaa“	Žiak viditeľne	„Už teda rozumieš?“	Direction maintenance
	porozumel čo má robiť.		Questioning
	Žiak pokračuje v práci, pozerá do papiera, niečo si zapíše, pozrie na tabuľu, ťukne pár krát do kalkulačky	Učiteľ v tichosti pozoruje.	
„Už som to vypočítal“	Učiteľ pochváli žiaka	„Výborne Martin“	Contingency management Feeding back

5 Záver

V tomto príspevku sme priblížili historickú cestu skefoldingu a jeho kľúčové prvky. Pomenovali sme zámery a spôsoby ako prebieha podpora žiaka učiteľom, pri strete žiaka s komplexnou úlohou. Uviedli sme konkrétny príklad interakcie žiaka a učiteľa, pri ktorej prebieha skefolding – podpora žiaka. Na tejto interakcii sme videli, že skefoldingovo podporený žiak zvládne aj komplexnú úlohu, ktorú pred tým nikdy neriešil.
Ďalšie interakcie budú skúmané v rámci autorovej bakalárskej práce.

Poďakovanie

Ďakujem za vedenie a konzultácie doc. RNDr. Petrovi Demkaninovi PhD. Tento príspevok je podporený EÚ NextGenerationEU prostredníctvom Plánu obnovy a odolnosti SR v rámci projektu č. 09I03-03-V04-00093.

Literatúra

VAN DE POL, J., VOLMAN, M., BEISHUIZEN, J. 2010. Scaffolding in Teacher–Student Interaction: A Decade of Research. *Educ Psychol Rev* 22, 271–296. Dostupné na: https://doi.org/10.1007/s10648-010-9127-6

STONE, C. A. 1998. The metaphor of scaffolding: Its utility for the field of learning disabilities. *Journal of Learning Disabilities*, 31, 344–364. [cit. 2025-04-20] Dostupné na: https://www.sfu.ca/~jcnesbit/EDUC220/ThinkPaper/Stone1998.htm

VELMOVSKÁ, K., VANYOVÁ, M., HODOSSYOVÁ, M. 2022, 1.3 Meranie objemu kvapalín – UL. [online]. In: Metodické materiály pre 6. ročník ZŠ a 1. ročník osemročných gymnázií. Bratislava : FMFI. [cit. 2025-04-13]. Dostupné na http://e-fyzika.ddp.fmph.uniba.sk/

PUNTAMBEKAR, S., & HÜBSCHER, R. 2005. Tools for scaffolding students in a complex learning environment: What have we gained and what have we missed? *Educational Psychologist*, 40, s. 1–12. DOI:10.1207/s15326985ep4001_1

LAJOIE, S. P., 2005. Extending the scaffolding metaphor. *Instructional Science*, 33, 541–557.

WOOD, D., BRUNER, J. S., ROSS, G. 1976. The role of tutoring in problem-solving. *Journal of Child Psychology and Psychiatry and Allied Disciplines*, 17, 89–100. [cit. 2025-04-13]. Dostupné na: https://acamh.onlinelibrary.wiley.com/doi/epdf/10.1111/j.1469-7610.1976.tb00381.x

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 96–104
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Aneta Kolodzejová

Využitie aktivít so športovou tematikou v rámci kontextuálneho prístupu k vyučovaniu fyziky na stredných školách

Aneta Kolodzejová[1]*
Školiteľ: Klára Velmovská[1†]
[1] Katedra didaktiky matematiky, fyziky a informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

V práci sa venujeme teoretickým východiskám kontextuálneho prístupu k vyučovaniu fyziky a zmysluplnému učeniu sa. Realizovali sme prieskum, ktorého cieľom bolo zistiť, či sa v asociáciách žiakov s fyzikálnymi pojmami objavujú slová so športovou tematikou v takej miere, aby bolo zmysluplné využiť šport ako kontext pri výučbe vybraných fyzikálnych tém. Na základe získaných výsledkov sme vytvorili metodické materiály so športovou tematikou pre žiakov stredných škôl. Vytvorené materiály obsahujú pracovný list pre žiaka a metodický list pre učiteľa. Aktivity prepájajú fyzikálne poznatky s vybranými športovými témami, niektoré úlohy vyžadujú vyhľadávanie zaujímavých informácií na internete alebo v literatúre. Vybrané materiály sme otestovali na niektorých školách a získali sme spätnú väzbu od žiakov, ktorá prispela k ich ďalšiemu vylepšeniu. Kontext športu považujeme za jednu z možností, ktorá pomôže žiakom aplikovať fyzikálne poznatky v reálnych situáciách a na základe vlastných skúseností lepšie pochopiť princíp fungovania javov okolo nás.

Kľúčové slová: zmysluplné učenie sa, kontextuálny prístup, aktivity so športovou tematikou

1 Zmysluplné učenie sa

V súčasnosti sa nekladie dôraz na mechanické memorovanie faktov, ale na pochopenie vzájomných súvislostí medzi jednotlivými javmi. Pojem „zmysluplné učenie sa“ zaviedol americký psychológ Dávid Ausubel. Ausubel [1963] dospel k záverom, že ľudia získavajú vedomosti hlavne dedukciou a priamym vystavením sa faktom, pojmom a myšlienkam.

Jonassen a kolektív [2003] chápu zmysluplné učenie sa ako jav, ktorý nastáva vtedy, keď sú žiaci aktívni, konštruktívni a so zámerom spolupracujú na autentických úlohách. V rámci formálneho a neformálneho vzdelávania si žiaci rozvíjajú svoje vedomosti a zručnosti, ktoré potom zdieľajú s ostatnými členmi. Učiaci sa prostredníctvom týchto aktivít manipulujú s predmetmi, nástrojmi a pozorujú účinky toho, čo robia.

Zmysluplné učenie sa nezameriava na to, aby si žiaci precvičovali veci, ktoré dávajú zmysel iba učiteľovi ako tvorcovi učebných osnov, ale dôraz sa kladie na žiacku interpretáciu svojich činností a výsledkov týchto činností. Najdôležitejším aspektom zmysluplného učenia sa je zameranie na to, čo javy znamenajú pre žiaka. [Jonassen & Strobel, 2006, s. 2]

Učenie sa je najzmysluplnejšie, keď je zámerné. Keď sa učiaci sa snažia dosiahnuť nejaký kognitívny cieľ, myslia a učia sa viac, lebo napĺňajú určitý zámer. Tento zámer nemusí byť pôvodne vyjadrený samotným žiakom, ale musí byť prijatý a osvojený. Väčšina súčasných teórií učenia sa zhoduje v tom, že zmysluplné učenie sa si vyžaduje zmysluplnú úlohu. Za najzmysluplnejšie úlohy budeme považovať podobne ako mnohí autori tie, ktoré vyplývajú z autentického kontextu alebo sú aspoň simulované. [Jonassen & Strobel, 2006, s. 2]

Zmysluplné učenie sa je často založené na spolupráci. V každodennom živote ľudia vyhľadávajú iných, aby im pomohli riešiť problémy. Je dôležité, aby sme vzájomnú spoluprácu pri osvojovaní vedomostí a zručností podporovali aj vo vyučovaní.

Spomenuté charakteristiky zmysluplného učenia sa sú vzájomné poprepájané a vyučovacie aktivity by mali podporovať kombinácie aktívneho, konštruktívneho, kooperatívneho, autentického a zámerného učenia sa. (Obrázok 1) [Jonassen & Strobel, 2006, s. 2-3]

Na obrázku 1 vidíme, že každá dimenzia zmysluplného učenia sa zahŕňa ešte určité charakteristiky. Aby bolo učenie sa aktívne, je dôležité, aby žiaci pozorovali určité javy alebo objekty, ešte väčší zmysel žiakom prináša možnosť manipulovať s predmetmi a následne pozorovať účinky toho, čo robia .

* kolodzejova1@uniba.sk
† klara.velmovska@fmph.uniba.sk

Učenie sa je konštruktívne, ak je pre všetkých účastníkov jasné a zrozumiteľné a žiaci pracujú so záujmom na niečom, od čoho sa odrazili. Medzi charakteristiky kooperatívneho učenia sa patria vzájomná spolupráca a dialóg. Žiaci môžu na probléme pracovať v skupinách, rozvíja sa ich schopnosť navzájom sa počúvať, argumentovať a dospieť k záverom. Aby bolo zmysluplné učenie sa autentické, musí vychádzať z kontextu a zároveň zahrnúť viaceré oblasti, ktoré vytvoria celok. Poslednou dimenziou zmysluplného učenia sa je zámer – učenie sa musí mať kognitívny cieľ, ktorý je do istej miery regulovaný, aby bol naplnený.



Obrázok 1 Päť dimenzií zmysluplného učenia sa (voľne preložené autorkou z https://lnk.sk/jkiw)

2 Kontextuálne vyučovanie

Učenie má najväčší zmysel, keď je zámerné. Výučbové aktivity a úlohy sú pre žiakov najprínosnejšie, keď vychádzajú z autentického kontextu. Snažíme sa vytvoriť niekoľko aktivít so športovou tematikou v kontexte vyučovania fyziky hlavne z toho dôvodu, že žiaci sa športovým aktivitám venujú v rámci voľného času, teda je to niečo, čo robia z vlastného presvedčenia a so záujmom.

Kontextuálne vyučovanie využíva problémové, na žiakov zamerané praktické činnosti, ktoré smerujú k dosiahnutiu zmysluplného a relevantného učenia sa v kontexte problémov reálneho sveta. [Rose, 2012, s. 1380].

Williams [2008, s. 395] poukázal na to, že kontextuálne učenie je inovatívna metóda, ktorá situuje učenie sa študentov do reálnych prostredí a zahŕňa implementáciu procedurálnych znalostí. Riešenie problémov je hlavný proces vyučovania v rámci kontextov a pomáha rozvíjať schopnosti a zručnosti žiakov pri riešení problémov v reálnom živote.

Prístupy založené na kontexte by žiakom mali priblížiť učenie sa v súvislosti so situáciami, s ktorými sa stretávajú vo svojom živote a zároveň zlepšiť ich záujem a porozumenie [Pilot & Bulte, 2006, s. 1381]. Učenie založené na kontexte zdôrazňuje, že žiaci musia brať do úvahy sociálny kontext učebného prostredia a reálny kontext poznania, ktoré sú kľúčové pre osvojenie a spracovanie vedomostí.

Rose [Rose, 2012, s. 1381] odporúča viaceré odlišné fázy kontextuálneho vyučovania. Žiak najskôr prežíva reálnu skúsenosť alebo sa zúčastňuje na diskusii, ktorá prepája predchádzajúce vedomosti s novými poznatkami. Po druhé, učiaci sa konceptualizuje pojmy a teoretické poznatky, z jednej alebo viacerých disciplín, prostredníctvom absolvovania naučených úloh. V ďalšej fáze žiak využíva konceptuálne a teoretické vedomosti na riešenie reálnych, konkrétnych problémov alebo na preukázanie vedomostí v praxi. Nakoniec sa vytvárajú a uvádzajú výsledky a závery rôznymi spôsobmi

2.1 Kontextuálny prístup k vyučovaniu fyziky

Medzi základné myšlienky konštruktivizmu patria – žiak je aktívny v procese učenia sa, žiak formuluje hypotézy, testuje ich a na základe skúseností ich pozmeňuje. Učenie sa je dynamický proces. Žiaci vstupujú do tried s vlastnými poznatkami, ktoré nadobudli v priebehu niekoľkoročných skúseností. Učenie sa v kontexte môže nastávať kedykoľvek, keď sa vedecká informácia prepojí s bežnou životnou skúsenosťou.

Viacerí autori sa zhodujú v tom, že kontextuálny prístup k vyučovaniu fyziky, má byť postavený do centrálneho diania žiackeho učenia sa. Kontexty sa vytvárajú vo vyučovacích procesoch a formujú žiakov. Žiaci sa pomocou kontextov naučia, čo je podstatou obsahu.

Vyučovanie v kontexte pomáha žiakom dať význam pojmom, zákonom a pravidlám. De Jong [De Jong 2006, s. 2- 3] tvrdí, že na úplný opis kontextu je potrebné analyzovať zdroj kontextu. Zdroje kontextov môžeme rozdeliť do štyroch skupín – individuálne, spoločenské, profesionálne uplatnenie a veda a technika.

V rámci kontextuálneho prístupu sa na začiatku využije situácia alebo problém z bežného života. Cieľom je využiť obsah a jeho vzájomne vzťahy v rámci kontextu ako prostriedok na vyriešenie situácie alebo problému. Do prírodovedného vzdelávania by sa malo implementovať učenie a učenie sa na základe rôznych reálnych kontextov. [Glynn & Koballa, 2007]

Kontexty z reálneho života a ich prepojenie s prírodovedným obsahom sú hlavným zameraním kontextuálneho prístupu. Zvolenie vhodných kontextov a výučba pomocou nich pomáha u žiakov rozvíjať vedecké zručnosti. Viaceré teórie potvrdzujú, že kontextuálny prístup je efektívny, čo sa týka žiackeho konštruovania, prenosu a implementácie poznatkov pomocou vlastnej skúsenosti. [Gilbert, 2006]

Ak sú úlohy alebo problémy zadávané kontextuálne, tak autori [Edwards & Whitelegg, 2001; Wilkinson 1999, s. 54] dospeli k záveru, že žiaci:

- nevnímajú fyziku ako abstraktnú oblasť, ktorá nesúvisí s bežným životom,
- neuvažujú o fyzikálnych problémoch ako o niečom, čo je potrebné si zapamätať alebo vypočítať,
- sa zlepšia v riešení problémov – používanie lepších stratégií, dosiahnutie úspechu.

2.2 Vplyv kontextuálneho prístupu na postoj žiakov k fyzike

Kontextuálne vyučovanie zvyšuje záujem žiakov, podnecuje ich záujem o vedu tým, že ich podporuje, aby sa zapojili do vyučovania fyziky pomocou jej významu pre život mimo školy. [Bennet et al., 2003, s. 44]

Existuje niekoľko empirických štúdií, ktoré analyzovali dopad kontextuálne zadávaných inštrukcií vo vyučovaní. Bennet a Lubben [2007, s. 24] preskúmali dvadsaťštyri experimentálnych štúdií o výučbe prírodných vied v rámci kontextuálneho prístupu. Dospeli k záveru, že inštrukcie založené na kontexte sa zdajú byť prospešné z hľadiska postoja a upriamenia pozornosti žiakov a porovnateľné s tradičnými inštrukciami z hľadiska pochopenia pojmov.

Çekiç [2011, s. 25] uviedol zoznam kontextuálnych výučbových stratégií. Kontextuálne vyučovanie:

- dáva dôležitosť riešeniu problémov,
- zohľadňuje potreby učenia sa a vyučovania, ktoré sa vyskytujú v domácom prostredí, spoločnosti a na pracoviskách,
- ukazuje študentom postupy učenia sa a spôsoby ako kontrolovať a riadiť výsledky, čo vedie študentov k samostatnosti a zodpovednosti,
- súvisí s viacerými rozličnými kontextmi, ktoré sú prepojené so životom žiakom,
- povzbudzuje študentov, aby vytvárali skupiny a učili sa z nich a v rámci nich,
- učí vytvárať adekvátne hodnotenia,
- podporuje a rozvíja kritické myslenie,
- používa systematické prístupy na riešenie problémov, objasnenie situácie,
- zohľadňuje rozdiely medzi žiakmi.

Učenie sa stáva celoživotným na základe výučbových stratégií, ktoré uvádza Çekiç [2011, s. 25.]

2.3 Žiaci a učitelia v rámci kontextuálneho prístupu k vyučovaniu

Na základe Çekiça [2011, s. 27] by sme úlohy žiakov a učiteľov mohli opísať takto:

- žiaci sa aktívne zapájajú počas vyučovacích hodín,
- žiaci kontrolujú a riadia vyučovací proces,
- žiaci získavajú poznatky a uvedomujú si vzťahy medzi nimi sami,
- žiaci získavajú informácie k pochopeniu fyzikálneho obsahu na základe práce v tímoch a skupinách,
- žiaci kladú učiteľom otázky a vyhodnocujú ich,
- učitelia sa snažia žiakom uľahčiť vyučovací proces.

Podobne ako podľa Harlen [2006] je učenie sa fyziky definované ako dávanie zmyslu novým skúsenostiam dieťaťom v spolupráci s inými. V súčasnosti sa zastávajú názory, že dieťa sa učí lepšie, ak má v učení aktívnu a nie pasívnu úlohu [Demkanin, 2018, s. 36]. Ak sa pozrieme na úlohy žiakov a učiteľov v rámci kontextuálneho prístupu k vyučovaniu fyziky, dospejeme k rovnakým záverom.

Skupina expertov, profesorov z rôznych univerzít, vedcov, učiteľov prírodovedných predmetov vykonala výskum, ktorý analyzoval kontextuálny prístup k vyučovaniu (Obrázok 2). Tento výskum sa realizoval v 30 krajinách sveta s cieľom vytvoriť kurikulum fyzikálneho vzdelávania pre 9-12 ročných žiakov. Vytvorenie kurikula založeného na kontextuálnom vyučovaní zlepšilo žiacke výkony a tiež pomohlo žiakom pri riešení problémov vo fyzike, technológiách, spoločnosti a mnohých iných oblastiach týkajúcich sa napríklad životného prostredia, etických hodnôt alebo počítačových softvérov. [Günes et al., 2007]



Obrázok 2 Cyklus výučbových aktivít v rámci kontextuálneho vyučovania
(voľne preložené autorkou z https://lnk.sk/vp29)

3 Prieskum zisťujúci výskyt slov so športovou tematikou v pojmoch z fyziky

Východiskom pre túto prácu bol prieskum zisťujúci výskyt slov so športovou tematikou vo vybraných pojmoch z fyziky. Prieskumu sa zúčastnili žiaci 9. ročníka základnej školy v Prešovskom kraji a 1. ročníka gymnázií v Bratislavskom kraji.
Cieľom prieskumu bolo analyzovať slová alebo slovné spojenia, ktoré si žiaci spájajú s vybranými fyzikálnymi pojmami. Hlavnou úlohou prieskumu bolo zistiť, koľkokrát sa slová so športovou tematikou vyskytujú v slovných asociáciách k piatim vybraným pojmom z fyziky a na základe frekvencie výskytu asociácie „šport“ usúdiť, či môže byť implementácia aktivít so športovou tematikou do vyučovania fyziky prínosná.
K záľubám žiakom nepochybne patrí šport, či už individuálny alebo kolektívny. Je zaujímavé pozrieť sa na frekvenciu slov so športovou tematikou vo fyzikálnych pojmoch. Položili sme si nasledujúce výskumné otázky.

1. Aké slovné asociácie si žiaci spájajú s pojmami *pohyb*, *sila*, *energia*, *výkon* a *práca*?
2. Vnímajú žiaci prepojenie fyziky a športu?
3. Patria športové aktivity k slovným asociáciám žiakov do takej miery, že môžeme zvoliť kontext športu pri výučbe niektorých fyzikálnych tém?

Na zistenie asociácie slov spojených so športom pri fyzikálnom pojme sme si zvolili metódu, ktorej podstatou je zadanie verbálneho podnetu žiakovi (slovo, slovné spojenie). Žiak na tento pojem reaguje spontánne slovami, ktoré mu napadnú. Odpoveď môže byť ústna alebo písomná. Vyhodnotenie prebieha na základe počtu relevantných odpovedí, teda slov, ktoré majú zmysluplný vzťah k podnetnému slovu. [Labašová, Porubčanová, 2012, s. 43]
V rámci nášho prieskumu sme žiakom zadali postupne päť pojmov z oblasti fyziky – *pohyb*, *sila*, *energia*, *výkon*, *práca*. Počas časového limitu dvoch minút žiaci na papierik písali slová, ktoré sa im s daným pojmom spájali. Snažili sa napísať čo najviac slov, s ktorými sa stretávajú v bežnom živote alebo v škole k vybranému fyzikálnemu pojmu.
Prieskumu sa zúčastnilo spolu 68 žiakov, z toho 20 žiakov deviateho ročníka základnej školy v Prešovskom kraji, 23 žiakov 1. ročníka gymnáziá so štvorročným štúdiom v Bratislavskom kraji a 25 žiakov 1. ročníka bilingválneho gymnázia s päťročným štúdiom v Bratislavskom kraji.
Odovzdané odpovede sme následne prepísali do tabuľkového programu Microsoft Excel. Pri jednotlivých slovných asociáciách sme vylúčili irelevantné odpovede. Následne sme zistili, ktoré slová si žiaci spájajú s konkrétnym pojmom najčastejšie, a aký je ich počet. K jednotlivým pojmom sme vytvorili tabuľku s desiatimi najčastejšie sa vyskytujúcimi odpoveďami a určili ich absolútnu a relatívnu početnosť k celkovému počtu žiakov. Pomocou online softvéru WordClouds (https://www.wordclouds.com/) sme najčastejšie vyskytujúce odpovede vizualizovali.
Uvádzame vizualizácie k vybraným fyzikálnym pojmom. (Obrázok 3 a 4)



Obrázok 3 Slovné asociácie k pojmu *pohyb*
(vytvorené autorkou pomocou https://www.wordclouds.com/)



Obrázok 4 Slovné asociácie k pojmu *výkon*
(vytvorené autorkou pomocou https://www.wordclouds.com/)

Pri jednotlivých fyzikálnych pojmoch sme uviedli najčastejšie vyskytujúce sa slovné asociácie. Z uvedených výsledkov prieskumu sme zistili, že žiakom sa s fyzikálnymi pojmami *pohyb*, *sila* a *výkon* vo veľkej miere spájajú aktivity alebo slová so športovou tematikou. Pri pojme *energia* mali slová šport a pohyb dostatočné percentuálne zastúpenie. Túto tému je zaujímavé prepojiť napríklad s príjmom a spaľovaním kalórií pri výkone športových aktivít. Z odpovedí k pojmu *práca* sme dospeli k záveru, že žiaci si ju najviac prepájajú

so zamestnaním a peniazmi. Prepojenie so športom nie je veľmi významné, čiže nie je nutné ju vyučovať v kontexte športu. Napriek tomu si myslíme, že by sme mohli uvažovať napríklad o tom, akú prácu vykonáme pri nejakej športovej aktivite.
Na základe všetkých výsledkov prieskumu sme zistili, ktoré témy môžeme prepojiť so športom a využiť kontextuálny prístup k vyučovaniu, ktorému sa bližšie venujeme v teoretickej časti. Zároveň predpokladáme, že učenie sa dá žiakom väčší zmysel (učenie sa bude zmysluplné), keď sa počas hodín fyziky budú venovať niečomu, čo ich zaujíma a venujú sa tomu napríklad v rámci voľného času.

4 Tvorba metodických materiálov

Na základe výsledkov prieskumu sme sa rozhodli vytvoriť niekoľko aktivít so športovou tematikou pri výučbe vybraných fyzikálnych tém. V prílohe k tomuto článku uvádzame pracovný list Hod oštepom. Túto aktivitu sme otestovali na dvoch gymnáziách a spätná väzba od žiakov nám pomôže pri tvorbe ďalších materiálov.
V metodickom materiáli Hod oštepom uvádzame aj komentáre pre učiteľa a správne odpovede. Pri práci s touto aktivitou sa využíva práca v skupinách a diskusia o výrokoch z pojmového komiksu. Žiaci zároveň pracujú s pripraveným modelom v programe Coach 7, alternatívou je práca so simuláciou „Let strely“ (PhET Colorado), ktorá modeluje šikmý vrh nahor a žiaci si môžu vyskúšať, ako jednotlivé faktory ovplyvňujú dolet oštepu.

5 Prieskum zisťujúci postoj žiakov k aktivite – HOD OŠTEPOM

Pripravenú aktivitu „Hod oštepom“ sme otestovali v dvoch rozličných školách na žiakoch prvého ročníka gymnázia so všeobecným zameraním v Bratislavskom kraji. Vzorka žiakov bola rôznorodá, čo nám umožní porovnať, ako sa pracovalo s aktivitou žiakom, ktorí majú k fyzike pozitívny vzťah oproti žiakom, ktorí fyziku neobľubujú. Na jednej zo škôl sme aktivitu realizovali pomocou simulácie „Let strely“ (PhET Colorado), v ktorej sme oštep nahradili futbalovou loptou (mierne sme upravili aj pracovný list). Žiaci druhého gymnázia pracovali s pripraveným modelom v programe Coach 7. Na základe odpovedí žiakov v dotazníku vieme usúdiť, či sa žiakom pracovalo s modelmi intuitívne, a či je ich používanie prínosné.

5.1 Úloha prieskumu

Cieľom prieskumu bolo zistiť, aký vzťah majú žiaci gymnázia k predmetu fyzika a k športu. Zisťovali sme aj, akým spôsobom prebiehajú ich hodiny fyziky, a či niekedy počuli o fyzikálnych princípoch pri hode oštepom. Najdôležitejšou úlohou bolo preskúmať, ako sa žiakom pracovalo s pripravenou aktivitou „Hod oštepom“, so simuláciou alebo modelom. Zároveň sme sa ich opýtali, či si vedia predstaviť prepojiť aj iné témy z fyziky podobným spôsobom a ako hodnotia zaradenie pojmového komiksu do vyučovania.

5.2 Výskumné otázky

K stanoveným cieľom prieskumu sa viažu nasledujúce výskumné otázky. Zaujímajú sa žiaci o fyzikálne princípy, s ktorými sa stretávajú v bežnom živote? Bude pre žiakov pripravená aktivita v kontexte športu zaujímavá? Aký postoj zaujmú k aktivite žiaci, ktorí majú negatívny vzťah k predmetu fyzika alebo k športu? Ako žiaci hodnotia skupinovú prácu pri hľadaní odpovedí na otázky v pripravenom pracovnom liste?

5.3 Metóda prieskumu

Na zistenie žiackych postojov k fyzike, športu a pripravenému materiálu sme využili dotazník, ktorý sa skladal z troch častí. Prvé dve časti dotazníka vypĺňali žiaci pred začiatkom práce s aktivitou, tretiu časť po vyplnení pracovného listu. V prvej časti žiaci vyjadrovali svoj postoj k predmetu fyzika a k športu. Zároveň uviedli, ako prebiehajú ich hodiny fyziky a či sa zajímajú o fyzikálne javy okolo nás. Vďaka týmto odpovediam môžeme porovnať postoje k fyzike alebo k športu s tým, ako sa daným žiakom pracovalo s aktivitou. V oboch prípadoch som sa zúčastnila prieskumu ako vyučujúca. Keďže práca s pracovným listom bola prevažne samostatná a zameraná na prácu v skupine, mohla som žiakov pozorovať. Zaujímalo ma, ako o daných úlohách diskutujú, čo si všímajú, a ako sa im s aktivitou pracuje. Žiakom som vždy poskytla informácie, čomu sa ideme venovať – zamerali sme sa na určitú časť pracovného listu, a až keď to mali všetci žiaci hotové, pokračovali sme ďalej. Zároveň bol v triede prítomný aj ich vyučujúci, ktorý bol tiež pozorovateľom alebo im pomohol pri práci s modelom.

5.4 Charakteristika súboru

Prieskumu sa zúčastnilo 36 žiakov prvého ročníka gymnázia, z toho 16 žiakov pracovalo so simuláciou „Let strely“ (PhET Colorado) a 20 žiakov s pripraveným modelom v programe Coach 7.

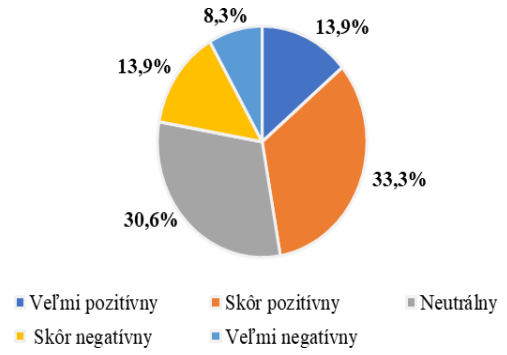
Žiaci vyjadrovali svoj vzťah k predmetu fyzika a zároveň aj svoj vzťah k športu. Vďaka rozdielnym odpovediam môžeme zistiť dopad vytvorenej aktivity na žiakov s rozličnými postojmi k športu a vyučovaniu fyziky. Žiaci počas realizácie aktivity pracovali v 2-4-členných skupinách. Žiaci, ktorí pracovali so simuláciou PhET Colorado mali k dispozícii 16 školských tabletov, takže každý žiak si mohol vyskúšať pozorovanie fyzikálneho javu a následne o tom diskutovať so spolužiakmi v skupinke. Pri práci s modelom v programe Coach 7 pracovali žiaci na 8 školských notebookoch, v ktorých bol program nainštalovaný. V oboch triedach žiaci vytvorili 8 skupín.

5.5 Spracovanie a interpretácia výsledkov

Počas realizácie aktivity prevládala v triedach príjemná pracovná atmosféra. Žiaci spolupracovali a diskutovali o možných odpovediach na otázky. Oceňujeme, že žiaci nemali problém položiť doplňujúce otázky alebo poprosiť o radu pri práci so simuláciou alebo modelom.

Prvá časť dotazníka sa zameriavala na zistenie postoja žiakov k predmetu fyzika a k športu. Zároveň sme zisťovali, akým spôsobom prebiehajú ich hodiny fyziky, čomu sa venujú. Na základe odpovedí žiakov sme dostali rôznorodú vzorku žiakov, ktorá nám zabezpečila možnosť sledovať vplyv pripravenej aktivity na žiakov s rôznym vzťahom k týmto dvom oblastiam.

V prvej otázke mali žiaci vyjadriť svoj vzťah k predmetu fyzika. Mohli si vybrať z možností „veľmi pozitívny“, „skôr pozitívny“, „neutrálny“, „skôr negatívny“ a „veľmi negatívny“. Takmer polovica žiakov má k fyzike pozitívny vzťah. 11 žiakov považuje svoj vzťah k fyzike za neutrálny, ostatní žiaci fyziku veľmi neobľubujú. V grafe číslo 1 vidíme percentuálne zastúpenie jednotlivých odpovedí.



Graf 1 Percentuálne zastúpenie odpovedí vzťahu žiakov k predmetu fyzika

V ďalšej otázke mali žiaci opísať, aké pocity majú na hodinách fyziky, ako ich hodiny prebiehajú, a čo je pre nich zaujímavé alebo naopak náročné. Veľmi oceňujeme, že viacerí žiaci uviedli, že sa na hodinách fyziky venujú experimentom a diskusiám a vyučujúci sa im snažia javy priblížiť na reálne situácie z bežného života. Dokonca aj žiaci, ktorí majú k fyzike negatívny vzťah považujú hodiny za zaujímavé a praktické. Žiaci si uvedomujú, že ich vzťah k fyzike ovplyvňujú vyučujúci. Väčšina žiakov považuje počítanie príkladov, príliš veľa teórie a zapamätanie si fyzikálnych vzťahov ako najnáročnejšiu časť vyučovania fyziky. Uvádzame niektoré odpovede vybraných respondentov.

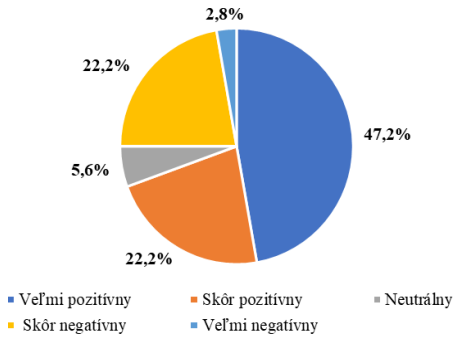
Respondent 5: *Tak mňa hodiny bavia tento rok, keďže väčšinu hodín máme s pokusmi, vďaka ktorým tej fyzike rozumiem. Náročne mi prídu niektoré výpočty.*

Respondent 9: *Po príchode nového učiteľa tento rok sa hodiny fyziky posunuli na výrazne lepšiu úroveň, hodiny zahŕňajú otvorené diskusie, zaujímavé experimenty, a každá hodina sa začína demonštráciou problému*.

Respondent 16: *Sú veľmi zaujímavé a prínosné.*

V tretej otázke sme zisťovali, či sa žiaci zaujímajú o fyzikálne javy, s ktorými sa stretávajú v bežnom živote. 19 žiakov (52,8 %) sa o fyzikálne javy v bežnom živote nezaujíma. Odpoveď „Áno“ zvolilo 17 respondentov, čo predstavuje 47,2 %.

V poslednej otázke prvej časti dotazníka sme sa žiakov pýtali, aký je ich vzťah k športu. . Ponúkané možnosti boli „veľmi pozitívny“, „skôr pozitívny“, „neutrálny“, „skôr negatívny“ a „veľmi negatívny“. Aj odpovede na túto otázku boli veľmi rôznorodé, čo nám poskytlo širokú škálu na zisťovanie, ako sa žiakom pracovalo s pripraveným pracovným listom „Hod oštepom“. Takmer 70 percent žiakov uviedlo, že má k športu pozitívny vzťah. Dvaja žiaci považujú svoj postoj k športu za neutrálny. Negatívne šport vnímajú 9 žiaci (25 %). Percentuálne zastúpenie odpovedí na vzťah respondentov k športu uvádzame v grafe 2.



Graf 2 Percentuálne zastúpenie odpovedí vzťahu žiakov k športu

Druhá časť dotazníka sa zameriavala na žiacke predchádzajúce vedomosti a ich hypotézy o faktoroch ovplyvňujúcich dolet oštepu. Skúsili uviesť aj tipy na optimálny uhol pri hode oštepu, ak odpor prostredia nezanedbávame. Odpovede na otázky 5-7 vyhodnotíme spoločne.

Väčšina žiakov (63,9 %) o fyzikálnych princípoch, ktoré využívajú atléti pri hode oštepom, nepočula. Títo žiaci následne neuviedli ani faktory, ktoré dolet oštepu ovplyvňujú. 13 respondentov uviedlo, že medzi faktory, ktoré môžu mať dopad na dolet oštepu, patria: *odpor vzduchu, hmotnosť oštepu, počiatočná rýchlosť hodu, vietor, sila pôsobenia ruky atléta, aerodynamika predmetu a gravitácia*. *45 stupňov* bola najčastejšia odpoveď na otázku, či existuje optimálny uhol na hod oštepu (odpor prostredia nezanedbávame), pri ktorom dopadne oštep do najväčšej vzdialenosti. Niektorí žiaci uviedli, že uhol určite existuje, ale nevedia, aký to je.

Posledná časť dotazníka bola zameraná na samotnú prácu s pracovným listom. V ôsmej otázke nás zaujímalo, ako sa žiakom pracovalo s aktivitou „Hod oštepom“ a pripraveným modelom alebo simuláciou. Väčšina respondentov uviedla, že to bolo zaujímavé a bavilo ich to. Zároveň sme zaujali s touto aktivitou aj žiakov, ktorí majú k fyzike alebo športu neutrálny až negatívny vzťah. Našli sa aj žiaci, ktorí vnímali aktivitu neutrálne a hodnotili ju slovami „*v pohode*“ alebo „*dobre*“. Z odpovedí sme vybrali niekoľko, ktoré uvádzame nižšie. Prví traja respondenti pracovali so simuláciou „Let strely“ (PhET Colorado), ostatní s modelom v programe Coach 7.

Respondent 2: *Super, bolo to zaujímavé a interaktívne.*

Respondent 12: *Veľmi sa mi páčilo pracovať so simuláciami, keďže som mohla pozorovať zmenu pri určitých faktoroch.*

Respondent 15: *Pracovalo sa mi veľmi dobre a aktivita ma bavila, bola praktická a intuitívna. Zároveň sa mi páčilo, že tam bola aj teória, ktorá má uviedla do témy.*

Respondent 23: *Bolo to zaujímavé.*

Respondent 26: *Pripravený model bol super. Aktivita ma až tak nezaujala.*

Respondent 35: *Ten naprogramovaný model bol úplne super...ešte zaujímavejšie by bolo, kebyže niečo aj naozaj hádžeme, ale ten model bol dosť dobrý.*

Zo získaných odpovedí môžeme vyvodiť záver, že práca v obidvoch prostrediach je dostačujúca na demonštráciu fyzikálneho javu a zároveň intuitívna.

Nasledujúca otázka sa týkala názoru žiakov na využitie pojmového komiksu a diskusiu v menších skupinách v úvode pracovného listu. Žiaci hodnotili toto zaradenie ako veľmi pozitívne a užitočné pre ich ďalšiu prácu. Uvádzame niektoré z odpovedí.

Respondent 5: *Bolo to dobré na zamyslenie a uvažovanie nad vecami, nad ktorými by sme asi bežne nerozmýšľali*.

Respondent 10: *Mám rada prácu v skupine, takže hodnotím veľmi pozitívne.*

Respondent 12: *Každý sme mohli vyjadriť svoj názor, takže to bolo veľmi fajn, lebo sme mohli diskutovať o našich predpokladoch.*

V ďalšej otázke sme sa pýtali, či žiaci vedeli odpovedať na otázky k pripravenej aktivite – či boli zrozumiteľné a jasne formulované. Takmer všetci žiaci považovali otázky sa dostatočne zrozumiteľné. Ako mierne problémové vnímali úlohy na zamyslenie, spojené s vyhľadávaním na internete, keďže otázky v nich boli otvorené a žiakom sme poskytli len drobné rady – na sledovanie čoho sa majú zamerať. Odpovede vybraných žiakov uvádzame nižšie.

Respondent 7: *Všetky boli zrozumiteľné.*

Respondent 12: *Na každú otázku som bola schopná odpovedať, boli veľmi zrozumiteľne postavené.*

Respondent 16: *Na otázky som vedela odpovedať, aj keď niekedy som sa musela zamyslieť.*

V otázke číslo 11 sme zisťovali, čo nové a zaujímavé sa žiaci pri realizácii aktivity naučili. Najviac vyskytovanou odpoveď bolo, že optimálny uhol hodu oštepom alebo iných predmetov bez odporu prostredia je *45 stupňov*. Niektorí žiaci v odpovediach uviedli aj parametre, ktoré vplývajú na dolet oštepu. Pre žiakov bolo prekvapivé, že držitelia rekordu v hode oštepom v mužskej aj ženskej sú z Českej republiky.

V ďalších dvoch otázkach sme sa pýtali ako žiaci hodnotia prepojenie aktivít so športovou tematikou s vyučovaním fyziky, a či si vedia predstaviť aj iné témy, ktoré by mohli byť prepojené podobným spôsobom. Žiaci vnímali prepojenie so športovou tematikou za užitočné a zábavné. Podarilo sa nám zaujať aj žiakov, ktorí nemajú k športu pozitívny vzťah.

V ďalších odpovediach žiaci uvádzali, či si vedia predstaviť aj iné témy, ktoré možno prepojiť s vyučovaním fyziky a zároveň mohli uviesť aj návrhy na vylepšenie aktivity.

5.6 Diskusia k výsledkom dotazníka

Na základe uvedených výsledkov a odpovedí žiakov konštatujeme, že kontext športu môže byť jednou z možností ako prepojiť fyzikálne javy z bežného života s vyučovaním. Žiaci hodnotili pripravenú aktivitu veľmi pozitívne, páčila sa im diskusia v rámci pojmového komiksu. Žiakom sa s pripravenou simuláciou alebo modelom pracovalo intuitívne, ocenili, že si mohli vyskúšať rôzne faktory, ktoré ovplyvňujú, do akej vzdialenosti oštep alebo iné športové náčinie doletí.

Zistenia sme zapracovali do pripraveného materiálu a zároveň nám spätná väzba od žiakov poskytla informácie, či môžeme iné témy spracovať podobným spôsobom - odpovede žiakov nám poskytli cenné rady pri tvorbe ďalších materiálov v budúcnosti.

Záver

V príspevku sme zhrnuli výsledky prieskumu zameraného na zistenie postoja žiakov pri práci s pripravenou aktivitou. Zámerom bolo zistiť, či vyučovanie v kontexte športu môže byť pre žiakov prínosné a zaujímavé.

Počas realizácie jednotlivých prieskumov sme naplnili ciele práce. Východiskom pre túto prácu bolo zistiť, či sa v asociáciách žiakov s fyzikálnymi pojmami vyskytujú slová so športovou tematikou do takej miery, že môžeme využiť kontext športu pri výučbe vybraných fyzikálnych tém. S dôrazom na zmysluplné učenie sa a kontextuálny prístup k vyučovaniu sme v ďalšej časti práce naplnili ciele týkajúce sa tvorby metodických materiálov v kontexte športu.

V rámci prieskumu plánujeme pokračovať tak, že vytvoríme ďalšie materiály, ktoré následne otestujeme.

Z výsledkov dotazníka a vyplnených pracovných listov je možné usúdiť, že kontext športu je jedným z mnohých využiteľných kontextov vo vyučovaní fyziky.

Poďakovanie

Týmto spôsobom by som sa chcela poďakovať doc. PaedDr. Kláre Velmovskej, PhD. za jej cenné rady a podnety pri príprave tohto príspevku. Zároveň sa chcem poďakovať žiakom, ktorí sa zúčastnili jednotlivých prieskumov a poskytli nám nápady, akým spôsobom možno pripravené aktivity vylepšiť Ďalej sa chcem poďakovať aj ich vyučujúcim a riaditeľom škôl, že nám umožnili výskumy zrealizovať.

Literatúra

[Ausubel, 19636] Ausubel, D.P. 1963. *The Psychology of Meaningful Verbal Learning*. New York: Grune & Stratton, 1963. 255. s. ISBN 9780808900252.

[Bennet & Lubben, 2007] Bennet, J., & Lubben, F. 2007. Context-based chemistry: the Salters approach. [online]. In: *Teaching effects of context based approach to teaching on students' physics achievements, motivation for learning Physics and attitudes towards Physics*. Tirana: European University of Tirana, 2016. 360. s. [cit. 2024-05-30]. Dostupné na: <https://uet.edu.al/wpcontent/uploads/2021/11/Ahmed_Fatih_Ersoy.pdf>.

[Bennet et al., 2003] Bennet, et al. 2003. *A systematic review of the effects of context-based and Science-Technology-Society (STS) approaches in the teaching of secondary science*. [online]. University of London: EPPI-Centre, 2003. 68. s. [cit. 2024-05-30]. Dostupné na: <https://eppi.ioe.ac.uk/cms/Portals/0/PDF%20reviews%20and%20summaries/Science_2003review.pdf?ver=2006-03-02-125252-487>.

[Çekiç , 2011] Çekiç, T., 2011. Effect of 7e learning model integrated with real-life context based instruction on students' conceptual achievement, misconceptions and science process skills about "energy". [online]. In: *Teaching effects of contex*t *based approach to teaching on students' physics achievements, motivation for learning Physics and attitudes towards Physics*. Tirana: European University of Tirana, 2016. 360. s. [cit. 2024-05-30]. Dostupné na: < https://uet.edu.al/wp-content/uploads/2021/11/Ahmed_Fatih_Ersoy.pdf>.

[De Jong, 2006] De Jong, O., 2006. *Context-based chemical education*. [online]. Seoul: 19th International Conference on Chemical Education [cit. 2024-11-14]. Dostupné na: <https://old.iupac.org/publications/cei/vol8/0801xDeJong.pdf>.

[Demkanin, 2018] Demkanin, P. 2018. *Didaktika fyziky pre študentov magisterského štúdia a učiteľov v praxi*. Bratislava: Univerzita Komenského v Bratislave, 2018. 156 s. ISBN 978-80-223- 4374-9.

[Edwards & Whitelegg, 2001] Edwards, C., & Whitelegg, E. 2001. Beyond the laboratory – learning physics using real-life contexts. [online]. In: *Teaching effects of context based approach to teaching on students' physics achievements, motivation for learning Physics and attitudes towards Physics*. Tirana: European University of Tirana, 2016. 360. s. [cit. 2024-11-14]. Dostupné na: <https://uet.edu.al/wpcontent/uploads/2021/11/Ahmed_Fatih_Ersoy.pdf>.

[Ersoy, 2015] Ersoy, A.,F. 2016. *Teaching effects of context based approach to teaching on students' physics achievements, motivation for learning Physics and attitudes towards Physics*. Tirana: European University of Tirana, 2016. 360. s. [cit. 2024-11-13]. Dostupné na: <https://uet.edu.al/wpcontent/uploads/2021/11/Ahmed_Fatih_Ersoy.pdf>.

[Harlen, 2006] Harlen, W. 2006. *Teaching, Learning and Assessing Science 5-12. London*: SAGE., 2006. Podľa Demkanin P. Didaktika fyziky pre študentov magisterského štúdia a učiteľov v praxi. Bratislava: Univerzita Komenského v

Bratislave, 2018. 156 s. ISBN 978-80-223- 4374-9.

[Gilbert, 2006] Gilbert, J., K. 2006. On the Nature of "Context" in Chemical Education. [online] In: *International Journal of Science Education, 28(9),* Oxfordshire: Taylor & Francis. 2006. s. 957–976. [cit. 2024-11- 13]. Dostupné na : <https://doi.org/10.1080/09500690600702470>.

[Glynn, Koballa, 2007] Glynn, S., Koballa, T. 2007. *Attitudinal and Motivational Constructs in Science Learning*. New York: Routledge., 2007. 28 s. ISBN 978-02-038-2469-6.

[Günes, 2007] Günes et al., 2007. Effect of 7e learning model integrated with real-life context based instruction on students' conceptual achievement, misconceptions and science process skills about "energy". [online]. In: *Teaching effects of context based approach to teaching on students' physics achievements, motivation for learning Physics and attitudes towards Physics.* Tirana: European University of Tirana, 2016. 360. s. [cit. 2024-05-30]. Dostupné na: <https://uet.edu.al/wp-content/uploads/2021/11/Ahmed_Fatih_Ersoy.pdf>.

[Jonassen, Strobel, 2006] Jonassen, D., H., Strobel, S. 2006. Modeling for Meaningful Learning. [online]. In: *Hung, D., Khine, M.S. (eds) Engaged Learning with Emerging Technologies*. Dodrecht: Springer, 2006. 290 s. [cit. 2024-05-28]. Dostupné na: <https://www.researchgate.net/publication/226842886_Modeling_for_Meaningful_Learning>.

[Jonassen et al., 2003] Jonassen et al., 2003. Learning to solve problems with technology: A constructivist perspective. [online]. In: *Modeling for Meaningful Learning*. Dodrecht: Springer, 2006. 27. s. [cit. 2024-05-28]. Dostupné na: <https://www.researchgate.net/publication/226842886_Modeling_for_Meaningful_Learning>.

[Labašová, Porubčanová, 2012] Labašová, E., Porubčanová, D. 2012. *Pedagogická diagnostika. (Vysokoškolská učebnica)* [online]. Dubnica nad Váhom: Dubnický technologický inštitút, 2012. 167. s. [cit. 2024-05-30]. Dostupné na: <https://www.dti.sk/data/files/file-1674550469-63cf9cc5af87e.pdf>.

[Pilot & Bulte, 2006] Pilot, A. & Bulte, A., M., W. 2006. Why do you "need to know"? *Context-based education. [online]. In: Enhancing students' problem-solving skills through context-based learning*. Taiwan: International Journal of Science and Mathematics Education. 2015. s. 1377-1401. [cit. 2024-05-29]. Dostupné na: <https://www.researchgate.net/publication/267109315_Enhancing_students'_problem-solving_skills_through_context-based_learning>.

[Rose, 2012] Rose, D., E. 2012. Context-based learning. [online]. In: *Enhancing students' problem-solving skills through context-based learning*. Taiwan: International Journal of Science and Mathematics Education. 2015. s. 1377-1401. [cit. 2024-05-29]. Dostupné na: <https://www.researchgate.net/publication/267109315_Enhancing_students'_problem-solving_skills_through_context-based_learning>.

[Williams, 2008] Williams, P. 2008. *Assessing context-based learning: Not only rigorous but also relevant.* [online]. Assessment and Evaluation in Higher Education, 33(4). 2008. s. 395-408. [cit. 2024-05-29]. Dostupné na: <https://www.researchgate.net/publication/248966006_Assessing_Context-Based_Learning_Not_Only_Rigorous_but_Also_Relevant>.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 105–116
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Ľubomír Varchol

Využitie programu Algodoo pri vizualizácii fyzikálnych javov

Ľubomír Varchol*

Školiteľ: Klára Velmovská†

KDMFI, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

Cieľom tohto príspevku je predstaviť niekoľko možností zakomponovania počítačových modelov, konkrétne modelov v programe Algodoo, do výučby fyziky. Modely sú z oblastí mechaniky a optiky, keďže program Algodoo je najlepší práve v týchto oblastiach. Ku každému uvedenému modelu sú priložené postup jeho vytvorenie a úlohy pre žiakov, ktoré slúžia na zlepšenie zručností s daným programom, ale zároveň aj pomocou ktorých môžu sami objaviť kľúčové vzťahy a zákony.
Kľúčové slová: vizualizácia, simulácia, počítačové modely, Algodoo

1 Teoretický úvod do počítačových modelov vo vyučovaní fyziky

Na tvorbu počítačových modelov žiaci potrebujú nielen vedomosti v oblasti, alebo oblastiach, potrebných na ich tvorbu, ale aj určité spôsobilosti vedeckej práce, kombináciu prírodovednej, digitálnej a grafickej gramotnosti a motiváciu na prácu.

1.1 Prírodovedná, digitálna a grafická gramotnosť

Prírodovedná gramotnosť sa chápe ako schopnosť používať vedecké poznatky, získavať nové vedomosti, vysvetľovať prírodné javy, identifikovať otázky a vyvodzovať dôkazmi podložené závery pre pochopenie a tvorbu rozhodnutí o svete prírody a zmenách, ktoré v ňom nastali v dôsledku ľudskej aktivity. Táto gramotnosť má, podľa Harlen [Harlen, W., 1999], tri časti:

- prírodovedné predstavy,
- prejavy vedeckého postoja k realite,
- spôsobilosti vedeckej práce.

Pre samostatnú tvorbu modelov sú dôležité spôsobilosti ako interpretovanie dát, práca s tabuľkami a grafmi, ako aj tvorba záverov a zovšeobecnení a samozrejme experimentovanie. Vo všeobecnosti prírodovedná gramotnosť predstavuje cieľ, ku ktorému má vyučovanie prírodovedných predmetov smerovať.

Inak, prírodovedná gramotnosť predstavuje aj hlavný cieľ prírodovedného vzdelávania k dosiahnutiu pokroku a rozvoja nielen jedinca, ale aj spoločnosti v kontexte vedy a techniky [Bybee, R. W., 1997].

Digitálna gramotnosť zahŕňa kognitívne, emocionálne a sociologické zručnosti, ktoré používatelia potrebujú na efektívne fungovanie v digitálnom prostredí [Martin, A., Madigan, D., 2006]. Digitálne technológie sú označované ako súbor prostriedkov, nástrojov, prostredí a postupov (prichádzajúcich z oblasti počítačov), ktoré žiaci využívajú na podporu učenia a učenia sa, komunikácie a kolaborácie, vyjadrovania sa, tvorby a pod., teda na komplexnú podporu všetkých rozvojových domén detí,

*varchol5@uniba.sk
†klara.velmovska@fmph.uniba.sk

žiakov a učiacich sa každého veku. Je to synonymum pre informačné komunikačné technológie alebo IKT. V dnešnej dobe však digitálne technológie postupne nahrádzajú označenie IKT v pedagogických a vládnych dokumentoch mnohých štátov. Je to súbor schopností:

- primerane a produktívne využívať rôzne digitálne nástroje pre svoje potreby, pre svoje poznávanie, pre vyjadrenie seba a svoj komplexný osobný rozvoj,
- efektívne riešiť úlohy a problémy v digitálnom prostredí,
- kvalifikovane si zvoliť a vedieť použiť vhodnú digitálnu technológiu na nájdenie informácií, ich spracovanie, použitie, šírenie alebo vytvorenie,
- kriticky vyhodnocovať a analyzovať znalosti získané z digitálnych zdrojov,
- rozumieť spoločenským dôsledkom (včítane bezpečnosti, ochrany súkromia a etiky), ktoré vznikajú v digitálnom svete [Kalaš, I., 2011].

V neposlednom rade je so školským experimentom spojená grafická metóda. Meranie, vykonané pri experimente, poskytuje údaje – výsledky, ktoré pri vhodnom usporiadaní do tabuľky predstavujú jednu z možností matematickej formulácie funkčnej závislosti veličín sledovaných v priebehu experimentu. Tabelárne vyjadrenie fyzikálnej funkcie a následné zostrojenie súradnicového grafu možno zvoliť ako prostriedok na zavedenie pojmu – fyzikálnej veličiny. Tento prostriedok však možno účinne v školských podmienkach využiť ako názorný prostriedok iba vtedy, ak žiaci dokážu čítať a interpretovať graf, teda získať z neho fyzikálne informácie. V modeloch, konkrétne digitálnych fyzikálnych modeloch je dôležitým prvkom práve graf. Graf je považovaný za nositeľa dvojakého druhu informácií – kvantitatívnych a kvalitatívnych. Kvalitatívne informácie o zobrazenom deji čítame z tvaru čiary grafu. Kvantitatívne informácie zodpovedajú jednotlivým geometrickým prvkom grafu – dĺžkam úsečiek, ich pomerom, uhlom zovretým úsečkami [Velmovská, K., Lapitková, V., 2024].

Kombinácia týchto troch gramotností zabezpečí, že žiaci budú vedieť vytvárať vlastné hypotézy na fyzikálne problémy, s ktorými sa stretnú, potom tie problémy budú vedieť preniesť do digitálneho sveta odkiaľ získajú závery z tabuliek a grafov.

1.2 Počítačové modely

Niektorí fyzici zdôrazňujú potrebu poskytnúť žiakom, ktorí sú stále vo formatívnych rokoch na základnej škole, možnosť prihliadnuť na spôsob, akým vedci v reálnom živote pracujú. To je možné dosiahnuť pomocou riešenia fyzikálnych úloh alebo pomocou modelov a simulácií [Válek, J., 2023].

Keď sa fyzikálna úloha nahradí modelom, ide o simulovanie danej situácie v digitálnom prostredí. Niekedy je zadanie úlohy zložité alebo matematický aparát potrebný na jej vyriešenie, je príliš náročný. Vtedy je vhodné simulovanie danej situácie a hľadanie riešenia alebo záveru pomocou nejakého appletu alebo programu. S pojmom model úzko súvisia pojmy simulácia a vizualizácia.

Vizualizácia je definovaná ako transformácia fyzikálneho fenoménu do grafickej podoby. Nezáleží na tom, či ten daný fenomén je nejaký fyzikálny problém, vzťah, proces alebo objekt. Výsledkom vizualizácie potom môže byť konkrétny proces alebo už výsledok problému. Hlavným cieľom je vytvorenie názornej predstavy o skúmanom fenoméne a jeho pochopenie [Spousta, V., 2007].

Vizualizácia je veľmi dôležitý prvok prijímania informácií. Až 87 % z toho, čo vstupuje do nášho mozgu ako informácie, je prijímaných vizuálne. Zároveň, človek si zapamätá 70 % z toho, čo vidí, počuje a o čom sa baví zároveň, 90 % z toho, čo robí, namiesto 30 % z toho, čo len vidí v obrazovej podobe [Petty, G., 2002].

Pre toto je využívanie modelov výborný prostriedok zapojenia žiakov do vyučovacieho procesu. Žiaci v dnešnej dobe trávia viac času na digitálnych zariadeniach ako generácie doteraz a presne preto je využitie digitálnych aplikácií, konkrétne počítačových modelov, veľmi dobrý spôsob, ako vyprovokovať u žiakov záujem o prírodné vedy, v tomto prípade o fyziku, a zároveň zvýšiť pravdepodobnosť toho, že si žiaci danú problematiku osvoja.

Simulácia je určitá forma imitácie reálnych vecí, stavov, vzťahov alebo procesov. Simulácia, tak ako ju definuje väčšina zdrojov, pracuje s určitým modelom, teda idealizovanou podobou skutočného sveta. Tento fakt samozrejme nevylučuje možnosť získania poznatkov o svete reálnom. Na určitej úrovni zjednodušenia môžeme povedať, že simulácia predstavuje experiment s modelom [Paholok, I., 2008].

Po ozrejmení súvisiacich pojmov s modelmi, teda simulácia a vizualizácia, je jasné, že slovo model neznamená len zjednodušenie nejakej situácie, ale je to komplexný proces skladajúci sa z viacerých častí. Modelom je pomenované také zobrazenie reality, ktoré si zachováva pre tvorcu dôležité vlastnosti, ktoré pozoruje, a má také vlastnosti, aké tvorca pri pozorovaní daného javu spozoroval. Model má vo vedeckom poznávaní priniesť nové poznatky a vo vyučovacom procese sprostredkováva vedecky známe poznatky, alebo ponúka metódu, ako získať nové poznatky [Válek, J., 2023].

Modely, ktoré sú využívané v tomto príspevku sú konkrétne počítačové modely a taktiež vedecké modely, keďže sa venujú fyzikálnym problémom a javom. Počítačový model, alebo počítačová simulácia, je program, ktorý sa spúšťa na počítači a pracuje s nejakým matematickým modelom, ktorého správaniu chceme porozumieť. Daný program vyprodukuje vždy nejaký výsledok. Počítačovú simuláciu možno chápať aj ako celý proces potrebný na to, aby sa tvorca dostal od problému až po získané výsledky [Chejlava, D., 2023]. Vedecký model je fyzikálne alebo matematické znázornenie systému myšlienok, udalostí alebo procesov. Ide však o reprezentáciu zjednodušených vysvetlení, ktorá sa nesnaží vysvetliť každú situáciu alebo každý detail. Z toho vyplýva, že vedecké modely nie sú a nemôžu byť totožné so skutočným svetom, ktorý sa snažia opísať [Válek, J., 2023].

Vedecké modely sa rozdeľujú na 3 podkategórie, tie sú myšlienkové, vyjadrené a konsenzuálne. Počítačové modely môžu byť buď vyjadrené alebo konsenzuálne, keďže myšlienkový model je definovaný ako osobná predstava, ktorú si jednotlivec alebo skupina vytvorí. Vyjadrený model, alebo „expressed model“ je v jednoduchosti len myšlienkový model pretavený do reality, aby ho mohli využívať aj ostatná populácia. Konsenzuálne modely sú také, ktoré sú už overené vedeckou komunitou, ktorá sa na ňom zhodla a akceptuje ich [Gilbert, J. K., 2004].

Podľa kvality modelu, jeho zamerania a zároveň používateľa, ktorý model vytvoril, môže model poskytnúť rôzne výsledky a závery. Je nutné ale povedať, že počítačové modely, ani žiadne iné modely, nedokážu nahradiť reálne experimenty, merania a pozorovania a mali by slúžiť ako doplňujúce aktivity popri osvojovaní daného učiva.

1.2.1 Tvorba modelov

Teraz je na mieste opísať to, čo vstupuje do tvorby modelov. Často to nie je priamočiary proces a vstupujú do neho viaceré premenné ako napríklad problém s fungovaním programu alebo jeho funkcie, nedostatočne premyslený plán tvorby modelu, čo môže viesť k neschopnosti vyvodiť záver k predom vytvorenej hypotéze a mnohé ďalšie.

Pri tvorbe modelov by už tvorca mal mať rozmyslené, na čo daný model potrebuje a čo ním chce vysvetliť. Podľa Bakoša [Bakoš, D., 1971] má tvorba modelov tri hlavné časti:

1. Zjednodušenie ako základ fyzikálno-matematického sledovania a modelovania týchto zložitých javov. Zjednodušením sa tu myslí nájdenie merateľných vzťahov, reprodukovateľných na modely, inak povedané, ide tu o vyčlenenie niektorých elementárnych procesov zo zloženého, a to takých, ktoré sa zdajú jeho základom, a ďalej o výstavbu modelu.

2. Experimenálne skúmanie modelu, kde sú možné presnejšie merania niektorých základných parametrov a abstrahovanie od vlastností, ktoré sa nejavia základnými.

3. Prechod od modelu k prírodnému objektu, prenos výsledkov skúmania na tento objekt.

Čo sa ale týka podstaty modelovania, tak je možné modelovanie nájsť veľmi nepriamo pri cieľoch predmetu fyzika [ŠPÚ (Štátny pedagogický ústav), 2019] ako napríklad:

- opísať spôsoby ako prírodné vedy pracujú,
- formulovať a testovať hypotézy v podmienkach riadenia premenných veličín,
- organizovať, prezentovať a vyhodnocovať dáta rôznymi spôsobmi a vytvárať predpovede založené na dátach.

Modelovanie sa tiež objavuje v cieľových požiadavkách na maturitu z fyziky. Konkrétne v oblasti Aplikácia má byť žiak schopný pracovať s počítačom v oblasti matematického modelovania fyzikálnych situácií, fyzikálnych závislostí a spracovania výsledkov fyzikálnych meraní [ŠPÚ (Štátny pedagogický ústav), 2019].

1.2.2 Počítačové modely zo strany učiteľa

Podľa výskumu uskutočneného Válekom [Válek, J., 2023] na 30-tich základných školách v českých krajoch Vysočina, Jihomoravský a Olomoucký bolo zistené, že úroveň prezentovaných modelov na hodinách fyziky nesúvisela s dĺžkou ich pedagogickej praxe. Na druhej strane, možno trochu nečakane, najčastejšie ich využívajú učitelia s praxou dlhšou ako 16 rokov. Čo je celkom prekvapivé, pretože učitelia s extenzívnou pedagogickou praxou vyrastali v dobe, kedy ešte digitálne technológie neboli také rozvinuté ako v dnešnej dobe, a tak učitelia s kratšou praxou majú v tomto jednoznačnú výhodu. Najčastejšie modely využívajú učitelia fyziky jeden až dvakrát do mesiaca. Ak učitelia použijú na vyučovaní nejaký model, je to hlavne kvôli peknému vzhľadu a čitateľnému prostrediu. Tiež väčšinou učitelia nepoužívajú svoje vlastné modely, ale využijú už predom vytvorené modely, pretože to je menej časovo náročné ako si ich vytvoriť, no hlavne nie sú dostatočne edukovaní v tom, ako si ich majú sami vytvoriť.

Ak ale teda učitelia vytvárajú vlastné modely, je to hlavne kvôli zlému ovládaniu existujúcich modelov, existujúce modely sú príliš

komplexné pre ich cieľ používania alebo vôbec nenašli taký model, aký práve potrebujú. Zo štatistiky sa tiež dalo vydedukovať, že najviac učiteľov, ktorí vôbec modely používajú, to tak robia hlavne v aplikačnej a expozičnej fáze vyučovacej hodiny, čo je v súlade aj s modelmi a k nim priradenými úlohami, ktoré sa nachádzajú v tomto príspevku.

1.2.3 Počítačové modely zo strany žiaka

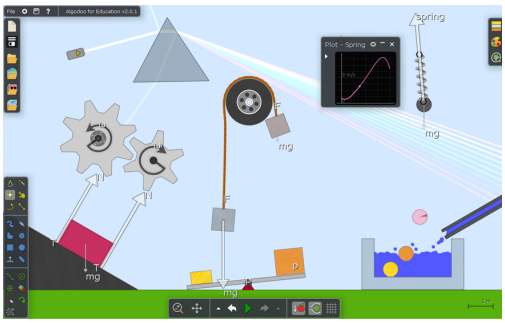
Do toho istého výskumu [Válek, J., 2023] boli okrem učiteľov zakomponovaní aj žiaci. Najčastejšie sa s modelmi v škole stretávajú žiaci 7. ročníka, jeden- až dvakrát do polroka a hlavne na fyzike. Čo trochu nekorešponduje s informáciou v predchádzajúcej časti a to že učitelia používajú modely jeden- až dvakrát do mesiaca. Toto môže mať viacero dôvodov, napríklad, že žiaci si neuvedomujú, čo je model a čo nie je, model nebol taký dobrý, alebo prospešný na to, aby si ho žiaci zapamätali, alebo jednoducho si učitelia jeden-dva modely za polrok pridali. V škole modely používajú hlavne na počítačoch a tabletoch, ak s nimi pracujú aj doma, je to hlavne na tabletoch a mobiloch. Čo sa týka ich preferencií, tak žiaci preferujú, ak je modelom doplnený experiment, ktorý učiteľ práve prezentuje. Keďže platformy, na ktorých žiaci najčastejšie používajú modely sú tablety, tak sa neradi stretávajú so zadávaním číselných hodnôt alebo parametrov a preferujú rôzne tlačidlá na zmenu vlastností alebo celých situácií.

Žiaci 9. ročníka sú tí, ktorí modely najčastejšie tvoria, podobne často ako ich používajú v škole, teda jeden- až dvakrát do polroka. Robia tak hlavne na informatike a fyzike. Medzi žiakmi sú najobľúbenejšími programami také, v ktorých sa dá zostaviť programový kód z grafických blokov, ale bol medzi nimi aj konkrétny príklad používaného programu a to Algodoo, na ktorom je postavený tento príspevok.

2 Algodoo

Program, v ktorom sú vytvorené nasledovné modely, sa nazýva Algodoo. Algodoo, prvotne Phun, čo je spojenie slov „physics“ a „fun“, bol založený 1.9.2009 ako nástroj na učenie, vytváranie hier, animácií a simulácií. Dizajn jeho 2D rozhrania je animovaný a hravý, jeho funkcie sú komplexné, no ovládanie sa dá hravo zvládnuť, čo tento program robí perfektným nástrojom pre vytváranie vlastných simulácií a aj rôznych hier, či už pre dospelých alebo deti (viď. Obrázok 1).

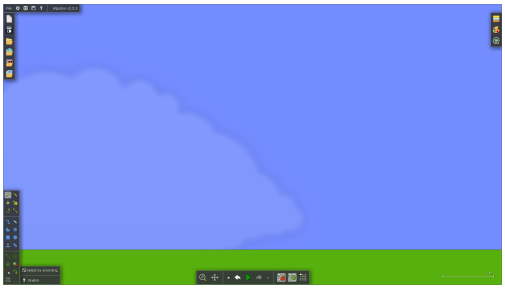
Algodoo je dostupný zadarmo na stiahnutie na nasledovnom linku: `http://www.algodoo.com/download/`, a je ho možné nainštalovať na zariadenia s Windowsom, Linuxom a taktiež je dostupný pre iPad, kde už je ale potrebné si ho zakúpiť za 4,99€. Je taktiež možné ho používať s interaktívnymi tabuľami, čo môže byť veľkým prínosom pre učiteľov v školách, kde je teda interaktívna tabuľa dostupná. Nevýhodou ale je neprítomnosť slovenského či českého prekladu. Zatiaľ čo v minulosti Algodoo mal čiastočný český preklad, dnes už si češtinu nie je možné zvoliť.



Obr. 1: Niektoré funkcie Algodoo

Práca s týmto programom je ľahko

osvojiteľná a zároveň dostatočne komplexná. Hneď po otvorení Algodoo používateľa víta úvodná obrazovka (viď. Obrázok 2). Najdôležitejšia oblasť je v ľavom dolnom rohu, kde sa nachádzajú všetky nástroje. Okrem toho, sa na spodku obrazovky v strede, nachádza tlačidlo spustenia simulácie, a taktiež tlačidlá ovládajúce odpor vzduchu a gravitáciu. Iné dôležité tlačidlá sa nachádzajú v pravom hornom rohu, konkrétne vykreslenie vektorov síl, rýchlostí a iných fyzikálnych veličín, ako aj vykreslenie grafov.



Obr. 2: Pracovná plocha Algodoo

3 Príklady modelov v Algodoo

Či už učitelia chcú vytvárať vlastné modely, používať predom vytvorené modely, alebo chcú nechávať vytváranie modelov na svojich žiakov, čím budú všetky zákonitosti daného javu objavovať sami, všetky tieto možnosti sú lepšie ako modely nevyužívať vôbec.

Čo sa týka vytvárania modelov, v tejto kapitole sa nachádza niekoľko nápadov na modely, možný postup na ich vytvorenie a taktiež úlohy pre žiakov. Žiaci si môžu vytvoriť model podľa priložených inštrukcií alebo môže učiteľ pred realizáciou aktivity nakopírovať predom vytvorený model do priečinkov na jednotlivých počítačoch/iPadoch, čo môže ušetriť čas. Ku každému modelu sú priradené úlohy, ktoré žiaci môžu riešiť buď samostatne alebo vo dvojiciach, počas vyučovania alebo ako práca na doma, vo vyučovacej fáze expozičnej, či aplikačnej.

3.1 Modely z mechaniky

Oblasť, v ktorej Algodoo najviac vyniká, je mechanika. Nasledujúce modely sú síce celkom jednoducho realizovateľné počas výučby, no tieto digitálne modely môžu žiaka zapojiť do vyučovacieho procesu vo väčšej miere, keďže zároveň s realizovaným modelom žiaci môžu analyzovať potrebné grafy meniace sa v reálnom čase, pôsobiace sily na telesá, okamžitú rýchlosť a mnohé iné.

3.1.1 Voľný pád

Prvý model, pri ktorom by sa žiaci mohli stretnúť s Algodoo, a zároveň si ho aj vyskúšať a preskúmať jeho funkcie, môže byť model voľného pádu (ďalej len VP).

Ciele:

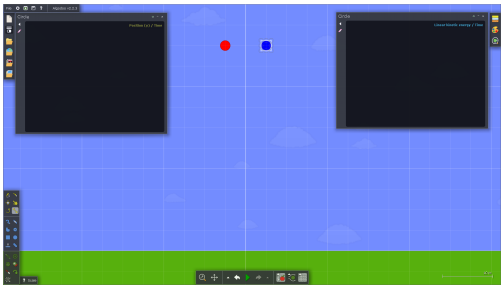
- zistiť závislosť dráhy prejdenej telesom od času;
- zistiť závislosť rýchlosti, ktorou bude teleso padať, od času;
- zistiť, ako hmotnosť telesa ovplyvňuje jeho dobu pádu;
- zistiť, ako sa menia kinetická energia a potenciálna energia podľa toho, v akej fáze pádu sa teleso nachádza;

Na vytvorenie modelu VP stačí umiestniť teleso, napríklad kruh, do zvolenej výšky nad podložkou. Vzorový model môže vyzerať tak, ako na obr. 3 a obr. 4 a žiak si ho môže vytvoriť napríklad takto:

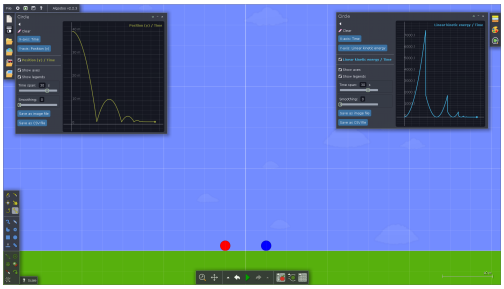
1. vytvorenie nového priestoru;

2. vloženie kruhu alebo kruhov s požadovaným polomerom do požadovanej výšky;

3. vytvorenie požadovaného grafu;



Obr. 3: Príklad modelu VP - pred spustením



Obr. 4: Príklad modelu VP - po spustení

Úlohy pre žiaka:

1. Ako ovplyvňuje hmotnosť telesa dobu pádu?

2. Aká bude rýchlosť telesa tesne nad povrchom pri páde z výšky:

   (a) 10 m,

   (b) 30 m,

   (c) 50 m?

3. Vykreslite kinetickú a potenciálnu energiu do jedného grafu. Platí zákon zachovania mechanickej energie?

4. Ako dosiahnuť to, aby sa teleso odrazilo do tej istej výšky, z ktorej padalo? (pomôcka: vlastnosti telesa)

5. Ako sa zmení doba pádu a rýchlosť tesne nad povrchom, keď zapneme odpor vzduchu, ak:

   (a) sa zmení hmotnosť a polomer sa zachová?

   (b) sa zmení polomer a hmotnosť sa zachová?

6. Guľové teleso z dreva s polomerom 0,25 m sa nachádza vo výške 40 m. Prispôsobte výšku druhého telesa zo zlata s polomerom 1 m tak, aby dopadli naraz.

3.1.2 Silomer

Silomer je nástroj, s ktorým sa žiaci stretávajú už na úvodných hodinách fyziky. Problém často ale býva v nedostatku silomerov pre každého, poprípade pre dvojice, každý silomer meria s inou presnosťou a každý je v inom stave kvality. Model silomera v Algodoo je trochu abstraktnejší, no môže pomôcť v situáciách, keď fyzikálne laboratórium nie je dostatočne vybavené alebo učiteľ nemá dostatok času na skupinovú prácu. Tiež sa tento model môže použiť pri zavádzaní pojmu mechanický oscilátor a môže sa použiť ako ďalšia možnosť vizualizácie daného problému. Žiaci sa už so silomerom počas svojho štúdia stretli a používali ho viackrát. No máloktorí z nich sa nad silomerom zamysleli v takomto kontexte.

Tento model silomeru, napríklad ako na obr. 5, spočíva na natiahnutí pružiny s tuhosťou k v dôsledku zavesenia telesa s hmotnosťou m o nejakú vzdialenosť Δy. Následne je možné zistiť pôsobiacu silu zapnutím vykresľovania pôsobiacich síl a zaškrtnutím políčka „Show values“. Alternatívne, vykreslením grafu závislosti y-ovej súradnice od času

a pomocou $m, \Delta y$ a k (Δy možno zistiť zo vzťahu $\Delta y = y - y_0$, kde hodnota y sa nachádza v grafe a y_0 z vlastností pružiny spolu s k; obe možno voľne zvoliť) vložením do vzťahu: $F = k \cdot \Delta y$ alebo $F = m \cdot g$, podľa toho, či bude žiakom zadaná hmotnosť telesa alebo tuhosť pružiny.

Ciele:

- zistiť, od čoho závisí predĺženie pružiny;
- zistiť, ako ovplyvňuje gravitačné zrýchlenie (gravitácia) predĺženie pružiny.

Jeden z mnohých spôsobov, ako si v Algodoo vytvoriť silomer je nasledovný:

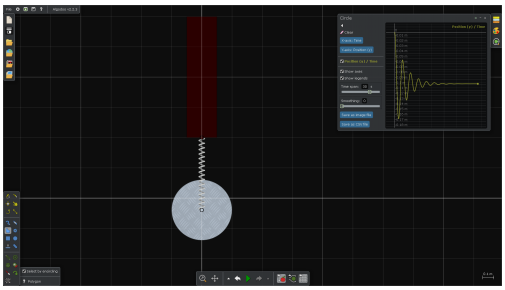
1. vloženie obdĺžnika; na rozmeroch obdĺžnika nezáleží;
2. vloženie kruhu; na rozmeroch kruhu nezáleží;
3. spojenie obdĺžnika a kruhu pružinou;

Poznámka:

- Tuhosť pružiny použitej v modeli uvedenom vyššie je 100 $\mathrm{N{\cdot}s^{-1}}$, pretože vo väčšine silomerov sa používajú pružiny s tuhosťou od 100 $\mathrm{N{\cdot}s^{-1}}$ do 1 000 $\mathrm{N{\cdot}s^{-1}}$.

Úlohy pre žiaka:

1. Zistite, od čoho závisí predĺženie pružiny.
2. Zmení odpor vzduchu predĺženie pružiny?
3. Na silomer bolo pripevnené závažie neznámej hmotnosti a pružina silomeru s tuhosťou 100 $\mathrm{N{\cdot}s^{-1}}$ sa predĺžila o 25 cm. Aká bola hmotnosť závažia?
4. Na silomer s tuhosťou pružiny 300 $\mathrm{N{\cdot}s^{-1}}$ bolo zavesené závažie s hmotnosťou 2 kg. O koľko sa pružina silomeru predĺži?
5. Silomer, umiestnený na Zemi, ukazuje hodnotu 9,8 N. Akú hodnotu bude ukazovať na Mesiaci a ostatných planétach Slnečnej sústavy?



Obr. 5: Príklad modelu Silomeru

3.2 Modely z optiky

Experimenty v oblasti optiky sú často komplikované na realizáciu, či už z dôvodu zlého stavu prístrojov vo fyzikálnom laboratóriu alebo potrebné prístroje úplne chýbajú. Nasledovné modely, síce vytvorené digitálne, sú vhodnou alternatívou pre niektoré z nich, zatiaľ čo iné môžu prehĺbiť vedomosti žiakov v tejto oblasti a zvýšiť mieru zapojenia do výučby.

3.2.1 Lom svetla

Jednoduchý, no komplexný model je ten opisujúci lom svetla. Lom svetla funguje na základe Snellovho zákona, ktorý hovorí, že lomený lúč ostáva v rovine dopadu a pomer sínusu uhla dopadu α a sínusu uhla lomu β je pre danú dvojicu prostredí konštantný, rovná sa podielu rýchlostí svetla v týchto prostrediach a platí:

$$\frac{\sin\alpha}{\sin\beta} = \frac{v_1}{v_2} = \frac{n_2}{n_1}$$

kde $n_{1,2}$ je index lomu prostredia.

Ciele:

- vedieť rozlíšiť, ako sa správa lúč svetla pri prechode rôznymi prostrediami;
- odmerať uhol dopadu, uhol lomu a dať do pomeru sínus daných uhlov;
- rozumieť pojmu medzný uhol a dokázať ho nájsť pre rôzne prostredia.

Nasledovný model, ako ten na obr.6, možno použiť ako náhradu výpočtových úloh alebo môže byť použitý ako nástroj na objavenie Snellovho zákona. Model lomu svetla možno jednoducho zostrojiť nasledovne:

1. vloženie obdĺžnika; obdĺžnik by mal prekrývať celú šírku, keďže bude pôsobiť ako druhé prostredie;
2. označenie optických priestorov n_1 a n_2;
3. vloženie kruhu; tento kruh bude slúžiť ako uhlomer, teda bude niesť informáciu o uhloch dopadu α a lomu β;
4. vloženie laseru;

Poznámky:

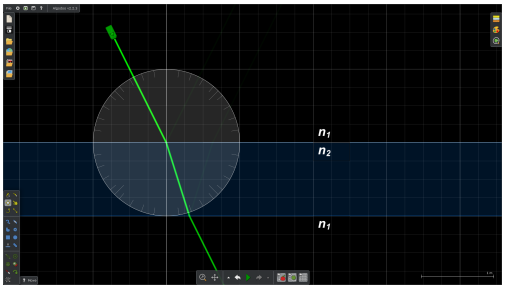
- Tento model je možné jednoducho upraviť tak, že bude modelovať odraz svetla z dokonale rovného zrkadla. Je potrebné pridať obdĺžniku podmienku, že nemôže prepustiť svetlo. To možno jednoducho zabezpečiť tým, že sa zmení index lomu na ∞.
- Keď je potrebné modelovať situáciu, kde lúč svetla prechádza z opticky hustejšieho prostredia do opticky redšieho, teda $n_1 < n_2$, tak je potrebné pridať ďalší obdĺžnik, ktorému sa zmení index lomu na požadovanú hodnotu. Inou alternatívou je vložiť laser do vnútra vytvoreného obdĺžnika, čo z neho spraví prostredie, z ktorého lúč prichádza.

Úlohy pre žiakov:

1. Lúč svetla prechádza zo vzduchu do vody a dopadá pod uhlom 30°. Pod akým uhlom sa láme?
2. Nájdite medzný uhol úplného odrazu, ak lúč svetla prechádza:
   (a) zo skla do vody,
   (b) zo skla do vzduchu.
3. Overte nasledujúce tvrdenie: Indexy lomu dvoch prostredí sú v rovnakom pomere, ako uhol dopadu a uhol lomu.

$$n_1 : n_2 = \alpha : \beta$$

4. Od čoho závisí uhol lomu?



Obr. 6: Príklad modelu lomu svetla

3.2.2 Optický hranol

Optický hranol (ďalej len OH) je priehľadné teleso s plochým povrchom, ktorý láme, odráža alebo rozptyľuje svetlo. Zvyčajne sa vyrába z materiálov ako je sklo, kremeň alebo plast. Keď svetlo prechádza cez povrch hranola alebo sa od neho odráža, môže zmeniť smer, rozdeliť sa na jednotlivé farby alebo sa vnútorne odraziť, čo z neho robí kľúčové prvky širokej škály optických systémov. Bežne sa v učebniciach fyziky žiak stretne s trojuholníkovým hranolom, ktorý vďaka

svojmu tvaru rozkladá biele svetlo na spektrum procesom lomu. Optické hranoly iných tvarov majú iné vlastnosti a iné využitie, ktoré sú opísané v blogu dostupnom tu: `https://www.uqgoptics.com/understanding-optical-prism-types-functions-and-uses/`.

Ciele:

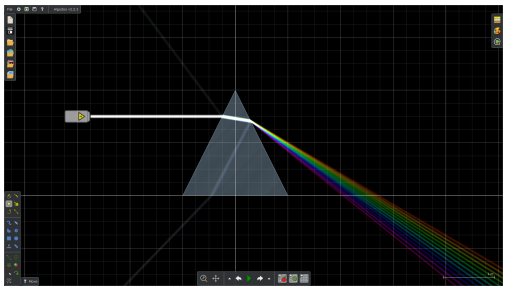
- opísať rozdiely medzi lomom a rozptylom svetla;
- zistiť, na aké farby sa rozkladá biele svetlo a pod akým uhlom sa jednotlivé farebné lúče lámu;
- zmeniť model OH tak, aby vznikli primárna aj sekundárna dúha, pozorovať a vysvetliť rozdiely medzi nimi.

Tento model slúži na vizualizáciu toho, ako sa lúč bieleho svetla láme pri prechode hranolom a a rozkladá na jeho farebné zložky. Model, taký ako na obr. 7, možno napríklad vytvoriť nasledovne:

1. vloženie trojuholníka; trojuholník by mal byť pravidelný;
2. vloženie laseru; je potrebné zmeniť farbu lasera na bielu, aby sa lúč po prechode trojuholníkom rozložil;

Úlohy pre žiaka:

1. Aké sú rozdiely medzi lomom svetla medzi prostrediami a lomom svetla pri prechode optickým hranolom?
2. Zistite, aký je rozdiel medzi uhlami lomu fialového a červeného svetla.
3. Zistite, aký index lomu má svetlo fialovej a červenej farby.
4. Aký je minimálny uhol dopadu svetla, aby vnútri hranolu nastal úplný odraz? O koľko sa táto hodnota líši od reálnej hodnoty?



Obr. 7: Príklad modelu OH

Bonusová aktivita týkajúca sa lomu a rozkladu svetla je tvorba dúhy. To sa žiakom môže ukázať už na predchádzajúcom modeli alebo je možné vytvoriť nový model, kde bude kvapka vody (kruh s indexom lomu rovným vode) a laser, ktorý vyšle biely svetelný lúč. Tu si žiaci môžu všímať, pod akým uhlom musí svetlo dopadať, aby sa biele svetlo rozložilo na farebné spektrum. Ďalšia úloha pre žiakov môže byť nájsť taký uhol dopadu lúča na kvapku vody, aby vznikla sekundárna dúha. Tá vznikne po dvojitom odraze vo vnútri kvapky a jej poradie farieb je opačné, čo môže byť ďalšou úlohou pre žiakov, konkrétne, nájsť rozdiely medzi primárnou a sekundárnou dúhou.

4 Prvé skúsenosti s implementáciou aktivít

Program Algodoo sme doteraz použili na dvoch vyučovacích hodinách. Prvá hodina sa konala v kvinte a program bol využitý ako doplnok k výpočtovým príkladom z témy : pohyby v homogénnom gravitačnom poli. Prvý príklad znel: „Teleso bolo vyhodené zvisle

nahor v tom istom momente, ako bolo druhé teleso voľne pustené. V akej výške nad povrchom sa stretnú?“ Tento príklad bol na predchádzajúcej hodine zadaný ako domáca úloha, no celkom nešťastne boli hodnoty veličín zadané tak, že žiaci neboli schopní príklad vypočítať. Počiatočná rýchlosť vrhnutého telesa bola príliš malá na to, aby platilo, že dráha, ktorú prejdú obi dva telesá dokopy, je rovná výške, z ktorej je jedno teleso pustené nadol, teda: $s_1 + s_2 = h$. Model, ktorý bol pre žiakov pripravený pred vyučovacou hodinou, bol využitý ako demonštrácia toho, prečo daný príklad nebolo možné vypočítať metódou opísanou vyššie. Podobný model bol využitý aj pri ďalšom príklade, ktorý bol len jednoduchý príklad zvislého vrhu nahor. Pomocou modelu, znova pripraveného pred vyučovacou hodinou, si žiaci overili, že čas výstupu je rovnaký, ako čas pádu. Zároveň si tiež overili, že počiatočná rýchlosť, ktorou je teleso vrhnuté nahor a konečná rýchlosť telesa tesne nad povrchom, sú totožné. Druhá hodina bola v tercii a téma hodiny bola momentová veta. Žiaci už z predchádzajúcich hodín poznali podstatu páky a momentovej vety a pomocou programu si overili svoje vedomosti v tejto oblasti. Žiaci sa pri programe striedali vo dvojiciach a každá z piatich dvojíc si vytvorila vlastný model páky a menili jeho vlastnosti podľa toho, čo skúmali. Žiaci program dokázali používať takmer hneď, ako sa k nemu dostali. Mali pár otázok k ovládaniu, na čo dostali hneď odpoveď a ďalej pracovali bez problémov. Kým dvojica pracovala s Algodoo, ostatní žiaci sa pýtali otázky ohľadom rôznych možností využitia Algodoo a zároveň viacerí žiaci po dokončení aktivity usúdili, že sa im Algodoo páči viac ako PhET, s ktorým sa už stretli a mali s ním nejaké skúsenosti.

5 Záver

Cieľom tohto príspevku bolo ukázať učiteľom fyziky možnosti zakomponovania počítačových modelov do výučby fyziky a predstaviť žiakom fyziku iným spôsobom, na aký sú zvyknutí. Taktiež bolo cieľom predstaviť podstatu toho, čo vstupuje do procesu ich vytvárania a čo žiaci potrebujú na to, aby ich dokázali správne používať a aby naplnili plánované ciele.

V prvej časti bolo písané o tom, čo musí žiak ovládať na to, aby mohol efektívne používať počítačové modely na hodinách fyziky. Išlo o skupinu gramotností, konkrétne prírodovednú, digitálnu a grafickú. Cieľom fyzikálneho vzdelávania je rozvíjať prírodovednú gramotnosť, ale je potrebné rozvíjať aj ďalšie dve. Podstata počítačových modelov spočíva v tom, že nahrádza fyzikálnu úlohu a simuluje ju v digitálnom prostredí. Počítačový model vzniká spojením vizualizácie a simulácie a sprostredkováva poznatky do zjednodušenej formy pre používateľov.

Ďalšia časť predstavila konkrétny program Algodoo, v ktorom boli vytvorené konkrétne modely z mechaniky a optiky. Oblasť mechaniky obsahovala dva modely. Bol to model voľného pádu a silomeru. Z oblasti optiky to boli model lomu svetla a optického hranola. K týmto modelom boli priradené, ako s modelmi pracovať, niekoľko poznámok pre uľahčenie práce a úlohy pre žiaka. Niektoré úlohy boli vytvorené tak, aby pomocou konkrétneho modelu vyriešili nejakú typickú úlohu, iné boli štrukturované tak, aby pomocou nich objavili kľúčové vzťahy pre daný fyzikálny dej.

Hoci už máme prvé skúsenosti s implementáciou aktivít s programom Algodoo do vyučovania, bolo by vhodné nadviazať overením týchto, a aj iných, modelov v praxi na hodinách fyziky a zistiť, kedy a ktoré modely

majú najväčší prínos pre žiakov pre hodiny fyziky na základných a stredných školách.

Poďakovanie

Chcel by som sa poďakovať doc. PaedDr. Kláre Velmovskej, PhD. za jej rady, nápady, trpezlivosť a čas, ktoré mi počas tvorby tohto príspevku venovala.

Literatúra

[Bakoš, D., 1971] Bakoš, D. (1971). Modelovanie v molekulárnej biológii. [online]. In: *Filozofia*. Filozofický ústav slovenskej akadémie vied, roč. XXVI., č. 6, s. 644-652. [cit. 27-2-2025]. Dostupné na: http://www.filozofia.sav.sk/sites/default/files/doc/filozofia/1971/6/644-652.pdf, ISSN 2585-7061.

[Bybee, R. W., 1997] Bybee, R. W. (1997). *Achieving Scientific Literacy: From Purposes to Practices*. Heinemann : Portsmouth, NH, USA. 265 s. ISBN-0-435-07134-3.

[Chejlava, D., 2023] Chejlava, D. (2023). Počítačové modely vybraných úloh z elektřiny a magnetismu. [online]. Master's thesis. Západočeská univerzita v Plzni. [cit. 24-2-2025]. Dostupné na: http://hdl.handle.net/11025/53919.

[Demkanin, P., 2018] Demkanin, P. (2018). *Didaktika fyziky pre študentov magisterského štúdia a učitelov v praxi*. Bratislava : Knižničné a edičné centrum FMFI UK. 155 s. ISBN 978-80-223-4374-9.

[Gilbert, J. K., 2004] Gilbert, J. K. (2004). Models and modelling: Routes to more authentic science education. [online]. In: *International Journal of Science and Mathematics Education*. roč. II., č. 2, s. 115-130. [cit. 26-2-2025]. Dostupné na: https://doi.org/10.1007/s10763-004-3186-4. ISSN 1573-1774.

[Harlen, W., 1999] Harlen, W. (1999). Purposes and procedures for assessing science process skills. [online]. In: *Assessment in Education*. roč. VI., č. 1, s. 129–144. [cit. 15-3-2025]. Dostupné na: https://www.proquest.com/scholarly-journals/purposes-procedures-assessing-science-process/docview/204052635/se-2?accountid=17229. ISSN 0969-594X.

[Kalaš, I., 2011] Kalaš, I. (2011). Škola ako príležitosť. [online]. In: *Metodický portál*. [cit. 13-2-2025]. Dostupné na: https://clanky.rvp.cz/clanek/o/z/10613/SKOLA-AKO-PRILEZITOST.html. ISSN 1802-4785.

[Martin, A., Madigan, D., 2006] Martin, A., Madigan, D. (2006). *Digital literacies for learning*. Londýn : Facet Publishing. 242 s. ISBN 978-1-85604-563-6.

[Paholok, I., 2008] Paholok, I. (2008). Simulácia ako vedecká metóda. [online]. In: *E-LOGOS. Electronic Journal for Philosophy*. roč. XV., č. 1, [cit. 13-2-2025]. Dostupné na: https://elogos.vse.cz/artkey/elg-200801-0010.php. ISSN 1211-0442.

[Petty, G., 2002] Petty, G. (2002). *Moderní vyučování*. 2. vyd. Praha: Portál. 380 s. ISBN 80-7178-681-0.

[Spousta, V., 2007] Spousta, V. (2007). *Vizualizace: gnostický a komunikační prostředek edukologických fenoménů.* Brno : Masarykova Univerzita. 161 s. ISBN 978-80-210-4420-3.

[Válek, J., 2023] Válek, J. (2023). *Modelování jevů z mechaniky ve školské fyzice*. Brno : Masarykova univerzita. 223 s. ISBN 978-80-280-0438-5.

[Velmovská, K., Lapitková, V., 2024] Velmovská, K., Lapitková, V. (2024). *Úvod do didaktiky fyziky*. Bratislava : Knižničné a edičné centrum FMFI UK. 256 s. ISBN 978-80-8147-142-1.

[ŠPÚ (Štátny pedagogický ústav), 2019] ŠPÚ (Štátny pedagogický ústav) (2019). *Cieľové požiadavky na vedomosti a zručnosti maturantov z fyziky.* [online]. Bratislava : ŠPÚ. [cit. 15-3-2025]. Dostupné na: https://www.statpedu.sk/files/sk/svp/maturitne-skusky/platne-od-sk-r-2018/2019/cp_fyzika_2019.pdf.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 117
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Karin Zacharová, Peter Demkanin

Komentované riešenie úloh vo fyzike gymnázia

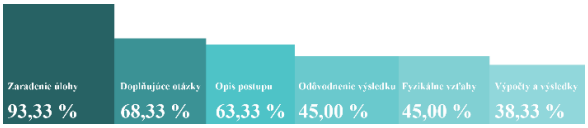
Karin Zacharová[1]* Peter Demkanin[‡§]
[1] KDMFI, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava

Podľa Inovovaného štátneho vzdelávacieho programu [ŠPÚ, 2020] je vyučovanie fyziky koncipované tak, aby učiteľ nepredkladal žiakom hotové poznatky, ale aby vytváral vhodné podmienky na aktívne osvojenie vedomostí. Učitelia fyziky ale často nemajú šancu tušiť, čo sa v hlavách žiakov odohráva počas riešenia fyzikálnych úloh. Od prvého prečítania zadania až po dosiahnutie výsledku je proces premýšľania v hlavách žiakov plný nápadov, možno aj frustrácie. Pre učiteľa by však mohlo byť užitočné poznať tieto myšlienky, pretože by mu poskytli informácie o úspešnosti zvládnutia úlohy a aj nového učiva. V neposlednom rade vie učiteľ u žiakov aj identifikovať problémové fázy riešenia danej úlohy.

V školskej praxi sa vyskytujú najčastejšie kvantitatívne typy fyzikálnych úloh, kedy ich zaradenie prepája na vyučovacej hodine skutočné fyzikálne javy s matematickými operáciami. Avšak rovnako podstatné je aj riešenie kvalitatívnych typov fyzikálnych úloh [Kluvanec et al., 1992]. Preto sme sa rozhodli vytvoriť zbierku 10 fyzikálnych úloh, ktoré v sebe zahŕňajú oba charaktery. Našou cieľovou skupinou, u ktorých sme chceli identifikáciu realizovať, boli žiaci gymnázií končiacich ročníkov navštevujúcich seminár z fyziky.

Na identifikáciu ťažkostí u žiakov sme zbierali dáta troma rozličnými spôsobmi. Žiakov sme požiadali o vyriešenie nami vytvorených úloh, ktoré sme na základe dopredu oboznámených kritérií vyhodnotili. Vytvorili sme dotazník ako dodatok k žiackym riešeniam, pretože ak je našim cieľom zistenie žiackych ťažkostí počas riešenia, tak nám nestačí zohľadniť iba ich prácu, ale aj ich samotné postoje, ktoré mali k určitým fázam riešenia. Mohli sa v nej vyjadriť aj o svojich predchádzajúcich skúsenostiach s komentovaným riešením. Posledným dodatkom k výskumu boli rozhovory s učiteľmi našich respondentov. Zaujímalo nás, či budú mať žiaci pri riešení úloh tendenciu sústreďovať sa iba na výpočty, alebo sa v prípade neúspechu pri počítaní spoľahnú na komentovanie, kde môžu svoj postup obhájiť.

Výsledky na obrázku 1 boli spracované na základe bodového zisku, a jednotlivé kritériá, podľa ktorých sme ich hodnotili, sú zoradené zostupne podľa úspešnosti. Na obrázku 2 sú kritériá zoradené taktiež zostupne na základe hodnotenia žiakov, kde sa v rámci Likertovej stupnice mohli vyjadriť, v akej miere pri jednotlivých fázach riešenia nastávali problémy. Podľa žiakov robili kvalitatívne fázy riešenia väčšie ťažkosti ako kvantitatívne, čo sa ale vo výsledkoch ukázalo presne naopak. Aj na základe rozhovorov s vyučujúcimi sa potvrdilo, že žiaci z roka na rok majú väčšie ťažkosti s vyjadrovaním sa a s grafickou stránkou výpočtov.



Obrázok 1: výsledky na základe hodnotenia riešení



Obrázok 2: výsledky na základe reflexie z dotazníkov

Cieľom práce bolo zistiť ťažkosti žiakov, ktoré by sme v budúcnosti mohli v rámci riešenia úloh na hodinách fyziky čo najviac eliminovať. Podľa Georga Polyu [Polya, 1985] je možné mnohé chyby eliminovať, ak si žiak po sebe kontroluje každý svoj krok. To môžeme dosiahnuť aj pomocou komentovania riešení.

Podporené EÚ NextGenerationEU prostredníctvom Plánu obnovy a odolnosti SR v rámci projektu č. 09I03-03-V04-00093.

Literatúra

[ŠPÚ, 2020] ŠPÚ (Štátny pedagogický ústav), (2020). *Inovovaný štátny vzdelávací program: fyzika – gymnázium so štvorročným a päťročným vzdelávacím programom.* [online]. Bratislava: ŠPÚ, 2020. 16 s.[cit. 2024-06-15]. Dostupné na: https://lnk.sk/dhh7.

[Kluvanec et al., 1992] Kluvanec et al. (1992). *Vybrané kapitoly z didaktiky fyziky*. Nitra: Pedagogická fakulta v Nitre, 1992. 210 s. ISBN 80-85183-83-8.

[Polya, 1985] Polya. G. (1985). *How to solve it*. New Jersey: Princeton University Press, 1985. 253 s. ISBN 0-691-02356-5.

* zacharova57@uniba.sk
‡ peter.demkanin@uniba.sk
§ Školiteľ

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 118–128
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Patrik Mäsiar, Martina Bátorová

Primitívne pytagorejské trojuholníky ako alternatívna forma opakovania vybraných tém na maturitnú skúšku z matematiky

Patrik Mäsiar[1]* Martina Bátorová[2]†‡

[1] Katedra didaktiky matematiky, fyziky a informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2] Katedra algebry a geometrie, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt: Príspevok sa zameriava na opis tvorby pracovného listu o pytagorejských trojuholníkoch a vyhodnotenie jeho pilotného nasadenia na dvoch z bratislavských gymnázií. Materiál je cielený najmä na budúcich maturantov z matematiky, no poslúžiť môže aj učiteľom nielen maturitného seminára ako podklad k opakovaniu viacerých tém stredoškolskej matematiky. Jednotlivé úlohy zodpovedajú vedomostiam, ktoré by mal maturant ovládať a zároveň ukazujú, ako sa dá pokročilejšia stredoškolská matematika aplikovať na iba zdanlivo jednoduchý problém. Úlohy boli navrhnuté a spracované tak, aby na ich riešenie stredoškolská matematika stačila, no ukazujú, ako možno prepájať rôzne matematické oblasti a napomôcť tak uvedomelému utvrdeniu už osvojeného učiva. Na základe spätnej väzby tak môže prezentovaný materiál poslúžiť aj učiteľom ako alternatíva k tradičnému opakovaniu daných tém, keďže ponúka možnosť obohatiť klasické poznatky o nové aplikácie a nečakané súvislosti.

Kľúčové slová: pravouhlý trojuholník, pytagorejská trojica, pracovný list, dotazník

Motivácia

Po obhájení bakalárskej práce sme sa zúčastnili Letnej školy Trojstenu, kde sme prezentovali vybrané časti práce študentom, ktorí sa prezentácie zúčastnili s dobrovoľným záujmom o tému. Okrem toho sme boli oslovení, aby sme urobili prednášku o trojuholníkoch na gymnáziu v Turci. Aj tejto prednášky sa zúčastnili študenti s dobrovoľným záujmom. Ich ohlasy boli pozitívne hlavne z dôvodu, že sa stretli s novými poznatkami, prezentovanými zaujímavou formou. V diplomovej práci sme tieto poznatky ešte rozšírili a pripravili pracovný list, v ktorom sa v priebehu niekoľkých vyučovacích hodín oboznámia s hlavnými myšlienkami týkajúcich sa pravouhlých trojuholníkov. Materiál sme sa tentokrát rozhodli vyskúšať na študentoch, ktorí neprejavili o tému osobný záujem. Keďže sa pri práci s trojuholníkmi využívajú rôzne oblasti stredoškolskej matematiky, najvhodnejšia vzorka sa zdali byť účastníci maturitného seminára. Jedným so zamýšľaných využití je alternatívna pomôcka pre opakovanie vybraných tém na maturitnú skúšku.

*masiar17@uniba.sk
†martina.batorova@fmph.uniba.sk
‡Školiteľ

1 Matematické pojmy a potrebné vzťahy

Pre pohodlie zaujatého čitateľa uvedieme potrebné pojmy a vzťahy, ktoré v bežnej matematike nie sú veľmi používané. Základným pojmom je *primitívny pravouhlý trojuholník*, ktorého strany majú celočíselné nesúdeliteľné dĺžky.

V pracovnom liste často využívame pojem *parametrizácia*. V našom príspevku používame jeden alebo dva parametre, parametrizácia je potom zobrazenie, ktoré každému parametru (dvojici parametrov) priradí bod v priestore $\mathbb{R}^2$. V príspevku uvádzame *Euklidovu parametrizáciu*, ktorá sa nachádzala už v Euklidovych základoch. Strany pravouhlého trojuholníka vieme pomocou nej vyjadriť cez parametre $u, v \in \mathbb{R}^+$ (kvôli kladným dĺžkam strán)

$$a = u^2 - v^2, \;\; b = 2uv, \;\; c = u^2 + v^2.$$

Môžeme ju nájsť napríklad v [Kolibiar et al., 1992, Veta 6.2.6].

Ďalšou spomínanou parametrizáciou je *(s, k)-parametrizácia*, o ktorej sa dá dozvedieť viac v [Mäsiar, 2023], poprípade v [Overmars et al., 2019]. Vyjadrenie dĺžok strán pre $s, k \in \mathbb{R}^+$ má tvar

$$a = s(s+2k), \;\; b = 2k(s+k), \;\; c = (s+k)^2 + k^2.$$

Rekurentný vzťah aritmetickej postupnosti a *súčet prvých n členov aritmetickej postupnosti*, definujeme

$$a_{n+1} = a_n + d; n \in \mathbb{N},$$
$$s_n = \frac{n(a_1 + a_n)}{2},$$

kde d je diferencia aritmetickej postupnosti, teda rozdiel medzi dvomi po sebe nasledujúcimi členmi. (Jednotlivé označenia nesúvisia s tými, ktoré používame v súvislosti s trojuholníkmi.)
Polomer vpísanej kružnice pri celočíselných stranách pravouhlého trojuholnika je taktiež celé číslo, čo vychádza zo vzťahu $r = \frac{a+b-c}{2}$, čo je odvodené napríklad v [Mäsiar, 2023] a v [Sporn, 2021] . Už primitívne trojuholníky musia mať práve preponu a jednu odvesnu nepárnych dĺžok. Pod *rozdelením prvočísel medzi parametre* myslíme prvočíselný rozklad polomeru $\prod_{i=0}^{n} p_i^{\ell_i}$, kde jednotlivé $p_i^{\ell_i}$ rozdeľujeme medzi parametre s a k, pretože pre polomer vpísaných kružníc vyjadrený touto parametrizáciou platí vzťah $r = sk$. (V prípade, ak trojuholník nie je primitívny, polomer vpísanej kružnice bude vyjadrený ako $r = msk$, kde $m \in \mathbb{N}$.)
V jednej úlohe sa vyskytuje μ*-trojuholník*, pre ktorého pomery strán platí $\frac{a}{b} = 1 + \frac{b}{c}$.
Pellove čísla P_n sú postupnosť čísel $1, 2, 5, \ldots, 2P_{n-1} + P_{n-2}$ a pre *Pellovu aproximáciu* $\sqrt{2}$ platí vzťah $\sqrt{2} \cong \frac{P_n + P_{n-1}}{P_n}$. Pellove čísla sú uvedené napríklad v [Burton, 2007, str. 348].

2 Príprava didaktického materiálu

Didaktický materiál sme sa rozhodli pripraviť vo forme pracovného listu. Jednotlivé úlohy sme sa snažili usporiadať tak, aby na seba čo najlepšie nadväzovali a boli pre študentov obsahovo aj časovo zvládnuteľné.

2.1 Štátny vzdelávací program

V štátnom vzdelávacom programe pre gymnázia s osemročným vzdelávacím programom [ŠPÚ, 2015a], pre gymnázia so štvorročným a päťročným vzdelávacím programom [ŠPÚ, 2015b] a cieľových požiadaviek na vedomosti a zručnosti maturantov [ŠPÚ, 2019] sú uvedené najdôležitejšie vedomosti, ktorými majú študenti disponovať (uvádzame tie, ktoré budú potrebné na úspešné vypracovanie pracovného listu):

- použiť základné typy dôkazov;
- použiť pri úpravách výrazov roznásobovanie, vynímanie pred zátvorku, krátenie, úpravu zloženého zlomku na jednoduchý;
- nahradiť premennú vo výraze novým výrazom, vyjadriť neznámu zo vzorca;
- nájsť NSN, NSD daných čísel pomocou prvočíselného rozkladu; pre aritmetickú postupnosť (danú explicitne) napísať zodpovedajúci rekurentný vzťah;
- nájsť súčet n (pre konkrétne n) za sebou nasledujúcich členov danej aritmetickej postupnosti;
- odvodiť Pytagorovu a Euklidove vety, vypočítať dĺžky i vzdialenosti pomocou týchto viet;
- odvodiť Tálesovu vetu a využiť ju pri jednoduchých konštrukčných úlohách;
- zdôvodniť vzťah medzi koeficientmi všeobecnej rovnice priamky a normálovým vektorom priamky;
- riešiť jednoduché kombinatorické úlohy vypisovaním všetkých možností, použitím pravidla súčtu a súčinu, využitím vzťahov pre počet kombinácií, variácií, variácií s opakovaním, permutácií a permutácií s opakovaním.

Medzi vlastnosti, ktoré majú študenti poznať (a nie sú obsiahnuté vo vedomostiach a zručnostiach [ŠPÚ, 2019]) patria:

- priesečník osi strán je stredom opísanej kružnice trojuholníka, priesečník osí uhlov je stredom vpísanej kružnice trojuholníka;
- vlastnosti zhodných a podobných trojuholníkov.

Pojmy, ktoré potrebujú študenti ovládať (a nie sú obsiahnuté v zručnostiach a vedomostiach ani vo vlastnostiach):

- súdeliteľné a nesúdeliteľné čísla;
- postupnosť daná rekurentne;
- parametrické rovnice priamky.

2.2 Proces získavania dát

Rozhodli sme sa pripraviť 12 úloh zaoberajúcich sa značnej časti matematiky na stredných školách, pričom jedna úloha bola nepovinná celá a v dvoch úlohách bola nepovinná časť c). Vypracovanie pracovného listu sme odhadovali na 2 vyučovacie hodiny vrátane vyplnenia dotazníka. Takýto čas sme zvolili aj z dôvodu, aby nám boli vyučujúci ochotnejší uvoľniť svoj seminár. Oslovili sme 5 fakultných učiteľov na 5 rôznych školách aj s ukážkou pracovného listu.

Odpoveď sme dostali z troch škôl, pričom dve boli pozitívne. Učitelia nám boli ochotní uvoľniť seminár študentov len tretieho ročníka, z dôvodu blížiacich sa maturitných skúšok. Výskum sme realizovali 3.-4. 3. 2025. Okrem pracovného listu sme pripravili aj jeho vzorové riešenie s prezentáciou. Niektoré úlohy mali vypracovať študenti samostatne s následnou spoločnou diskusiou nad riešeniami a poukázaním na zaujímavosti, pričom časti iných úloh boli úvodom pre samostatnú prácu

2.3 Úlohy z pracovného listu

Jednotlivé úlohy v pracovnom liste sú doplnené o autorské poznámky.

Úloha 1 [Hejný et al., 2004, 12.4.4] Do štvorcovej siete si označte pravouhlú súradnicovú sústavu s osami x a y. Do súradnicovej sústavy zaznačte bod $B[0,0]$ a bod $K[u,v]$. Následne úsečku BK predĺžte na jej u-násobok v smere BK a získaný bod označte P. Bodom P veďte kolmicu na BP. Priesečník s x-ovou osou označte L. Dokreslite bod A tak, aby bol trojuholník BLA rovnoramenný a jeho výška bola úsečka BP. Bodom A veďte kolmicu na x-ovú os a priesečník označte C. Dostávame pravouhlý trojuholník ABC. Pracujte s hodnotami u, v:

a) $K[2,1]$,
b) $K[3,1]$,
c) $K[3,2]$,
d) $K[4,2]$.

Akú veľkosť majú strany a, b, c trojuholníka ABC? Aký vzťah platí pre strany a, b, c všeobecne použitím u a v?

V [Hejný et al., 1990] autori považujú rovnice s parametrom za najnáročnejší druh rovníc preberaných na strednej škole, pretože býva problémom porozumenie podstaty a funkcie parametra. Študenti sa stretli s parametrickým vyjadrením priamky, no o parametrizácií strán pravouhlého trojuholníka pravdepodobne nepočuli. Úloha 1 slúži na to, aby si študenti sami odvodili Euklidovu parametrizáciu pravouhlých trojuholníkov. Popri vypracovávaní využijú konštrukciu kolmých vektorov (výmena súradníc a zmena jedného znamienka). Rysovanie nie je potrebné, postačuje štvorčekový papier. Pri našom výskume im bol poskytnutý spoločne s pracovným listom.

Úloha 2 Dokážte podmienky primitívnosti Euklidovej parametrizácie. (Primitívny pravouhlý trojuholník je trojuholník s celočíselnými nesúdeliteľnými dĺžkami strán)

a) $u > v$,
b) $\mathrm{NSD}(u,v) = 1$,
c) u, v majú rôznu paritu.

Študenti sa oboznámili s pojmom primitívny trojuholník a preopakovali si jednoduché dôkazy na podmienkach primitívnosti. Primitívne trojuholníky sú zaujímavé, pretože ich môžeme považovať za bázový trojuholník celej triedy, pričom násobkami jeho dĺžok strán dokážeme generovať nekonečne veľa podobných trojuholníkov. Práve primitívne trojuholníky budú potrebné v ďalších úlohách.

Úloha 3 Použitím podmienky $u > v$ v Euklidovej parametrizácii vieme odvodiť inú parametrizáciu. Ako budú vyzerať vzťahy pre jednotlivé strany trojuholníka použitím „novej“ parametrizácie? Aké bude mať trojuholník podmienky primitívnosti? (Pre prehľadnosť používajte parametre s a k, kde $k = v$.)

Konštruujeme vhodnú substitúciu, ktorou zmenšíme počet podmienok primitívnosti. Novoodvodená parametrizácia bude potrebná pri ďalších úlohách.

$$a = s(s+2k),\ \ b = 2k(s+k),\ \ c = (s+k)^2 + k^2$$

Úloha 4 Vďaka (s,k)-parametrizácii vieme trojuholníky rozumne usporiadať (pozri tabuľku 1).
Vieme pomocou tabuľky odvodiť rovnaké vzťahy, ako sme odvodili v úlohe 3? Ako bude vyzerať ich odvodenie?

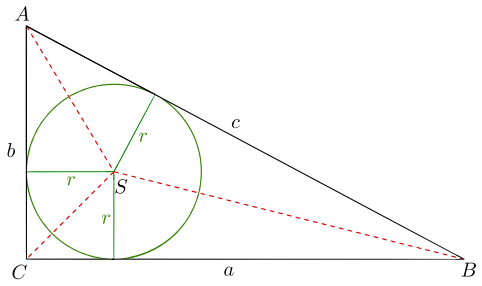
Úloha využíva iný spôsob odvodenia (s, k)-parametrizácie, keď poznáme strany jednotlivých trojuholníkov. Pre riešenie je kľučové všimnúť si, že odvesna párnej dĺžky v prvom riadku je násobkom 4 v každom stĺpci, odvesna nepárnej dĺžky je súčinom dvoch po sebe idúcich nepárnych čísel a prepona je o 2 väčšia ako ako dĺžka nepárnej odvesny, alebo o s^2 väčšia ako dĺžka párnej odvesny. V rámci stĺpcov je dôležité všimnúť si, že sa dĺžka nepárnej odvesny zväčšuje o $2s$ a k odvesne s párnou dĺžkou (aj

	$s=1$	$s=3$	$s=5$	$s=7$	$s=9$
k \ n	1	2	3	4	5
1	$(4,3,5)$	$(8,15,17)$	$(12,35,37)$	$(16,63,65)$	$(20,99,101)$
2	$(12,5,13)$	$(20,21,29)$	$(28,45,53)$	$(36,77,85)$	$(44,117,125)$
3	$(24,7,25)$	$(36,27,45)$	$(48,55,73)$	$(60,91,109)$	$(72,135,153)$
4	$(40,9,41)$	$(56,33,65)$	$(72,65,97)$	$(88,105,137)$	$(104,153,185)$
5	$(60,11,61)$	$(80,39,89)$	$(100,75,125)$	$(120,119,169)$	$(140,171,221)$
6	$(84,13,85)$	$(108,45,117)$	$(132,85,157)$	$(156,133,205)$	$(180,189,261)$

Tabuľka 1: Generátor pravouhlých trojuholníkov

k prepone) sa vždy pripočíta číslo o 4 väčšie, ako sa pripočítalo k predchádzajúcej odvesne párnej dĺžky (prepone). Na odvodenie vzťahov pre strany trojuholníka stačí poznať rekurentný vzťah aritmetickej postupnosti a súčet aritmetickej postupnosti.

Úloha 5 Ako skonštruujeme stred *opísanej* kružnice trojuholníku? Prečo?
Ako skonštruujeme stred *vpísanej* kružnice trojuholníku? Prečo? Aký vzťah platí pre veľkosť polomeru vpísanej kružnice? (Pre všeobecný trojuholník.)
Aký vzťah platí pre pravouhlý trojuholník na obrázku 1?



Obr. 1: Konštrukcia stredu vpísanej kružnice pravouhlého trojuholníka

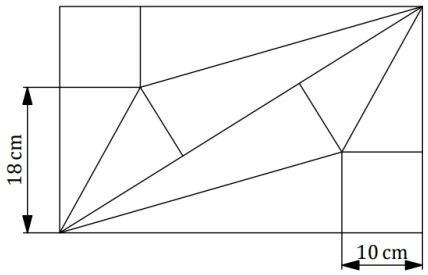
Ak je polomer vpísanej kružnice 6 a prepona má dĺžku 29, aký je obsah pravouhlého trojuholníka?

Táto úloha slúži na zopakovanie konštrukcie stredov vpísanej a opísanej kružnice trojuholníku. Otázka *Prečo?* je určená na to, aby si študenti uvedomili dôvod konštrukcie kružníc. Úloha je taktiež určená na odvodenie vzťahu pre veľkosť polomeru vpísanej kružnice pravouhlého trojuholníka. Popri práci s obrázkom by mali prísť ku vzťahu pre obsah pravouhlého trojuholníka pomocou polomeru a prepony $S = r(c+r)$. Vzťah pre polomer vpísanej kružnice pravouhlého trojuholníka využijeme pri odvodzovaní v nasledujúcej úlohe.

Úloha 6 Pomocou vzťahu pre polomer vpísanej kružnice z predchádzajúcej úlohy a vzťahov $(s,\ k)$-parametrizácie odvoďte polomer vpísanej kružnice pomocou parametrov s a k.

Jednoduchšia úloha na aplikáciu vzťahu z predchádzajúcej úlohy a $(s,\ k)$-parametrizácie. Je vhodnejšie si jednotlivé vzťahy pre strany trojuholníka roznásobiť. Získaný vzťah sa využije neskôr pri zisťovaní počtu trojuholníkov s rovnakým polomerom vpísanej kružnice v Úlohe 8.

Úloha 7 [Slovenská komisia MO, 2023, Príklad 2] Obdĺžnik na obrázku je rozdelený na dva zhodné štvorce, štyri zhodné menšie pravouhlé trojuholníky a štyri zhodné väčšie pravouhlé trojuholníky. Veľkosti niektorých strán sú vyznačené na obrázku. Vypočítajte rozmery obdĺžnika na obrázku 2.



Obr. 2: Príklad z matematickej olympiády

Táto úloha slúži na ukážku využitia (s, k)-parametrizácie. Pomocou nej je riešenie priamočiare. Samozrejme je možné aj elementárne riešenie použitím Pytagorovej vety.

Úloha 8 Koľko je primitívnych pravouhlých trojuholníkov s polomerom r vpísanej kružnice, pre hodnoty:

a) $r = 15$, b) $r = 150$, *c) všeobecne.

Vieme určiť, ktoré sú to trojuholníky?

Ide o kombinatorickú úlohu. Vďaka (s, k)-parametrizácii vieme polomer vpísanej kružnice vyjadriť ako súčin parametrov, na čo bola určená Úloha 6. Keď sú dĺžky strán trojuholníka celé čísla, musí mať celočíselnú dĺžku aj polomer. Dĺžku polomeru vieme rozložiť na prvočísla, a tie musia pochádzať práve z parametrov. V tejto úlohe sa jedná o primitívne trojuholníky, takže je potrebné dbať na podmienky primitívnosti. Je teda potrebné porozdeľovať všetky prvočísla z prvočíselného rozkladu medzi dva parametre. Na zistenie počtu takých trojuholníkov máme 2 pohľady: z n prvočísel vyberáme k-tice, koľko prvočísel priradíme jednému parametru a takto postupne prejdeme všetkými prvočíslami, čím získavame súčet v jednom riadku Pascalovho trojuholníka, alebo sa na to pozeráme z pohľadu prvočísla, ktoré má 2 možnosti, v ktorom parametri sa bude nachádzať, s tým, že prvočísel je n.

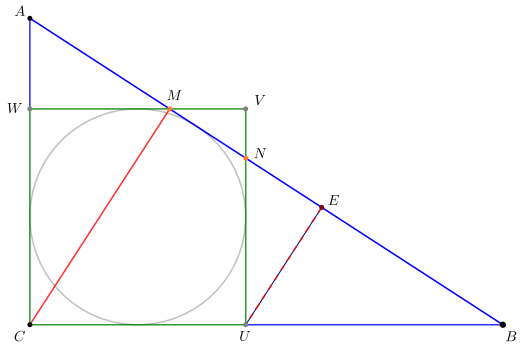
***Úloha 9** Koľko je celočíselných pravouhlých trojuholníkov s polomerom r vpísanej kružnice, pre hodnoty:

a) $r = 3$, b) $r = 25$, c) všeobecne.

Náročnejšia kombinatorická úloha, v ktorej pracujeme aj s podobnými trojuholníkmi (teda m-násobok dĺžok strán primitívnych trojuholníkov). Práve tento násobok sa objaví aj vo vzťahu pre polomer. Kvôli prehľadnosti stále pracujeme s primitívnymi trojuholníkmi, pričom rozdeľujeme prvočísla medzi 3 parametre m, s a k. Je dôležité si uvedomiť, že tentokrát sú dôležité aj exponenty a následne je potrebné dávať pozor na opakujúcu sa možnosť.

Úloha 10 Pre strany pravouhlého trojuholníka na obrázku 3 platí pomer strán

$$\frac{a}{b} = 1 + \frac{b}{c}.$$



Obr. 3: μ-trojuholník

Akú dĺžku majú úseky $CM = v_c$, $AM = c_b$, AW, CW, BU, BN, MN a NU?
Dosaďte vynechané časti rovníc.
Využitím $a^2 + b^2 = c^2$ dostávame

$$\frac{a}{b} = 1 + \frac{b}{c}$$
$$ac = bc + _____ = bc + _____$$
$$ac + a^2 = _____ + c^2$$
$$_____(a+c) = _____(b+c)$$
$$\frac{a}{c} = _____$$
$$\frac{ab}{c} = _____ \cdot b = \frac{____}{a+c} = _____$$

Rovnicu vieme ďalej upraviť

$$\frac{ab}{c} = \frac{____}{a+c} = \frac{c(a+\quad)}{a+c} = \frac{c(a+c)-c^2}{a+c} =$$
$$= c - \frac{c^2}{a+c} = c - _____ = v_c$$

Využitím podobnosti trojuholníkov dostávame

$$\frac{b}{a} = \frac{c_b}{c-b}$$
$$c_b = \frac{b(c-b)}{a} = \frac{____}{c} = b \cdot _____ = _____$$

$$|AW| = ____, \ |CW| = ____, \ |BU| = ____,$$
$$|BN| = ____, \ |MN| = ____, \ |NU| = ____$$

Úloha slúži na obohatenie vedomostí študentov. Ukazuje špeciálny pravouhlý trojuholník, pre ktorý platia zaujímavé vzťahy (napríklad pre stranu b) a taktiež zaujímavé veľkosti jednotlivých úsekov, získaných vďaka podobnosti trojuholníkov. Aproximácia na 6 desatinných miest pre pomer odvesien tohoto trojuholníka je $\frac{159}{103} \doteq 1{,}543689$. Trojuholník je špeciálny v tom, že rozdiel výšky na preponu a polomeru (respektíve priemeru) vpísanej kružnice je maximálny [Mäsiar, 2023, str. 32–36]. Zaujímavosťou je, že prepona takéhoto trojuholníka je násobkom Tribonacciho konštanty η. Úloha môže tiež slúžiť ako úvod ku ukážke Tribonacciho postupnosti a ukážke geometrického riešenia kubických rovníc. Taktiež môže viesť k využitiu Euklidovej vety o výške, kde môžeme skonštruovať parameter s (ako druhú odmocninu v_c) a aj parameter k (z úseku AW). Takto môžeme následne prejsť ku geometrickým konštrukciám násobkov a podielov čísel pomocou súradnicovej sústavy a podobných trojuholníkov.
V úlohe si študenti precvičia úpravu výrazov a podobnosť trojuholníkov. Študenti sa naučia, že bod dotyku vpísanej kružnice vieme skonštruovať pomocou štvorca opísaného kružnici.

Úloha 11 Využitím Fibonacciho identity

$$\begin{aligned}(x^2+y^2)(z^2+w^2) &= (xz+yw)^2+(xw-yz)^2 \\ &= (xz-yw)^2+(xw+yz)^2\end{aligned} \tag{1}$$

zistite počet primitívnych pravouhlých trojuholníkov s rovnakou preponou c (teda trojuholníkov, s rovnakým polomerom opísanej kružnice) pre hodnoty:

a) $c = 65$, b) $c = 1105$, *c) $c = 325$.

Vedeli by ste navrhnúť všeobecný vzťah? Čo môžu znamenať čísla získané Fibonacciho identitou?

Keď sa už zisťoval počet trojuholníkov s rovnakou vpísanou kružnicou, je vhodné uviesť aj počet trojuholníkov s rovnakou opísanou kružnicou (teda s rovnako dlhou preponou). Tu sa študenti stretnú s Fibonacciho identitou, ktorá je kľúčová pri zisťovaní tohto počtu. Fibonacciho identita (1) hovorí, že ak vynásobíme dve čísla, ktoré vieme zapísať ako súčet dvoch štvorcov, tak aj ich súčin vieme zapísať ako súčet dvoch štvorcov. Pre primitívne trojuholníky platí, že prvočíselný rozklad dĺžky ich prepony obsahuje len prvočísla tvaru $4n+1$, ktoré sa dajú zapísať ako súčet dvoch štvorcov. Keďže má identita dve ekvivalentné rovnosti, vieme pre dvojicu čísel získať dve riešenia, ktoré je možné rozvetvovať v stromovom diagrame. Študenti by mali prísť na to, že ak sa v prvočíselnom rozklade nachádza číslo viackrát, dostaneme dve rovnaké riešenia, ktoré navyše nie sú primitívne.

Úloha 12 Neexistujú primitívne pravouhlé trojuholníky, ktoré by mali pomer odvesien $\frac{a}{b} = n$, kde $n \in \mathbb{N}$. Vieme ale nájsť trojuholníky, ktoré majú pomer odvesien skoro n využitím (s, k)-parametrizácie. Jednotlivé zlomky predstavujú pomer parametrov $\frac{s}{k}$. Zistite, aký je rekurentný vzťah postupnosti pre konkrétne n a aj všeobecne.

$$\begin{aligned}
n = 1 &\rightsquigarrow \frac{1}{1}, \frac{3}{2}, \frac{7}{5}, \frac{17}{12}, \frac{41}{29}, \cdots \\
n = 2 &\rightsquigarrow \frac{3}{1}, \frac{13}{4}, \frac{55}{17}, \frac{233}{72}, \frac{987}{305}, \cdots \\
n = 3 &\rightsquigarrow \frac{5}{1}, \frac{31}{6}, \frac{191}{37}, \frac{1177}{228}, \frac{7253}{1405}, \cdots \\
n = 4 &\rightsquigarrow \frac{7}{1}, \frac{57}{8}, \frac{463}{65}, \frac{3761}{528}, \frac{30551}{4289}, \cdots
\end{aligned}$$

Posledná úloha slúži ako ukážka využiteľnosti (s, k)-parametrizácie pre hľadanie trojuholníkov s určitou vlastnosťou. Úloha je jednoduchšia a vhodná na precvičenie hľadania rekurentného vzťahu pre postupnosť parametrov pre také trojuholníky (pre $n = 1$ uvádzame jeden z nich na konci Úlohy 5). Rekurentných vzťahov je viac. Pre $n = 1$ môžeme upozorniť na to, že sa v menovateli nachádzajú Pellove čísla a samotný zlomok je Pellovou aproximáciou $\sqrt{2}$. Pre $n = 2$ zas môžeme upozorniť, že pomer aproximuje 2φ (kde φ je zlatý rez) a využíva časť členov Fibonacciho postupnosti. Úloha môže slúžiť ako úvodná úkažka reťazových zlomkov, ktorými tiež získavame jednotlivé pomery (jedno rekurentné odvodenie vychádza práve z reťazových zlomkov). Vyskytujúci sa pojem *skoro n* môže byť využitý ako prerekvizita limít.

3 Spracovanie a vizualizácia dát

Bolo nám umožnené urobiť výskum na troch triedach, kde sme získali 32 respondentov. Taktiež sa nám vyjadrili aj dvaja učitelia. Spätnú väzbu sme získali z dotazníkov. Študentský dotazník pozostával z 9 úloh, pričom posledná bola dobrovoľná, a učiteľský z 5 úloh, kde v poslednej bol priestor na voľnú spätnú väzbu.

3.1 Dáta od študentov

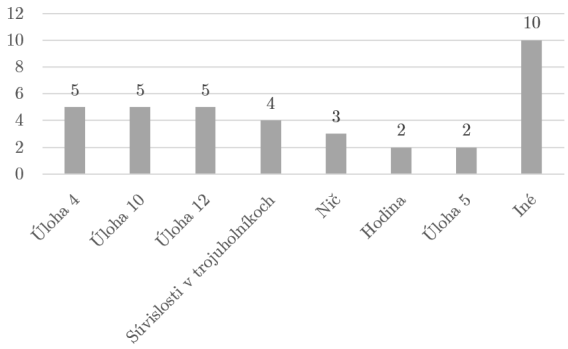
Hoci bolo študentov 32, v niektorých otázkach uviedli viac odpovedí, teda celkový počet odpovedí miestami presahuje tento počet.

Otázka 1: Už ste sa s takouto formou pracovného listu stretli? Podľa odpovedí sme zistili, že sa 12 študentov už stretlo s rovnakou alebo podobnou formou pracovného listu a pre 20 študentov bol pracovný list premiéra.

Otázka 2: Zaujali Vás úlohy v takejto podobe? Hoci bol pracovný list v takejto podobe pre väčšinu študentov nový, 25 z nich uviedlo, že ich úlohy zaujali, pričom len 7 nezaujali.

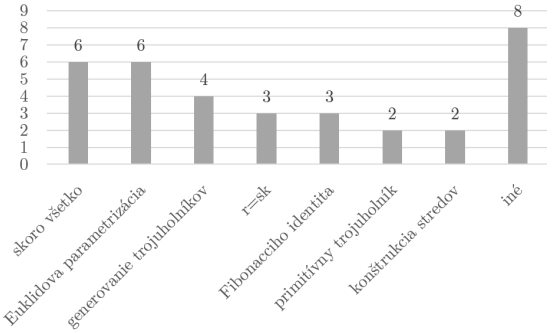
Otázka 3: Čo Vás zaujalo najviac a prečo? Odpovede sa výrazne rozdelili, čo môžeme vidieť na grafe 1. Študentom sa páčila tabuľka v Úlohe 4 s odôvodnením, že majú radi postupnosti a vedeli s nimi pracovať. Úlohu 10 uviedli študenti kvôli odvodeniu výšky na preponu, „ceste“ po trojuholníku a z dôvodu, že ju vedeli. Rovnaký počet uviedlo aj Úlohu 12 kvôli rekurentným vzťahom, páčili sa im postupnosti a takisto z dôvodu, že ju vedeli. Študentov taktiež zaujali súvislosti v trojuholníkoch, no neuviedli konkrétne dôvody. Niekoľkých študentov nezaujalo nič, pretože nemajú radi geometriu a nezaujala ich téma. Na druhej strane odpovedali aj takí, ktorých naopak zaujala hodina ako celok kvôli materiálu a podrobnému vysvetľovaniu. Z úloh ďalej uviedli aj Úlohu 5 kvôli zdôvodňovaniu konštrukcií. Desať študentov napísalo iné odpovede, ktoré sa neopakovali. Preto sme sa ich rozhodli zaradiť ako „iné“. Medzi tie patria napríklad: Fibonacciho identita, prepojenie úloh, (s, k)-parametrizácia a iné.

Otázka 4: Čo nové ste sa naučili? Odpovede študentov sú na grafe 2. Veľa z nich uviedlo, že bolo pre



Graf 1: Odpovede k otázke Čo Vás zaujalo najviac a prečo?

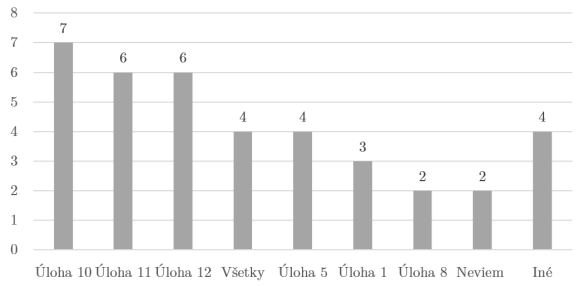
nich nové skoro všetko, pretože to bol iný pohľad na vec. Ďalší študenti sa naučili Euklidovu parametrizáciu. Iná početnejšia vzorka uviedla len všeobecne generovanie trojuholníkov. Rovnaký počet študentov sa naučilo vzťah pre polomer vpísanej kružnice pomocou parametrov s, k a Fibonacciho identitu. Po dvoch študentoch zas uviedlo, že sa naučili, čo je primitívny trojuholník a postup konštrukcie stredu vpísanej a opísanej kružnice spolu s odôvodnením takéhoto postupu. Osem študentov uviedlo jedinečné odpovede z ktorých niektoré sú: obsah pravouhlého trojuholníka pomocou pomocou polomeru vpísanej kružnice a prepony, konštrukciu bodu dotyku pomocou opísaného štvorca kružnici a všeobecne čo je parametrizácia.



Graf 2: Odpovede k otázke Čo nové ste sa naučili?

Otázka 5: Ktorá úloha bola pre Vás najnáročnejšia a prečo? Graf 3 ukazuje, že ako najnáročnejšiu úlohu študenti považovali Úlohu 10, pretože sa s takou ešte nestretli, nevedeli ako pracovať a bola pre nich dlhá. Rovnaký počet študentov uviedlo Úlohu 11, lebo ju nepochopili a Úlohu 12, pretože na ňu

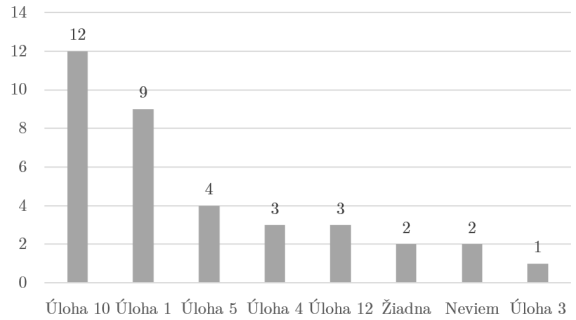
ostalo málo času a taktiež jej nerozumeli. Študenti uviedli aj Úlohu 5 s odôvodnením, že si nepamätali konštrukciu a stratili sa pri odvodzovaní polomeru. Pre niekoľkých študentov boli všetky úlohy náročné. Úlohu 1 zas uviedli študenti z dôvodu, že nemajú geometrickú predstavivosť, vyžadovala veľa rysovania a neboli zrejmé vzťahy pre strany trojuholníka. Dvaja študenti napísali Úlohu 8 s odôvodnením, že ju nepochopili a rovnaký počet študentov uviedlo, že nevedia posúdiť kvôli nedostatku času. Spolu štyri odpovede boli jedinečné, napríklad Úloha 3. Objavila sa aj odpoveď, že tie, nad ktorými sa bolo potrebné veľa zamýšľať.



Graf 3: Odpovede k otázke Ktorá úloha bola pre Vás najnáročnejšia a prečo?

Otázka 6: Ktorá úloha sa Vám páčila najviac a prečo? Prekvapivo, najviac študentov uviedlo Úlohu 10 kvôli zaujímavému trojuholníku a celkovému konceptu, pretože ich bavilo odvodzovanie. Môžeme to vidieť na grafe 4. Druhý najväčší počet študentov označilo Úlohu 1, pretože bola jednoduchá a rozumeli jej. Úlohu 5 uviedli pretože sa im páčilo zdôvodňovanie konštrukcií, logické myslenie a dobrá aplikácia. Ďalej uviedli Úlohu 4 kvôli hľadaniu vzťahov a usporiadaní pomocou $(s,\ k)$-parametrizácie a rovnaký počet študentov napísalo aj Úlohu 12, pretože bola logická a bavilo ich hľadať vzory. Niekoľkým študentom sa nepáčila žiadna úloha s odôvodnením, že im nedávali zmysel a rovnaký počet študentov uviedol, že nevedeli uviesť kvôli nedostatku času. Posledný študent uviedol Úlohu 3 kvôli úprave rovníc.

Otázka 7: Ktorá úloha sa Vám páčila najmenej a prečo? Odpovede študentov sú uvedené v grafe 5. Vidíme, že tri úlohy dostali rovnaký počet hlasov. Podľa očakávaní je jednou z nich Úloha 10, pretože neradi odvádzajú, bolo treba veľa písať a nebola pochopená. Tiež uviedli aj Úlohu 11, ktorú kvôli neporozumeniu nevypracovali a nakoniec napísali Úlohu 12, pretože bola ťažká a nevedeli vymyslieť vzťahy, ostalo na ňu málo času a považovali ju za náhodnú. Rovnaký počet hlasov mali aj 3 ďalšie odpovede. Prvou z nich je Úloha 5, pretože ju považujú za najnáročnejšiu, nemajú radi geometriu a potrebovali na ňu viac času. Ďalej uviedli Úlohu 8, pretože nevedeli prísť na výsledok a vypracovanie nebolo plynulé a zaujímavé. A nakoniec sa rovnakému počtu študentov nepáčili všetky úlohy, ale nedostali sme zdôvodnenie. Študenti ďalej označili aj Úlohu 4, pretože nemajú radi tabuľky a ťažko sa im vyjadrovali vzťahy. Dvaja študenti sa nevedeli vyjadriť kvôli nedostatku času. Po hlase si odniesla Úloha 2, pretože študent nemá rád dôkazy a Úloha 3, pretože nerozumel zadaniu.



Graf 4: Odpovede k otázke Ktorá úloha sa Vám páčila najviac a prečo?



Graf 5: Odpovede k otázke Ktorá úloha sa Vám páčila najmenej a prečo?

Otázka 8: Máte pocit, že úlohy na seba nadväzovali bez priveľkých skokov v obsahu/náročnosti, alebo by sa mali rozdeliť na viac jednoduchších úloh? Podľa 26 študentov bol pracovný list v poriadku, len by ocenili viac času na vypracovanie, jasné odkomunikovanie zamýšľaného zámeru a viac príkladov na precvičenie. Podľa jedného študenta by

rozdelenie znížilo dynamiku a pôsobilo nudne. Podľa 3 študentov úlohy nenadväzovali a 3 študenti by ocenili rozdelenie na viac jednoduchších príkladov, pretože sa (subjektívne) strácali.

Otázka 9: Akú tému by bolo vhodné podľa Vás spracovať podobným spôsobom? (Dobrovoľná) Táto otázka slúžila na získanie možných námetov na ďalšie práce. Hoci bola otázka dobrovoľná, vyjadrilo sa nemalé množstvo študentov a navrhli tieto témy:

- klasické grécke problémy (3 študenti),
- goniometria (2 študenti),
- zlatý rez,
- komplexné čísla,
- štatistika,
- funkcie,
- nekonečno ako číslo a pojem,
- limity,
- n-uholníky,
- kvadratická rovnica s odvodením cez štvorce (pravdepodobne myslené s úpravou na štvorec).

3.2 Dáta od učiteľov

Vyjadrenie k testovanej hodine sa nám podarilo získať od 2 učiteľov. Odpovedali na ne v špeciálnom dotazníku.

Otázka 1: Myslíte si, že mali pre študentov takéto úlohy zmysel? Pri tejto otázke sa názory líšili, pretože jeden si myslí, že študenti nemali čas pochopiť súvislosti a podľa druhého mali úlohy zmysel.

Otázka 2: Máte pocit, že úlohy na seba nadväzovali bez priveľkých skokov v obsahu/náročnosti, alebo by sa mali rozdeliť na viac jednoduchších úloh? Tentokrát sa v odpovedi zhodli. Podľa učiteľov sa išlo veľmi rýchlo a nebol čas na kompletné uvedomenie si nadväzností. Ich odporúčané časy sú $4-8$ vyučovacích hodín na materiál v rovnakej podobe.

Otázka 3: Vedeli by ste si predstaviť využiť tento materiál aj inokedy, napr. s budúcimi maturantmi? Aj v tejto otázke sa obidvaja zhodli. Uviedli, že je to pekné prepojenie viacerých tém.

Otázka 4: Myslíte si, že by bolo vhodné použiť podobnú formu aj na iné témy? Aké by boli podľa Vás najvhodnejšie? Podľa jedného učiteľa sa dá materiál využiť skôr ako rozšírenie poznatkov o trojuholníkoch. Druhý uviedol, že by sa takéto rozprávanie dalo použiť pri komplikovaných témach ako „neriešiteľnosť klasických gréckych problémov“.

Otázka 5: Priestor na voľnú spätnú väzbu. Jeden učiteľ uviedol, že je to vhodná inšpirácia ako robiť Pytagorovu vetu inak. Druhý učiteľ uviedol, že sa úlohami prešlo tak rýchlo, že sa stratil úžitok, ktorý z nich mohol byť. Taktiež uviedol, že je to škoda, pretože matematika za tým vyzerala byť krásna.

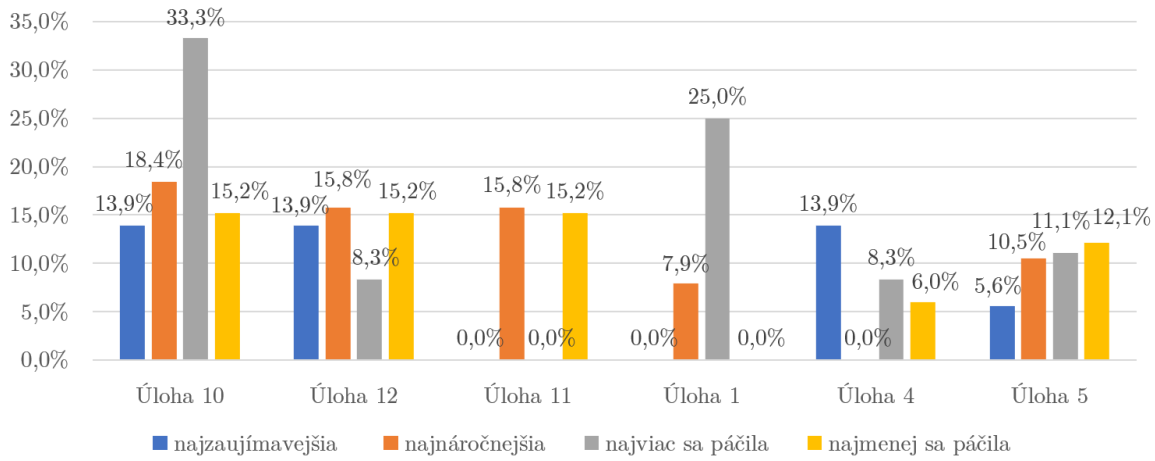
3.3 Spätný pohľad na pracovný list

Po sebakritickom zhodnotení priebehu pilotných hodín odhadujeme ideálnu časovú dotáciu na 6 vyučovacích hodín, pričom by sme úlohy z pracovného listu rozdelili do troch modulov: Úlohy $1-4$ na prvej dvojhodinovke, Úlohy $5-9$ na druhej a Úlohy $10-12$ na tretej. Takýmto rozdelením by úlohy naplnili svoj úplný potenciál, pričom úlohy v prvých dvoch moduloch na seba pekne nadväzujú. V poslednom module sú úlohy zamerané skôr na zaujímavosti, a tak by sa v prípade časovej núdze mohli vynechať.

Na prvej dvojhodinovke by si študenti v pokoji narysovali všetky trojuholníky a následne sami odvodili jednotlivé vzťahy. Potom by sa mohli venovať zvyšným úlohám, na ktoré by zostal dostatok času.

Pri druhej dvojhodinovke by si pravdepodobne najviac času vyžadovala Úloha 9, pretože považujeme myšlienku rozšíriť polomer ako súčin 3 premenných za dosť náročný koncept. Okrem toho by mohlo trvať uvedomenie, že práve do rozšíreného parametru je potrebné rozdeľovať exponent prvočísla.

Pri tretej dvojhodinovke by bola časovo najnáročnejšia určite Úloha 10. Veľa času by zabrala úprava výrazov, no pravdepodobne aj „cestovanie“ po trojuholníku by mohlo študentov zdržať, pretože by si nemuseli uvedomiť súvislosť rozdielu dlhšej a kratšej odvesny pre kratšiu časť prepony v jednom podobnom trojuholníku. Úloha 11 je skôr manuálna, pričom časovo náročnejšia by bola aj Úloha 12. Ak by študenti prišli na vzťah pri menovateli z reťazového zlomku, analogický vzťah má aj čitateľ, no v opačnom prípade by odvodenie vzťahu pre hodnoty čitateľa bolo oveľa náročnejšie. Pri dostatku času by bol priestor napríklad na ukážku reťazových zlomkov.



Graf 6: Úlohy s významným počtom hlasov

V prípade, ak by sme chceli zachovať náš pôvodný plán 2 vyučovacie hodiny, vhodný výber úloh by bol: 4, 5, 6, 8 a 12. V Úlohe 4 sa študenti zoznámia s parametrizáciou a môžu si uvedomiť, že pri poznaní niekoľkých základných primitívnych pytagorejských trojuholníkov, je možné rekurentné generovanie ostatných. Úloha 5 slúži na zopakovanie konštrukcie vpísaných a opísaných kružníc a následné odvodenie vzťahu pre vpísanú kružnicu pravouhlého trojuholníka. Ako dôsledok odvodenia sa študenti naučia vypočítať obsah pravouhlého trojuholníka pomocou tejto konštrukcie polomeru a prepony. Úloha 6 je krátka a slúži na odvodenie polomeru pomocou parametrov, ktorú využijú v Úlohe 8. V závislosti od množstva zostávajúceho času by mohli stihnúť aspoň časti a) a b). Táto úloha slúži na aplikáciu $(s,\ k)$-parametrizácie. Posledná Úloha 12 je ďalšia ukážka využitia $(s,\ k)$-parametrizácie s poukázaním na zaujímavosti, ako sú Pellove čísla a ďalšie využitie Fibonacciho postupnosti.

4 Zhodnotenie

Hoci sme neodhadli časovú náročnosť vypracovania pracovného listu, kvôli čomu sme museli prispôsobiť chod hodiny tak, aby sme ukázali aspoň myšlienku jednotlivých úloh, spätnú väzbu považujeme za veľmi pozitívnu. Hodina sa páčila $78,1\%$ študentom, pričom $81,3\%$ považovalo úlohy v pracovnom liste za nadväzujúce. Najväčší problém mali študenti s nedostatkom času, čo nasvedčuje, že by sa daným úlohám chceli venovať viac do hĺbky, aby si uvedomili ich zákutia. Najskloňovanejšia bola Úloha 10. Dostala najviac hlasov ako najzaujímavejšia, najnáročnejšia, a ako úloha, ktorá sa páčila najviac a taktiež aj najmenej. Môžeme to vidieť v grafe 6. Na vysokých priečkach v rôznych kategóriach sa umiestnila aj Úloha 12. Úloha 11 patrí medzi najviac označované v kategóriach najnáročnejšie a tie, ktoré sa najmenej páčili kvôli tomu, že ju nestihli vypracovať a z predstavenia myšlienky ju nepochopili. Úloha 1 získala prekvapivo veľa hlasov ako úloha, ktorá sa študentom páčila najviac, práve kvôli jednoduchosti a zrozumiteľnosti. Úloha 4 patrí v jednej kategórii medzi tie s najväčším počtom. Výrazné zastúpenie dostala aj Úloha 5, ktorá síce nepatrila medzi najskloňovanejšie, no zastáva významné miesto.
Podľa získaných výsledkov sme dospeli k záveru, že Úloha 10 sa študentom najviac páčila aj nepáčila z rovnakých dôvodov.

Učitelia sa zhodli na tom, že 2 vyučovacie hodiny na pracovný list v danej podobe sú málo, s čím po prvotnom nasadení súhlasíme. Navrhli sme preto nové rozdelenie úloh, poprípade väčšiu časovú dotáciu. Podľa učiteľov sa dá daný materiál využiť, lebo je to prepojenie viacerých tém a obsahuje veľa peknej matematiky.

Po ocenení úloh učiteľmi a ich pozitívnym postojom k budúcemu využitiu sme učiteľom sprístupnili prázdny aj riešený pracovný list spolu s pripravenou prezentáciou. Pripravené materiály sú dostupné na odkaze `https://sites.google.com/view/patrikmasiar` v časti „Moje práce“.

Poď akovanie

Prvý autor by rád poďakoval školiteľke a spoluautorke za jej čas, ochotu, odbornú pomoc a cenné rady, ktoré napomohli pri vypracovávaní tejto práce. V neposlednom rade aj za morálnu podporu v ťažkých chvíľach. Autorova vďaka patrí aj učiteľom, ktorí mu umožnili zrealizovať výskum na ich seminároch.

Druhá autorka príspevku bola čiastočne podporená grantom KEGA 038-4/2024.

Literatúra

[Burton, 2007] Burton, D. M. (2007). *Elementary Number Theory*. McGraw-Hill, New York, 6th edition.

[Hejný et al., 2004] Hejný, M., Novotná, J., and Stehlíková, N. (2004). *Dvacet pět kapitol z didaktiky matematiky*. Karolinum, Praha. [online], [cit. 2025-31-03]. Dostupné na: https://mdisk.pedf.cuni.cz/SUMA/MaterialyKeStazeni/PublikaceKnihy/25KapitolZDM.pdf.

[Hejný et al., 1990] Hejný, M., Vantuch, J., Repáš, V., Bereková, H., Bero, P., Hrdina, Ľ., and Benešová, M. (1990). *Teória vyučovania matematiky 2*. Slovenské pedagogické nakladateľstvo, Bratislava.

[Kolibiar et al., 1992] Kolibiar, M., Legéň, A., Šalát, T., and Znám, Š. (1992). *Algebra a príbuzné disciplíny*. Alfa, Bratislava.

[Mäsiar, 2023] Mäsiar, P. (2023). Pytagorovské trojice a ich parametrizácie. Bakalárska práca, FMFI UK.

[Overmars et al., 2019] Overmars, A., Ntogramatzidis, L., and Venkatraman, S. (2019). A new approach to generate all Pythagorean triples. *AIMS Mathematics*, 4(2):242–253. [online], [cit. 2025-31-03]. Dostupné na: https://doi.org/10.3934/math.2019.2.242.

[Slovenská komisia MO, 2023] Slovenská komisia MO (2023). Matematická olympiáda: Zadania úloh okresného kola kategórie Z9. [online], [cit. 2025-31-03]. Dostupné na: https://skmo.sk/dokument.php?id=4896.

[Sporn, 2021] Sporn, H. (2021). A group of Pythagorean triples using the inradius. *The Mathematical Gazette*, 105(563):209–215. [online], [cit. 2025-31-03]. Dostupné na: https://doi.org/10.1017/mag.2021.48.

[ŠPÚ, 2015a] ŠPÚ (2015a). *Štátny vzdelávací program Matematika – gymnázium s osemročným vzdelávacím programom*. Bratislava. [online], [cit. 2025-31-03]. Dostupné na: https://www.statpedu.sk/files/articles/dokumenty/inovovany-statny-vzdelavaci-program/matematika_g_8_r.pdf.

[ŠPÚ, 2015b] ŠPÚ (2015b). *Štátny vzdelávací program Matematika – gymnázium so štvorročným a päťročným vzdelávacím programom*. Bratislava. [online], [cit. 2025-31-03]. Dostupné na: https://www.statpedu.sk/files/articles/dokumenty/inovovany-statny-vzdelavaci-program/matematika_g_4_5_r.pdf.

[ŠPÚ, 2019] ŠPÚ (2019). *Cieľové požiadavky na vedomosti a zručnosti maturantov z matematiky*. Bratislava. [online], [cit. 2025-31-03]. Dostupné na: https://www.statpedu.sk/files/sk/svp/maturitne-skusky/platne-od-sk-r-2018/2019/cp_matematika_2019.pdf.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 129–135
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Adela Mináriková

Gradované úlohy na prácu so štruktúrou slovník v Python-e

Adela Mináriková*

Školiteľ: Daniela Bezáková†

Katedra didaktiky, matematiky, fyziky a informatiky FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt: Cieľom príspevku je preskúmať dostupné úlohy na dátovú štruktúru slovník v učebniciach programovania v jazyku Python pre stredné školy, či v iných učebných materiáloch. Ďalším cieľom je popísať slovník a jeho metódy využívané pri riešení úloh. Hlavným cieľom práce je vytvoriť sériu gradovaných úloh zameraných na dátovú štruktúru slovník v Pythone pre žiakov stredných škôl so zvýšeným záujmom o programovanie. Postupnosť úloh by mala viesť žiakov k oboznámeniu sa s postačujúcimi metódami na prácu s touto štruktúrou. Príspevok zahŕňa popísané jednotlivé úlohy a ich ciele, zhrnuté metodické poznámky pre učiteľa a aj poznatky z overenia úloh žiakmi.

Kľúčové slová: Python, slovník, gradované úlohy, programovanie

Úvod

Štruktúra slovník v Pythone je užitočnou štruktúrou, pretože zjednodušuje riešenie istých problémov. V niektorých prípadoch je výhodnejšia ako iné štruktúry, či už pre žiaka alebo programátora oboznámeného so slovníkmi, ale aj pre pamäť počítača a rýchlosť behu programu. Po preskúmaní dostupných materiálov pre stredné školy na tému asociované polia v Pythone som zistila, že sa téme venuje málo učebníc, a preto som sa rozhodla vytvoriť vlastný materiál pre žiakov a učiteľov.

Hlavným cieľom práce bolo navrhnúť postupnosť gradovaných úloh zameraných na prácu so štruktúrou slovník pre žiakov stredných škôl so zvýšeným záujmom o programovanie v jazyku Python, otestovať zrozumiteľnosť, riešiteľnosť a úplnosť zadaní so žiakmi a následne upraviť zadania podľa poznatkov z overenia. Na dosiahnutie cieľa bolo potrebné preskúmať, čo o štruktúre slovník hovorí Štátny vzdelávací program a čo o nej hovoria slovenské učebnice programovania v Pythone pre stredné školy. Dôkladne som preskúmala štruktúru slovník a jej metódy v jazyku Python. Zamyslela som sa nad tým, ktoré z nich by mali zvládnuť žiaci stredných škôl a ktoré by ich už zbytočne mýlili. Dúfam, že svojimi materiálmi a metodickými poznámkami pomôžem svojim budúcim kolegom a prispejem k obľúbenosti štruktúry slovník medzi žiakmi.

*minarikova95@uniba.sk
†daniela.bezakova@fmph.uniba.sk

1 ŠVP a vybrané učebnice Pythonu

Na začiatok sa zoznámime so štátnym vzdelávacím programom predmetu Informatika pre štvorročné, päťročné a osemročné gymnázia v oblasti Algoritmické riešenie problémov. Pri osemročných sa budeme zaujímať o ročník kvinta a vyššie. Ďalej si predstavíme slovenskú učebnicu programovania, ktorá sa ako jedna z mála zaoberá dátovou štruktúrou slovník.

1.1 ŠVP a dátová štruktúra slovník

V oblasti Algoritmické riešenie problémov pre vyššie spomenuté gymnázia, vzdelávame žiakov vo viacerých prierezových témach. Sú to nasledujúce témy – analýza problému, jazyk na zápis riešenia pomocou postupnosti príkazov, pomocou nástrojov na interakciu, pomocou premenných, pomocou cyklov, pomocou vetvenia, interpretácia zápisu riešenia a hľadanie a opravovanie chýb. Vo výkonových a obsahových štandardoch týchto tém, však pojem „slovník“ nájsť nevieme. Tento pojem nachádzame v oboch štátnych vzdelávacích programoch v oblasti: Reprezentácia a nástroje – štruktúry. Tu si pojem „slovník“ môžeme spojiť s pojmami „tabuľka“ a „štruktúra“. Môžeme sa dočítať, že slovník je akýsi typ tabuľky, ktorá je nejaký typ štruktúry. To nám ale nepribližuje pojem „slovník“ a jeho využitie v kontexte algoritmického riešenia úloh, pozri [Štátny pedagogický ústav, 2015a], [Štátny pedagogický ústav, 2015b].

1.2 Učebnica *Programujeme v Pythone 2*

Učebnica *Programujeme v Pythone 2* [Kučera and Výbošťok, 2017] je jedna z mála slovenských učebníc programovania, ktorá zahŕňa tematiku asociovaných polí, teda slovníkov. Nájdeme v nej čiastočné porovnanie slovníka s inými dátovými štruktúrami, ktoré slúži ako premostenie zo štruktúr, ktoré už sú žiakom známe a používajú ich: zoznamy a n-tice. Kapitola ukazuje na príklade, kedy je vhodné použiť slovník namiesto týchto štruktúr. Spomenuté sú aj jeho vlastnosti, aj viaceré s ním spojené metódy. V učebnici sa nachádzajú aj rôzne príklady na naučenie sa a precvičenie používania slovníka. Sú to:

- anglicko-slovenský slovník, ktorý využíva prácu s textovým súborom,
- vytvorenie programu, ktorý by nám pomohol s testovaním našej znalosti anglických slovíčok s využitím grafickej plochy z modulu tkinter,
- šifrovanie,
- frekvenčná tabuľka výskytov, či už znakov alebo slov v texte.

Ďalej sa vieme pozrieť aj na využívanie viacerých dátových štruktúr naraz. Napríklad využitie n-tice alebo zoznamu ako hodnoty v slovníku. Okrem vyriešených úloh sa vieme pozrieť aj na doplňujúce úlohy bez riešenia.

2 Čo je to slovník?

K tomu, aby sme vedeli žiakov viesť k porozumeniu dátovej štruktúry slovník v Pythone, potrebujeme vedieť, čo to slovník vlastne je, aké má obmedzenia, vlastnosti a metódy.

2.1 Slovník

Slovník alebo asociované pole (po angl. *dictionary*) je štruktúra, ktorá má v programovacom jazyku Python vlastný dátový typ (ozn. *dict*) [Python Software Foundation, 2024]. Na rozdiel od zoznamov, kde sa indexuje celými číslami, pri slovníkoch indexujeme pomocou kľúčov. Najlepšie je slovník popísaný ako množina dvojíc `kľúč: hodnota`, kde kľúč a hodnota sú oddelené dvojbodkou. Samotné dvojice sú oddelené čiarkami a všetky dvojice sa nachádzajú medzi množinovými zátvorkami. Zápis je teda nasledovný:

- inicializácia prázdneho slovníka:
  `slovník = {}`
- vytvorenie slovníka s hodnotami:
  `slovník = {kľúč1: hodnota1, kľúč2: hodnota2}`
- pridanie hodnoty do už existujúceho slovníka:
  `slovník[kľúč3] = hodnota3`

Kľúč v slovníku musí spĺňať nasledujúce podmienky:

- Musí byť unikátny v rámci jedného slovníka.
- Jeho dátový typ musí byť nemeniteľný (po angl. *immutable*). Môže to byť: celé číslo (ozn. *int*), desatinné číslo (ozn. *float*), reťazec (ozn. *str*), logický typ (ozn. *bool*) a n-tica (ozn. *tuple*). Ak využívame n-ticu, tak v nej taktiež môžu byť iba nemeniteľné dátové typy.

Hodnoty v slovníku sa môžu opakovať. Sú priradené k unikátnemu kľúču, takže vždy vieme, k čomu daná hodnota patrí. Hodnoty nemajú obmedzenie, čo sa týka použiteľných dátových typov. Okrem nemeniteľných typov, hodnoty môžu byť aj zoznam (ozn. *list*), množina (ozn. *set*), ale aj samotný slovník, čo sú meniteľné (po angl. *mutable*) dátové typy.

Ak chceme uložiť hodnotu do slovníka a použijeme taký kľúč, ktorý sa už v slovníku nachádza, tak sa hodnota priradená ku kľúču prepíše. V prípade pokusu o prístup k hodnote cez kľúč, ktorý neexistuje, program vypíše chybu.

2.2 Metódy

So slovníkmi je spojených viacero metód. Predstavíme si iba tie z nich, ktoré využívame v zadaniach pre žiakov, prípadne v metodických poznámkach k zadaniam. Pri popise sme vychádzali z [W3Schools,].

`slovník.values()` - Metóda vráti objekt dict_values, ktorý je prehľadom všetkých hodnôt, nie je to ani zoznam, ani množina. Tento objekt môže byť parametrom funkcie `len()`, `min()` a `max()`, dá sa cezeň prechádzať cyklom a kontrolovať, či sa v ňom nachádza daná hodnota pomocou

operátora `in`.

`slovník.items()` - Metóda vráti objekt dict_items, ktorý je prehľadom všetkých dvojíc ako n-tíc nasledovne: (kľúč, hodnota). Taktiež to nie je ani zoznam, ani množina. Tento objekt tiež môže byť parametrom funkcie `len()`, `min()` a `max()`, dá sa cezeň prechádzať cyklom a kontrolovať, či sa v ňom nachádza daná hodnota pomocou operátora `in`. Väčšinou sa táto metóda používa práve pri cykloch.

`slovník.pop(kľúč)` - Metóda odstráni daný kľúč zo slovníka a vráti hodnotu priradenú ku kľúču. Pokiaľ sa kľúč nenachádza v slovníku, program vypíše chybu.

3 Popis úloh a metodické poznámky

Séria gradovaných úloh obsahuje 10 zadaní. V tejto časti príspevku si predstavíme, z akého dôvodu sú práve tieto úlohy zaradené do gradovanej postupnosti a čo by sa z konkrétnych úloh mali žiaci naučiť. Konkrétne zadania úloh sa nachádzajú v prílohe *zbierka_uloh_slovnik.docx*.

3.1 Vytvorenie slovníka

Zámerom prvej úlohy v postupnosti je vytvorenie slovníka, čo znamená, naučenie sa syntaxi asociovaných polí v programovacom jazyku Python. Ďalším zámerom je zopakovanie alebo predstavenie terminológie *kľúč* a *hodnota*, ktorá je neoddeliteľnou súčasťou slovníkov. V zadaní sa žiakov pýtame aj na otázku, ktorá ich má usmerniť k myšlienke, že pri programovaní existuje veľa správnych riešení.

3.2 Vlastnosti slovníka

V tejto úlohe predstavujeme žiakom niektoré z vlastností slovníkov. Sú to unikátnosť kľúča, nemožnosť indexovania slovníka neexistujúcim kľúčom a fakt, že vieme zmeniť hodnotu už existujúceho kľúča. Taktiež si v tejto úlohe žiaci osvoja syntax `slovník[kľúč] = hodnota`.

3.3 Typy kľúčov a hodnôt

V zadaní pokračujeme s predstavovaním vlastností. Cieľom tejto úlohy je získanie vedomosti, ktoré dátové typy vieme používať ako kľúče a predstavenie možnosti používania rôznych dátových typov ako hodnoty, čo sa nám bude hodiť v neskoršom zadaní. Okrem tohto hlavného cieľa sa zadanie sústredí na zopakovanie dátových typov, ktoré žiaci prebrali pred témou slovníky a aj na spoluprácu so spolužiakmi.

3.4 Úprava slovníka a jeho výpis

Ešte treba predstaviť jeden fakt o slovníkoch, a to je, že sú meniteľným dátovým typom. Toto žiakom vyslovene nepovieme, ale ukáže sa to pri pridávaní nových dvojíc a úprave hodnoty pri už existujúcich. Úloha by žiakom mala predstaviť vypisovanie slovníka pomocou for cyklu, a ak takto nebudú riešiť zadanie treba ich na to upozorniť, pretože je to kľúčová znalosť. Druhý argument pre cyklus je taký, že ručné vypisovanie každého jedného reťazca je zbytočne zdĺhavý proces. Žiaci sa stretnú aj s relatívnou zmenou hodnoty daného kľúča, napr. s pripočítavaním k hodnote, pri čom si musia dať pozor na to, aký dátový typ zvolili prvotne.

3.5 Výškový priemer triedy

Najväčším cieľom tejto úlohy je uvedomenie si, že aj keď veľmi ľahko vieme zistiť hodnotu podľa kľúča, tak opačná operácia, t. j. zistenie kľúča podľa danej hodnoty, nie je až taká jednoduchá. Neexistuje na to jednoduchá funkcia alebo metóda, žiaci sa proste musia vynájsť. Pri tejto úlohe narážame aj na fakt, že nie pri všetkých riešeniach je potrebné si dáta ukladať do slovníka, a tak s nimi pracovať. Je dôležité, aby žiaci vedeli, že treba zvážiť výhody a nevyhody rôznych dátových typov, predtým než vôbec začnú písať kód. Ak však dostaneme štruktúru už predpripravenú, často je zbytočné ju meniť. Vhodné je, aby z nej žiaci vedeli vybrať dáta, ktoré potrebujú. Na toto by mali vedieť použiť internet a vyhľadať si použiteľné funkcie a metódy. Úloha tiež skúma schopnosť žiakov rozmýšľať matematicky, čo je veľmi často úzko spojené s programovaním samotným.

3.6 Zmena všetkých hodnôt v slovníku pomocou for cyklu

V predošlých úlohách sme žiakom predstavili dôležité a postačujúce vedomosti o práci so slovníkmi a teraz prišiel čas, ako to aj často pri programovaní býva, na kombinovanie predošlých znalostí s tými novými. Pri tejto úlohe to je opakovanie modulu `random`. Zároveň sme tu vytvorili priestor, spoločne

s predošlou úlohou, na pomerne organické zopakovanie si témy funkcie. Využíva sa tu aj naučená zručnosť z úlohy 3.4, t. j. pripočítavanie k hodnote. Zadanie už priamo vyžaduje od žiakov vyhľadanie si vhodnej metódy na internete. Mohli by sme ju žiakom prezradiť, ale myslíme si, že ak budú nútení sami si ju nájsť (zvoliť vhodené kľúčovné slová), skôr si ju zapamätajú, resp. budú ju vedieť nájsť aj kedykoľvek inokedy.

3.7 Vytvorenie grafu z údajov v slovníku

Táto úloha je zameraná na kombinovanie slovníka s modulom `tkinter`. Okrem tohto je cieľom aj čítanie alebo prezeranie grafu s porozumením. V zadaní je spomenuté, že sa jedná o upravený slovník, a to by žiakov malo prinútiť sa zamyslieť nad tým, "Prečo je takto formulovaná otázka?" alebo "Ako sme upravovali slovník v predošlej úlohe?". Malo by ich to viesť aj k tomu, aby porovnali graf v zadaní so slovníkom, ktorý chcú použiť.

3.8 Slovník ako kľúč pre šifrovanie a dešifrovanie

Opäť v úlohe kombinujeme slovník s pravdepodobne prebranou programovacou témou. Tentokrát je to čítanie zo súboru a práca s reťazcami. Jedným z cieľov, ku ktorému vedie aj úloha otázkou, je správne si rozdeliť znaky pomocou podmienok, a podľa toho určiť, ako sa má daný znak správať. Ďalším cieľom je uvedomenie žiakov, že slovenská diaktritika je prekážka pri riešení úloh so slovenským textom, v tejto úlohe konkrétne s veľkými písmenami s diakritikou, pretože na to sa nedá použiť ASCII tabuľka. Znovu sa tu objavuje možnosť využitia funkcií. Tentokrát by funkcia mala už dva parametre: slovník a reťazec. Hlavným cieľom pre žiakov je, aby získali zručnosť v zámene hodnoty a kľúča v slovníku. Mala by ich k tomu viesť pomôcka v zašifrovanom texte, ktorá vraví, že "Šifrovanie je opačná operácia k dešifrovaniu.".

3.9 Počet výskytov písmen v texte

Frekvenčná analýza je pomerne časté využitie slovníka pri programovaní. Je to niečo, čo sa podobá k tomu často žiakmi spomínanému "reálnemu životu". Nie je to jediný dôvod pridania tejto úlohy. Zámerom je, aby žiaci podľa internetu zistili ako funguje funkcia `sorted()` v slovníkoch, a čo musia spraviť, aby fungovala v ich prospech.

3.10 Heslová politika

Posledná úloha je tá, ktorá sa najviac podobá "reálnemu životu" programátora. Vyslovene nehovorí, že je potrebné na riešenie zadania použiť slovník, avšak keďže je to posledná z gradovaných úloh na tému slovníky v Pythone, môžeme povedať, že to z toho vyplýva. Cieľom tejto úlohy je osvieženie si vnorených cyklov, ale aj prácu s podreťazcami. Táto úloha je inšpirovaná [Advent of Code, 2024] a môže žiakom priblížiť reálny život samorozvíjajúceho sa programátora.

4 Testovanie a poznatky

Gradované úlohy z predošlej kapitoly boli otestované ôsmimi žiakmi 3. ročníka päťročného gymnázia v slovenskom jazyku. Testovanie prebiehalo na ôsmich vyučovacích hodinách informatiky, v štyroch po sebe nasledujúcich týždňoch (dvakrát do týždňa jedna vyučovacia hodina). Žiaci mali z predchádzajúcich hodín v Pythone prebrané učivo zoznamy, čítanie z textového súboru, práca s reťazcami, práca s modulom tkinter i random, for cyklus aj podmienky. V skupine žiakov sa nachádzali žiaci na rôznych úrovniach porozumenia a zručností programovania, keďže sa jednalo o povinný predmet. Väčšina zo žiakov programovala v prostredí Python IDLE, niektorí používali Visual Studio Code. Na testovacích hodinách mali žiaci možnosť si hľadať informácie na internete, priam k tomu boli smerovaní.

Najväčší problém pri riešení úloh nastával nie pri samotnom programovaní, ale pri čítaní zadania. Žiaci si často neprečítali celé zadanie, a preto nevypracovali úlohu správne. Občas mali otázky, ktoré by ľahko zodpovedalo prečítanie zadania s porozumením. Žiakom by bolo vhodné ešte pred začiatkom riešenia úloh navrhnúť, aby si poriadne prečítali úplne celé zadanie, vrátane podúloh (a), b), ..., a až potom začali s programovaním. Ďalej sme si všimli, že sa žiaci snažili najskôr napísať celý kód a neskúšali ho priebežne testovať, aby vedeli, či je ich časť kódu správna a robí to, čo by mala.

Čo nás tiež úprimne prekvapilo, bol nezvyk žiakov vyhľadávať si veci na internete. Aj reálni

programátori čerpajú pri svojej práci informácie z internetu, či z iných zdrojov. Je nerealistické si úplne všetko zapamätať. Dôležité je, aby si potrebné informácie vedeli vyhľadať, prípadne upraviť a aplikovať ich do svojej práce. Aj k tomuto by sme mali žiakov pri výučbe programovania na stredných školách viesť.

Cennou skúsenosťou pre nás je, že to, čo my považujeme za samozrejmé, žiaci často nie. A teda ak chceme, aby sa žiaci ubrali nejakým smerom, tak to musíme zdôrazniť, či už v zadaní alebo naživo.

4.1 Vytvorenie slovníka

Po stručnom úvode žiaci nemali veľký problém s tvorbou slovníka. Pri počiatočnom predstavení slovníkov je určite vhodné ukázať použitie reťazcov a čísel ako kľúčov a hodnôt.

4.2 Vlastnosti slovníka

Pri podúlohe a) si žiaci všimli prepísanie hodnoty kľúča `"Hana"` až keď boli vyzvaní, aby porovnali pôvodný počet žiakov s počtom žiakov vo vypísanom slovníku. Z tohto dôvodu sme do upraveného zadania pridali pomôcku navádzajúcu na overenie počtu žiakov. V pôvodnom zadaní žiaci nemali vytvárať slovník, mali ho už predpripravený. Myslíme si, že tvorba slovníka by taktiež mohla pomôcť žiakom uvedomiť si, že sa kľúč `"Hana"` opakuje a zároveň si znovu zopakujú naučenú zručnosť vytvárania slovníka. Vypisovanie slovníka chceli žiaci robiť pomocou for cyklu. Pri tejto úlohe to nie je nevyhnutné, stačil by aj výpis celého slovníka jedným príkazom `print(slovník)`, ale aj pomocou cyklu je to správne.

Časť c) niektorí žiaci chceli riešiť pomocou for cyklu a iterácie, čo je veľmi dobrý nápad, a samozrejme si to môžu skúsiť, zároveň od verzie Pythonu 3.7 asociované polia zachovávajú poradie prvkov, takže by to každému žiakovi vypísalo rovnaký prvok. Avšak tu išlo o ukážku toho, čo sa stane, keď sa snažíme vypísať neexistujúci kľúč. Ako riešenie sme zvolili zátvorku s navedením.

4.3 Typy kľúčov a hodnôt

Táto úloha nerobila žiakom žiaden problém, ale až potom, ako sme spolu prebrali, aké dátové typy poznajú. Z tohto dôvodu považujeme túto úlohu za ešte dôležitejšiu, hlavne na zopakovanie už získaných vedomostí.

Pridali sme skúšanie rôznych typov hodnôt, predovšetkým kvôli poslednej úlohe, t. j. *Heslová politika*. Žiaci nemali predtým vyskúšané, že môžeme používať zoznam ako hodnotu, a zo série úloh sa práve do tejto hodilo pridať osvojenie si tejto zručnosti.

4.4 Úprava slovníka a jeho výpis

Úprava slovníka prebehla bez väčších problémov. Pri výpise žiaci nepoužili for cyklus tak, ako by sme predpokladali, že spravia. Síce v zadaní nikde nie je vyslovene napísané, že majú slovník vypísať for cyklom, je to určite menej prácne. Nechceli sme do zadania písať explicitne, že majú použiť for cyklus, aby ich zadanie nútilo sa zamyslieť. Namiesto toho sme pridali navádzajúcu vetu o opakovaní, pretože cieľom tejto úlohy je, aby žiaci vedeli používať for cyklus na výpis slovníka.

4.5 Výškový priemer triedy

Zadanie podúlohy a) žiaci riešili očakávaným spôsobom, t. j. prechádzali slovník for cyklom a pripočítavali hodnoty premennej a tento súčet vydelili počtom iterácií cyklu. Pri riešení nenastali žiadne problémy.

K otázke v podúlohe b) sme veľa odpovedí od žiakov nedostali. Všimli sme si, že teoretické otázky, resp. otázky na zamyslenie a programovanie sa žiakom nespájajú. Zvyčajne začnú programovať zadania bez hlbšieho zamyslenia, a to možno spôsobuje tento problém. Odporúčame vyhradiť priestor na túto otázku, aby si žiaci odvodili túto spojitosť.

V úlohe c) mali žiaci najväčší problém s riešením úlohy podľa zadania. Väčšinou vypisovali číselné hodnoty výšok tam, kde si úloha vyžadovala meno žiaka s danou výškou. Mysleli sme si, že väčší problém bude s výpočtom výšky najbližšie k priemeru, ale žiaci si s tým poradili. Niektorí s navedením, niektorí samostatne. Tak isto to prebiehalo po vysvetlení metódy `values()`. Niektorí ju pochopili samostatne, niektorí až po vysvetlení. Niektorí žiaci využívali pri riešení funkciu `max()` a

`min()`, a niektorí zadanie riešili hľadaním najväčšej a najmenšej hodnoty pomocou for cyklu.

4.6 Zmena všetkých hodnôt v slovníku pomocou for cyklu

Vypracovanie tejto úlohy žiakom nerobilo problém. Z veľkej časti ju vyriešili už v predošlej úlohe. Padol tu však návrh vytvorenia funkcie priemer. Taktiež by sa dali vytvoriť funkcie pre najvyššieho žiaka, najnižšieho žiaka a žiaka najbližšie ku priemeru. Tento fakt sme pridali do metodických poznámok pre učiteľa.

V podúlohe b) sa žiaci pýtali na to, či majú vypísať jedného alebo všetkých žiakov, ktorí spĺňajú požiadavky, pretože majú rovnakú výšku. Toto sme upresnili v zadaní.

Niektorí žiaci riešili podúlohu c) bez odstránenia žiakov Cyril a Darina, t. j. vo for cykle dali podmienku, že ak je kľúčom meno Darina alebo Cyril, tak ich nepočítame do priemeru. Keďže jedným z cieľov tejto úlohy bolo predstaviť metódu `pop()` v kontexte slovníkov, doplnili sme do zadania vetu o hľadaní metódy na odstránenie kľúča zo slovníka.

4.7 Vytvorenie grafu z údajov v slovníku

Úloha s modulom `tkinter` žiakom väčšie problémy nerobila. Niektorí si nepamätali, ako sa vytvára grafická plocha. Veľa z nich si však až neskoro všimlo, že sa v grafe nachádza aj priemer, a tak mali zle vypočítané rozpoloženie grafu. Preto sme sa rozhodli zmienku o priemere doplniť do zadania.

Keďže sme úlohu 3.6. a 3.7. riešili na iných hodinách, tak si žiaci prekopírovali pôvodný slovník s Darinou a Cyrilom, a preto ich mali vo výslednom grafe napriek tomu, že sa v ukážke nenachádzajú. Pri riešení úlohy na tom v podstate nezáleží, ale potvrdzuje to fakt, že žiaci sú nepozorní pri čítaní a skúmaní zadania.

4.8 Slovník ako kľúč pre šifrovanie a dešifrovanie

Na úvod sme sa rozhodli pridať úlohu, kde si žiaci ručne vyskúšajú dešifrovať krátke slovo, aby si uvedomili, aký algoritmus budú neskôr programovať.

Po zopakovaní si čítania zo súboru nenastali nejaké veľké problémy s dešifrovaním textu v súbore. Vynašli sa aj pri použití vetvenia na zistenie, či je znak písmenom pomocou metódy pre reťazce `isalpha()`, ktorú im poradila ich pani učiteľka. Žiakom, ktorým neprepisovalo veľké písmená, sme poradili metódy `lower()` a `upper()`. Písmená prerobili na malé, aby ich vedeli nájsť v slovníku, avšak na veľké ich už spätne neprerábali. Čitateľnosť textu to neovplyvnilo, takže sme to v niektorých prípadoch nechali tak.

Pri šifrovaní, im nepomohla ani táto pomôcka v zašifrovanom texte: *„Šifrovanie je opačná akcia k dešifrovaniu.“*, a tak ich mená ako keby znovu „dešifrovali“. Zámerom tejto úlohy bola zámena kľúča a hodnoty v slovníku, a keď znovu použili kľúč desifrovanie tak sa tento cieľ nenaplnil. Pôvodné zadanie podúlohy c): *„Ako by ste vedeli zašifrovať nový text pomocou toho istého kľúča?“*, sme zmenili na: *„Ako by ste vedeli zašifrovať nový text tak, aby sa dal dešifrovať pomocou toho istého kľúča?“*. Myslíme si, že táto zmena by mohla niektorým žiakom pomôcť lepšie pochopiť zadanie.

4.9 Počet výskytov písmen v texte

Žiaci nemali veľký problém s pochopením úlohy, ani s jej vypracovaním. Trvalo im to trochu dlhšie, hlavne kým prišli na to, aký zvoliť postup pri podúlohe c). Z tohto dôvodu sme sa rozhodli podúlohu c) označiť ako náročnejšiu. Pri tomto zadaní sa vyskytla možnosť pozorovať rôznorodé žiacke riešenia.

Niektorí zo žiakov sa pýtali, aký má byť konkrétny výpis úlohy c), a tak sme zadanie doplnili o presný požadovaný výpis. Je to výpis, ktorý získajú po použití funkcie `sorted()` na dvojicu kľúč a hodnota, t. j. metóda `items()`. V úlohe nejde o formát výpisu, ide v nej o zámenu kľúča s hodnotou a následné zoradenie, ale ak má konkretizácia žiakom pomôcť, je ju vhodné pridať.

4.10 Heslová politika

Táto úloha je už pomerne náročnejšia, takže sme tiež pridali označenie (*). Žiaci mali problém s pochopením zadania a pýtali sa, či sa znaky môžu opakovať. Informáciu o opakovaní sme doplnili a pridali sme aj vysvetlenie kontroly, podľa ukážkových pravidiel na konkrétnych ukážkových heslách. Veríme, že tento doplnok pomôže žiakom s pochopením algoritmu.

Žiaci samostatne zvládli zápis pravidiel do slovníka. Musel im byť ale najskôr predstavený fakt, že ako hodnotu môžeme použiť zoznam. Tento problém sme sa pokúsili podchytiť pridaním skúšania rôznych dátových typov ako hodnoty v úlohe 3.3.

Našlo sa zopár žiakov, ktorí na riešenie prišli sami. Avšak viacerým úloha robila problém, takže sme sa rozhodli predviesť, ako by sme to programovali my. S touto ukážkou prebehla aj ukážka odlaďovania chýb (v angl. *debugger*), aby žiaci pochopili použitý algoritmus.

V úlohe b) žiaci znovu správne nedokončili zadanie. Namiesto vypočítania percent správnych hesiel často vypísali iba počet správnych hesiel. V jednom prípade aj počet nesprávnych. Pýtali sme sa však na pomer správnych ku všetkým zúčastneným. Tu môžeme znovu pozorovať žiacku nepozornosť pri čítaní zadania s porozumením.

Záver

V našom príspevku sme skúmali dostupné materiály pre žiakov, vysvetľovali, čo je štruktúra slovník v programovacom jazyku Python, popisovali dôvody, prečo sme si zvolili gradáciu úloh takú akú sme zvolili, ciele jednotlivých úloh, ale aj nejaké metodické poznámky k nim. Vieme sa dočítať formu testovania a aj hlavné poznatky z tohto overenia navrhnutých úloh.

Prieskum potvrdil môj predpoklad, že veľa slovenských materiálov na prácu s touto štruktúrou nie je. Tvorba úloh mi priniesla veľa nových poznatkov ohľadom gradácie. Testovanie úloh a ich následná úprava podľa poznámok z testovacích hodín mi dali asi najviac, čo sa týka porozumenia, aké dôležité je postupovať pomaly. Samotné zadania úloh nebolo potrebné veľmi upravovať. Zároveň potrebné zmeny sa pomerne opakovali pri viacerých úlohách. Pochopila som aj to, že nie všetko, čo ja považujem za samozrejmosť, musí byť samozrejmosťou aj pre žiakov a žiakom treba ukázať radšej viackrát ako menej.

Poďakovanie

Chcela by som poďakovať hlavne PeadDr. Daniele Bezákovej PhD, za jej rady, nápady a celkový čas, ktorý si vyhradila na túto prácu. Samozrejme nemôžem zabudnúť ani na žiakov, ktorí mi pomohli posunúť úlohy na lepšiu úroveň.

Literatúra

[Advent of Code, 2024] Advent of Code (2024). Advent of code 2024, day 5. [online]. [cit. 2025-03-22].

[Kučera and Výbošťok, 2017] Kučera, P. and Výbošťok, J. (2017). *Programujeme v Pythone 2*. Mgr. Peter Kučera.

[Python Software Foundation, 2024] Python Software Foundation (2024). Python 3.13 documentation: Data structures - dictionaries. [online]. [cit. 2025-03-28].

[W3Schools,] W3Schools. Python dictionary methods. [online]. [cit. 2025-03-28].

[Štátny pedagogický ústav, 2015a] Štátny pedagogický ústav (2015a). Informatika: Inovovaný štátny vzdelávací program pre gymnáziá, 4. a 5. ročník. [online]. [cit. 2024-11-12].

[Štátny pedagogický ústav, 2015b] Štátny pedagogický ústav (2015b). Informatika: Inovovaný štátny vzdelávací program pre gymnáziá, 8-ročné štúdium. [online]. [cit. 2024-11-12].

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 136–140
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Barbora Stenová

Ako s nami komunikujú roboty? Prekoncepty žiakov vo veku 11 až 13 rokov. Pilotná štúdia

Barbora Stenová[1*]

Školiteľ: Karolína Miková[1†‡]

Katedra didaktiky matematiky, fyziky a informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt: Roboty a umelá inteligencia sa v posledných rokoch rýchlo vyvíjajú a čoraz viac sa stávajú súčasťou rôznych oblastí každodenného života. Vďaka technologickému pokroku sú roboty pokročilejšie a schopné komunikovať so svojím okolím prostredníctvom rôznych senzorov. Skúsenosti žiakov s robotmi z reálneho života, či z filmov a médií majú značný vplyv na ich pochopenie fungovania robotov. Tieto skúsenosti ovplyvňujú aj ich porozumenie komunikácie robotov s ich okolím prostredníctvom senzorov. Žiaci prichádzajú na vyučovanie s rôznymi predchádzajúcimi poznatkami o senzoroch robotov. V tomto príspevku sa zameriavame na identifikáciu a analýzu prekonceptov žiakov vo veku 11-13 rokov o senzoroch robotov. Využívame kvalitatívnu metódu zberu dát (dotazník s otvorenými otázkami) a zmiešané metódy analýzy dát, aby sme preskúmali, aké typy senzorov žiaci poznajú, ako rozumejú ich fungovaniu a akým spôsobom si predstavujú dáta, ktoré senzory získavajú a odosielajú do riadiacej jednotky robota. V tomto príspevku predstavujeme identifikované prekoncepty žiakov a rôzne úrovne ich porozumenia funkciám a práci senzorov v robotike.

Kľúčové slová: prekoncepty, robot, senzor, edukačná robotika

1 Úvod do problematiky

V súčasnej dobe dochádza k intenzívnemu zavádzaniu robotiky, automatizácie a umelej inteligencie do viacerých rôznych oblastí bežného života [Dwivedi et al., 2021]. Školstvo tiež podlieha týmto trendom a je dôležité, aby si žiaci osvojili základné princípy robotiky a umelej inteligencie. K týmto základným princípom neodmysliteľne patrí aj pochopenie fungovania senzorov. Senzory zohrávajú zásadnú úlohu pri komunikácii robotov s okolím, pretože umožňujú implementáciu tzv. modelu Sense–Reason–Act (SRA) [Fanchamps et al., 2021], ktorý pozostáva zo snímania okolia, ich vyhodnotenia a následnej akcie. Aj keď môže byť tento koncept pre žiakov náročný, moderné blokové programovacie prostredia umožňujú jeho priblíženie aj úplným začiatočníkom. Edukačná robotika umožňuje žiakom osvojiť si základné princípy fungovania technológií a ich senzorov [Crandall et al., 2014]. Edukačná robotika sa prevažne integruje do STEM predmetov. Pre žiakov je to hravý spôsob výučby, ktorý rozvíja kritické a kreatívne myslenie, zručnosti 21. storočia a tiež sociálne zručnosti [Bano et al., 2024]. Dôležité je však prispôsobiť vzdelávacie ciele vyučovania robotiky aktuálnym vedomostiam a prekonceptom žiakov. Svoje prekoncepty žiaci využívajú pri riešení problémov a formujú ich skúsenosti z každodenného života. Teória "knowledge in pieces" [DiSessa, 2018] ukazuje, že vedomosti nie sú ucelené časti, ale skladajú sa z intuitívnych predstáv (p-prims). Posnerova teória konceptuálnej zmeny [Posner et al., 1982] objasňuje proces, prostredníctvom ktorého žiaci postupne nahrádzajú nesprávne predstavy presnejšími poznatkami, a to v situáciách, keď existujúce prekoncepty už nedokážu adekvátne vysvetliť nové informácie a javy.

2 Metodológia

Cieľom nášho výskumu bolo lepšie porozumieť a identifikovať prekoncepty žiakov vo veku 11 až 13 rokov o senzoroch robotov, ktorí nemajú predchádzajúce skúsenosti s robotikou. Využili sme 3 rôzne modelové príklady technológií a ich senzorov z každodenného života, prostredníctvom ktorých sme analyzovali, ako žiaci rozumejú ich fungovaniu v reálnom živote. K tomuto cieľu sme si položili nasledujúcu výskumnú otázku: O1: Aké prekoncepty majú žiaci o fungovaní senzorov a komunikácií robotov s okolím?

Pri analýze sme sa zamerali na identifikáciu rôznych úrovní prekonceptov žiakov týkajúcich sa senzorov robotov, ktoré si vytvorili na základe skúseností s robotmi z reálneho života alebo sprostredkovaných v médiách. Analyzovali sme aj možné ne-

*barbora.stenova@fmph.uniba.sk
†karolina.mikova@fmph.uniba.sk
‡Školiteľ

správne alebo neúplné prekoncepty žiakov, ktoré by mohli ovplyvniť proces osvojovania si poznatkov o funkciách a využití senzorov robotov. Tento výskum predstavuje pilotnú štúdiu, ktorej výsledky budú následne zahrnuté do širšieho výstupu z výskumného projektu skúmajúceho prekoncepty žiakov o robotoch.

2.1 Výskumná vzorka

Výskum zahŕňal 48 žiakov vo veku 11-13 rokov z matematického gymnázia v Bratislave. Túto vekovú škálu sme si vybrali, pretože podľa Piagetovej teórie kognitívneho vývinu [Pakpahan and Saragih, 2022] deti v tomto veku vedia pracovať s určitou úrovňou abstrakcie a majú už dostatočné skúsenosti z reálneho života, ktoré im umožňujú rozlíšiť skutočnosť od fikcie. Všetci žiaci boli žiakmi prvého ročníka osemročného gymnázia (príma) a spĺňali kritériá všeobecného intelektového nadania, vrátane vysokej úrovne logického a matematického myslenia. Výber tejto skupiny bol zámerný, naším cieľom bolo zahrnúť žiakov z rôznych základných škôl, čím sme zabezpečili rôznorodosť predchádzajúcich skúseností. Zároveň títo žiaci neboli výraznejšie ovplyvnení výučbou na gymnáziu. Väčšina týchto žiakov sa nestretla s robotikou, len 13 žiakov uviedlo, že pracovali s robotom v škole, alebo na mimoškolských aktivitách, alebo doma. Skoro všetci však mali predchádzajúce skúsenosti s detskými programovacími jazykmi ako Scratch, Baltík či Imagine.

2.2 Zber dát

Na zber dát sme použili dotazník s otvorenými otázkami [Creswell, 2015]. Otázky sme navrhli tak, aby poskytli čo najpodrobnejšie informácie o myslení žiakov a umožnili nám identifikovať ich prvotné prekoncepty o fungovaní senzorov robotov. Dotazník bol rozdelený na tri samostatné časti. V prvej časti sme sa zameriavali na definovanie pojmu robot, chápanie jeho fungovania a ovládania. V druhej časti sme sa žiakov pýtali na fungovanie senzorov robotov, s ktorými sa stretávajú v každodennom živote. A v tretej časti sme sa snažili identifikovať žiacke prvotné predstavy o pojme "senzor", jeho funkciách a rôznych typoch vo všeobecnosti. Zber dát prebiehal v súlade s nariadením GDPR a dotazníky žiaci vyplnili v priemere za 60 minút. V rámci tohto výskumu sme sa rozhodli sústrediť na časť dotazníka, ktorá sa venovala senzorom, ich princípom fungovania a možnostiam využitia v reálnych životných situáciách. Predmetom analýzy boli otázky obsahujúce tri modelové príklady senzorov robotov z každodenného života, ako aj všeobecnejšie otázky zamerané na porozumenie samotného pojmu „senzor". Záverečnú časť analýzy tvorila posledná otvorená otázka dotazníka, ktorá ponúkala žiakom možnosť navrhnúť vlastné kreatívne riešenie technického problému prostredníctvom využitia senzorov. Cieľom tejto otázky bolo preveriť schopnosť žiakov aplikovať ich prekoncepty o senzoroch robotov do praktickej situácie. Vybrané otázky mali nasledujúce znenie:

1. Doma už dva mesiace bez problémov využívate robotický vysávač. Vždy sa úspešne vyhýba nábytku. Jedného dňa tvoja malá sestra zabudla v strede obývačky veľký dom pre barbie. Ako podľa teba zareaguje robotický vysávač pri vysávaní obývačky? Opíš, ako bude vysávač "rozmýšľať" a aká bude jeho reakcia.

2. Jedného pekného dňa sa Elenka hrala na mobile svoju obľúbenú hru. Po chvíľke vyšla z domu na terasu, kde sa jej obrazovka mobilu ihneď rozjasnila.Vysvetli čím bolo spôsobené, že sa Elenkina obrazovka mobilu rozjasnila. Podľa čoho mobil vedel, že má zvýšiť jas obrazovky?

3. Cez letné prázdniny sa rodinka Smrekovcov vybrala na výlet k jazeru. Nasadli do auta, ktoré bolo príliš rozohriate, preto otecko nastavil klímu na 22°C. Po 15 minútach sa klíma zastavila. A po ďalších 5 minútach sa klíma opäť spustila a začala chladiť auto. Vysvetli, prečo sa klíma v aute zastavila a po chvíli opäť spustila.

4. Poznáš pojem senzor? Skús vysvetliť, čo tento pojem znamená.

5. Vymenuj všetky/čo najviac senzorov, ktoré poznáš a ku každému dopíš ako podľa teba funguje.

6. Ako podľa teba vyzerajú údaje/informácie, ktoré senzory získavajú?

7. Smetiar Igor si chcel uľahčiť prácu pri triedení odpadu. Preto využil robota, ktorý mu s triedením odpadu pomôže. Opíš, ako by podľa teba mohol tento robot fungovať a aké senzory by mal použiť?

2.3 Analýza dát

Zozbierané dáta sme analyzovali pomocou kombinácie kvalitatívnych a kvantitatívnych metód. Hlavnou metódou bola tematická analýza [Creswell, 2015], ktorá nám poskytla hlbší pohľad na myšlienky žiakov. Ďalej sme využili otvorené kódovanie [Creswell, 2015] na identifikáciu opakujúcich sa kľúčových tém v žiackych odpovediach, ktoré sa týkali pojmu senzor a jeho fungovania Témy sme ďalej upravovali, prepojili a štruktúrovali do kategórií, aby sme vedeli identifikovať žiacke prekoncepty. Pre získanie podrobnejších výsledkov sme doplnili aj kvantitatívnu frekvenčnú analýzu [Creswell, 2021], ktorá umožnila kvantifikovať výskyt jednotlivých tém a overiť ich rozšírenosť. V predchádzajúcich etapách výskumu, zameraných na analýzu prvej a druhej časti dotazníka, sme sa sústredili na skúmanie prekonceptov žiakov týkajúcich sa ovládania robotov a ich základného fungovania. Na základe zistení z týchto analýz sme vytvorili štyri úrovne rubriky, ktoré vychádzali z kvantitatívneho skórovania [Creswell, 2021] žiackych odpovedí. Táto rubrika nám umožnila objektívne posúdiť kvalitu a úroveň žiackych prekonceptov a zároveň identifikovať správne, nepresné alebo nedostatočne rozvinuté prekoncepty. Rovnakú rubriku sme následne aplikovali aj pri analýze v tejto časti výskumu.

úroveň 0 – Nesprávne predstavy alebo žiadne: Odpovede sú nesúrodé, chýbajú základné znalosti o robotoch, prípadne žiaci nevedia vysvetliť základné funkcie.

úroveň 1 – Veľmi povrchné predstavy: Žiaci rozumejú fungovaniu robotov a ich ovládaniu len na povrchnej úrovni, ich opisy a vysvetlenia sú nepresné, protikladné, alebo nie úplne nesprávne.

úroveň 2 – Základné, ale neúplné predstavy: žiaci majú základné predstavy o používaní a ovládaní robotov, ale chýba im pochopenie komplexnejších súvislostí a podrobností o funkciách senzoroch.

úroveň 3 – Správne a komplexné predstavy: žiaci správne opisujú, ako roboty fungujú, a chápu ich úlohu nielen v konkrétnych situáciách, ale aj všeobecne.

Pri rozdeľovaní žiakov do štyroch úrovní rubriky sme kládli najväčší dôraz na ich správnosť a kvalitu odpovedí. Taktiež či vo svojich odpovediach spomenuli pojem senzor, vedeli tento pojem vysvetliť aj vo všeobecnosti a opísali jeho funkcie. Pri analýze žiackych prekonceptov o senzoroch robotov sme sa sústredili na znalosti žiakov na úrovniach 1 a 2, pričom sme vylúčili tých, ktorí mali nesprávne predstavy (úroveň 0), ako aj tých, ktorí mali komplexné a správne predstavy (úroveň 3). Tieto extrémne prípady sme vylúčili z dôvodu, aby výsledky neboli skreslené a reflektovali typické prekoncepty prítomné u väčšiny žiakov v tejto vekovej skupine.

3 Výsledky

Naše výsledky naznačujú, že väčšina žiakov dokáže správne interpretovať modelové príklady a vysvetliť príčinu daných situácií. Vo svojich odpovediach neuvádzajú senzory ako kľúčový prvok, ktorý tieto javy zabezpečuje. Avšak po priamej otázke - aký senzor je v daných situáciách použitý, viacerí žiaci, ktorí predtým senzor neuviedli, následne identifikovali správny typ senzora, prípadne opísali jeho funkciu. Ich prekoncepty o senzoroch a ich funkciách sú základné a neúplné, pričom sú ovplyvnené osobnými skúsenosťami s technológiami v každodennom živote. Chýba im hlbšie pochopenie princípov fungovania senzorov a komunikácie robotov s prostredím.

Pre každý z troch modelových príkladov sme identifikovali najčastejšie sa vyskytujúci prekoncept o fungovaní senzorov:

(A) Robotický vysávač – Žiaci predpokladajú, že vysávač najskôr narazí do prekážky a až potom ju obíde, pričom senzor podľa nich deteguje objekt až po samotnom náraze.

(B) Mobilný telefón – Žiaci správne uvádzajú, že jas obrazovky sa mení podľa okolitého osvetlenia kvôli lepšej viditeľnosti; viac než polovica chápe, že senzor meria intenzitu svetla.

(C) Klimatizácia v aute – Automatická klimatizácia sa podľa ich odpovedí zapína a vypína v závislosti od teploty v aute, avšak väčšina žiakov nedokáže presne vysvetliť, ako senzor priebežne monitoruje teplotu a na základe zmien reguluje činnosť klimatizácie.

Žiaci vnímajú senzor ako zariadenie, najčastejšie ako kameru, ktoré „niečo“ sníma. V ich odpovediach však chýba hlbšie porozumenie princípom fungovania senzorov, ako aj poznanie ich rôznych typov a funkcií. Medzi najčastejšie uvádzané príklady patria: senzor vzdialenosti, ktorý slúži na detekciu objektov v okolí robota; senzor farby, umožňujúci rozpoznávanie farieb; senzor zvuku, ktorý žiaci často prirovnávajú k mikrofónu; a senzor svetla alebo jasu, určený na meranie intenzity svetelného žiarenia. Toto povr-

chové porozumenie senzorov sa prejavuje aj v tom, ako si žiaci predstavujú dáta získané zo senzorov. Až 43 % z nich netuší, ako tieto údaje vyzerajú a 25 % si ich predstavuje zakódované v binárnej sústave. Menej často sa v odpovediach objavujú prirovnania ako morzeovka či DNA, alebo všeobecné pojmy ako dáta, čísla a signály.

Záverečnú časť dotazníka tvorila otvorená otázka dotazníka, ktorá ponúkala žiakom možnosť navrhnúť vlastné kreatívne riešenie technického problému prostredníctvom využitia senzorov. Väčšina žiakov vedela navrhnúť aspoň základný spôsob fungovania robota na triedenie odpadu, pričom najčastejšie uviedli senzory farby, materiálu a tvaru. Objavovali sa aj konkrétne typy senzorov, ako napríklad infračervené, dotykové, kamerové či senzory hmotnosti a vzdialenosti. Niektorí žiaci už uvažovali na komplexnejšej úrovni a vo svojich odpovediach zapojili aj umelú inteligenciu či databázu odpadu. Približne štvrtina odpovedí bola veľmi nejasná, neúplná a ich prekoncepty boli veľmi zjednodušené alebo intuitívne.

4 Záver

V tejto pilotnej štúdií sme sa zamerali na identifikáciu a analýzu prekonceptov žiakov vo veku 11 až 13 rokov o fungovaní senzorov, ktoré robotom umožňujú komunikovať s prostredím. Výsledky ukazujú, že žiaci síce dokážu správne vysvetliť dôvody reakcií robotov na zmeny v prostredí, avšak bez spomenutia a zadefinovania senzora a jeho funkcie. Žiacke prekoncepty sú na základnej úrovni a žiaci nemajú úplne prepojené poznatky, čo vychádza z teórie „knowledge in pieces“, teda žiaci vnímajú senzory skôr ako samostatné zariadenia než ako súčasť komplexného systému.

Výsledky tiež poukazujú na to, že osobné skúsenosti žiakov s technológiami a médiami významne ovplyvňujú ich prekoncepty – napríklad predstava, že robotický vysávač rozpozná prekážku až po náraze, alebo že senzory fungujú ako kamery bez vysvetlenia procesov snímania. Kreatívna otázka zameraná na návrh robota na triedenie odpadu ukázala, že žiaci síce dokážu aplikovať svoje predstavy do praxe, ale ich návrhy často postrádajú systémové myslenie a hlbšie pochopenie prepojenia medzi senzorom, spracovaním dát a následnou akciou.

Zistenia z tejto pilotnej štúdie potvrdzujú potrebu zaradenia praktických aktivít so senzormi do výučby edukačnej robotiky. Výučba by mala nadväzovať na existujúce prekoncepty žiakov. V budúcnosti by sme chceli rozšíriť výskum na väčšiu výskumnú vzorku vo veku 10 až 15 rokov, aby sme získali detailnejší pohľad na žiacke prekoncepty ohľadom senzorov robotov.

Pod'akovanie

Táto práca bola podporená Vedeckou grantovou agentúrou Ministerstva školstva a vedy Slovenskej republiky a Slovenskou akadémiou vied na základe grantu GUK 2025 UK/1380/2025, ktorá poskytla financovanie pre B. Stenovú.

Literatúra

[Bano et al., 2024] Bano, S., Atif, K., and Mehdi, S. A. (2024). Systematic review: Potential effectiveness of educational robotics for 21st century skills development in young learners. *Education and information technologies*, 29(9):11135–11153.

[Crandall et al., 2014] Crandall, J. W., Manohar, V., Gezehei, I., Atherton, A., and Goodrich, M. A. (2014). Principles of robot programming systems.

[Creswell, 2015] Creswell, J. W. (2015). *Educational research: Planning, conducting, and evaluating quantitative and qualitative research*. pearson.

[Creswell, 2021] Creswell, J. W. (2021). *A concise introduction to mixed methods research*. SAGE publications.

[DiSessa, 2018] DiSessa, A. A. (2018). A friendly introduction to "knowledge in pieces": Modeling types of knowledge and their roles in learning. In *Invited lectures from the 13th international congress on mathematical education*, pages 65–84. Springer.

[Dwivedi et al., 2021] Dwivedi, Y. K., Hughes, L., Ismagilova, E., Aarts, G., Coombs, C., Crick, T., Duan, Y., Dwivedi, R., Edwards, J., Eirug, A., et al. (2021). Artificial intelligence (ai): Multidisciplinary perspectives on emerging challenges, opportunities, and agenda for research, practice and policy. *International journal of information management*, 57:101994.

[Fanchamps et al., 2021] Fanchamps, N. L., Slangen, L., Hennissen, P., and Specht, M. (2021). The influence of sra programming on algorithmic thinking and self-efficacy using lego robotics in two types of instruction. *International Journal of Technology and Design Education*, 31:203–222.

[Pakpahan and Saragih, 2022] Pakpahan, F. H. and Saragih, M. (2022). Theory of cognitive development by jean piaget. *Journal of Applied Linguistics*, 2(1):55–60.

[Posner et al., 1982] Posner, G. J., Strike, K. A., Hewson, P. W., Gertzog, W. A., et al. (1982). Accommodation of a scientific conception: Toward a theory of conceptual change. *Science education*, 66(2):211–227.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 141
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Martina Kalašová

Nekonečno a číselné množiny na gymnáziu

Martina Kalašová[1]*
Školiteľ: Zbyněk Kubáček[2]‡
[1] Katedra didaktiky matematiky, fyziky a informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

V našej diplomovej práci sme skúmali, či téma nekonečna môže mať prínos vo vyučovaní matematiky na gymnáziu. Začali sme štúdiom publikácií o histórii tejto matematickej témy, čerpali sme z didaktickej teórie, analyzovali prítomnosť témy nekonečno v súčasnom školskom kurikule a oboznámili sme sa s vybranými popularizačnými zdrojmi k téme nekonečno. Obzvlášť inšpiratívne sa nám zdali kapitoly o nekonečne v publikáciách Príbeh matematiky v 24 rovniciach [Hromkovič, 2012] a Sedem divov informatiky [Mackenzie, 2012].

Na základe nadobudnutých poznatkov sme sa rozhodli, že pripravíme sériu vyučovacích hodín, na ktorých si trieda zopakuje a prehĺbi vedomosti o číselných množinách a následne sa oboznámi so základmi témy veľkostí nekonečných množín. Zistili sme, že témy sú prirodzene prepojené. Opakovanie číselných množín je užitočné pre napĺňanie cieľov kurikula. Téma nekonečna sa nám zdá pre triedu prínosná, pretože vzbudzuje záujem, ktorý vyvoláva ochotu aktívne pracovať, rozmýšľať nad abstraktnými problémami, skúmať netriviálne štruktúry, spochybňovať a argumentovať, čím s rozvíja matematické myslenie. Téma nekonečna tiež ponúka príležitosť prepojiť matematiku s históriou a dozvedieť sa viac o fungovaní matematiky ako vedy. Cieľom hodín bolo, aby si žiaci rozvíjali myslenie a vytvorili približnú predstavu a správnu intuíciu o téme veľkostí nekonečných množín.

Vychádzajúc z týchto cieľov hodín sme si stanovili nasledujúce výskumné otázky:

1. Ako koncipovať hodiny o číselných množinách a nekonečne v druhom/treťom/štvrtom ročníku na štvor/päťročnom gymnáziu?
   a) Ktoré časti témy číselné množiny a nekonečno sú primerane náročné pre týchto žiakov?
   b) Aké zadania umožnia triede porozumieť vybraným častiam učiva?
   c) Aké vyučovacie metódy podporia žiacke hlboké premýšľanie, porozumenie téme a aktívne zapojenie sa do týchto hodín?
2. Aké materiály treba vytvoriť pre učiteľov/učiteľky, aby podľa nich vedeli zrealizovať nami pripravené hodiny o číselných množinách a nekonečne?

Výskum sme realizovali v dvoch triedach bratislavského gymnázia a rozhovorom o pripravených materiáloch s dvoma učiteľkami z iných miest. Po analýze takto zozbieraných dát sme došli k rozsiahlym záverom, z ktorých spomenieme len najpodstatnejšie zistenia.

Pri téme nekonečno sa oplatí zistiť, čo trieda vie, čo by ju zaujímalo a prediskutovať ich otázky. Z našej skúsenosti sa najviac zaujímali o význam témy nekonečno. Taktiež sme zistili, že má zmysel venovať dlhý čas, mnohé cvičenia a kontrolné otázky vytváraniu párovaní medzi jednoduchými nekonečnými množinami. Téma je pre žiakov náročná, ale pri dostatočnom čase a vhodných zadaniach jej dokážu porozumieť. Pochopiť, prečo je reálnych čísel viac ako prirodzených sme zaradili do rozširujúceho učiva, ale že to tak je, zaujalo celú triedu. Na dosiahnutie cieľov hodín sa nám osvedčilo využívanie riadeného objavovania a diskusií v súlade s [Petty, 2013].

Pre učiteľky a učiteľov sme pripravili nasledovné materiály:

- Stručný úvod k vyučovacím hodinám (3 strany)
- Metodický materiál (11 strán)
- Tri prezentácie na vyuč. hodiny (po 11 snímok)
- Zhrnutie príslušnej mat. teórie (15 strán)

Za nosný považujeme metodický materiál, v ktorom vysvetľujeme všetky aktivity, ich ciele a ako prebiehali, keď sme ich realizovali. Zhrnutie teórie slúži na objasnenie témy pre vyučujúcich alebo aj pre triedu, tiež ponúka tréningové úlohy a doplňujúce informácie. Všetky materiály sa dajú nájsť a voľne stiahnuť na učiteľskom portáli wilma.sk v sekcii Rozširujúce/rôzne materiály.

Literatúra

[Hromkovič, 2012] Hromkovič, J. (2012). *Sedem divov matematiky*. Ružomberok: Verbum. ISBN 978-80-8084-958-0

[Mackenzie, 2012] Mackenzie, D. (2012). *The Story of Mathematics: in 24 Equations*. Modern Books. ISBN 9781911130703

[Petty, 2013] Petty, G. (2013). *Moderní vyučování*. Praha: Portál. ISBN 9788026203674

* kalasova10@uniba.sk
‡ Zbynek.Kubacek@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 142
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Dušan Daniel

Návrh a pilotné overovanie testu algebrického myslenia

Dušan Daniel[1]*
Školiteľ: Mária Slavíčková[2‡§]
[1] KDMFI, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Schopnosť pracovať s premennými, nachádzať pravidelnosti a vytvárať rôzne formy reprezentácií vzťahov je považovaná za kľúčový prvok algebrického myslenia (AM), ktoré predstavuje významný prienik medzi matematickým a informatickým myslením žiakov [Kieran, 2004; Weintrop et al., 2016].

Na identifikáciu týchto prienikov sa zameriava aj náš dizertačný výskum, ktorého cieľom je preskúmať, ako sa líšia stratégie žiakov pri riešení úloh zameraných na vybrané informatické koncepty v závislosti od miery rozvinutosti AM.

Pre potreby výskumu je nutné vytvoriť nástroj, ktorý by spoľahlivo overoval úroveň AM na úrovni strednej školy. Existujúce testy sa prevažne zameriavajú na mladších žiakov [Ralston, 2013] alebo pokrývajú len úzke tematické oblasti bez komplexného pohľadu na AM [Blanton, Stephens & Gardiner, 2015]. Preto sme pristúpili k vývoju testu založeného na modeli Kaputa a Blantonovej [Kaput & Blanton, 2008], ktorý rozlišuje tri dimenzie AM: symbolizáciu, funkčné myslenie a modelovanie. Pri odhade náročnosti úloh sme vychádzali zo 7-stupňového modelu Godina a kol. [Godino et al., 2015].

Pilotné overenie prvej verzie testu sme realizovali na vzorke 87 žiakov strednej školy. Získané dáta sme analyzovali prostriedkami klasickej testovej teórie (CTT) a teórie odpovede na položku (IRT).

V rámci CTT sme overovali spoľahlivosť testu a analyzovali základné charakteristiky jednotlivých položiek, ako sú ich náročnosť a schopnosť rozlišovať medzi žiakmi s rôznou úrovňou AM. Výsledky ukázali, že viaceré úlohy boli výrazne náročnejšie, ako predpovedali teoretické modely. Zároveň sa ukázalo, že schopnosť niektorých úloh diferencovať medzi žiakmi bola nižšia, ako bolo žiaduce.

Podrobnejšiu analýzu sme realizovali prostredníctvom IRT, ktorá umožnila odhadnúť pravdepodobnosť správnej odpovede na položku v závislosti od schopností respondentov. Analýzy potvrdili, že u niektorých položiek je aspoň 50 % pravdepodobnosť správnej odpovede podmienená vysoko nadpriemernou úrovňou schopností alebo sa ich diskriminačná funkcia prejavovala len v úzkom intervale žiackej ability. Tieto zistenia v kombinácii s frekvenčnou analýzou odpovedí naznačujú, že pri riešení niektorých úloh mohli žiaci zlyhávať z viacerých dôvodov, ako napríklad výroková logika, jazyková a čitateľská gramotnosť, atď.

Na základe týchto výsledkov plánujeme revíziu testových položiek, úpravu ich formulácie a zaradenie ďalšieho kola pilotného testovania tak, aby úlohy spoľahlivo zachytávali sledované dimenzie AM. V ďalšej fáze výskumu bude analýza doplnená o kvalitatívne údaje, ktoré nám umožnia hlbšie porozumieť spôsobom riešenia jednotlivých úloh a lepšie identifikovať ich slabé miesta. Kvalitatívna analýza zároveň pomôže odfiltrovať príliš ťažké, málo responzívne, nerozlišujúce alebo nejednoznačne formulované úlohy, ktoré znižujú validitu a reliabilitu testu.

Literatúra

[Blanton, 2015] Blanton, M. L., Stephens, A. C., Gardiner, A. M. (2015). Leveraging research on early algebra to inform the teaching of algebra. In Cho, S. J. (Ed.), *Selected Regular Lectures from the 12th International Congress on Mathematical Education*, pages 321–340, Cham: Springer.

[Godino, 2015] Godino, J. D., Font, V., Wilhelmi, M. R., Lurduy, O. (2015). Why is algebra so difficult for students? In Krainer, K., Vondrova, N. (Eds.), *Proceedings of CERME 9*, pages 1460–1466, Prague: Charles University.

[Kaput, 2008] Kaput, J. J., Blanton, M. L. (2008). Algebraic reasoning in the elementary grades. In Kaput, J. J., Carraher, D. W., Blanton, M. L. (Eds.), *Algebra in the Early Grades*, pages 5–18, New York: Lawrence Erlbaum Associates.

[Kieran, 2004] Kieran, C. (2004). Theoretical perspectives on algebraic thinking. In Stacey, K., Chick, H., Kendal, M. (Eds.), *The Future of the Teaching and Learning of Algebra*, pages 149–169, Dordrecht: Kluwer Academic Publishers.

[Ralston, 2013] Ralston, N. C. (2013). *Assessment of Early Algebraic Reasoning: Instrument Development and Validation*. Doctoral dissertation, University of Missouri-Columbia.

[Weintrop, 2016] Weintrop, D., Beheshti, E., Horn, M., Orton, K., Jona, K., Trouille, L., Wilensky, U. (2016). Defining computational thinking for mathematics and science classrooms. *Journal of Science Education and Technology*, 25(1), pages 127–147.

* dusan.daniel@fmph.uniba.sk
‡ maria.slavickova@fmph.uniba.sk
§ Školiteľ

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 143
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Zuzana Tureková

Aktivity na rady a zásobníky pre žiakov základnej školy

Zuzana Tureková[1*]

Školiteľ: Lucia Budinská[1†]

Katedra didaktiky matematiky, fyziky a informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

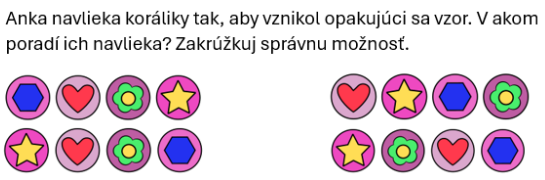
Hlavným cieľom našej bakalárskej práce je vysvetliť koncepty radov a zásobníkov v informatike žiakom na druhom stupni základnej školy.

Dátové štruktúry, ako sú rady a zásobníky, sú základné spôsoby organizácie a spracovania údajov. Zásobník je špeciálny typ zoznamu, z ktorého môžeme vyberať prvky iba z miesta, kde boli vložené. Príkladmi takýchto zoznamov sú taniere naukladané na seba, šumivé tablety v tube alebo knihy položené na seba. Princíp zásobníka sa označuje aj ako last-in-first-out (LIFO). Rad je dátová štruktúra podobná zásobníku. Môžeme si ho predstaviť ako rad v obchode, jedálni alebo čakárni u lekára. Ak chceme vybrať posledný prvok, musíme najprv odstrániť všetky predchádzajúce. Naopak, ako prvý vyberieme prvok, ktorý bol do štruktúry pridaný najskôr. Tento princíp sa nazýva first-in-first-out (FIFO) [Aho et al., 1983].

Tému radov a zásobníkov vieme v Štátnom vzdelávacom programe zaradiť do oblasti „Reprezentácie a nástroje“, konkrétne časť „štruktúry“ [Štátny pedagogický ústav, 2020].

Aby sme žiakov oboznámili s danou témou, rozhodli sme sa inšpirovať projektom CSUnplugged. Podľa [Bell et al., 2015] bol tento projekt pôvodne vyvinutý, aby sa mladí študenti oboznámili s oblasťami informatiky bez programovania. Podobné ciele má aj informatická súťaž iBobor [iBobor, 2024], ktorá zoznamuje žiakov s rôznymi informatickými konceptami a nevyžaduje od žiakov, aby ich už poznali. Pri tvorbe pracovných listov sme vychádzali z úloh zo súťaže. Žiaci v každom pracovnom liste objavujú daný koncept v sérii gradovaných úloh bez počítača.

Prvý pracovný list vysvetľuje žiakom koncept radu na základe situácie z bežného života - a to radu v pekárni. Obsahuje úlohy, ktoré sú vhodne gradované pomocou Blooomovej taxonómie [Bloom, 1956]. Vypracovaním pracovného listu si žiaci osvoja základné operácie s radmi ako sú vyberanie a vkladanie. Tiež vedia odpovedať na otázky a rozlíšiť správnosť informácií o štruktúre, na základe údajov, ktoré sú o



Obr. 1: Príklad úlohy z pracovného listu

nej poskytnuté. Druhý pracovný list objasňuje koncept zásobníka na príklade korálok na náhrdelníku. Rovnako ako všetky naše pracovné listy, aj tento má za cieľ naučiť žiakov pracovať so štruktúrou zásobník a vedieť správne reagovať na rôzne situácie a otázky. Vytvorili sme ešte jeden pracovný list, v ktorom sa koncepty radov a zásobníkov spájajú a ukazujú v kontexte balíkoboxu.

Materiály sme overili v dvoch kolách. Prvé prebehlo na osemročnom gymnáziu v Bratislave s účasťou 82 žiakov, druhé na základnej škole pri Bratislave s 46 žiakmi. Na základe spätnej väzby sme pracovné listy upravili a znovu otestovali. Overovanie potvrdilo, že materiály sú zrozumiteľné a prínosné pre cieľovú skupinu. Žiaci vedeli rozpoznať informatické koncepty a uviesť príklady z praxe. Pozitívne hodnotenie sme získali aj od učiteľky v druhom kole overovania.

Literatúra

[Aho et al., 1983] Aho, A. V., Hopcroft, J. E., and Ullman, J. D. (1983). *Data Structures and Algorithms*, volume 322. Addison-Wesley.

[Bell et al., 2015] Bell, T., Witten, I. H., and Fellows, M. (2015). Csunplugged: An enrichment and extension programme for primary-aged students created.

[Bloom, 1956] Bloom, B. S. (1956). *Taxonomy of educational objectives. handbook 1, Cognitive Domain*. Longmans.

[iBobor, 2024] iBobor (2007 - 2024). Katedra didaktiky MFI, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky Univerzity Komenského v Bratislave.

[Štátny pedagogický ústav, 2020] Štátny pedagogický ústav (2020). iŠvp pre 2. stupeň základných škôl. Inovovaný štátny vzdelávací program.

*turekova19@uniba.sk
†lucia.budinska@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 144
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Júlia Pešková

Úniková hra s grafovými úlohami

Júlia Pešková*
Školiteľ: Mgr. Lucia Budinská, PhD.§
[1] Katedra matematiky, fyziky a informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

V práci sme sa snažili priblížiť žiakom druhého stupňa základnej školy koncepty teórie grafov pomocou zábavnej formy, únikovej hry. Podľa Štátneho vzdelávacieho programu sa žiaci stretnú s grafmi v šiestom a ôsmom ročníku pri organizovaní štruktúry do dát. V šiestom ročníku by mal žiak vedieť pracovať s grafovými štruktúrami (s mapou, labyrintom, sieťou), pracovať so stromovými štruktúrami (strom rozhodnutí, stratégií, turnajov, rodokmeň), zapisovať a vyhľadávať v jednoduchšej štruktúre, zostavovať štruktúry. V ôsmom ročníku by mal žiak vedieť pracovať s grafovými štruktúrami (s mapou, labyrintom, sieťou), pracovať so stromovými štruktúrami (strom rozhodnutí, stratégií, turnajov, rodokmeň), zapisovať a vyhľadávať v jednoduchej štruktúre, zostavovať štruktúry.[Štátny pedagogický ústav, 2020]. Na zvýšenie motivácie žiakov sme sa rozhodli využiť únikovú hru, v ktorej sme sa inšpirovali úlohami zo súťaže iBobor [iBobor,2024] a prepojili ich jedným príbehom.

Úniková hra , ktorú sme vytvorili sa skladá zo šiestich úloh. Hra bola pripravená na štýl detektívky, teda úlohou žiakov bolo nájsť páchateľa. V úvode žiaci dostali list, v ktorom bol úvodný príbeh, teda bol ukradnutý vzácny artefakt, pomôžte detektívovi nájsť páchateľa. K príbehu bola priložená prvá úloha, ktorá bola zameraná na hľadanie susedných vrcholov v grafe (osoby, ktoré blízko spolupracujú). Po vyriešení úlohy im ostal určitý zoznam podozrivých, s ktorým pracovali v nasledujúcich úlohách. Teda hra pokračovala tak, že žiaci po správnom vyriešení úlohy dostali ďalšiu, ktorá im odstránila zo zoznamu osoby, ktoré už neboli ďalej podozrivé. Postupným riešením úloh sa im zoznam podozrivých stále zmenšoval, až napokon ostal jeden, páchateľ. V jednotlivých úlohách sa žiaci mohli stretnúť s ohodnoteným grafom, s rôznymi interpretáciami zápisu grafov, s Eulerovou cestou, s pojmami ako je cesta, ťah a cyklus. Po úspešnom riešení všetkých úloh žiaci dostali dotazník, v ktorom hodnotili náročnosť zadania, ako veľmi im pomohol graf pri riešení úlohy a ich celkový dojem. Ak žiaci vyriešili úlohy skôr, bolo pre nich pripravené bonusové zadanie, ktoré nadväzovalo na príbeh. Táto úloha nebola povinná, teda ak sa žiaci nedostali k jej riešeniu nenarušilo to dej príbehu.

	Prvé pozorovanie		Druhé pozorovanie		Tretie pozorovanie
	Prvá skupina	**Druhá skupina**	**Tretia skupina**	**Štvrtá skupina**	**Piata skupina**
Trieda	7.A	7.A	8.C	8.C	8.A
Počet žiakov	11	9	10	10	20
Typ hry	Marvel	Detektív Jablonský	Detektív Jablonský	Detektív Jablonský	Detektív Jablonský
Kto viedol hodinu?	Autorka práce	Autorka práce	Vyučujúca	Autorka práce	Vyučujúca

Obr. 1: Pozorovanie

Únikovú hru sme overovali na štyroch hodinách informatiky na základnej škole v obci na západnom Slovensku. Dve hodiny boli s ôsmakmi, dve so siedmakmi. Dokopy si hru zahralo 40 žiakov. Následne vyučujúca, ktorá bola prítomná na predchádzajúcich testovaniach si hru zahrala s ďalšími 20 žiakmi. V hre sme nepoužili priamo pojmy a definície týkajúce sa teórie grafov. Cieľom hry bolo, aby sa naučili pracovať s grafmi, čítať z nich informácie a pracovať s rôznymi obmedzeniami v zadaní atď. Hru dokončilo pri prvom pozorovaní 15 žiakov a v druhom všetci okrem dvoch. Bonusovú úlohu stihlo dokopy osem žiakov. V takmer každej úlohe sa nachádzalo „edukačné okienko“ v ktorom boli pomenované pojmy, s ktorými žiaci pracovali pri riešení danej úlohy. V hodnotiacom dotazníku sme sa pýtali, koľko edukačných okienok si prečítali pri riešení úloh a takmer polovica žiakov odpovedala, že všetky. Počas pozorovania sme si mohli všimnúť, že aj napriek tomu, že žiaci nemali predošlé vedomosti z tejto tematiky, úlohy v hre vedeli vypracovať bez väčších problémov. Pripravili sme si aj hodnotiace otázky pre učiteľov, ktorí boli prítomní na hodinách, na ktorých sme hru overovali. Podľa ich vyjadrení bola hra pre žiakov zaujímavá a bavila ich. Vedeli by si však predstaviť, že by bola prevedená v digitálnej forme, čo by podľa nich bolo pre žiakov atraktívnejšie. Celkovo hru ohodnotili pozitívne, myslia si, že žiaci vďaka nej dostatočne pochopili koncepty z teórie grafov.

Literatúra

[Štátny pedagogický ústav, 2020] Štátny pedagogický ústav (2020). iŠVP pre 2. stupeň základných škôl. Inovovaný štátny vzdelávaci program.

[iBobor,2024] iBobor (2007-2024). Katedra didaktiky MFI, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky Univerzity Komenského v Bratislave.

* peskova37@uniba.sk
§ lucia.budinska@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 145–152
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Samuel Peter Kovár, Peter Papp

Modelovanie ionizačných procesov vybraných halogénanizolov v plazme

Samuel Peter Kovár[1*] Peter Papp[1†‡]

Katedra experimentálnej fyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt: V tomto príspevku demonštrujeme možnosti využitia štandardných kvantovo-chemických prístupov pri identifikácii fragmentov halogénanizolov vznikajúcich v plazme pri disociáciách materských molekúl vyvolaných fotónmi a nízkoenergetickými elektrónmi. Hlavným prezentovaným výsledkom je séria prahových energií pre disociatívne reakcie skúmaných molekúl.

Kľúčové slová: anizoly, ionizácia, disociácia, DFT, ab-initio, MS, PES

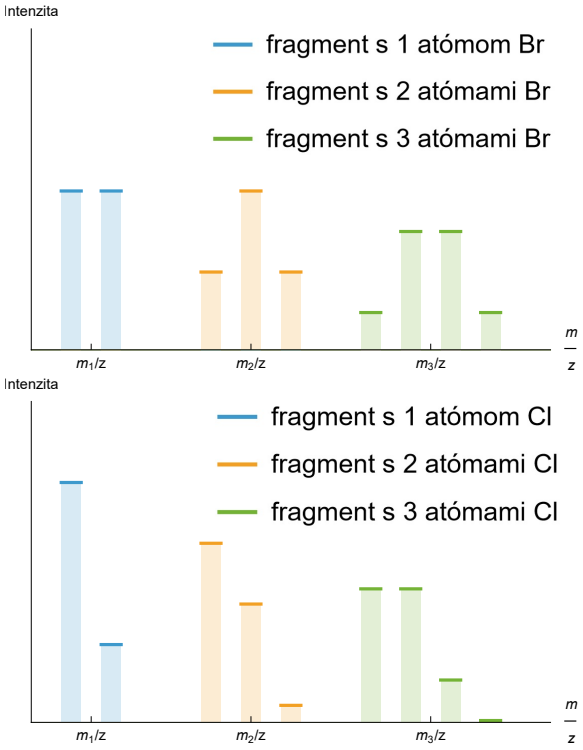
1 Úvod a motivácia

2,4,6-trichloroanizol (TCA) a 2,4,6-tribromoanizol (TBA), v tomto príspevku označované súhrnne ako 2,4,6-trihalogénnizoly (THA) sú potenciálnymi kontaminantami potravín, liečiv a ich obalov [Kato et al., 2011] s charakteristickým nepríjemným, zemitým až hubovitým zápachom. V prírode bol ich výskyt zdokumentovaný vo forme metabolitov 2,4,6-trihalogénfenolov produkovaných niektorými druhmi baktérií a plesní. V bežnom kontexte je tak ich výskyt buď priamo nežiadúci alebo indikátorom prítomnosti iných, nežiaducich zlúčenín, ich prekurzorov, ako napríklad chlorofenolových pesticídov [Feltrer et al., 2010].

Disociatívne reakcie, na ktorých teoretickú analýzu sa zameriavame v rámci tejto publikácie, sú kľúčovými procesmi pri detekcii THA. Kvantitatívne porozumenie disociácií je preto nevyhnutné pre interpretáciu hmotnostných a fotoelektrónových spektier skúmaných molekúl.

1.1 Hmotnostná spektrometria

Hmotnostná spektrometria (MS) predstavuje experimentálnu analytickú metódu, ktorá je založená na ionizácii, separácii a detekcii molekúl resp. fragmentov molekúl skúmanej látky. Separácia ionizovaných častíc prebieha na základe rôznych hodnôt m/z, kde



Obr. 1: Ukážka typického binomického rozdelenia píkov m/z fragmentov v hmotnostnom spektre obsahujúcich 1 až 3 atómy Br resp. 1 až 3 atómy Cl. Počet píkov okolo strednej hmotnosti m_i/z môže byť nápomocný pri určovaní početnosti atómov s nezanedbateľným izotopovým zastúpením.

m a z sú hmotnosť a celkový náboj separovaného fragmentu. MS tak poskytuje informáciu o počte detegovaných fragmentov s určitým pomerom m/z, ale nie o geometrii fragmentov a pri neutrálnych fragmentoch dokonca ani informáciu o ich početnosti. Vo všeobecnosti navyše nemožno pomeru m/z a priori jednoznačne priradiť stechiometriu.

Z kvantovomechanických výpočtov sme však schopní na teoretickej úrovni jednotlivým rozpadovým reakciám priradiť energie resp. entalpie reakcií a v kombinácii s analýzou hmotnostných spektier molekúl pri rôznych energiách ionizujúcich častíc identifikovať stechiometriu ako aj geometriu fragmentov.

*kovar23@uniba.sk
†peter.papp@fmph.uniba.sk
‡Školiteľ

1.2 Fotoelektrónová spektroskopia

Fotoelektrónová spektroskopia je analytickou metódou, ktorej podstatou je ionizácia skúmanej molekuly fotónom a následnou detekciou energie vyrazeného elektrónu. V kombinácii s vhodne zvolenými teoretickými prístupmi umožňuje analyzovať štruktúru valenčných orbitálov skúmnanej molekuly.

Najpoužívanejším zdrojom ionizujúceho žiarenia v ultrafialovej fotelektrónovej spektroskopii je héliová výbojka, konkrétne žiarenie zodpovedá He I ($^1S_0 - ^1P_1$) spektrálnej čiare s energiou fotónov 21,22eV. [Kramida et al., 2024] Pre energiu vyrazených elektrónov tak platí horné ohraničenie

$$E_{elec} \leq h\nu - E_{ion}, \tag{1}$$

kde E_{ion} je príslušná ionizačná energia a $h\nu = 21,22\text{eV}$ je energia ionizujúceho fotónu. Keďže detegovať nízkoenergetické elektróny je experimentálne náročné[Wagner, 1983, Stevie and Donley, 2020], fotoelektrónové spektrá sú typicky merané do 17 až 20 eV.

2 Postup a metodika

2.1 Určenie stechiometrie fragmentov pozorovaných v MS

Určenie stechiometrie fragmentu pre daný pomer m/z nie je vo všeobecnosti jednoznačné, v prípade materských molekúl obsahujúcich atómy s výraznou izotopovou stopou ako sú napríklad Cl a Br však môže práve takéto izotopové rozdelenie poskytnúť dodatočné informácie o fragmente. Napríklad pre TBA vieme rozhodnúť o počte atómov Br vďaka charakteristickému zdvojeniu píkov za každý atóm Br v pozorovanom fragmente, tak ako symbolicky demonštruje obrázok 1.

2.2 Určenie geometrie fragmentov

Hľadanie optimálnych geometrií teoretickými metódami si vyžaduje dôkladnú analýzu, čo najväčšieho počtu izomérov. V prvom kroku využívame modul GOAT (global geometry optimization and ensemble generator) dostupný v balíku ORCA 6 [Neese, 2022]. Jednou z funkcionalít GOAT je vytvorenie sady geometrií zodpovedajúcich lokálnym minimám na PES, ktorú využívame ako súbor vstupných geometrií pre ďalšie, presnejšie výpočty. Kvôli vysokému počtu single-point výpočtov v rámci hľadania lokálnych miním je výber výpočtovej metódy obmedzený na semiempirické metódy, konkrétne používame metódu GFN2-xTB [Bannwarth et al., 2019], najmä kvôli dobrej integrácii v balíku ORCA a nízkej výpočtovej náročnosti. Typický počet identifikovaných izomérov v tomto kroku je 10-150 pre každý neutrálny fragment a 10-50 izomérov pre každý katiónový fragment.

V ďalšom kroku prepočítavame energie fragmentov na DFT úrovni, pomocou funkcionálu B3LYP v spojení s bázou 6-311G[Krishnan et al., 1980]. Každý potenciálny izomér fragmentu identifikovaný v prvom kroku preoptimalizujeme pre dve najnižšie možné spinové násobnosti (singlet a triplet, resp. doublet a kvartet). Cieľom tohto kroku je identifikovať fragmenty relevantné pre vysvetlenie konkrétnych disociačných reakcií resp. identifikovať izomér zodpovedajúci globálnemu minimu v robustnejšej ako semiempirickej metóde. Opäť musíme brať na zreteľ veľké množstvo optimalizácii, ktoré je potrebné v tomto kroku vykonať a zohľadniť ho pri výbere metódy a bázy. Funkcionál B3LYP s bázou z Popleovej rodiny bol zvolený pre širokú aplikovateľnosť naprieč spektrom rôznych molekulárnych systémov ako aj priaznivý pomer presnosti stanovených energií a výpočtového výkonu. Bázu 6-311G sme zvolili ako najväčšiu zo štandardne používaných Popleových báz bez difúznych a polarizačných funkcií. Dôvodom nezahrnutia difúznych a polarizačných funkcií v báze, bola snaha minimalizovať chybu spôsobenú interakčnou energiou medzi neutrálnymi fragmentami v prípade, že optimalizácia skonvergovala do disociovaného stavu (ako napr. Br_2 + CH_3BrO). Tento prístup sa neskôr ukázal byť neakceptovateľný, pre chyby spôsobné použitím B3LYP/6-311G pri stanovovaní energií a geometrii fragmentov. Ďalším dôvodom tejto voľby bola snaha získať geometrie podobné optimálnym geometriám na úrovni B3LYP/6-31G(2df) s cieľom zrýchliť konvergenciu v prvej časti G4 [Curtiss et al., 2007] výpočtu.

V poslednom kroku je naším cieľom určiť energiu a entalpiu relatívne malého počtu relevantných fragmentov s čo najvyššou presnosťou. Na stanovenie tejto energie používame metódu G4 z programového balíka Gaussian 16 [Frisch et al., 2016].

2.3 Použité modelové chémie

2.3.1 B3LYP

Modelová chémia B3LYP patrí medzi tzv. DFT metódy (Density Functional Theory), ktoré nahrádzajú štandardný opis elektrónového obalu pomocou vlnovej funkcie Ψ, opisom založeným na hustote elektrónovej pravdepodobnosti ρ. Výsledná energia systému je v tejto teórii vyjadrená ako funkcionál hustoty ρ. Teoretickým základom sú tzv. Kohnove–Shamove rovnice[Kohn and Sham, 1965], ktoré však obsahujú člen $E_{xc}(\rho)$, ktorý nemožno presne určiť z prvých princípov. Tento člen reprezentuje výmennú (E_x) a korelačnú (E_c) energiu elektrónov. Rôzne prístupy k aproximácii tohto funkcionálu vedú k rôznym DFT metódam.

V prípade B3LYP je $E_{xc} = E_x + E_c$ definovaný nasledovne:

$$E_{xc}^{B3LYP} = E_{xc}^{LSDA} + a_0(E_x^{exact} - E_x^{LSDA}) + a_x\Delta E_x^{B88} + a_c(E_c^{LYP} - E_c^{LSDA}), \quad (2)$$

kde E_{xc}^{LSDA} je výmenná a korelačná energia v LSDA (Local spin density aproximácii)[Vosko et al., 1980], ΔE_x^{B88} je Beckeho gradientová korekcia z roku 1988[Becke, 1989], E_c^{LYP} je Lee-Yang-Parrova korelačná energia [Lee et al., 1988].

Becke navrhol empirický výber koeficientov optimálnych pre B3PW91 funkcionál[Becke, 1993]:

$$a_0 = 0.20, \quad a_x = 0.72, \quad a_c = 0.81,$$

ktorý sa štandardne používa aj pre B3LYP a používame ho aj v tejto práci.

2.3.2 xTB (GFN-xTB)

Metódy GFN-xTB sú semiempirickými kvantovochemickými metódami, navrhnutými a optimalizovanými na štúdium geometrií, harmonických vibračných frekvencií a nekovalentných väzieb veľkých molekúl a ich konformérov. Ide o metódy vychádzajúce z Kohnových–Shamových rovníc (v tomto zmysle sú podobné DFT), ale využívajú sériu aproximačných schém pre dvojelektrónové integrály a malú až minimálnu bázu (upravenú verziu STO-*n*G báz). Takéto aproximatívne riešenie je následne korigované empirickými korekciami, ktoré slúžia najmä na zachytenie nelokálnych efektov.

Veľkou výhodou oproti metódam DFT je rádovo nižšia výpočtová náročnosť – za cenu výrazne nižšej robustnosti a presnosti v porovnaní s ab initio a DFT metódami. [Bannwarth et al., 2019]

V tejto práci využívame GFN2-xTB, najmodernejšiu metódu z rodiny GFN, dostupnú v čase písania tohto príspevku. Podobne ako B3LYP, aj GFN2-xTB obsahuje empirické parametre, ktoré sa určujú optimalizáciou na databáze molekúl. Skupina okolo Grimmeho, autora metódy, publikovala sériu empirických parametrov (vrátane približne 20 globálnych a mnohých atómovo špecifických), ktoré využívame aj v tejto práci. [Bannwarth et al., 2019]

2.3.3 G4 (Gaussian-4)

Na účely získavania vysoko presných (typicky s chybou < 1 kcal/mol) termodynamických veličín bola vyvinutá metóda G4[Curtiss et al., 2007]. Ide o kompozitnú metódu, v ktorej sú rôzne časti výpočtu realizované na rôznych úrovniach kvantovo-chemickej teórie.

Geometria systému je optimalizovaná metódou B3LYP/6-31G(2df,p). Na tejto úrovni sú tiež stanovené frekvencie harmonických vibrácií, ktoré sú následne korigované empirickým faktorom 0.9854. Tieto údaje sa využívajú pri výpočte termodynamických potenciálov.

V optimalizovanej geometrii sa spočíta Hartree–Fock limita energie extrapoláciou na bázu s nekonečnou kardinalitou dvojbodovou extrapoláciou[Halkier et al., 1999] aug-cc-pV*n*Z[Dunning, 1989], typicky pre $n = Q, 5$.

Nasleduje séria single-point výpočtov ab-initio metódami MP2[Møller and Plesset, 1934], MP4[Pople et al., 1987] a CCSD(T)[Raghavachari et al., 1989] v kombinácii s bázami 6-31G s rôznymi kombináciami polarizačných a difúznych funkcií. Cieľom tohoto kroku je zachytiť vplyv pridania bázových funkcií na výpočtovo lacnejších metódach (MP2 a MP4) a získanie presnej korelačnej energie pomocou CCSD(T)/6-31G(d).

2.4 Analýza fotoelektrónového spektra

Pri analýze fotoelektrónového spektra je nutné poznať čo najpresnejšie hodnoty ionizačných energií zodpovedajúce vyrazeniu elektrónov z rôznych molekulárnych orbitálov. Ionizačné energie THA ako aj sily pólov pre príslušné ionizácie sme stanovili pomocou EPT OVGF [Ortiz, 2005, Cederbaum, 1975] v programovom balíku Gaussian 16. Do výpočtu

boli zahrnuté tie valenčné orbitály, ktorých ionizačná energia odhadnutá podľa Koopmensovej teorémy neprekročila 20.0eV (tabuľka 1), teda prvých 20 obsadených orbitálov.

3 Hlavné výsledky

3.1 Zhodnotenie vhodnosti výberu výpočtových metód

Obrázok 2 ilustruje na konkrétnych katiónových fragmentoch typické priebehy vypočítaných energií a štrukturálnych parametrov stanovených na semiempirickej, DFT a kompozitnej teoretickej úrovni.

Metóda xTB v spojení s GOAT bola schopná prakticky vo všetkých prípadoch identifikovať kvalitatívne geometrie izomérov zodpovedajúcich lokálnym minimám na PES B3LYP resp. G4 a zdá sa byť vhodná na hľadanie vstupných geometrií pre robustnejšie výpočtové prístupy.

Preoptimalizácia pomocou B3LYP/6-311G vedie vo väčšine skúmaných prípadov ku zhoršeniu geometrie (presnejšie vzdialenie sa od geometrie v G4). Relatívne energie fragmentov vypočítané pomocou B3LYP/6-311G nie sú jednoznačne v lepšej zhode s energiami G4 oproti xTB. V ďalších teoretických štúdiách podobného charakteru preto neodporúčame ako druhý krok optimalizáciu na úrovni B3LYP/6-311G a odporúčame ju nahradiť single-point výpočtom v kombinácii s inou bázou napr. 6-31G(2df), ktorá sa využíva na nájdenie optimálnej geometrie fragmentu v rámci G4 výpočtu. Taktiež bude potrebné v rámci tohoto kroku preskúmať využitie iných DFT metód, prípadne úplne tento krok vynechať.

Zhodnotenie presnosti výsledných prahových energií, ako aj relevantnosti celého postupu. si bude žiadať dôsledné porovnanie s experimentálnymi dátami.

Rozdiel medzi energiami predikovanými na úrovni G4 a experimentálnymi hodnotami možno odhadnúť na základe existujúcich benchmarkových štúdií, ktoré skúmali spoľahlivosť G4 pri stanovovaní disociačných energií aromatických uhľovodíkov so substituovanými atómami chlóru a brómu [Xu et al., 2021] resp. tvorných entalpií oxidovaných uhľovodíkov [Simmie and Somers, 2015]. Uvedené práce stanovili strednú odchýlku voči experimentálnym alebo odporúčaným hodnotám na 0.36 kcal.mol^{-1} resp. -0.42 kcal.mol^{-1}. Súčasťou týchto benchmarkových štúdií nebolo stanovenie ionizačných energií, ktoré tiež ovplyvňujú prahové energie. Na základe týchto skutočností sa domnievame, že chyba, ktorú vnáša použitie metódy G4 do výsledkov, je na úrovni jednotiek kcal.mol^{-1}, prípadne menej.

3.2 Prahové energie

Prahovou energiou pre účely tohoto príspevku rozumieme najnižšiu možnú energiu, ktorá postačuje na iniciovanie ionizačno-disociatívnej reakcie v tvare:

$$M + E_{dis} \longrightarrow (M - X - Y_1 - Y_2 - ...) + Y_1 + Y_2 + .. + X^+. \quad (3)$$

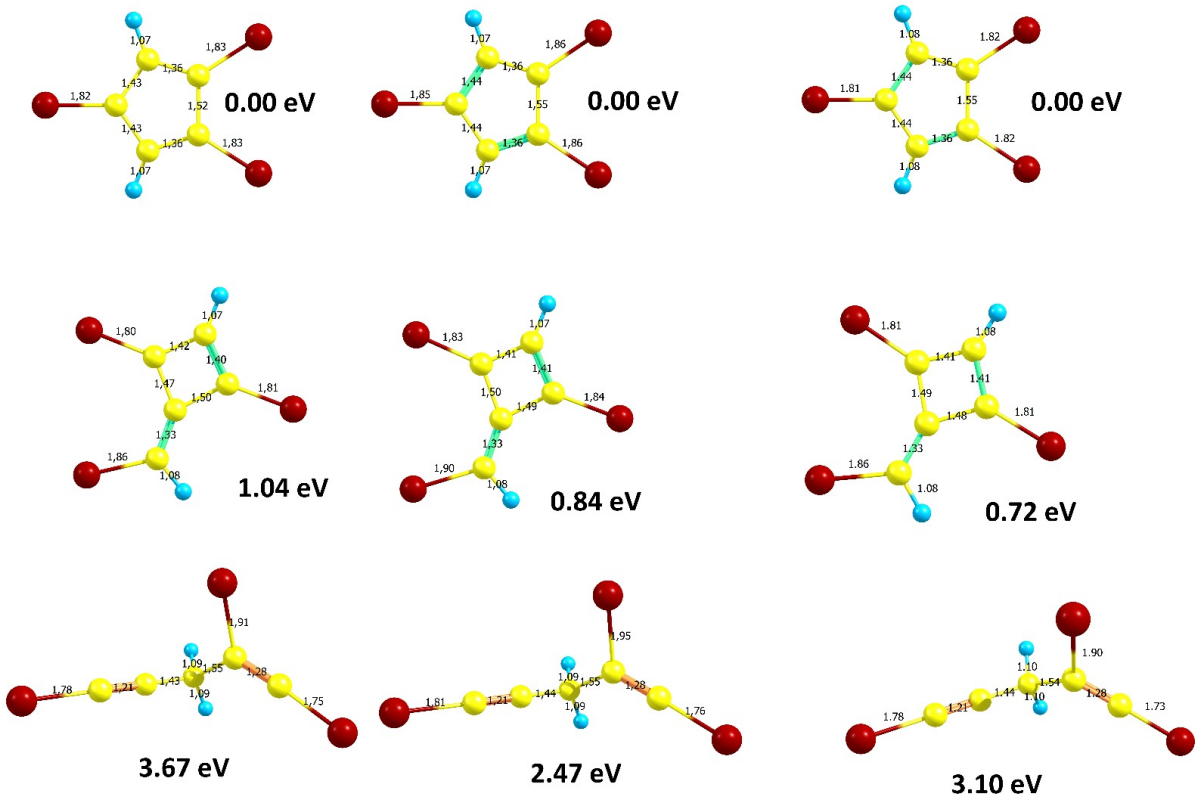
Počet neutrálnych fragmentov Y_i, pri ktorom sa minimalizuje disociačná energia nie je principiálne limitovaný, avšak v nami skúmaných prípadoch nebol vyššší ako tri.

Prahové energie boli pre TBA a TCA stanovené pre vybrané relevantné pomery m/z, na ktorých boli pomocou MS pozorované silné iónové signály [Wallace, 2025]. Získané hodnoty sú zhrnuté v tabuľke 2.

Podotknime, že takto definované prahové energie nemusia nutne korešpondovať s experimentálne určenými hodnotami, nakoľko disociačné reakcie pre príslušné m/z nemusia prebiehať kanálom s najnižšou energiou reakcie.

3.3 Ionizačné energie

Porovnanie ionizačných energií spočítaných pomocou OVGF/6-311G(2df,p) s nekorelovanými ionizačnými energiami podľa Koopmansovej teorémy sa nachádza v tabuľke 1. Sily pólov sú v teórii elektrónového propagátora úmerné efektívnemu prierezu pre ionizáciu - pravdepodobnosti detachmentu elektrónu z príslušného orbitálu [Harb and Hratchian, 2021].



Obr. 2: Porovnanie vybraných katiónvých fragmentov $m/z = 302$ - dĺžky väzieb a relatívne energie voči fragmentu s najnižšou energiou stanovené v optimálnej geometrii na úrovni xTB (vľavo), B3LYP/6-311G (v strede) a G4 (vpravo). Metóda xTB je pomerne spoľahlivo schopná replikovať geometriu G4 pri oveľa nižšej výpočtovej náročnosti. Pri stanovovaní relatívnych energií vykazujú metódy B3LYP/6-311G a xTB podobnú odchýlku od energií stanovených pomocou G4.

	TCA	
KT [eV]	OVGF [eV]	Sila pólu
9,41	8,86	0,890
9,75	9,20	0,889
12,83	11,23	0,891
12,27	11,26	0,876
12,59	11,54	0,890
12,90	11,86	0,889
12,97	11,94	0,888
14,01	12,90	0,883
14,18	13,04	0,881
14,55	13,34	0,894
15,02	13,65	0,888
15,30	13,97	0,882
15,77	14,12	0,827
16,69	15,01	0,878
17,23	15,42	0,888
17,27	15,69	0,872
17,88	16,12	0,855
18,01	16,20	0,866
19,74	17,22	0,853
19,98	17,93	0,861

	TBA	
KT [eV]	OVGF [eV]	Sila pólu
9,37	8,76	0,890
9,65	9,06	0,891
11,42	10,65	0,891
11,55	10,77	0,897
11,77	10,99	0,896
11,79	11,02	0,896
12,70	11,27	0,889
12,85	11,92	0,887
13,14	11,94	0,886
14,08	12,89	0,888
14,15	12,91	0,889
14,59	13,28	0,885
15,48	13,75	0,824
16,45	14,64	0,877
16,25	15,00	0,872
17,24	15,35	0,884
17,72	15,81	0,865
17,93	16,05	0,857
19,59	16,97	0,848
20,00	17,88	0,858

Tabuľka 1: Porovnanie prvých 20 ionizačných energií THA molekúl určených z Hartree-Fock výpočtu použitím Koopmansovej teorémy a teórie elektrónového propagátora OVGF a sily pólov pre príslušné ionizácie.

m/z	Katiónový fragment	Netruálne fragmenty	Prahová energia [eV]
213	TCA^+	/	8,52
198	$(TCA-CH_3)^+$	CH_3	10,30
170	$(TCA-COCH_3)^+$	$COCH_3$	11,15
110	$C_6H_2Cl^+$	$CH_3ClO+Cl$	14,98
98	$C_5H_2Cl^+$	$C_2H_3Cl_2O$	14,39
74	$C_6H_2^+$	$CHClO+2HCl$	14,28
62	$C_5H_2^+$	$CH_3Cl+CCl_2O$	14,30

m/z	Katiónový fragment	Netruálne fragmenty	Prahová energia [eV]
345	TBA^+	/	8,52
330	$(TBA-CH_3)^+$	CH_3	10,95
302	$(TBA-COCH_3)^+$	$COCH_3$	11,06
250	$(TBA-BrCH_3)^+$	C_2H_3Br	11,02
234	$C_6H_2Br^+$	C_2H_3BrO	12,80
222	$C_5H_2Br_2^+$	CH_2BrO	13,01
170	$C_6OH_2Br^+$	CH_3Br+Br	12,77
155	$C_6H_3Br^+$	CH_2Br_2O	12,74
154	$C_6H_2Br^+$	CH_3Br_2O	29,30
142	$C_5H_2Br^+$	$C_2H_3BrO+Br$	13,46
74	$C_6H_2^+$	$CH_3BrO+Br_2$	14,98
62	$C_5H_2^+$	$C_2H_2Br_2O+HBr$	14,18

Tabuľka 2: Prahové energie disociatívnych reakcií produkujúcich katiónové fragmenty s uvedeným m/z. Tieto energie prestavujú teoretický model najnižšej možnej energie elektrónu, aby bol schopný vytvoriť katiónový fragment s daným pomerom m/z.

Pod'akovanie

Táto práca bola podporená Agentúrou na podporu vedy a výskumu, grantom č. APVV-23-0522, a Vedeckou grantovou agentúrou MSVVaM SR a SAV (VEGA), číslo projektu 1/0553/22.

Táto práca bola čiastočne podporená vedecko-výskumnou platformou Univerzity Komenského v Bratislave na zariadeniach, IKT službách a odborných znalostiach zamestnancov Centra informačných technológií pre vysokovýkonné počítanie CLARA@UNIBA.SK. https://uniba.sk/HPC-Clara

Literatúra

[Bannwarth et al., 2019] Bannwarth, C., Ehlert, S., and Grimme, S. (2019). GFN2-xTB - an accurate and broadly parametrized self-consistent tight-binding quantum chemical method with multipole electrostatics and density-dependent dispersion contributions. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 15.

[Becke, 1989] Becke, A. D. (1989). *Density Functional Theories in Quantum Chemistry*.

[Becke, 1993] Becke, A. D. (1993). Density-functional thermochemistry. III. the role of exact exchange. *The Journal of Chemical Physics*, 98.

[Cederbaum, 1975] Cederbaum, L. S. (1975). One-body green's function for atoms and molecules: Theory and application. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, 8.

[Curtiss et al., 2007] Curtiss, L. A., Redfern, P. C., and Raghavachari, K. (2007). Gaussian-4 theory. *Journal of Chemical Physics*, 126.

[Dunning, 1989] Dunning, T. H. (1989). Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. i. the atoms boron through neon and hydrogen. *The Journal of Chemical Physics*, 90.

[Feltrer et al., 2010] Feltrer, R., Álvarez Rodríguez, M. L., Barreiro, C., Godio, R. P., and Coque, J. J. R. (2010). Characterization of a novel 2,4,6-trichlorophenol-inducible gene encoding chlorophenol O-methyltransferase from trichoderma longibrachiatum responsible for the formation of chloroanisoles and detoxification of chlorophenols. *Fungal Genetics and Biology*, 47.

[Frisch et al., 2016] Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., Robb, M. A., Cheeseman, J. R., Scalmani, G., Barone, V., Petersson, G. A., Nakatsuji, H., Li, X., Caricato, M., Marenich, A. V., Bloino, J., Janesko, B. G., Gomperts, R., Mennucci, B., Hratchian, H. P., Ortiz, J. V., Izmaylov, A. F., Sonnenberg, J. L., Williams-Young, D., Ding, F., Lipparini, F., Egidi, F., Goings, J., Peng, B., Petrone, A., Henderson, T., Ranasinghe, D., Zakrzewski, V. G., Gao, J., Rega, N., Zheng, G., Liang, W., Hada, M., Ehara, M., Toyota, K., Fukuda, R., Hasegawa, J., Ishida, M., Nakajima, T., Honda, Y., Kitao, O., Nakai, H., Vreven, T., Throssell, K., Montgomery, Jr., J. A., Peralta, J. E., Ogliaro, F., Bearpark, M. J., Heyd, J. J., Brothers, E. N., Kudin, K. N., Staroverov, V. N., Keith, T. A., Kobayashi, R., Normand, J., Raghavachari, K., Rendell, A. P., Burant, J. C., Iyengar, S. S., Tomasi, J., Cossi, M., Millam, J. M., Klene, M., Adamo, C., Cammi, R., Ochterski, J. W., Martin, R. L., Morokuma, K., Farkas, O., Foresman, J. B., and Fox, D. J. (2016). Gaussian~16 Revision C.01. Gaussian Inc. Wallingford CT.

[Halkier et al., 1999] Halkier, A., Helgaker, T., Jørgensen, P., Klopper, W., and Olsen, J. (1999). Basis-set convergence of the energy in molecular Hartree-Fock calculations. *Chemical Physics Letters*, 302.

[Harb and Hratchian, 2021] Harb, H. and Hratchian, H. P. (2021). dscf dyson orbitals and pole strengths from natural ionization orbitals. *Journal of Chemical Physics*, 154.

[Kato et al., 2011] Kato, H., Sato, K., and Takui, T. (2011). Analysis of iodine-like (chlorine) flavor-causing components in brazilian coffee with rio flavor. *Food Science and Technology Research*, 17.

[Kohn and Sham, 1965] Kohn, W. and Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 140.

[Kramida et al., 2024] Kramida, A., Yu. Ralchenko, Reader, J., and and NIST ASD Team (2024). NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.12), [Online]. Available: `https://physics.nist.gov/asd` [2025, March 29]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.

[Krishnan et al., 1980] Krishnan, R., Binkley, J. S., Seeger, R., and Pople, J. A. (1980). Self-consistent molecular orbital methods. xx. a basis set for correlated wave functions. *The Journal of Chemical Physics*, 72.

[Lee et al., 1988] Lee, C., Yang, W., and Parr, R. G. (1988). Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. *Physical Review B*, 37:785–789.

[Møller and Plesset, 1934] Møller, C. and Plesset, M. S. (1934). Note on an approximation treatment for many-electron systems. *Physical Review*, 46.

[Neese, 2022] Neese, F. (2022). Software update: The orca program system—version 5.0.

[Ortiz, 2005] Ortiz, J. V. (2005). An efficient, renormalized self-energy for calculating the electron binding energies of closed-shell molecules and anions. volume 105.

[Pople et al., 1987] Pople, J. A., Head-Gordon, M., and Raghavachari, K. (1987). Quadratic configuration interaction. a general technique for determining electron correlation energies. *The Journal of Chemical Physics*,

87:5968–5975.

[Raghavachari et al., 1989] Raghavachari, K., Trucks, G. W., Pople, J. A., and Head-Gordon, M. (1989). A fifth-order perturbation comparison of electron correlation theories. *Chemical Physics Letters*, 157.

[Simmie and Somers, 2015] Simmie, J. M. and Somers, K. P. (2015). Benchmarking compound methods (CBS-QB3, CBS-APNO, G3, G4, W1BD) against the Active Thermochemical Tables: A Litmus Test for Cost-Effective Molecular Formation Enthalpies. *Journal of Physical Chemistry A*, 119.

[Stephens et al., 1994] Stephens, P. J., Devlin, F. J., Chabalowski, C. F., and Frisch, M. J. (1994). Ab initio calculation of vibrational absorption and circular dichroism spectra using density functional force fields. *Journal of Physical Chemistry®*, 98.

[Stevie and Donley, 2020] Stevie, F. A. and Donley, C. L. (2020). Introduction to x-ray photoelectron spectroscopy. *Journal of Vacuum Science and Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, 38.

[Vosko et al., 1980] Vosko, S. H., Wilk, L., and Nusair, M. (1980). Accurate spin-dependent electron liquid correlation energies for local spin density calculations: a critical analysis. *Canadian Journal of Physics*, 58.

[Wagner, 1983] Wagner, C. D. (1983). Sensitivity factors for xps analysis of surface atoms. *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, 32.

[Wallace, 2025] Wallace, W. E. (2025). Nist chemistry webbook, nist standard reference database number 69. *P. J. Linstrom and W. G. Mallard, National Institute of Standards and Technology*.

[Xu et al., 2021] Xu, S., Wang, Q. D., Sun, M. M., Yin, G., and Liang, J. (2021). Benchmark calculations for bond dissociation energies and enthalpy of formation of chlorinated and brominated polycyclic aromatic hydrocarbons. *RSC Advances*, 11.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 153–163
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Dominik Diňa, Richard Cimerman

Využitie výboja prechodovej iskry pre konverziu CO_2

Dominik Diňa[1*] Richard Cimerman[1†‡]

Katedra astronómie, fyziky Zeme a meteorológie, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt: Oxid uhličitý CO_2 je jeden z hlavných skleníkových plynov. V súčasnosti sa venuje veľa pozornosti nájdeniu metód, ktoré by dokázali rast koncentrácie CO_2 v atmosfére spomaliť a CO_2 z atmosféry opätovne využiť. Sľubnou metódou sa javí byť plazmová konverzia CO_2.

V práci sme skúmali plazmovú konverziu CO_2 prebiehajúcu v prechodovom iskrovom výboji generovanom pri atmosférickom tlaku v zmesi N_2 a CO_2. Skúmali sme viacero typov experimentov, a to so suchou alebo vlhkou plynnou zmesou, prípadne s pridaným externým kondenzátorom.

Pomocou infračervenej absorpčnej spektroskopie sme pozorovali produkciu oxidu uhoľnatého CO ako hlavného produktu konverzie CO_2. Pre jednotlivé experimenty sme vyhodnotili aj základné elektrické charakteristiky výboja, ako časový priebeh napätia a prúdu, výkon výboja, kapacitu obvodu, prúdové amplitúdy a frekvenciu iskrenia.

Vyhodnotili sme účinnosť konverzie CO_2 (v %), energetickú náročnosť (v kWh/g) a energetickú účinnosť (v g/kWh) skúmaného experimentu v závislosti od výkonu výboja, resp. objemovej hustoty energie SIE (J/l).

Z výsledkov vyplýva, že so zvyšovaním výkonu výboja rastie aj účinnosť konverzie CO_2. Najväčšia účinnosť konverzie bola pozorovaná v experimente so suchou plynnou zmesou a s pridaným externým kondenzátorom, a to vo výške 12,6 % pre SIE rovné 3570 J/l. Najvyššiu energetickú účinnosť sme dosiahli vo výške 4,7 g/kWh pre SIE 950 J/l v experimente s vlhkou plynnou zmesou.

Kľúčové slová: Nízkoteplotná plazma, prechodový iskrový výboj, konverzia CO_2

1 Prechodový iskrový výboj

Táto práca sa primárne zaoberá tzv. prechodovým iskrovým výbojom, v ktorom je prítomná fáza iskry spolu so streamerom. Prechodová iskra je teplotne nerovnovážna plazma, kvôli malému množstvu energie uloženej v celkovej kapacite systému [Dvonč and Janda, 2015]. Samotný názov prechodová iskra odkazuje na prechod medzi teplotne rovnovážnou a teplotne nerovnovážnou plazmou, príp. je tiež označovaná ako "výboj prechodu od streamera k iskre", čo je výstižnejší názov týkajúci sa šírenia výboja [Janda et al., 2011]. Elektrický prieraz všeobecne vedie ku generovaniu oblúkového výboja, čo je teplotne rovnovážna plazma, alebo "len" k výboju iskry v prípade nedostatočného dodávania prúdu. Z dôvodu zabránenia vzniku teplotne rovnovážnej plazmy môže byť do elektrického obvodu pridaný odpor alebo môžu byť výboje generované použitím veľmi krátkych vysokonapäťových pulzov. Tieto metódy teda obmedzujú prúd dodaný plazme zdrojom jednosmerného prúdu, inhibujú prechod na oblúk a umožňujú len veľmi krátku fázu iskry, počas ktorej nemôže dôjsť k vzniku teplotne rovnovážnej plazmy. Nakoniec plazma začne po impulze iskry spontánne zanikať [Dvonč and Janda, 2015].

2 Experimentálna aparatúra

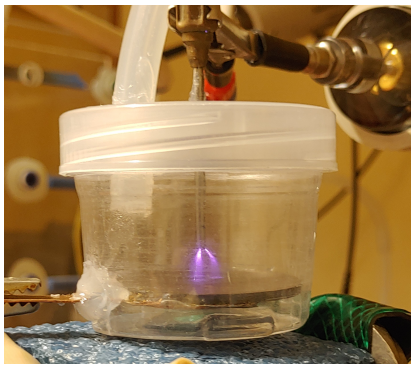
Experimentálnu aparatúru tvorilo niekoľko základných častí: zdroj vysokého napätia, plazmový reaktor, meracie a analytické prístroje.

2.1 Plazmový reaktor

Používaný plazmový reaktor využíval geometriu ihla - rovina na generovanie nehomogénneho elektrického poľa. Telo reaktora tvorila uzatvárateľná valcová nádoba s priemerom približne 5 cm a výškou tiež približne 5 cm (viď. obrázok 1 a 2). Cez vrchnák nádoby bola pripojená ihlová elektróda, ktorú tvorila dutá komerčná ihla slúžiaca na nafukovanie lopty. Táto elektróda bola pripojená na zdroj vysokého napätia (t. j. vysokonapäťová elektróda) a zároveň slúžila aj na prívod plynnej zmesi do reaktora. Na vrchnáku nádoby reaktora sa nachádzala aj hadička, ktorá odvádzala plyn po prechode reaktorom na analýzu do infračerveného absorpčného spektrometra FTIR (*Shimadzu IRSpirit-X*). Na dne nádoby reaktora sa nachádzala druhá - rovinná oceľová elektróda, ktorá bola od ihlovej elektródy vzdialená pri-

*dina5@uniba.sk
†richard.cimerman@fmph.uniba.sk
‡Školiteľ

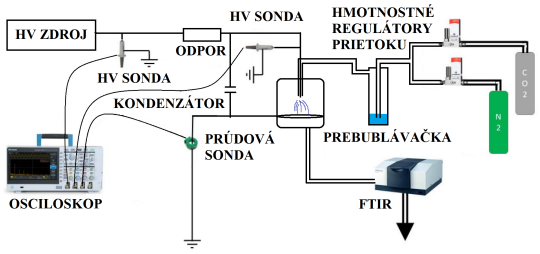
bližne 6 mm. Táto rovinná elektróda bola zároveň cez otvor v stene nádoby uzemnená. Všetky otvory nádoby reaktora vrátane vrchnáku boli utesnené silikónom, aby sa zabezpečila jeho plynotesnosť.



Obrázok 1: Použitý reaktor s výbojom.

2.2 Zdroj vysokého napätia a meranie elektrických charakteristík výboja

V našej práci sme použili zdroj vysokého DC napätia. K zdroju vysokého napätia bola pripojená ihlová elektróda, pričom rovinná elektróda bola uzemnená. Amplitúda vysokého napätia dodávaného zdrojom sa pohybovala v intervale $10-21$ kV. Aby študovaný iskrový výboj plynulo neprešiel do oblúkového výboja, bol do obvodu sériovo pridaný odpor. Pracovali sme s predradeným odporom o veľkosti $12,6$ MΩ a $18,4$ MΩ, čo malo za následok limitovanie dodávaného prúdu do výboja. To spôsobilo, že výboj spotreboval energiu uloženú v kapacite samotného odvodu, no nemal dostatok energie na to, aby sa udržal, a preto spontánne "zhasol". Navonok mal preto študovaný iskrový výboj pulzný charakter. Frekvencia tohto iskrenia sa pohybovala v intervale $1-2,3$ kHz. Pri zvýšenej vlhkosti plynu sa frekvencia zmenila v rozsahu $2-5$ kHz. Keďže energia iskry závisí od celkovej kapacity obvodu, zaujímalo nás, ako sa výsledky zmenia, ak túto kapacitu zväčšíme pridaním externého kondenzátora. S externým kondenzátorom sa frekvencia pulzov výboja pohybovala v rozmedzí $1-1,3$ kHz. Podobne ako odpor, aj kondenzátor pomáha zabrániť prechodu iskrového výboja do oblúka, preto po pridaní externého kondenzátora bolo postačujúce pracovať s menším predradeným odporom s hodnotou $4,63$ MΩ. Externý kondenzátor mal hodnotu 110 pF. Pomocou vysokonapäťových sond (*Tektonix P6015A*) sme merali výstupné napätie zo zdroja (pred odporom) a napätie aplikované na ihlovú elektródu reaktora (za odporom). Prúdovou sondou (*Pearson Electronics 2877*) sme merali elektrický prúd tečúci výbojom. Tieto sondy boli pripojené k digitálnemu osciloskopu (*Tektronix TBS 2104*).



Obrázok 2: Schéma experimentálnej aparatúry

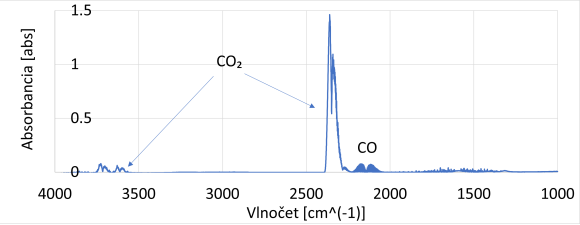
2.3 Prívod a zloženie plynnej zmesi

Ako nosný plyn bol použitý dusík N_2 (čistota 4.0) z tlakovej fľaše, do ktorého bol primiešavaný oxid uhličitý CO_2 z tlakovej fľaše tak, aby výsledná koncentrácia CO_2 v zmesi bola $2,5$ %. To bolo dosiahnuté pomocou dvoch hmotnostných regulátorov prietoku (*Bronkhorst EL-FLOW Prestige*). Celkový prietok plynnej zmesi experimentálnym systémom bol $0,2$ l/min. Po prechode plazmovým reaktorom a spektrometrom bola nakoniec plynná zmes odvedená von z miestnosti.

2.4 Analýza plynnej zmesi

FTIR spektroskopia sa používa pri analýze vzoriek, v ktorých molekuly absorbujú IČ žiarenie s vlnovými dĺžkami typicky medzi 800 nm a 1 mm. Vzorka analyzovaného plynu prechádza tzv. plynnou kyvetou, ktorá je presvietená lúčom IČ žiarenia. Následne detektor umiestnený za kyvetou vyhodnotí, ktoré vlnové dĺžky žiarenia a v akej miere boli vzorkou absorbované. Výsledkom je absorpčné spektrum, ktoré je graficky znázornené ako závislosť absorbancie od vlnočtu (typicky v jednotkách cm^{-1}), teda prevrátenej hodnoty vlnovej dĺžky (viď. obrázok 3). V spektre môžeme vidieť absorpčné pásy vzorky pre konkrétne vlnočtu žiarenia. Získané spektrá sa následne porovnajú s referenčnými spektrami, čo umožní priradiť jednotlivé získané absorpčné pásy jednotlivým zlúčeninám. Pozícia absorpčných pásov v spektre teda určuje kvalitatívne zastúpenie jednotlivých zložiek vo vzorke, pričom ich výška je úmerná kvantitatívnemu zastúpeniu zložiek vo vzorke. My sme používali plynnú kyvetu s okienkami z fluoridu

vápenatého CaF_2, ktoré nám obmedzili analýzu na interval vlnočtov $1000-4000$ cm^{-1}. Zameriavali sme sa na analýzu CO_2 v intervaloch $2200-2400$ cm^{-1} a $3500-3750$ cm^{-1} ako aj oxidu uhoľnatého CO (ako hlavného produktu konverzie CO_2) v intervale $2000-2250$ cm^{-1}. Dĺžka optickej dráhy použitej kyvety bola 10 cm.



Obrázok 3: Ilustračné výstupné FTIR spektrum so zvýraznenými hlavnými pásmi oxidu uhličitého CO_2 a oxidu uhoľnatého CO.

2.5 Merané veličiny

Pomocou osciloskopu sme merali nasledovné veličiny: výstupné napätie zo zdroja U_s, prierazné napätie na vysokonapäťovej elektróde U_{br}, frekvenciu f a amplitúdu prúdových pulzov I. Odpor R predstavoval známu veličinu, ktorú sme mohli variovať (ako už bolo opísané vyššie).

Pomocou nasledovného vzorca:

$$C = \frac{1}{R \cdot f \cdot ln\left(\frac{U_s}{U_s - U_{br}}\right)} \tag{1}$$

sme získali kapacitu C nášho elektrického obvodu.

Pomocou toho sme vedeli určiť energiu jedného pulzu E_p nasledovne:

$$E_p = \frac{1}{2} \cdot C \cdot U_{br}^2 \tag{2}$$

Následne po prenásobení frekvenciou iskrových výbojov f sme získali výkon výboja P:

$$P = E_p \cdot f \tag{3}$$

Okrem výkonu výboja sa však často v praxi používa aj *objemová hustota energie* (alebo anglicky *Specific input energy SIE*). Tá je definovaná ako podiel výkonu a prietoku plynu Q:

$$SIE(J/l) = \frac{P \cdot 60}{Q} \tag{4}$$

Účinnosť konverzie η sa udáva v percentách a hovorí, koľko skúmanej prechádzajúcej terčovej zlúčeniny (v našom prípade CO_2) bolo konvertovanej,

$$\eta(\%) = \left(1 - \frac{c}{c_0}\right) \cdot 100 \tag{5}$$

a kde c_0 je vstupná a c je výstupná koncentrácia CO_2 v plynnej zmesi.

Energetická náročnosť (tiež známa ako *Energy Cost EC*) vyjadruje množstvo energie (v kWh) potrebnej na konverziu jednotkovej hmotnosti CO_2 (v g):

$$EC(kWh/g) = \frac{SIE}{\eta \cdot c_0} \tag{6}$$

Energetická účinnosť tiež známa ako *Energy Efficiency EE* je obrátená hodnota *EC*, teda koľko látky bolo konvertovanej jednotkou energie dodanej do systému:

$$EE(g/kWh) = \frac{1}{EC} \tag{7}$$

2.6 Postup merania

V tejto práci sme sa zamerali na tri rozdielne experimenty zamerané na konverziu CO_2. Prvý experiment bol uskutočnený so suchou zmesou N_2 + CO_2 bez pridanej vlhkosti a externého kondenzátora. V druhom experimente sme namiesto suchej plynnej zmesi používali vlhkú plynnú zmes s relatívnou vlhkosťou plynu 50 %. Aj v tomto prípade sme pracovali bez pridaného externého kondenzátora. Tretí experiment bol uskutočnený opäť so suchou plynnou zmesou, avšak s pridaným externým kondenzátorom.

Pomocou nameraných hodnôt napätia pred a za odporom, prúdu a frekvencie iskrenia sme vedeli vyjadriť výkon výboja resp. SIE. Výkon výboja sa pohyboval v intervale $2-5$ W bez externého kondenzátora, resp. intervale $7-12$ W s externým kondenzátorom. V prípade SIE sa pracovný interval pohyboval medzi $700-1300$ J/l bez externého kondenzátora, resp. $2300-3200$ J/l s externým kondenzátorom. Pred spustením výboja bol celý experimentálny systém najprv prepláchnutý čistým N_2 alebo N_2 s 50 % relatívnou vlhkosťou a zmeralo sa pozaďové (referenčné) absorpčné spektrum. Následne bolo pridané do zmesi CO_2 a čakalo sa do ustálenia koncentrácie (v našom prípade aspoň 30 minút). S pozaďovým spektrom sa následne porovnávali namerané spektrá získané so spusteným výbojom. Z rozdielov medzi spektrami sme vypočítali koncentráciu vznikajúceho CO (na základe predchádzajúcich kalibrácii) a

následne aj jednotlivé hodnoty η, EE a EC. Výboj bol spustený pri danom napätí (výkone výboja) tak dlho, pokiaľ sa neustálila koncentrácia vznikajúceho CO, ako hlavného produktu sledovanej reakcie. V našom prípade jedno meranie pri jednom výkone výboja trvalo v priemere približne 6 minút. Pri experimentoch so suchou ako aj vlhkou plynnou zmesou bez externého kondenzátora sme meranie účinnosti konverzie CO_2 uskutočnili pre viacero hodnôt výstupného napätia zo zdroja v rozsahu $10-20$ kV pre odpory $12,6$ MΩ aj $18,4$ MΩ dvakrát, spolu celkovo 8 experimentov. Experiment s pridaným externým kondenzátorom sa nám podarilo dokončiť len raz, kvôli technickým problémom (tepelná deformácia reaktora). Celkovo teda bolo realizovaných 9 celých experimentov.

3 Výsledky a diskusia

3.1 Vizuálne pozorovanie výboja

Po aplikovaní dostatočne vysokého napätia sme pozorovali zapálenie výboja a generovanie viditeľných filamentov iskrového výboja. Tieto filamenty nesmerovali kolmo na elektródu, ich trajektória mala mierne zakrivenie. Pri prekročení zápalného napätia vychádzali iskry prevažne z jedného miesta ihlovej elektródy. Zvyšovaním výstupného napätia zo zdroja iskry postupne začali vychádzať z celého obvodu ihlovej elektródy, teda nepreferovali jedno miesto. Zvyšovaním napätia sa postupne zvyšovala aj frekvencia iskier. Pri určitej hodnote napätia však prechodový iskrový výboj začal byť nestabilný a na krátky čas prechádzal do oblúkového výboja, príp. prešiel do oblúkového výboja úplne.

3.1.1 Suchá plynná zmes

V tomto prípade bola farba výboja bielo-fialová. Jednotlivé filamenty výboja boli dobre okom rozlíšiteľné (viď. obrázok 5). Po ukončení experimentov sme na rovinnej uzemnenej elektróde pozorovali výrazné sfarbenie s oranžovým nádychom. V miestach dopadu iskry však toto zafarbenie nebolo.

Sfarbenie, no oveľa menej výrazné, sme pozorovali aj na ihlovej elektróde. Predpokladáme, že samotný materiál elektród, oceľ, reagoval so vzniknutými reaktívnymi časticami, ktoré výboj generoval. Pôvod a obsah sfarbenia nám však nie je známy.

3.1.2 Vlhká plynná zmes

Výraznou zmenou v tomto prípade bolo, že výboj mal oveľa sýtejší fialový nádych, ktorý sa zdanlivo javil matný. Jednotlivé filamenty výboja neboli tak dobre rozlíšiteľné ako pri suchej plynnej zmesi a výboj sa zdanlivo javil ako jeden samostatný kanál. Celková intenzita sa javila výrazne vyššia (viď. obrázok 6). Po ukončení experimentov sme pozorovali výrazne zakalené steny reaktora (viď. obrázok 4).

To naznačuje, že v reaktore okrem dominantného CO vznikali aj ďalšie minoritné produkty (keďže zvýšená vlhkosť plynnej zmesi so sebou priniesla ďalší reaktant vo forme vodíka), ktoré sa usádzali (kondenzovali) na spomenutých stenách reaktora. Napriek tomu presný pôvod ani zloženie týchto produktov zatiaľ nepoznáme.

3.1.3 Suchá plynná zmes s pridaným externým kondenzátorom

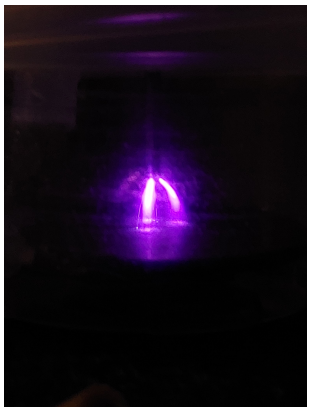
Tento prípad produkoval zdanlivo najintenzívnejší výboj. Voľným okom boli veľmi dobre rozlíšiteľné jednotlivé filamenty výboja, ktoré sa javili byť oveľa širšie ako v predchádzajúcich prípadoch. Farba výboja prešla skôr do bielej než fialovej farby (viď. obrázok 7). Po ukončení experimentu sme podobne, ako v prípade so suchou plynnou zmesou bez pridaného kondenzátora, pozorovali oranžový povlak na rovinnej elektróde, ktorý sa opäť nenachádzal v miestach samotného dopadu iskry (viď. obrázok 8). Povlak sa nachádzal aj na ihlovej elektróde, no mal sýtobordovú až čiernu farbu. Povlak bol výraznejší a viac rozsiahlý ako v suchej plynnej zmesi bez pridaného externého kondenzátora pravdepodobne z dôvodu tvorby väčšieho množštva reaktívnych častíc. V tomto prípade spôsobil výboj aj poškodenie povrchu rovinnej elektródy.

3.2 Elektrické charakteristiky reaktora

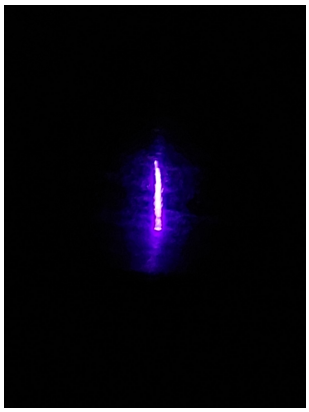
Vo všetkých experimentoch sme so zvyšovaním výstupného napätia zo zdroja vysokého napätia pozorovali aj mierny nárast priemerného prierazného napätia. Najväčší nárast prierazného napätia bol v experimente s pridaným externým kondenzátorom. Pri zvyšovaní aplikovaného napätia sme pozorovali aj nárast frekvencie iskrenia okrem experimentu s pridaným externým kondenzátorom, kde frekvencia mierne klesala. Priemerná energia pripadajúca na jednu iskru, ako aj maximálna amplitúda prúdového



Obrázok 4: Fotografia zaneseného reaktora po experimente s vlhkou plynnou zmesou, v ktorom bol následne spustený experiment so suchou plynnou zmesou a s pridaným externým kondenzátorom, a v ktorom boli dosiahnuté výsledky z obrázku 19.



Obrázok 5: Fotografia výboja v suchej plynnej zmesi. Výboj bol fotený s expozičnou dobou 1,3 sekundy.



Obrázok 6: Fotografia výboja vo vlhkej plynnej zmesi. Výboj bol fotený s expozičnou dobou $0,125$ s.



Obrázok 7: Fotografia výboja v suchej plynnej zmesi a s pridaným externým kondenzátorom. Výboj bol fotený s expozičnou dobou $0,01$ s.



Obrázok 8: Fotografia elektródy po experimente. Podobne vyzerala aj elektróda po experimente v suchej zmesi (viď. podkapitola 3.1.1) no zafarbenie bolo menej výrazné a menej rozsiahle.

pulzu jednej iskry, mali taktiež rastúci charakter s rastom aplikovaného napätia. Nasledujúce prezentované výsledky sú vždy priemerom piatich meraní uskutočnených pomocou osciloskopu.

3.2.1 Suchá plynná zmes

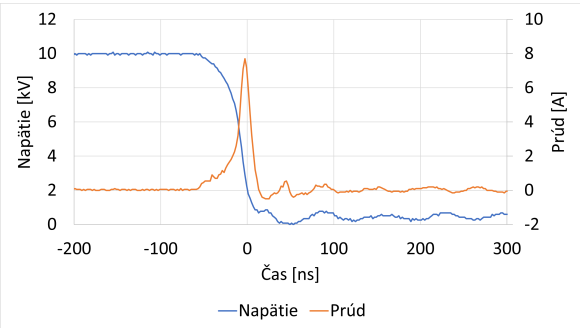
Pri použití $12,6$ MΩ odporu sme merali s výstupným napätím zo zdroja v rozsahu $11,5-18$ kV, pri ktorom bola iskra stabilná. Priemerné prierazné napätie bolo pozorované v rozsahu $9-10$ kV, priemerná frekvencia iskrenia v rozsahu $1000-2250$ Hz, priemerná kapacita obvodu v rozsahu $37-61$ pF a priemerná energia jednej iskry v rozsahu $1,6-2,3$ mJ. Celkový výkon výboja rástol s rastom aplikovaného napätia a pohyboval sa v rozmedzí $2,1-4,6$ W čo zodpovedá SIE v rozmedzí $630-1390$ J/l.

Pri zvýšení odporu na $18,4$ MΩ sa namerané hodnoty veľmi nelíšili. Výstupné napätie zo zdroja, s ktorým sme pracovali pri stabilnom výboji, bolo $14-21$ kV. Priemerné prierazné napätie sa pohybovalo v

rozsahu $9 - 10,7$ kV, priemerná frekvencia iskrenia v rozsahu $1670 - 2365$ Hz, priemerná kapacita obvodu v rozsahu $22 - 56$ pF a priemerná energia jednej iskry v rozsahu $0,9 - 2,2$ mJ. V tomto prípade sa výkon výboja a SIE pohybovali v rozmedzí $2,2 - 3,8$ W, resp. $660 - 1140$ J/l.

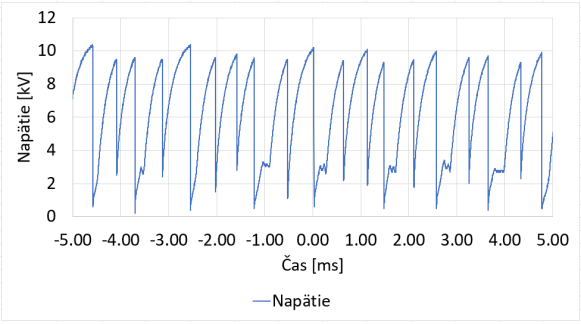
Na obrázku 9 možno vidieť typický časový priebeh napätia a prúdu s krátkou časovou základňou pre jednu iskru, pričom na obrázku 10 uvádzame časovú závislosť napätia aplikovaného na ihlovú elektródu s dlhou časovou základňou, na ktorom sú viditeľné viaceré napäťové spády prisluchajúce jednotlivým iskrovým výbojom.

Na obrázku 9 je viditeľné, že náhly pokles napätia (vybitie internej kapacity obvodu) je sprevádzané prudkým nárastom prúdu - vzniká iskra. Doba trvania jednej iskry stanovená podľa trvania hlavného prúdového pulzu bola približne 70 ns. V niektorých prípadoch bolo možné ešte pred "hlavným" poklesom napätia vidieť prvotný malý pokles napätia, za ktorým nasledoval úplný pokles. Tento malý pokles naznačuje práve prvotný streamer, ktorý sa neskôr vyvinul na iskru. Za samotným prúdovým pulzom je možné pozorovať niekoľko prúdových (aj napäťových) prekmitov, ktoré vznikali v dôsledku interných RLC vlastností samotného obvodu.



Obrázok 9: Časová závislosť elektrického napätia meraného za odporom a meraného elektrického prúdu v suchej plynnej zmesi s krátkou časovou základňou.

Na obrázku 10 môžeme vidieť, že nábehová hrana napätia nasledovaná po jednotlivých napäťových spádoch, ktoré prislúchajú jednotlivým iskrovým výbojom, nie je vždy hladká, ani rovnako vysoká. Rôzna výška, na akú napätie narástlo pred ďalším prierazom, poukazuje na mierne odlišné prierazné napätia jednotlivých výbojov. Zloženie plynu v malej oblasti, kde sa práve vyskytuje iskra, môžu byť v čase rôzne. to ovplyvňuje, ako dobre sa táto oblasť ionizuje, aká je vodivá a tým ovplyvňujú aj



Obrázok 10: Časová závislosť elektrického napätia meraného za odporom v suchej plynnej zmesi s dlhou časovou základňou.

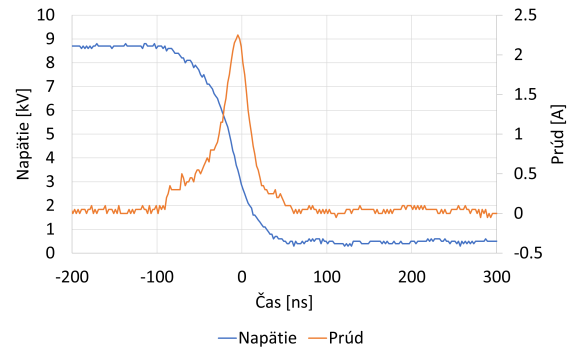
prierazné napätie, ktoré sa potom môže mierne líšiť pri jednotlivých nasledujúcich iskrových výbojoch. Rovnako mohli prierazné napätie ovplyvniť aj rôzne povrchové nedokonalosti ihlovej elektródy. Keďže samotné iskry mohli byť generované pozdĺž celého prierezu ihlovej elektródy, malé zakrivenia (nedokonalosti povrchu), by mohli spôsobiť skoršie zapálenie výboja (pri menšom zápalnom napätí).

3.2.2 Vlhká plynná zmes

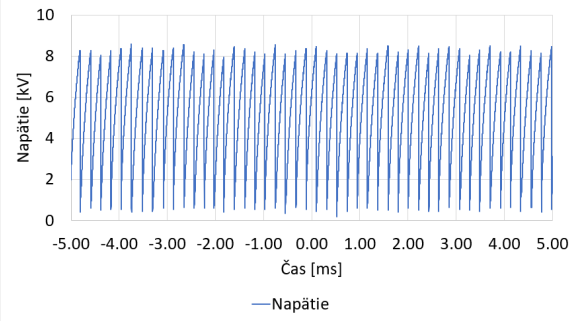
Vo vlhkej plynnej zmesi s odporom $12,6$ MΩ bola iskra stabilná pre $11,3 - 15,5$ kV nameraných na zdroji vysokého napätia. Priemerné prierazné napätie sa oproti suchej zmesi znížilo a pohybovalo v rozmedzí $7,5 - 9$ kV. Tento pokles môže byť spôsobený tým, že vodné pary sa ľahšie ionizujú a teda zlepšujú vodivosť plynnej zmesi. Veľkou zmenou oproti suchej plynnej zmesi bol prudký nárast priemernej frekvencie iskrenia, ktorá sa pohybovala v rozmedzí $2650 - 4650$ Hz. Pozorovateľnou zmenou bolo aj to, že priemerná kapacita obvodu sa s nárastom aplikovaného napätia skoro nezmenila a pohybovala sa v rozsahu $24 - 25$ pF. Priemerná energia jednej iskry bola tiež značne menšia $0,7 - 1$ mJ. Výkon výboja bol však podobný ako v suchom plyne (kvôli vyššej frekvencii iskrenia), a to $2,3 - 4,2$ W, pričom SIE dosahovalo $690 - 1260$ J/l.

S vyšším odporom $18,6$ MΩ bola iskra stabilná pre výstupné napätia zo zdroja v rozsahu $13 - 18,8$ kV. Priemerné prierazné napätie ($7,5 - 9$ kV) ani priemerná frekvencia ($2600 - 5100$ Hz) sa oproti menšiemu odporu veľmi nezmenili. Zaujímavou zmenou bolo, že v tomto prípade mala kapacita systému mierne klesajúci charakter z 24 na 20 pF. Priemerná energia jednej iskry bola menšia ($0,6 - 0,9$ mJ). V tomto prípade výkon výboja

dosahoval hodnoty $2,1 - 4$ W, čomu odpovedalo SIE v rozsahu $630 - 1200$ J/l.



Obrázok 11: Časová závislosť elektrického napätia meraného za odporom a meraného elektrického prúdu vo vlhkej plynnej zmesi s krátkou časovou základňou.

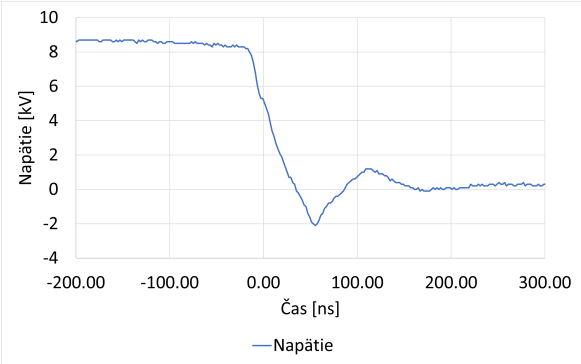


Obrázok 12: Časová závislosť elektrického napätia meraného za odporom vo vlhkej plynnej zmesi s dlhou časovou základňou.

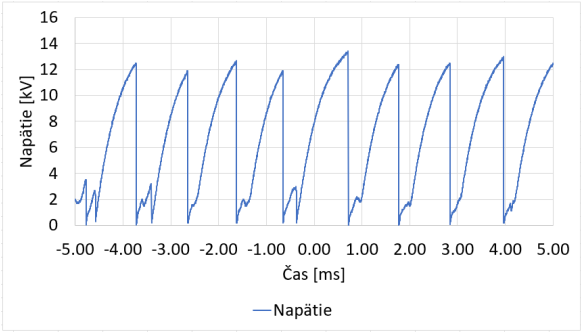
Na rozdiel od suchej plynnej zmesi môžeme vidieť, že s pridanou vlhkosťou nám nevznikali dodatočné zákmity prúdového signálu za hlavným prúdovým pulzom iskry (obrázok 11). Okrem toho bolo pozorované, že jednotlivé nábehové hrany napätia pri opakujúcich sa pulzoch sú v tomto prípade oveľa hladšie (obrázok 12). V tomto prípade trvala jedna iskra v priemere dlhšie, a to približne 150 ns. To malo za následok zdanlivo vyššiu pozorovanú žiarivosť iskry. Výška nábehových hrán opäť nie je vždy rovnaká z rovnakých dôvodov ako v suchej plynnej zmesi.

3.2.3 Suchá plynná zmes s pridaným externým kondenzátorom

Pri tomto experimente bolo výstupné napätie zo zdroja v rozsahu $13 - 16,5$ kV, pričom priemerné prierazné napätie bolo v najväčšom rozsahu $9,2 - 12,2$ kV. V tomto experimente bol pozorovaný pokles priemernej frekvencie iskrenia z 1170 Hz na 920 Hz. Kapacita obvodu bola v tomto prípade výrazne vyššia, ako v predchádzajúcich experimentoch a pohybovala sa v rozsahu $150 - 180$ pF. Tento experiment dosahoval najväčšiu priemernú energiu pripadajúcu na jednu iskru, a to v rozsahu $6,6 - 13$ mJ. V tomto prípade bol preto dosiahnutý najväčší výkon výboja v rozsahu $7,68 - 11,92$ W, čo umožnilo dosiahnuť hodnoty SIE v rozsahu $2300 - 3570$ J/l.



Obrázok 13: Časová závislosť elektrického napätia meraného za odporom v suchej plynnej zmesi s pridaným externým kondenzátorom a s krátkou časovou základňou.



Obrázok 14: Časová závislosť elektrického napätia meraného za odporom v suchej plynnej zmesi s pridaným externým kondenzátorom a s dlhou časovou základňou.

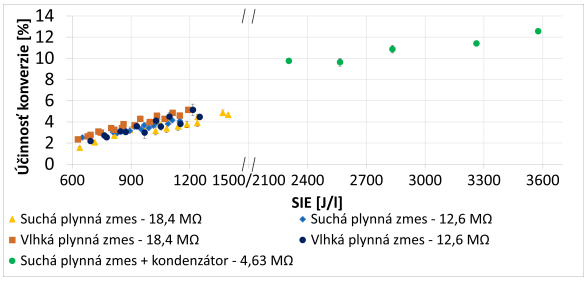
V tomto experimente sme však neboli schopní monitorovať elektrický prúd z technických dôvodov, keďže sme mali príliš citlivú sondu na monitorovanie prúdových pulzov, ktorých amplitúdy odhadujeme na vyše 40 A. Pridanie externého kondenzátora malo za následok aj dlhší čas nabíjania obvodu (viď. obrázok 14), čo sa prejavilo nižšou frekvenciou iskrenia ako v predchádzajúcich experimentoch. Iskra v tomto prípade typicky trvala približne 50 ns (obrázok 13).

3.3 Konverzia CO_2

Ako už bolo spomenuté v popise postupu experimentu, v každom experimente sme postupne zvyšovali aplikované napätie, čím sa zvyšoval výkon výboja. Bez ohľadu na typ experimentu sme vždy zaznamenali rast účinnosti konverzie CO_2 s rastom výkonu výboja. Pre suchú plynnú zmes so zapojeným odporom 12,6 MΩ sa účinnosť konverzie CO_2 pohybovala v rozmedzí $1,6-4,9$ % (pre SIE $630-1390$ J/l). So zapojeným väčším odporom 18,4 MΩ sa účinnosť konverzie výrazne nezmenila a pohybovala sa v rozmedzí $2,5-4,2$ % (SIE $660-1140$ J/l).

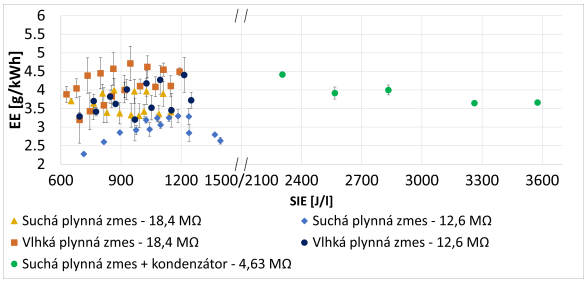
S primiešaním relatívnej vlhkosti do plynnej zmesi sme očakávali pokles účinnosti konverzie CO_2 predovšetkým kvôli elektrónovej afinite vody. To znamená, že voľné elektróny môžu byť „ochotne“ zachytávané molekulami vody bez toho, aby boli využité v konverzii CO_2. Výsledná dosiahnutá účinnosť konverzie však bola však s vlhkou plynnou zmesou mierne väčšia ako v suchej plynnej zmesi. Domnievame sa, že to môže byť spôsobené zmenou charakteristík generovaného iskrového výboja pri zvýšenej vlhkosti, konkrétne značne zvýšenou frekvenciou iskrenia. Účinnosť konverzie vlhkej plynnej zmesi bola v rozmedzí $2,2-5,1$ % (SIE $690-1260$ J/l) s odporom $12,6$ MΩ a v rozmedzí $2,1-5,1$ % (SIE $630-1200$ J/l) s odporom $18,4$ MΩ.

V experimente so suchou plynnou zmesou s pridaným externým kondenzátorom sa účinnosť konverzie CO_2 pohybovala v rozmedzí $9,8-12,6$ % (SIE $2300-3570$ J/l), čo bola najvyššia účinnosť, akú sme dosiahli. Nárast konverzie oproti predchádzajúcim experimentom bol očakávaný, keďže so zapojením externého kondenzátora sa značne zvýšila kapacita obvodu, a tým aj priemerná energia pripadajúca na jednu iskru a výkon výboja. Na obrázku 15 je znázornená závislosť účinnosti konverzie CO_2 od SIE, pričom v našom prípade 300 J/l je rovných 1 W .

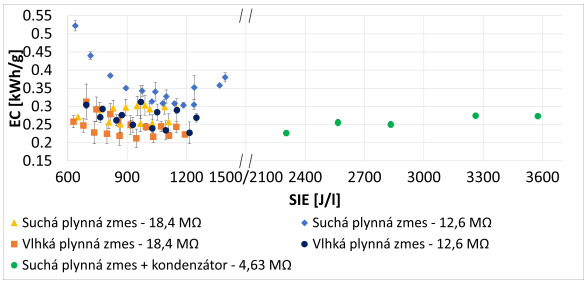


Obrázok 15: Graf závislosti účinnosti konverzie CO_2 od SIE pre jednotlivé experimenty.

Okrem účinnosti sme vyhodnotili aj energetickú účinnosť EE (viď. obrázok 16) a energetickú náročnosť EC (viď. obrázok 17).



Obrázok 16: Graf závislosti energetickej náročnosti EE od SIE pre jednotlivé experimenty.



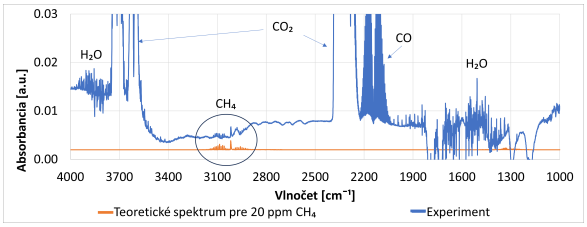
Obrázok 17: Graf závislosti energetickej účinnosti EC od SIE pre jednotlivé experimenty.

S postupným zvyšovaním aplikovaného napätia a teda aj zvyšovaním výkonu výboja sa menila aj energetická náročnosť resp. energetická účinnosť výboja. Pre suchú plynnú zmes so zapojeným odporom 12,6 MΩ sa EE pohybovala v rozmedzí $2-3,3$ g/kWh (resp. EC v rozmedzí $0,3-0,5$ kWh/g) pre SIE $630-1390$ J/l. Najlepší výsledok 3,3 g/kWh bol dosiahnutý pre SIE rovné 1190 J/l. So zapojeným väčším odporom 18,4 MΩ sme dosiahli mierne zlepšenie výsledkov. EE sa pohybovalo v rozmedzí $3,3-4$ g/kWh (resp. EC v rozmedzí $0,25-0,33$ kWh/g) pre sie $660-1140$ J/l. Najlepší výsledok 4 g/kWh bol dosiahnutý pre SIE 915 J/l. V prípade vlhkej plynnej zmesi bola výsledná EE mierne vyššia. So zapojeným menším odporom 12,6 MΩ sa EE pohybovala v rozmedzí $3,3-4,4$ g/kWh (resp. $0,22-0,3$ kWh/g v prípade EC) pre SIE $690-1260$ J/l. EC 4,4 g/kWh bola dosiahnutá pre SIE rovné 1215 J/l.

So zapojeným väčším 18,4 MΩ odporom bola zmena menej výraznejšia, keďže EE sa pohybovalo v rozmedzí $3,2-4,7$ g/kWh (resp. $0,31-0,21$ kWh/g) pre SIE v rozmedzí $630-1200$ J/l. Najlepší výsledok zo všetkých experimentov 4,7 g/kWh bol dosiahnutý pre SIE rovné 950 J/l.

S pridaním externého kondenzátora do suchej plynnej zmesi sa výsledky EE resp. EC veľmi nelíšia od experimentov bez externého kondenzátora. EE sa pohybovalo v rozmedzí $3,6-4,4$ g/kWh (resp. $0,22-0,27$ kWh/g v prípade EC) pre SIE v rozmedzí $2300-3600$ J/l. Najlepší výsledok 4,4 g/kWh bol dosiahnutý pre SIE 2300 J/l.

Na obrázku 18 môžeme vidieť namerané spektrum pri experimente s vlhkou plynnou zmesou. Spektrum bolo zmerané pri aplikovanom napätí 15,5 kV a SIE 1215 J/l. Podobne ako na obrázku 3 tu môžeme vidieť pásy CO_2 v oblasti $2400-2200$ cm^{-1} a pásy CO v oblasti $2200-2000$ cm^{-1}. Podobne aj tu, ale oveľa výraznejšie môžeme vidieť aj pásy pre vodnú paru H_2O v oblasti $4000-3400$ a $2000-1200$ cm^{-1}. Zaujímavým bol pás okolo oblasti 3000 cm^{-1}, ten mal rovnaký tvar a pozíciu ako softvérom modelovaný pás pre stopy metánu CH_4. Vďaka pridaniu vlhkosti do plynnej zmesi sme pridali aj nový prvok, vodík, ktorý mohol reagovať s ostatnými prvkami a vytvárať tak nové produkty oproti suchej plynnej zmesi. Vznik stopového metánu teda nie je principiálne vylúčený. Základnou analýzou získaných spektier usudzujeme, že v spektrách sa pravdepodobne nachádzajú absorpčné pásy funkčných skupín, ako -CH_2, -NH_2, -COO, ktoré pochádzajú z produktov sledovanej reakcie, a ktoré sa usádzali na stenách reaktora a spôsobovali jeho zanesenie. Keďže sme účinnosť konverzie vyhodnocovali na základe vyprodukovaného CO, sú v tomto prípade výsledky účinnosti konverzie CO_2 pravdepodobne podhodnotené, keďže pravdepodobne vznikali aj iné produkty obsahujúce uhlík C okrem CO (narozdiel od experimentu v suchej plynnej zmesi), ktoré však nevieme kvantifikovať.

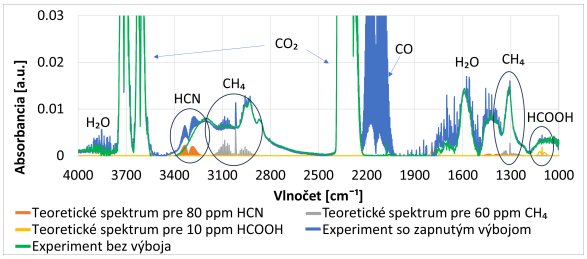


Obrázok 18: Spektrum experimentu s vlhkou plynnou zmesou pre SIE 1215 J/l doplnené o teoretické spektrum metánu CH_4.

Nečakané výsledky sme dostali aj v jednom špecifickom prípade. Ako sme spomínali vyššie, v sekcii vizuálneho pozorovania reaktora, po experimente s vlhkou plynnou zmesou nám ostali zanesené steny reaktora (viď. obrázok 4) v dôsledku tvorby ďalších (neznámych) produktov sledovaného procesu. Steny reaktora ani elektródy sme priebežne nečistili, našim zámerom bolo naakumulovať čo najviac tohto "znečistenia".

V tomto reaktore sme následne uskutočnili experiment so suchou zmesou a pridaným externým kondenzátorom. Po spustení výboja sa v nameraných spektrách okrem známych absorpčných pásov CO a CO_2 ukázali aj ďalšie pásy prislúchajúce ďalším produktom sledovanej konverzie CO_2. V tomto experimente sme okrem plynných produktov (ktorým sa budeme venovať ďalej) pravdepodobne vytvorili aj tuhé produkty, ktoré sa usádzali na stenách reaktora, ale aj okienkach plynnej kyvety vo FTIR spektrometri.

Je to možné vidieť na obrázku 19, kedy po vypnutí výboja sme stále zaznamenali pásy rôzne od CO_2, zatiaľ čo niektoré zmizli s vypnutím výboja. Zmiznuté pásy teda musia prislúchať plynom, zatiaľ čo tie, ktoré ostali musia prislúchať usadeninám na okienkach plynnej kyvety FTIR spektrometra.

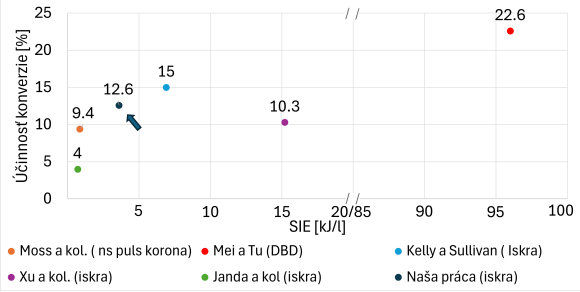


Obrázok 19: Spektrum experimentu so zanesenou stenou reaktora v suchej plynnej zmesi s pridaným externým kondenzátorom doplnené o teoretické spektrum metánu CH_4, kyanovodíka HCN a kyseliny mravčej HCOOH.

Znečistenie pravdepodobne obsahovalo produkty obsahujúce vodík, ktorý sa pod vplyvom intenzívneho výboja (vďaka externému kondenzátoru) mohol uvoľňovať zo stien reaktora, alebo rovno reagovali tieto produkty na stenách s produktami tvorenými priamo výbojom. Spektrum bolo namerané pri aplikovanom napätí 15,2 kV so SIE rovné 3100 J/l. Podobne ako na obrázku 18 môžeme vidieť pásy pre CO_2, CO, H_2O a CH_4. Môžeme si však všimnúť aj nové pásy, ktoré sa zhodujú tvarom a polohou s pásmi pre kyanovodík HCN a kyselinu mravčiu HCOOH. Tie sme podobne ako v prípade CH_4 vymodelovali pomocou softvéru pre nami pozorovanú optickú dráhu 10 cm.

V porovnaní s výsledkami iných autorov, ktorí

používali iskrový výboj, sme získali druhú najvyššiu účinnosť konverzie CO_2. Vyššiu účinnosť konverzie 15 % dosiahli *S. Kelly a J. A. Sullivan* [Kelly and Sullivan, 2019] ,no pri výrazne vyššej SIE (6900 J/l). Výrazne vyššiu SIE použili aj *Y. Xu a kol.* [Xu et al., 2023] (15200 J/l) ,no oproti nami získanou účinnosťou konverzie 12,6 %, získali účinnosť len 10,3 %. V našej práci sme získali vyššiu mieru konverzie ako vo svojej staršej práci *M. Janda a kol.* [Janda et al., 2008] vo výške (približne 4 %) pri použití najenšej SIE iba 700 J/l. Nami získaná najvyššia účinnosť konverzie bola vyššia aj oproti výsledkom s pulzným korónovým výbojom, ktorý použili *M. S. Moss a kol.* [Moss et al., 2017]. Tí získali najvyššiu účinnosť približne 9,4 %, pri použití oveľa nižšej SIE iba 850 J/l. Najlepšie výsledky zo spomínaných autorov získali *D. Mei a X. Tu* [Mei and Tu, 2017] vo svojom experimente s lôžkovým DBD výbojom s použitím $BaTiO_3$ katalyzátora. Tí dosiahli najvyššiu účinnosť konverzie CO_2 22,6 %, avšak pri použití SIE vo výške až 96000 J/l.



Obrázok 19: Porovnanie nami získanej maximálnej účinnosti konverzie CO_2 ako funkcie SIE s výsledkami iných autorov.

4 Záver

V tejto práci sme skúmali možnosť konverzie oxidu uhličitého CO_2 pomocou nízkoteplotnej plazmy generovanej prechodovým iskrovým výbojom. Realizovali sme tri typy experimentov, a to v suchej zmesi dusíka N_2 s 2,5 % koncentráciou CO_2, vo vlhkej plynnej zmesi N_2 s CO_2 s rovnakou koncentráciou pri relatívnej vlhkosti 50 % a napokon opäť v suchej plynnej zmesi N_2 s 2,5 % obsahom CO_2 s pridaným externým kondenzátorom. Všetky experimenty boli realizované v rovnakom reaktore, ktorý sa skladal z plastovej uzatvárateľnej nádobky. Geometria systému bola typu ihla - rovina. Ihlová (vysokonapäťová) elektróda, na ktorú bolo privedené napätie zo zdroja vysokého napätia, bola vyhotovená z komerčne dostupnej oceľovej dutej ihly pôvodne určenej na nafukovanie lôpt. Druhú elektródu tvoril oceľový pliešok, ktorý bol uzemnený. V experimentoch bez pridaného externého kondenzátora sme testovali aj dve rôzne veľkosti predradeného rezistora v obvode. Plyn bol po prechode reaktorom analyzovaný infračervenou absorpčnou spektroskopiou FTIR, pričom hlavným produktom konverzie vo všetkých typoch experimentov bol oxid uhoľnatý CO. Tento plyn je síce pre človeka toxický, no používa sa ako vstupná surovina pre syntézu mnohých chemikálií, napríklad pri kombinácii s vodíkom H_2 z neho možno vytvoriť tzv. syntézny plyn.

Vo všetkých experimentoch boli vyhodnotené aj elektrické charakteristiky reaktora, teda časový priebeh napätia a prúdu, výkon výboja, kapacita obvodu, prúdové amplitúdy a frekvencie iskrenia. Najvyšší dosiahnutý výkon výboja 11,9 W (resp. SIE 3570 J/l) bol získaný v experimente s pridaným externým kondenzátorom. Výkon výboja bol pri experimentoch so suchou a vlhkou plynnou zmesou bez externého kondenzátora podobný a dosahoval maximum vo výške 4,6 W (resp. SIE vo výške 1390 J/l).

Výboje v jednotlivých experimentoch sa od seba značne líšili aj vizuálne. Najintenzívnejší výboj, čo sa týka emisie svetla, s výrazným filamentárnym charakterom bol v experimente s pridaným externým kondenzátorom. Menej intenzívny výboj s menej výrazným filamentárnym charakterom bol pozorovaný pri experimente v suchej plynnej zmesi. Výboj generovaný vo vlhkej plynnej zmesi bol síce intenzívnejší ako v suchej zmesi, no mal skôr charakter jedného širokého kanála bez zdanlivo výrazných viacerých filamentov.

Z našich meraní vyplýva, že pridanie externého kondenzátora do obvodu výrazne zvyšuje výkon výboja (aj objemovú hustotu energie), čo sa následne prejavilo vo zvýšení účinnosti konverzie CO_2. V prípadoch suchej a vlhkej zmesi boli dosiahnuté výsledky podobné, no mierne horšie pre suchú zmes. Najvyššia účinnosť konverzie (η) bola 12,6 % pre objemovú hustotu energie SIE 3570 J/l dosiahnutá v experimente so suchou plynnou zmesou a s pridaným externým kondenzátorom. Tento experiment zároveň dosiahol energetickú účinnosť (EC) 4,4 g/kWh pre SIE 2300 J/l. Druhú najvyššiu η (5,1 %) dosiahol experiment s vlhkou plynnou zmesou, avšak pre výrazne nižšie SIE 1200 J/l. V tomto experimente sme zároveň dosiahli najlepšiu EC zo všetkých experi-

mentov konkrétne 4,7 g/kWh pre SIE 950 J/l. Experiment so suchou zmesou (bez externého kondenzátora) dosiahol najvyššiu η vo výške 4,9 % pre SIE 1360 J/l a najlepšiu EC vo výške 4 g/kWh pre SIE 900 J/l.

V experimente s vlhkou plynnou zmesou sme okrem oxidu uhoľnatého CO ako hlavného produktu reakcie pozorovali aj stopy metánu CH_4. Okrem toho sme pozorovali v spektrách aj ďalšie nateraz neznáme pásy pravdepodobne ako dôsledok formovania ďalších produktov, ktoré sa usádzali (kondenzovali) na stenách reaktora aj okienkach plynnej kyvety. Tie sme totiž mohli pozorovať aj po vypnutí výboja. V špeciálnom prípade, kedy sme v zanesenom reaktore použitom v predchádzajúcom experimente s vlhkou plynnou zmesou realizovali experiment s intenzívnym výbojom vďaka pridaniu externého kondenzátora, sme pozorovali opäť aj iné produkty ako CO. V spektrách sme medzi plynnými produktami pozorovali stopy kyanovodíka HCN, metánu CH_4 aj kyseliny mravčej HCOOH. To svedčí o komplexnej plazmochémii, ktorá sa v reaktore uplatňuje pri zvýšenej vlhkosti.

Zlepšenie výsledkov by bolo možné dosiahnuť viacerými spôsobmi: Nájdením optimálnej koncentrácie CO_2 v plynnej zmesi, prípadne použitím iného nosného plynu ako N_2. Iný nosný plynu, čo by zároveň mohol viesť k tvorbe iných produktov konverzie. Ďalej optimalizovanie RLC charakteristík obvodu by mohlo zmeniť charakteristiky generovaného výboja, čo by ďalej mohlo viesť k maximalizácii výkonu výboja aj k rastu η. Pravdepodobne aj optimalizácia samotného reaktora, teda jeho materiálu, vzdialenosti a geometrie elektród, ako aj samotného tvaru reaktora by potenciálne mohli viesť k vyššej účinnosti konverzie. Výslednú η by mohlo zvýšiť aj chladenie reaktora, čo by podľa dostupnej literatúry umožnilo znížiť mieru rekombinácie CO späť na CO_2.

Poďakovanie

Predovšetkým by som sa veľmi rád poďakoval môjmu školiteľovi Mgr. Richardovi Cimermanovi, PhD. za jeho pomoc, cenné a usmerňujúce rady a optimizmus pri experimentálnych meraniach. Veľká vďaka patrí aj doc. RNDr. Máriovi Jandovi, PhD. za pomoc pri experimentálnej časti či vysvetlení vzniknutých nejasností. Táto práca bola podporená grantom Agentúry na podporu výskumu a vývoja APVV-20-0566. Financované EÚ NextGenerationEU prostredníctvom Plánu obnovy a odolnosti SR v rámci projektov č. 09I03-03-V04-00092 a 09I03-03-V03-00033.

Literatúra

[Dvonč and Janda, 2015] Dvonč, L. and Janda, M. (2015). Study of transient spark discharge properties using kinetic modeling. *IEEE Transactions on Plasma Science*.

[Janda et al., 2011] Janda, M., Martišovitč, V., and Machala, Z. (2011). Transient spark: a dc-driven repetitively pulsed discharge and its control by electric circuit parameters. *Plasma Sources Science and Technology*.

[Janda et al., 2008] Janda, M., Morvova, M., Machala, Z., and Morva, I. (2008). Study of plasma induced chemistry by dc discharges in $co_2/n_2/h_2o$ mixtures above a water surface. *Origins of Life and Evolution of Biospheres*.

[Kelly and Sullivan, 2019] Kelly, S. and Sullivan, J. A. (2019). Co_2 decomposition in co_2 and co_2/h_2 spark-like plasma discharges at atmospheric pressure. *ChemSusChem*.

[Mei and Tu, 2017] Mei, D. and Tu, X. (2017). Atmospheric pressure non-thermal plasma activation of co_2 in a packed-bed dielectric barrier discharge reactor. *ChemPhysChem*.

[Moss et al., 2017] Moss, M. S., Yanallah, K., Allen, R. W. K., and Pontiga, F. (2017). An investigation of co_2 splitting using nanosecond pulsed corona discharge: Effect of argon addition on co_2 conversion and energy efficiency. *Plasma Sources Science and Technology*.

[Xu et al., 2023] Xu, Y., Gao, Y., and Xi, D. (2023). Spark discharge plasma-enabled co_2 conversion sustained by a compact, energy-efficient, and low-cost power supply. *Industrial & Engineering Chemistry Research*.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 164–170
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Alexandra Jančišinová

Teoretické štúdium ionizačných a ión-molekulových procesov pesticídu chlórpyrifos

Alexandra Jančišinová*

Školiteľ: Peter Papp†

Katedra experimentálnej fyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt: Porozumenie kinetiky ionizačných procesov pesticídu chlórpyrifos (CHL) je nevyhnutné na charakterizovanie možností jeho detekcie a degradácie pomocou experimentálnych techník. Vzhľadom na rôznorodý charakter ionizačných mechanizmov je nutné stanoviť ionizačné energie, elektrónové afinity, ako aj protónové afinity meraných látok. Táto práca sa zameriava na poskytnutie teoretických dát pre iónovú pohyblivostnú spektrometriu (IMS) založenú na ionizácii prenosom náboja, a to hlavne protónu, z reakčných iónov na detegované látky pomocou IMS. Protónové afinity mnohých látok nie sú známe, navyše selektivita naviazania protónu na rôzne prvky meranej vzorky vedie k rôznym protónovým afinitám. Výpočtami pomocou *density functional theory* (DFT) metód sme preskúmali štruktúru rôznych neutrálnych konformérov CHL (využitím funkcionálu M06-2X) a stanovili ich protónové afinity (využitím funkcionálu B3LYP). Na preskúmanie štruktúrnych faktorov ovplyvňujúcich veľkosť protónovej afinity sme analyzovali povrch potenciálnej energie molekuly CHL s využitím oboch funkcionálov. Porovnanie získaných protónových afinít CHL s protónovými afinitami známych reakčných iónov v IMS (rôznorodé vodné klastre) umožní stanoviť kinetiku jednotlivých reakcií, či je ionizačný kanál aktívny alebo zakázaný.

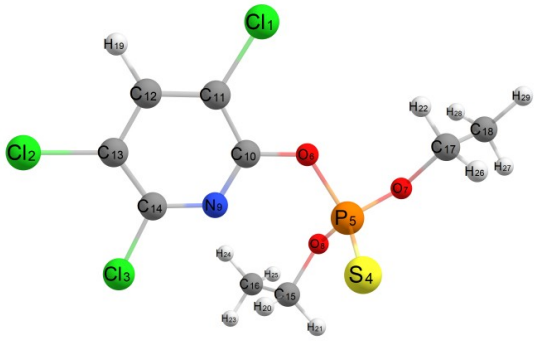
Kľúčové slová: chlórpyrifos, DFT, IMS, ionizačná energia, elektrónová afinita, protónová afinita

Úvod

Chlórpyrifos je insekticíd, ktorého rozšírené využívanie viedlo ku kontaminácii pôdy, povrchových vôd a jeho výskytu v potravinách (napr. na ovocí a zelenine) [Tse et al., 2004]. Podozrenia z možnej genotoxicity, vývojovej neurotoxicity a vplyvu CHL na hormonálnu reguláciu viedli vo viacerých krajinách k výraznému obmedzeniu alebo zákazu jeho používania [Flaskos, 2012, Hazarika et al., 2020].

*jancisinova2@uniba.sk
†peter.papp@fmph.uniba.sk

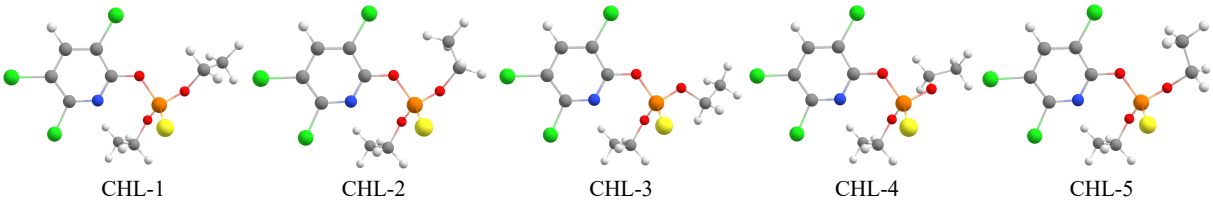
Z chemického hľadiska CHL patrí do skupiny organofosfátov, ktoré sa vyznačujú fosforovým atómom P viazaným na kyslík O, síru S alebo uhlík C. CHL obsahuje $P-O$ skupinu naviazanú na atóm síry dvojitou väzbou $P=S$ a dve etoxyskupiny $-OCH_2CH_3$. Jeho štruktúra je charakteristická pyridínovým jadrom, na ktoré sú naviazané atómy chlóru Cl (obr. 1).



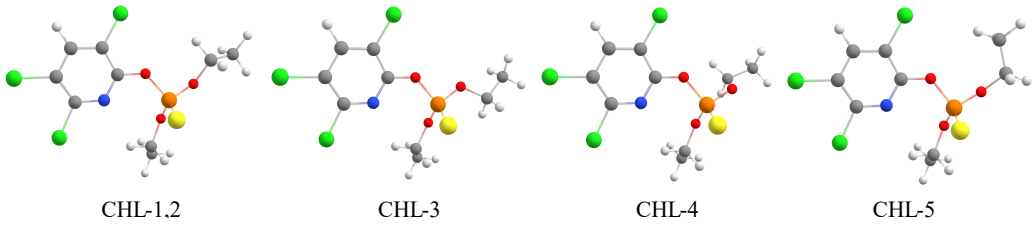
Obr. 1: Molekula CHL.

Vychádzajúc zo škodlivosti CHL sa záujmom mnohých štúdií tohto pesticídu stáva charakterizovanie možností jeho detekcie a degradácie [Zhou et al., 2010, Quintano and Rocha, 2021, Chen et al., 2012]. Skúmanie CHL si vyžaduje poznanie jeho štruktúr a chemických vlastností. V tejto súvislosti sa metódy výpočtovej chémie ukazujú ako vhodný nástroj na získanie teoretických dát, vďaka ktorým dokážeme určiť rôzne stabilné konformery CHL a opísať ich reaktivitu na základe ionizačnej energie (IE), elektrónovej afinity (EA) a protónovej afinity (PA). Tieto vlastnosti umožňujú porozumieť stabilite molekuly, jej tendencii odovzdať alebo prijať elektrón a schopnosti naviazať protón.

Na teoretické štúdium molekuly CHL sme využili výpočty založené na DFT, ktorá patrí medzi kvantovo-chemické metódy umožňujúce modelovať elektrónovú štruktúru molekúl na základe hustoty elektrónov. Hoci ide o aproximatívne riešenie Schrödingerovej rovnice, DFT predstavuje priaznivý kompromis medzi presnosťou a výpočtovou nároč-



Obr. 2: Optimalizované geometrie konformérov funkcionálom M06-2X.



Obr. 3: Optimalizované geometrie konformérov funkcionálom B3LYP.

nosťou. Výpočty boli realizované v programovom balíku Gaussian 16 [Frisch et al., 2016], pričom výber konkrétnych funkcionálov a bázy bol prispôsobený veľkosti skúmanej molekuly a analyzovaným vlastnostiam, ako sú geometrická štruktúra a rozloženie náboja v molekule.

Potreba konformačnej analýzy vychádza z malých energetických rozdielov medzi stabilnými konformémi CHL. Vzhľadom na spoľahlivosť pri určovaní dĺžky väzieb, uhlov a celkovej molekulovej štruktúry sme na skúmanie geometrií a povrchu potenciálnej energie (PES) CHL zvolili funkcionál M06-2X s bázou 6-311G(d) [Zhao and Truhlar, 2008, Walker et al., 2013].

V závislosti od konforméru sa líšia aj hodnoty IE, EA a PA. Navyše selektivita naviazania protónu na odlišné atómy molekuly CHL vedie k rôznym hodnotám PA. Na ich určenie je potrebné poznať rozloženie náboja v molekule, ktoré dostatočne presne stanovíme aj pomocou funkcionálu B3LYP s bázou 6-311++G(2d,2p) [Mathew et al., 2024].

Poznanie protonačných miest slúži na predikciu možnosti detekcie rozkladu pesticídu CHL pomocou experimentálnych metód na báze plazmových zdrojov. Táto práca sa podrobnejšie zameriava na poskytnutie teoretických podkladov pre IMS, kde proces ionizácie prebieha prevažne prenosom protónu z reakčných iónov, akými sú protónované vodné klastre $H^+(H_2O)_n$, na detegované látky. Porovnaním získaných PA molekuly CHL s PA rôznych vodných klastrov dokážeme stanoviť kinetiku reakcií molekuly CHL v IMS experimentoch.

1 Konformačná analýza CHL

Využitím DFT metód sme vykonali konformačnú analýzu molekuly CHL s cieľom identifikovať stabilné štruktúry a stanoviť ich energie. Voľba funkcionálu M06-2X je výhodnou z hľadiska vysokej presnosti pri skúmaní konformérov a ich iónových štruktúr [Zhao and Truhlar, 2008]. Poznanie optimalizovaných geometrií konformérov určených funkcionálom B3LYP sa využije pri opise reaktivity CHL. Výpočtom harmonických frekvencií pre jednotlivé študované štruktúry sme potvrdili ich charakter stacionárnych bodov, čím sme overili, že ide o skutočné minimá PES, kde všetky frekvencie normálnych módov nadobúdajú kladné hodnoty.

1.1 Optimalizované konformény

Populačná analýza založená na Boltzmannovom rozdelení z Gibbsovych voľných energií identifikuje štyri konforméry CHL-1 až CHL-4, ktoré spolu tvoria približne 99% populácie CHL v plynnej fáze [Taillebois et al., 2015].

Optimalizované geometrie pre konforméry CHL-1 až CHL-4 (obr. 2) sme získali využitím funkcionálu M06-2X v kombinácii s bázou 6-311G(d) na základe publikovaných geometrií [Taillebois et al., 2015]. Skúmaním PES konforméru CHL-2 sme stanovili ďalší energeticky blízky konformér CHL-5, ktorý bol nájdený ako najstabilnejšia geometria s hodnotou entalpie $H = -2749,8745439$ Hartree.

Výsledkom optimalizácie využívajúcej funkcionál

B3LYP v kombinácii s bázou 6-311++G(2d,2p) sme dospeli ku odlišným geometriám (obr. 3) v porovnaní s výsledkami funkcionálu M06-2X. Funkcionál B3LYP zoptimalizoval geometrie CHL-1 a CHL-2 na ten istý konformér, ktorý nadobúda najnižšiu hodnotu entalpie $H = -2750,3459975$ Hartree, a preto je najstabilnejším nájdeným konformérom tohto funkcionálu.

Tabuľka 1: Relatívne entalpie ΔH konformérov CHL v eV.

Konformér	M06-2X 6-311G(d)	B3LYP 6-311++G(2d,2p)
CHL-1	0,022	0
CHL-2	0,041	0
CHL-3	0,051	0,027
CHL-4	0,063	0,051
CHL-5	0	0,042

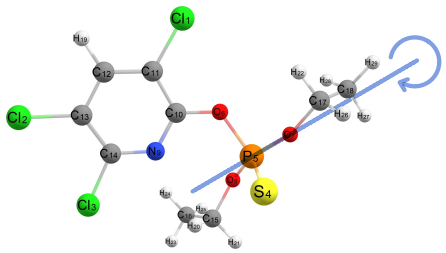
Na základe relatívnych entalpií konformérov uvedených v tab. 1 si môžeme všimnúť, že hodnoty entalpie skúmaných konformérov sa nachádzajú v rozsahu menšom ako $0,065$ eV. Tento poznatok hovorí, že konforméry sú energeticky porovnateľné a ich relatívna stabilita sa výrazne nelíši.

Tab. 2 prezentuje dihedrálne uhly optimalizovaných konformérov pomocou funkcionálov M06-2X a B3LYP. Dihedrálne uhly D(4-5-7-17) a D(4-5-8-18) geometrií optimalizovaných metódou M06-2X sa zhodujú s literatúrou [Taillebois et al., 2015]. Zároveň dihedrálny uhol D(4-5-7-17) spolu s uhlom D(5-7-17-18) poukazujú na rozdiely geometrického usporiadania skúmaných konformérov. Dihedrálny uhol D(5-8-15-16) korešponduje natočeniu etoxyskupiny voči pyridínovému jadru a poukazuje na podstatný rozdiel medzi funkcionálmi M06-2X a B3LYP. Funkcionál M06-2X preferuje natočenie etoxyskupiny voči pyridínovému jadru, zatiaľ čo funkcionál B3LYP ich predpovedá natočené v smere od pyridínového jadra. Optimalizáciou geometrií funkcionálom B3LYP so zahrnutím disperznej korekcie vo vstupnom súbore v podobe kľúčového slova *EmpiricalDispersion=GD3BJ* sme zistili, že tento systematický rozdiel je spôsobený zahrnutím empirickej disperznej korekcie vo funkcionáli M06-2X, s ktorou funkcionál B3LYP bez jej explicitného zadania nepočíta [Foresman and Frisch, 2015]. Zahrnutie disperznej interakcie v M06-2X teda vedie k identifikovaniu silnejších vnútromolekulových interakcií, a to sa prejavuje v odlišnej stabilizácii orientácie etoxyskupiny v porovnaní s B3LYP.

Nezahrnutie disperznej korekcie pri optimalizácii geometrií funkcionálom B3LYP sa prejaví v odchýlke entalpie na úrovni $\sim 0,02$ eV, čo je však z hľadiska merania v IMS experimente zanedbateľná hodnota.

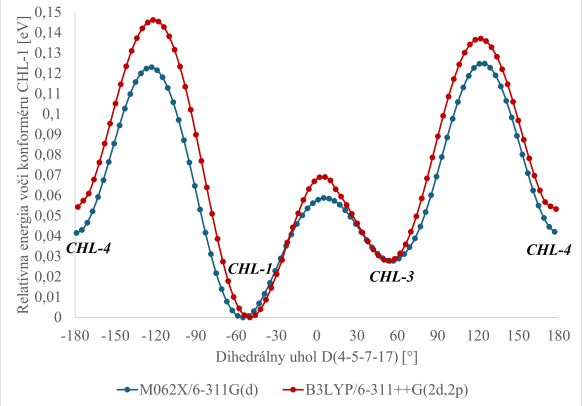
1.2 Sken dihedrálneho uhla a energetické bariéry

Sken dihedrálneho uhla D(4-5-7-17), naznačený na obr. 4, bol vykonaný s účelom analyzovať stabilitu konformérov a energetické bariéry medzi nimi.



Obr. 4: Smer skenu dihedrálneho uhla D(4-5-7-17).

Krivky potenciálnej energie na obr. 5 zobrazujú relatívnu energiu voči konformeru CHL-1 ako funkciu dihedrálneho uhla D(4-5-7-17). Kľúčové konforméry identifikované v skene zahŕňajú CHL-1, CHL-3 a CHL-4. Pozorované energetické bariéry predstavujú obmedzenia rotácie.



Obr. 5: Porovnanie skenu dihedrálneho uhla D(4-5-7-17) metódami M06-2X a B3LYP.

Z kriviek potenciálnej energie vidíme, že funkcionál B3LYP pravdepodobne nadhodnocuje výšku

Tabuľka 2: Dihedrálne uhly (°) konformérov vypočítané metódami M06-2X/6-311G(d) [1] a B3LYP/6-311++G(2d,2p) [2].

Konformér	D(4-5-7-17)		D(4-5-8-15)		D(5-7-17-18)		D(5-8-15-16)	
	1	2	1	2	1	2	1	2
CHL-1	-54,9	-49,9	16,3	15,1	-178,2	171,6	149,3	-169,9
CHL-2	-57,2	-49,9	15,8	15,1	-104,0	171,6	149,0	-169,9
CHL-3	55,3	53,6	19,7	23,3	174,2	-173,4	149,5	-166,8
CHL-4	-179,6	178,5	15,7	15,1	-175,1	-177,8	151,5	-173,5
CHL-5	-36,4	-36,5	15,6	10,7	-68,9	-102,2	149,5	-175,7

potenciálových bariér medzi jednotlivými konformérmi. Dôvod môžeme opäť hľadať v chýbajúcej disperznej korekcii vo funkcionáli B3LYP a taktiež v odlišnom prístupe funkcionálov M06-2X a B3LYP k optimalizácii geometrií.

Energetické bariéry pre konformačné prechody nie sú symetrické. Napr. pre funkcionál M06-2X si prechod z konforméru CHL-3 do CHL-1 vyžaduje $\sim 0,03\,\mathrm{eV}$, zatiaľ čo na opačný prechod z CHL-1 do CHL-3 potrebujeme dvojnásobnú energiu $\sim 0,06\,\mathrm{eV}$. Tieto hodnoty odrážajú asymetrický charakter krivky potenciálnej energie a vypovedajú o tom, že určité konformačné prechody sú výhodnejšie v jednom zo smerov zmeny dihedrálneho uhla, čo môže ovplyvňovať relatívnu populáciu konformérov.

2 Ionizačné procesy molekuly CHL

Opis ionizačných procesov molekuly spočíva vo vyhodnotení ionizačnej energie (IE), elektrónovej afinity (EA) a protónovej afinity (PA). Porozumením týchto vlastností vieme opísať stabilitu molekuly, konkrétne jej schopnosť odovzdať alebo prijať elektrón a tendenciu viazať protón.

Výpočet IE a EA sme vykonali na základe entalpií určenými oboma funkcionálmi M06-2X a B3LYP. Najpodstatnejšou časťou tejto práce, najmä z hľadiska poskytnutia teoretických dát charakterizujúcich reakčné procesy CHL v IMS experimentoch, je stanovenie PA. K ich spoľahlivému určeniu je nevyhnutným predpokladom poznanie správneho rozloženia náboja v jednotlivých konformérach CHL.

2.1 Ionizácia molekuly CHL

IE je energia potrebná na odstránenie elektrónu z neutrálnej molekuly v plynnej fáze:

$$X + e^- \rightarrow X^+ + 2e^- \qquad (1)$$

Vyššia IE indikuje väčšiu stabilitu voči ionizácii. IE je stanovená na základe entalpií ionizovanej $H(X^+)$ a neutrálnej molekuly $H(X)$:

$$IE = H\left(X^+\right) - H(X) \qquad (2)$$

Tabuľka 3: Ionizačné energie CHL v eV.

Konformér	M06-2X 6-311G(d)	B3LYP 6-311++G(2d,2p)
CHL-1	8,45	8,18
CHL-2	8,43	8,18
CHL-3	8,47	8,18
CHL-4	8,41	8,17
CHL-5	8,77	8,14

Výsledky (tab. 3) ukazujú, že M06-2X predpovedá vyššie IE v porovnaní s B3LYP. Najvyššia IE je pozorovaná pre CHL-5 v M06-2X výpočtoch a indikuje, že tento konformér je najstabilnejší voči ionizácii. Naopak, B3LYP určuje najnižšiu IE pre CHL-5 oproti ostatným konformérom, a tým preukazuje nesúlad medzi zvolenými funkcionálmi.

2.2 Záchyt elektrónu molekulou CHL

EA súvisí so zmenou energie, ktorá nastáva, keď neutrálna molekula v plynnej fáze prijíme elektrón a vytvorí anión:

$$X + e^- \rightarrow X^- \qquad (3)$$

Pozitívna hodnota EA znamená, že energia je uvoľnená. Záporná hodnota EA zodpovedá potrebe dodať reakcii energiu, čo indikuje, že takýto ión je nestabilný a má tendenciu sa elektrónu skôr zbaviť ako zotrvať v energeticky vyššom stave oproti neutrálnemu. EA je stanovená na základe entalpií aniónu $H(X^-)$ a neutrálnej molekuly $H(X)$:

$$EA = H(X) - H\left(X^-\right) \qquad (4)$$

Tabuľka 4: Elektrónové afinity CHL v eV.

Konformér	M06-2X 6-311G(d)	B3LYP 6-311++G(2d,2p)
CHL-1	0,79	0,80
CHL-2	0,82	0,80
CHL-3	0,76	0,78
CHL-4	0,80	0,80
CHL-5	0,78	0,81

Pre EA (tab. 4) oba funkcionály určujú približne podobný trend, s CHL-2 a CHL-5 preukazujúcimi najvyššie hodnoty EA, naznačujúc ich najväčšiu tendenciu prijať elektrón.

B3LYP predikuje o niečo vyššie EA ako M06-2X, rozdiely sú však v tomto prípade v absolútnych hodnotách zanedbateľné.

2.3 Protonácia molekuly CHL

PA je záporná zmena entalpie nastávajúca pri naviazaní protónu na neutrálnu molekulu v plynnej fáze:

$$X + H^+ \rightarrow XH^+ \tag{5}$$

Vyššia PA indikuje silnejšiu tendenciu neutrálnej molekuly viazať protón. PA je stanovená na základe entalpií neutrálnej molekuly $H(X)$, protónu $H(H^+)$ a protónovanej molekuly $H(XH^+)$ [Hunter and Lias, 1998]:

$$PA = H(X) + H\left(H^+\right) - H\left(XH^+\right) \tag{6}$$

Optimalizácia geometrií konformérov CHL-1 až CHL-5 funkcionálom B3LYP určila rozloženie náboja, ktoré umožnilo identifikovať potenciálne protonačné miesta v molekule. Výpočet PA spočíval vo vyhodnotení zmeny entalpie pri naviazaní protónu H^+ k rôznym negatívne nabitým prvkom v každom konforméri. Výpočet PA vychádzal výlučne z výpočtov funkcionálom B3LYP.

Najvyššie PA boli pozorované pri procese protonácie prvkov dusíka *N*9 a síry *S*4. Ich hodnoty pre jednotlivé konformery sú uvedené v tab. 5.

Z výsledkov zisťujeme, že protonácia prvku *N*9 je energeticky najviac výhodná pre všetky konformery, čo naznačuje, že dusíkové miesto je najsilnejším protónovým akceptorom v CHL. Atóm síry *S*4 taktiež preukazuje vysoké hodnoty PA, hoci o málo nižšie ako dusík *N*9.

Tabuľka 5: Vybrané protónové afinity CHL v eV určené metódou B3LYP/6-311++G(2d,2p).

Konformér	N9	S4
CHL-1	9,46	9,27
CHL-3	9,49	9,18
CHL-4	9,49	9,27
CHL-5	9,48	9,31

Pre všetky ďalšie protonačné miesta dosahujú PA hodnoty nižšie ako $8,5\,\text{eV}$, a teda majú podstatne redukovanú tendenciu naviazať protón. V niektorých prípadoch naviazanie protónu na tieto miesta ani neprebehne z dôvodu vysokej PA, a teda aj preferencie, protonačných miest dusíka *N*9 a síry *S*4.

Naviazanie protónu H^+ na prvok *O*6 vo všetkých skúmaných konformeroch viedlo k molekulovej disociácii, pri ktorej nastalo uvoľnenie energie $\sim 7,7\,\text{eV}$. To naznačuje, že protonácia prvku *O*6 robí štruktúru CHL nestabilnou, pravdepodobne kvôli nadmernému napätiu alebo nevýhodným elektrónovým interakciám. V tomto prípade vieme stanoviť iba vetrikálnu PA s hodnotou $7,23\,\text{eV} - 7,32\,\text{eV}$ v závislosti od skúmaného konformeru.

Môžeme očakávať, že presnosť dosiahnutých hodnôt PA je porovnateľná s presnosťou iných štúdií organických molekúl podobnej veľkosti a charakteru, ktoré využívajú rovnaký funkcionál a podobnú bázu. Napríklad pri výpočtoch molekuly 2,2,6,6-tetrametylpiperidín-1-oxyl a jej derivátov metódou B3LYP/6-311++G(d,p) bola odchýlka medzi teoreticky stanovenými a experimentálnymi hodnotami PA len 1,35% [Shiroudi et al., 2024]. Na základe toho možno predpokladať obdobnú spoľahlivosť aj pri stanovení PA pre molekulu CHL.

PA určuje mieru pevnosti väzby medzi molekulou a protónom. Za predpokladu, že prenos protónu H^+ z reakčného iónu RH^+ na molekulu X je opísaný reakciou:

$$RH^+ + X \rightarrow R + XH^+ \tag{7}$$

pre protóny silnejšie viazané ku skúmanej molekule platí:

$$PA(R) < PA(X) \tag{8}$$

Protónované vodné klastre $H^+(H_2O)_n$ sú bežne používané ako nosiče protónu v IMS experimentoch vďaka ich relatívne vysokým hodnotám PA. Na poskytnutie teoretických dát pre IMS je preto PA pesticídu CHL porovnávaná s PA vodných klastrov na zá-

klade vzťahu (8). Hodnoty PA vodných klastrov uvedené v tab. 6 vykazujú rastúci trend so zvyšujúcou sa veľkosťou klastrov.

Tabuľka 6: Protónové afinity v eV vybraných vodných klastrov určené metódou B3LYP/6-311++G(2d,2p).

Vodný klaster	PA
H_2O	7,11
$(H_2O)_2$	8,50
$(H_2O)_3$	9,05
$(H_2O)_4$	9,36

Na základe vzťahu (8) vieme, že prenos protónu v IMS nastáva, keď molekula s vyššou PA interaguje s protónovaným vodným klastrom s nižšou PA, čo vedie k ionizácii molekuly. Porovnanie PA indikuje, že CHL protónovaný na mieste atómu dusíka $N9$ $(9,46\,\mathrm{eV} - 9,49\,\mathrm{eV})$ má vyššiu PA ako všetky skúmané vodné klastre, ktorých hodnoty PA sú menšie ako $9,36\,\mathrm{eV}$. To naznačuje, že CHL by mal efektívne naviazať protón zo skúmaných reakčných iónov v IMS, čo vedie k tvorbe stabilných protónovaných produktov. PA na protonačnom mieste síry $S4$ je taktiež relatívne vysoká $(9,18\,\mathrm{eV} - 9,31\,\mathrm{eV})$, kvôli čomu može síra slúžiť ako alternatívne protonačné miesto, hoci menej preferované ako dusík $N9$. Naopak protonácia kyslíka $O6$ $(7,23\,\mathrm{eV} - 7,32\,\mathrm{eV})$ môže prebehnúť iba v reakcii s protónovaným vodným klastrom $H^+(H_2O)$ $(7,11\,\mathrm{eV})$, a preto teoreticky predpokladaná molekulová disociácia vedúca na stabilné produkty nastane s oveľa menšou pravdepodobnosťou ako naviazanie protónu na miesta $N9$ alebo $S4$.

Uvedené výsledky podporujú očakávanie, že ióny CHL sa budú formovať v IMS prostredí, špeciálne v prítomnosti protónovaných vodných klastrov.

3 Záver

Táto práca poskytuje teoretické dáta, určené na základe DFT metód, o PA pesticídu CHL, ktoré sú kľúčové pre stanovenie možnosti jeho detekcie a degradácie v IMS experimentoch. Výsledky ukazujú, že naviazanie protónu na rôzne atómy molekuly CHL vedie k odlišným hodnotám PA, čo naznačuje vysokú variabilitu v protonácii molekuly. Najpravdepodobnejším protonačným miestom molekuly CHL je dusík s hodnotou PA $9,46\,\mathrm{eV} - 9,49\,\mathrm{eV}$ závislou od geometrie molekuly. Nadobudnuté dáta môžu byť cenné pri vývoji techník detekcie a znižovaní toxicity skúmaného pesticídu.

Poďakovanie

Chceli by sme vyjadriť svoje poďakovanie školiteľovi doc. RNDr. Petrovi Pappovi, PhD. za cenné rady a pomoc pri analýze a interpretácii získaných dát.

Táto práca bola podporená Agentúrou na podporu vedy a výskumu, grantom č. APVV-23-0522, a Vedeckou grantovou agentúrou MŠVVaM SR a SAV (VEGA), číslo projektu 1/0553/22.

Literatúra

[Atkins and Friedman, 2011] Atkins, P. and Friedman, R. (2011). *Molecular Quantum Mechanics, Fifth ed.* Oxford University Press, New York, NY.

[Chen et al., 2012] Chen, S., Liu, C., Peng, C., Liu, H., Hu, M., and Zhong, G. (2012). Biodegradation of chlorpyrifos and its hydrolysis product 3,5,6-trichloro-2-pyridinol by a new fungal strain cladosporium cladosporioides hu-01. *PLOS One*, 7.

[Flaskos, 2012] Flaskos, J. (2012). The developmental neurotoxicity of organophosphorus insecticides: A direct role for the oxon metabolites. *Toxicology Letters*, 209:86–93.

[Foresman and Frisch, 2015] Foresman, J. B. and Frisch, A. (2015). *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, Third ed.* Gaussian, Wallingford, CT.

[Frisch et al., 2016] Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., Robb, M. A., Cheeseman, J. R., Scalmani, G., Barone, V., Petersson, G. A., Nakatsuji, H., Li, X., Caricato, M., Marenich, A. V., Bloino, J., Janesko, B. G., Gomperts, R., Mennucci, B., Hratchian, H. P., Ortiz, J. V., Izmaylov, A. F., Sonnenberg, J. L., Williams-Young, D., Ding, F., Lipparini, F., Egidi, F., Goings, J., Peng, B., Petrone, A., Henderson, T., Ranasinghe, D., Zakrzewski, V. G., Gao, J., Rega, N., Zheng, G., Liang, W., Hada, M., Ehara, M., Toyota, K., Fukuda, R., Hasegawa, J., Ishida, M., Nakajima, T., Honda, Y., Kitao, O., Nakai, H., Vreven, T., Throssell, K., Jr., J. A. M., Peralta, J. E., Ogliaro, F., Bearpark, M. J., Heyd, J. J., Brothers, E. N., Kudin, K. N., Staroverov, V. N., Keith, T., Kobayashi, R., Normand, J., Raghavachari, K., Rendell, A. P., Burant, J. C., Iyengar, S. S., Tomasi, J., Cossi, M., Millam, J. M., Klene, M., Adamo, C., Cammi, R., Ochterski, J. W., Martin, R. L., Morokuma, K., Farkas, O., Foresman, J. B., and Fox, D. J. (2016). *Gaussian 16*. Gaussian, Inc., Wallingford, CT.

[Hazarika et al., 2020] Hazarika, J., Ganguly, M., Borgohain, G., Baruah, I., Sarma, S., Bhuyan, P., and Mahanta, R. (2020). Endocrine disruption: molecular interactions of chlorpyrifos and its degradation products with estrogen receptor. *Structural Chemistry*, 31:2011–2021.

[Hunter and Lias, 1998] Hunter, E. P. L. and Lias, S. G. (1998). Evaluated gas phase basicities and proton affinities of molecules. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 27(3):413 – 656.

[Mathew et al., 2024] Mathew, M., Puchta, R., and Thomas, R. (2024). Proton affinity revisited: Benchmarking computational approaches for accurate predictions. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1233:114477.

[Quintano and Rocha, 2021] Quintano, M. and Rocha, W. (2021). Computational insights into the reactivity of chlorpyrifos and chlorpyrifos-methyl toward singlet oxygen. *Journal of Molecular Modeling*, 27:282.

[Shiroudi et al., 2024] Shiroudi, A., Śmiechowski, M., Czub, J., and Abdel-Rahman, M. A. (2024). Computational analysis of substituent effects on proton affinity and gas-phase basicity of TEMPO derivatives and their hydrogen bonding interactions with water molecules. *Scientific Reports*, 14(1):8434.

[Taillebois et al., 2015] Taillebois, E., Alamiddine, Z., Brazier, C., Graton, J., Laurent, A., Thany, S., and Le Questel, J. (2015). Molecular features and toxicological properties of four common pesticides, acetamiprid, deltamethrin, chlorpyriphos and fipronil. *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 23:1540–1550.

[Tse et al., 2004] Tse, H., Comba, M., and Alaee, M. (2004). Method for the determination of organophosphate insecticides in water, sediment and biota. *Chemosphere*, 54:41–47.

[Walker et al., 2013] Walker, M., Harvey, A., Sen, A., and Dessent, C. (2013). Performance of M06, M06-2X, and M06-HF density functionals for conformationally flexible anionic clusters: M06 functionals perform better than B3LYP for a model system with dispersion and ionic hydrogen-bonding interactions. *Journal of Physical Chemistry A*, 117:12590–12600.

[Zhao and Truhlar, 2008] Zhao, Y. and Truhlar, D. (2008). Density functionals with broad applicability in chemistry. *Accounts of Chemical Research*, 41:157–167.

[Zhou et al., 2010] Zhou, Q., Sun, X., Gao, R., Zhang, Q., and Wang, W. (2010). Mechanism study on oh-initiated atmospheric degradation of the organophosphorus pesticide chlorpyrifos. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 952:8–15.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 171
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Hanna Tatarevska, Pavel Veis

Nanoparticles enhancement LIBS (NELIBS) to correct absorption effects on plasma produced by laser pulses

Hanna Tatarevska[1]* Pavel Veis[1†]
Supervisor: Ivan Alexander Urbina Medina[1§]
[1] *Department of Experimental Physics, FMPI, CU, Mlynská dolina F2, 84248 Bratislava, Slovakia*

Laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) is an optical emission spectroscopic technique that uses a pulsed-power laser beam focused spatially and temporally to produce a plasma. This plasma is characterized by high temperatures and a significant degree of ionization, leading to the emission of spectral lines corresponding to atomic and ionic transitions. However, it is common under the conditions of thermodynamic equillibrium to observe the phenomenon of self-absorption that can occur within a plasma. Self-absorption appears when a photon emitted during the transition is re-absorbed by ground-state or lower-energy-state atoms or ions within the plasma itself. This effect interferes with quantification, resulting, in the worst case, in self-reversal, which exhibits a deep at the central wavelength emission. NELIBS [1] is a method usually used to produce an enhancement on the spectral lines. This technique utilizes metallic nanoparticles to improve the interaction between the laser pulses and the surface of the analyte with the goal of comparing the spectral lines recorded suffering an enhancement with nanoparticles and without them. To improve the quality of spectral lines, which are susceptible to self-absorption effect, the NELIBS method was employed using gold nanoparticles (AuNPs). The AuNPs were synthesized by laser ablation in distilled water solvent. Figure 1. Shows the SEM images of AuNPs produced [2].

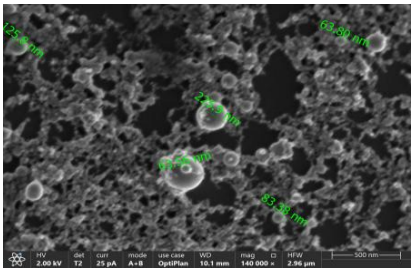


Figure. 1. SEM image AuNPs, 500ns scale bar.

UV-Vi's spectrum presents a typical surface plasmon resonance peak at approximately 521 nm, which is related to particles with more than 20nm diameter.

The LIBS experiment was performed using a solid boron sample to produce self-absorbed spectral lines. For the NELIBS experiment a few droplets of the colloidal suspension were deposited over solid boron (B) pure sample. The boron doublet B I at 249nm was recorded at different delay times, from 300ns up to 400 ns with 20ns step and a 20 ns gate time, with and without AuNPs.

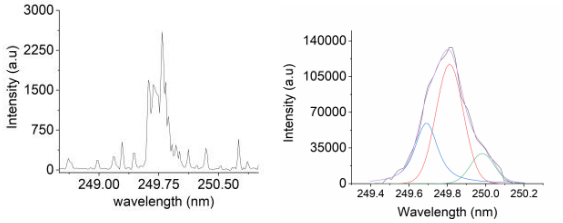


Figure. 2. Spectrum at 300ns. B I doublet spectrum without AuNPs (left), with AuNPs (right) deconvoluted: line 249.66nm (blue), line 249.77nm (red), Fe I 249.98nm (green). self-reversal in both peaks.

All the spectra recorded from the boron doublet without NPs suffer self-reversal effects (similarly in Figure 2), therefore it was not possible to propose a line profile and do the deconvolution. However, the AuNPs produce an enhancement on the line, merging the line into one peak, which was suitable for the deconvolution. The profile suggests involving the B I doublet and a Fe I line as an impurity. The NELIBS results show an improvement on the spectral line profile with nanoparticles and the elimination of self-reversal effect. Additionally, the intensity increased by almost 50 times. Hence, NELIBS can be applied to any surface for signal enhancement. However, it must be considered in advance to choose the right size and the composition of the particles as well as a substrate to verify the possible spectral interference and the enhancement factor.

Acknowledgements

The authors acknowledge the FMFI for VPS 2024/2025. The Slovak Research and Development Agency (APVV-22-0548). Grant UK Postdoctoral (GUKPOST 14/2024). Dr. Martin Motola for UV-Spectra analysis. Dr. Leonid Satrapinskyy for SEM image.

References

1. [Dell'Aglio, 2018] Dell'Aglio, M., Alrifai, R., & De Giacomo, A. *Nanoparticle Enhanced LIBS (NELIBS): A First Review*. **Spectrochim. Acta B**, 148, 105–112 (2018).
2. [Barcikowski, S., 2016] Barcikowski, S. et al. *Handbook of Laser Synthesis of Colloids*. (2016).

*tatarevska1@uniba.sk
†pavel.veis@fmph.uniba.sk
§ivan.urbina@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 172–173
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Diana Chernenko, Peter Čermák, Filip Pastierovič

Určovanie tlaku nasýtených pár metánu pri nízkych teplotách

Diana Chernenko[1*] Peter Čermák[1†‡] Filip Pastierovič[§]

Katedra experimentálnej fyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Táto práca sa zameriava na vývoj novej metodiky určovania *tlaku nasýtených pár metánu pri nízkych teplotách*. Cieľom je určenie tohto parametra z teplotnej závislosti absorpčného spektra CH_4 zaznamenaného pri rovnováhe plynnej a pevnej fázy v oblastiach teplôt nižších ako je teplota trojného bodu CH_4 (T_{TP}). Bežné prístupy predpokladajú znalosť absorpčných koeficientov jednotlivých rotačno-vibračných prechodov (S_i) na výpočet tlaku z nameranej absorpcie prechodov A_i:

$$p = A_i \cdot \frac{k_B T}{S_i(T)}, \tag{1}$$

kde k_B Boltzmannova konštanta a S_i je intenzita i-tej absorpčnej čiary pri teplote T. Koeficienty S_i však často nie sú presne známe. *Preto skúmame, či je možné z meraní absorpcie viacerých čiar, pri rôznych teplotách, určiť zároveň tlak nasýtených pár p a silu absorpčných čiar S_i aj bez ich predošlého presného poznania.*

Použijeme pri tom fakt, že tlak nasýtených pár môžeme určiť aj pomocou Clapeyronovej rovnice:

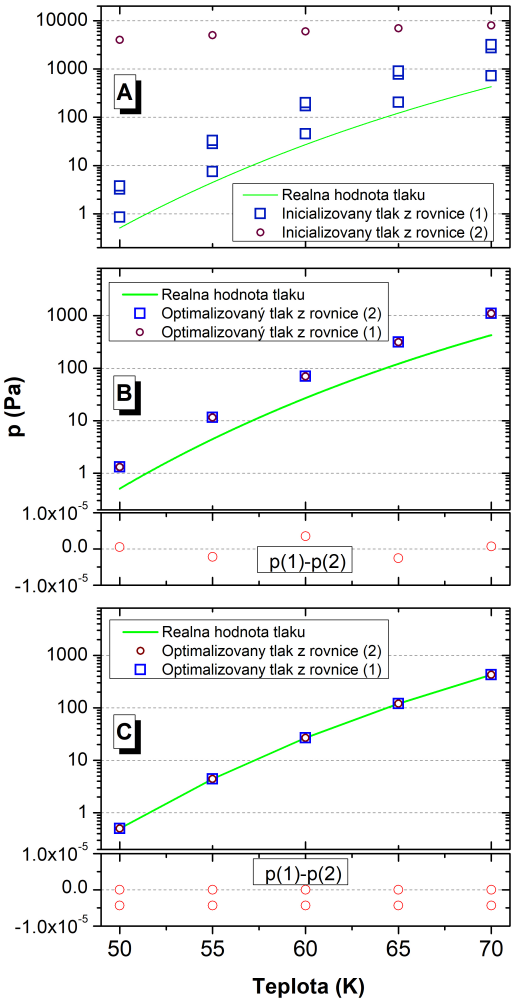
$$p = p_{\mathrm{TP}} \cdot \exp\left[\frac{\Delta H(T)}{R}\left(\frac{1}{T_{\mathrm{TP}}} - \frac{1}{T}\right)\right], \tag{2}$$

kde R je mólová plynová konštanta, p_{TP} je tlak v trojnom bode a $\Delta H(T)$ je entalpia sublimácie (vo všeobecnosti závislá od teploty).

Na overenie fungovania modelu sme vytvorili virtuálny experiment, v prostredí LabVIEW, ktorý simuluje namerané hodnoty A_i na základe dostupných dát z databázy HITRAN[Gordon et al., 2022] (S_i) a referencie [Cacciani et al., 2019a] (p_{TP}, T_{TP} a ΔH). Následne, pre zadané počiatočné hodnoty parametrov minimalizuje ich variáciou, pomocou Levenberg–Marquardt algoritmu, rozdiel:

$$(p_A - p_C)^2 = 0, \tag{3}$$

kde p_A tlak určený z rovnice 1 a p_C z rovnice 2.



Obr. 1: Krivka) Pred optimalizáciou: Simulované vs. reálne dáta
b) Po optimalizácii, c) Neúspešná konvergencia: Odchýlka od reálnej krivky Porovnanie skutočného tlaku s inicializovanými hodnotami z rovníc (1) a (2).

Výsledné parametre, získané optimalizáciou potom porovnávame so vstupnými hodnotami. Zaujíma nás nielen schopnosť optimalizačného algoritmu konvergovať ale hlavne aj to ako ďaleko sú získané hodnoty ďaleko od vstupných parametrov. Vo virtuálnom experimente máme kontrolu nad všet-

*chernenko1@uniba.sk
†peter.cermak@fmph.uniba.sk
‡Školiteľ
§filip.pastierovic@fmph.uniba.sk

kými parametrami, teda rozsahom teplôt pri ktorých simulujeme merania, počtom čiar, na ktorých realizujeme merania a parametrov Clapeyronovej rovnice. Taktiež určujeme ich počiatočné hodnoty a to či sa budú počas optimalizácie variovať alebo ostanú zafixované.

Obrázok prezentuje dve rôzne iterácie, kedy sme porovnávali variáciu všetkých Clapeyronových parametrov (p_{TP}, T_{TP} a ΔH) a intenzít čiar (S_i), so situáciou kedy sme zafixovali teplotu a tlak trojného bodu (na ich skutočnú hodnotu).

Na overenie funkčnosti prístupu vizualizujeme výsledky pomocou troch grafov. Prvý (A) zobrazuje výstup simulácie pred optimalizáciou. Na druhom grafe (B) vidíme príklad, kedy sme optimalizovali všetky parametre. Optimalizačná funkcia síce z konvergovala, čo vidieť z rozdielu tlakov v spodnej časti obrázka, avšak táto hodnota nezodpovedal reálnej hodnote tlaku. Tretí graf (C) zachytáva úspešne zladený výpočet s modelom, vrátane rozdielu medzi vypočítanými a skutočnými hodnotami tlaku. Tieto vizualizácie umožňujú sledovať, kde a ako presne algoritmus pracuje a kde naopak dochádza k výraznejším odchýlkam. Ide teda o neúspešnú konvergenciu z fyzikálneho hľadiska.

To znamená, že aj keď algoritmus môže numericky konvergovať, nie je zaručené, že výsledky budú fyzikálne správne. Preto je dôležité posudzovať nielen samotnú konvergenciu, ale aj to, či sa vypočítané parametre zhodujú s očakávanou fyzikálnou realitou.

Zistili sme teda, že v prípade ak je tlak nasýtených pár popísaný rovnicou (2), môžeme ho určiť pomocou merania absorpcie len vtedy, ak zafixujeme (t.j. poznáme) tlak a teplotu trojného bodu p_{TP} a T_{TP}. Toto je pomerne realizovateľná podmienka, nakoľko sú tieto hodnoty, na rozdiel od ΔH, oveľa dostupnejšie v literatúre.

Literatúra

[Cacciani et al., 2019a] Cacciani, P., Čermák, et al. (2019a). Spectroscopic measurements of methane solid–gas equilibrium clapeyron curve between 40 and 77 k. *The Journal of Physical Chemistry A*, 123(16):3518–3534.

[Cacciani et al., 2019b] Cacciani, P., Čermák, et al. (2019b). Spectroscopic measurements of methane solid–gas equilibrium clapeyron curve between 40 and 77 k. *The Journal of Physical Chemistry A*, 123(16):3518–3534.

[Gordon et al., 2022] Gordon, I. E., Rothman, L. S., Hargreaves, R. J., Hashemi, R., Karlovets, E. V., Skinner, F. M., and et al. (2022). The hitran2020 molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 277:107949.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 174
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Enmily Garcia, Barbora Stachová, Natalia Tańska, Wojciech Breguła, Marek Moravčík, František Krčma, Štefan Matejčík

Electron Induced Dissociative Excitation of Formamide

Enmily García[1], Barbora Stachová[1], Natalia Tańska[2], Wojciech Breguła[2], Marek Moravčík[3], František Krčma[3], Štefan Matejčík[1]
Supervisor: Juraj Országh[1]

[1]Comenius University in Bratislava, FMFI UK, Mlynská dolina F2, Bratislava
[2]Faculty of Applied Physics and Mathematics, Gdańsk University of Technology, Narutowicza 11/12, Gdańsk, Poland
[3]Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Purkyňova 118/464, Brno, Czech Republic

Electron-induced fluorescence (EIF) is a technique that enables the study of exited species of molecules after collision with an electron, based on the principle of optical emission spectroscopy, which is particularly important in astrophysics, especially in space exploration, as it allows for the remote analysis of interstellar bodies irradiated by nearby stars [1].

Formamide (NH_2CHO) has been identified as a potential precursor to a wide variety of organic compounds essential for life, and many biochemical studies propose that it likely played a crucial role in the origin of life on Earth. It contains an amide functional group (-N−C(=O)-), which is necessary to form chains of aminoacids and build up proteins; and it has been identified as a key precursor of numerous prebiotic molecules [2]. Its first detection in space was reported in 1971 in the Sagittarius B2 region (Sgr B2). Additionally, its detection in comets, that retained their chemical composition from the birth of the Solar System, raises the question of whether a significant amount of formamide may have been exogenously delivered to early Earth [2].

The previously published data on the electron-induced fluorescence of formamide are insufficient for studying extraterrestrial bodies. Since the emission spectroscopy is one of the main analytical methods in astronomy, it is necessary to have reliable reference data produced at stable repeatable conditions in laboratory. Many astronomical spectra are very complex as the photon signal is produced by various processes at once. In these cases, modelling can provide more insight but for models to be reliable the input data quality is crucial. The reactions cross sections are often used as input for models but the lack of reliable published data leads to lower quality models. This study aims to expand the database of absolute emission cross sections and provide detailed information on the process kinetics occurring during the experiments.

The emission spectrum following electron impact on formamide is studied in a crossed-beam experiment. The spectra were measured at slit widths of 100 and 300 µm, at 50eV, within a wavelengths range of 280 to 1000 nm, to achieve optimal ratio of signal intensity and resolution. In the emission spectra, several lines and bands could be successfully identified, as the Hydrogen Balmer series, the nitrogen triplet system NH ($A^3\Pi$-$X^3\Sigma$), the excited CH ($B^2\Sigma$-$X^2\Sigma$), CH ($A^2\Delta$-$X^2\Pi$) and CN ($B^2\Sigma$-$X^2\Sigma$) bands, and the atomic oxygen emission line in the IR wavelength region, OI ($3p^3P$-s^3S^0), as is shown in Fig. 1.

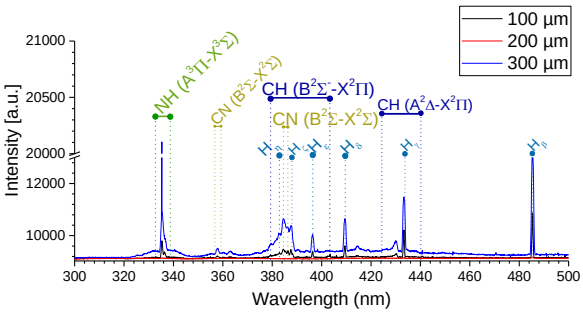


Fig. 1. The emission spectrum of Formamide measured by CCD camera at 50 eV electron energy with slit widths of 100 µm and 300 µm, from 300 to 500 nm.

The results presented are preliminary and help to clarify the most suitable parameters for working with this type of sample, allowing us to achieve clear, well-defined, stable, and reproducible results. Subsequently, a more comprehensive study of this molecule will be conducted, obtaining the emission spectrum after electron beam collisions at different electron energies ranging from 5 to 100 eV, covering the wavelength range from 280 to 1000 nm.

Acknowledgements

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the Contracts no. SK-PL-23-0050 and APVV-23-0522, Slovak grant agency VEGA under project nr. 1/0553/22. Funded by the EU NextGenerationEU through the Recovery and Resilience Plan for Slovakia under the project No. 09I01-03-V04-00047.

References

[1] D. Bodewits, J. Országh, J. Noonan, M. Ďurian and Š. Matejčík, The Astrophysical Journal, 2019, 885 (16pp) 167.

[2] A. López-Sepulcre et al., *Interstellar Formamide (NH2CHO), a Key Prebiotic Precursor*, ACS Earth Space Chem, 2019, 3, 2122-2137.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 175
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Gadisa Deme Megersa, Barbora Stachová, Garcia Angulo Enmily Loelbis, Štefan Matejčík

Low energy electrons interaction with acetone $(CH_3)_2CO$ in the UV-Vis spectral region

G. D. Megersa, B. Stachová, E. L. Garcia Angulo, Š. Matejčík,
Supervisor: J. Országh
Department of Experimental Physics, Faculty of Mathematics, Physics, and Informatics,
Comenius University in Bratislava, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava

This study investigates the interaction of acetone molecules with low-energy electrons (10–100 eV) using emission spectroscopy in the UV-Vis spectral region, with a focus on spectral analysis and the determination of emission cross-sections. The primary objective is to obtain data on the electron-induced fluorescence of $(CH_3)_2CO$ molecules, which are significant components of many extraterrestrial objects and hold substantial potential in astrophysical research. The processes of electron impact fluorescence methods enable the study of the electronic, vibrational, and rotational state of molecules, as well as the exploration of dissociation excitation, ionization, and photon emission processes.

Electron collisions with molecules are fundamental processes in plasma chemistry, atmospheric reactions, astrophysics, and comets. The detection of significant amounts of acetone in various extra-terrestrial environments, such as comets, interstellar space, and planetary atmospheres, has significant implications for chemical processes, prebiotic chemistry, and astrobiology. At the Laboratory of Electron-Induced Fluorescence (LEIF) at Comenius University in Bratislava, optical emission spectra of acetone species under electron impact are currently being reported as shown in Fig. 1. The most prominent spectral features (hydrogen Balmer series, Swan system, and the CH $(A^2\Delta–X^2\Pi)$ emission band) in the emission spectrum of CH_3COCH_3 were measured in the wavelength range of 280 – 950 nm at 50 eV electron energy [1].

Fig. 2 shows the excitation-emission functions of Hβ, Hγ, and the Q1 branch of CH(A2Δ–X2Π) measured in the electron energy range within 10–100 eV using the photomultiplier as a detector.

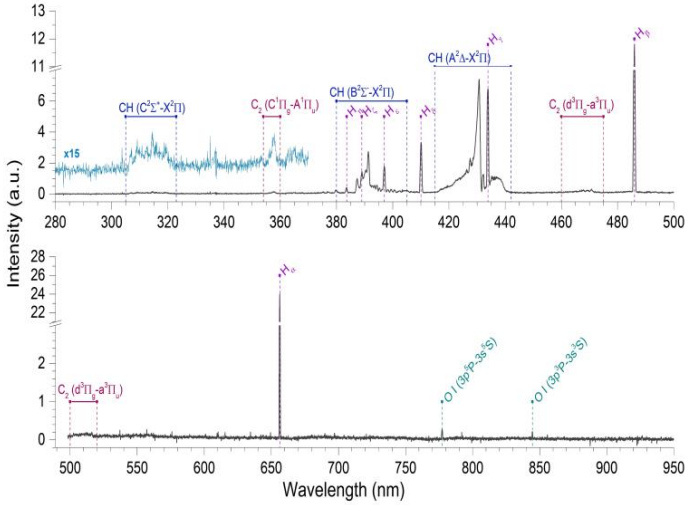


Figure 1: The emission spectrum of (CH3)2CO was measured by a CCD camera at 50 eV electron energy.

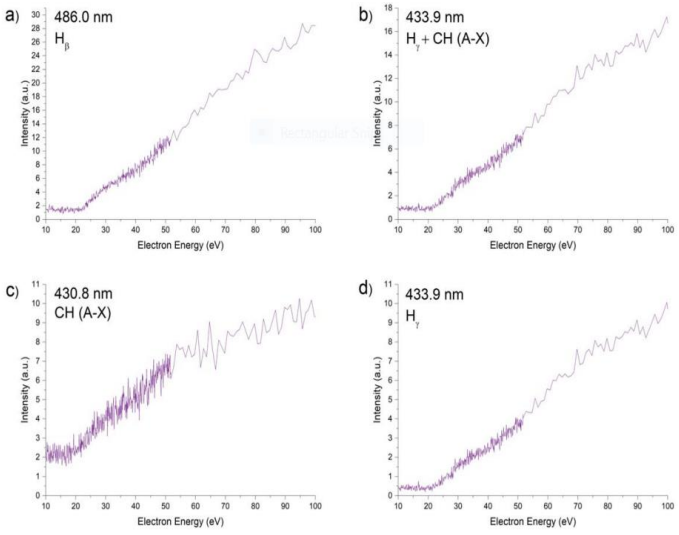


Figure 2: Excitation emission functions of a) H_β at 486 nm, b) H_γ combined with CH($A^2\Delta$-$X^2\Pi$) at 433.9 nm, c) Q_1 branch of CH ($A^2\Delta$-$X^2\Pi$) at 430.8 nm, and d) H_γ with subtracted signal from CH($A^2\Delta$-$X^2\Pi$) at 433.9 nm.

Acknowledgment

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under Contract no. SK-PL-23-0050 and APVV-23-0522. Funded by the EU Next Generation EU through the Recovery and Resilience Plan for Slovakia under the project No. 09I01-03-V04-00047.

Reference

1]. B Stachová *et al* 2025 *Phys. Scr.* **100** 015409.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 176
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Tereza Mišútová, Mohamed K. A. Fawwaz, Petra Šrámková

Porovnanie efektu dvoch rôznych zdrojov nízkoteplotnej plazmy na semená sóje

Tereza Mišútová* Mohamed K. A. Fawwaz† Petra Šrámková‡§
Katedra experimentálnej fyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Na zvýšenie výnosu poľnohospodárskych plodín sa používajú preukázateľne škodlivé látky ako pesticídy, fungicídy či umelé hnojivá, ktoré nepriaznivo vplývajú na životné prostredie i ľudský organizmus. Je dôležité redukovať tieto nepriaznivé vplyvy a zlepšiť klíčivosť, či eliminovať chorobnosť semien inovatívnymi technológiami. Ako jednou z možností náhrady bežne používaných látok sa ukazuje opracovávanie semien nízkoteplotnou plazmou [Bilea *et al.*, 2024].

Plazma ako ionizovaný plyn obsahuje mnoho aktívnych častíc ako sú elektróny, excitované častice, ióny, reaktívne kyslíkové a dusíkové častice (RONS), či UV žiarenie a iné. Plazmová úprava semien preukázateľne zlepšuje klíčivosť, zvyšuje vitalitu semien a ničí prirodzené patogény na ich povrchu. Pre naše experimenty sme vybrali semená sóje, ktoré sme vystavili dvom zdrojom nízkoteplotnej plazmy s rôznou konfiguráciou, a to difúznemu koplanárnemu povrchovému bariérovému výboju (z angl. diffuse coplanar surface barrier discharge - DCSBD) a piezoelektrickému výboju PiezoBrush PZ3. DCSBD je robustný rovinný zdroj difúznej plazmy s veľkou aktívnou plochou (8 x 20 cm), ktorý dokáže naraz opracovať stovky semien a jeho použitiu na úpravu osiva sa venuje rozsiahly výskum [Tomeková *et al.*, 2024]. Piezobrush PZ3 je kompaktný komerčne dostupný zdroj filamentárnej plazmy s aktívnou plochou plazmového ošetrenia 6 cm^2 [Korzec *et al*., 2021], čiže podstatne nižšou ako pri DCSBD. Oba plazmové zdroje pracujú za atmosférického tlaku v okolitom vzduchu, ale keďže ich konfigurácia je rozdielna, naším cieľom bolo porovnať tieto dva plazmové zdroje a ich efekt na modelové osivo. Stanovili sme zmenu zmáčavosti pomocou merania kontaktného uhlu vody, zmeny imbibície vody gravimetrickou metódou, klíčivosť semien a chemické zmeny metódou infračervenej spektroskopie.

Ukázalo sa, že oba plazmové zdroje majú pozitívny vplyv na zníženie kontaktného uhla vody a teda zvýšenie zmáčavosti. Merali sme kontaktné uhly vody pri piatich rôznych expozičných časoch plazmovej úpravy a to 5, 10, 30, 60 a 90 sekúnd pre oba zdroje. Pri kratších časových intervaloch sa nestihli opracovať semená rovnomerne, no pri vyšších intervaloch dosahujú uhly ustálenejšie hodnoty.

Pre skúmanie imbibície sme použili gravimetrickú metódu. Vzorky semien v triplikátoch sa zvážili v suchom stave a následne sa namočili do vody, pričom sme ich v rôznych časových intervaloch v rozmedzí od 5 minút po 2 hodiny vysušili a zvážili. Ukázalo sa, že nasiakavosť semien sa po opracovaní plazmou deje rýchlejšie, ako pri referencii.

Oba plazmové zdroje priaznivo pôsobia aj na klíčivosť semien, ktorá bola vyššia v porovnaní s referenciou. Keďže tieto parametre sú pre poľnohospodársky priemysel kľúčové, mohli by v budúcnosti práve plazmové úpravy osív a semien zvýšiť kvalitu potravín i životného prostredia.

Kľúčové slová: nízkoteplotná plazma, úprava semien, kontaktný uhol, DCSBD

Poďakovanie

Táto práca bola podporená Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-21-0147.

Literatúra

[Bilea *et al.,* 2024] Bilea, F. (2024). Critical Reviews in Plant Sciences Non-Thermal Plasma as Environmentally- Friendly Technology for Agriculture : A Review and Roadmap, *Critical Reviews in Plant Sciences*, 43: 428-486.

[Korzec *et al.,* 2020] Korzec et al. (2020). Atmospheric pressure plasma jet powered by piezoelectric direct discharge. *Plasma Process. Polym.* 17*:* e2000053.

[Tomeková *et al.*, 2024] Tomeková, J. *et al.* (2024). Interaction of Cold Atmospheric Pressure Plasma with Soybean Seeds: Effect on Germination and DNA, Seed Surface Characteristics and Plasma Diagnostics. *Plasma Chem. Plasma P.,* 44: 487-507.

* misutova7@uniba.sk
† mohamed.fawwaz@fmph.uniba.sk
‡ petra.sramkova@fmph.uniba.sk
§ Školiteľ

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 177
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Ramin Mehrabifard, Bernard Gitura Kimani, Zdenko Machala

Synergistic effect of cold atmospheric pressure plasma and ultraviolet (UVA) radiation on Gram-negative bacteria

Ramin Mehrabifard[1*] Bernard Gitura Kimani[1†], Zdenko Machala[1‡§]
[1] Division of Environmental Physics, Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, Comenius University, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava, Slovakia

Improving the plasma effects in multiple biomedical applications is one of the topics that has attracted a lot of attention in the past decade [Mehrabifard et al. 2020]. Ultraviolet radiation (UV) is one of the many combination techniques which can be used for this [Pavlovich et al. 2013]. In this work, we investigate the UV-photolysis and antibacterial synergy between plasma activated water and UV radiation of UVA (370 nm) wavelengths. Plasma treatments produce reactive oxygen and nitrogen species (RONS) in water. When we used plasma and UV simultaneously, or UVA followed by plasma for *Escherichia coli* bacteria treatment, the effect was higher than the two treatments alone. We used transient spark discharge plasma (TS). The schematic diagram of combining plasma + UVA setup is shown in figure 1.

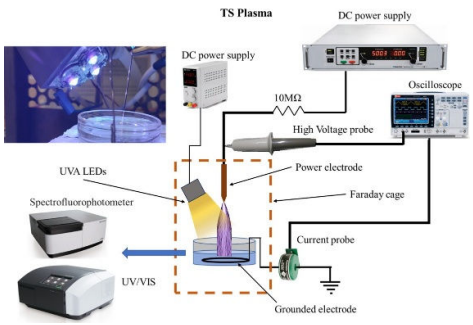


Figure 1. The schematic and real picture of TS-UVA setup use for combined treatment.

According to RONS measurements, it has been shown that the concentration of H_2O_2 and NO_2^- decreases in the presence of UVA. The UVA photolysis examination of pure nitrite, hydrogen peroxide solution, and their combination demonstrated that the generation of peroxynitrite in a buffered solution partially contributed to the antibacterial action seen in this study. Furthermore, fluorescent measurements of OH radicals show that part of the photodecomposition of H_2O_2 can produce the OH radical, which plays a key role in the elimination of bacteria. The results reported here confirm that the synergistic effect of plasma and UV radiation can produce highly active species and improve the plasma effect in the inactivation of bacteria. This methodology is also applicable in several plasma and plasma-activated water applications across diverse domains. The study investigates the effectiveness of plasma activated water and UV radiation in antibacterial treatment, finding that the combination of both treatments yields a higher antibacterial effect, with UVA reducing H_2O_2 and NO_2 concentrations and partially enhancing the peroxynitrite generation.

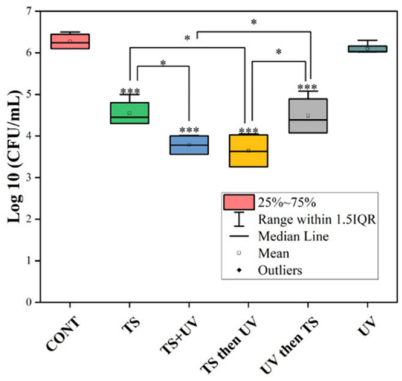


Figure 2. Antimicrobial activity of transient spark PAW/UV-A coupled system on planktonic *E. coli* in 2 kHz frequency, 10 min treatment for 10 mL of sample.

Acknowledgements

This work was supported by the EU NextGenerationEU through the Recovery and Resilience Plan for Slovakia under the project No. 09I03-03-V03-00033 EnvAdwice, and Slovak Research and Development Agency APVV-22-0247.

References

[Mehrabifard, R, 2020] Mehrabifard, R., H. Mehdian, K. Hajisharifi, and E. Amini. 2020. *Plasma Chemistry and Plasma Processing* 40(2): 511–26.

[Pavlovich et al. 2013] Pavlovich, Matthew J., Yukinori Sakiyama, Douglas S. Clark,. Plasma Process. Polym. 2013,10 (12), 1051–1060

* Ramin.Mehrabifard@fmph.uniba.sk
† bernard.kimani@fmph.uniba.sk
‡ machala1@uniba.sk
§ Supervisor

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 178–185
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Pengbo Liu, Qiang Li

III-V nanowires on silicon-on-insulator for advanced photonic devices

Pengbo Liu[1], Qiang Li [2](supervisor),
[1] Laboratory for Advanced Materials, Faculty of Natural Sciences,
Comenius University, 84215 Bratislava, Slovakia
[1-5] School of Physics & Astronomy, Cardiff University, Cardiff, UK

Abstract

Selective epitaxy alignment of direct bandgap group III-V nanowires can be used to form photonic crystal structures. Such structures can be used to build high-performance photonic devices. In this study a core-shell GaAs/InGaAs/InGaP based nanowire was designed. Photonic crystal surface emitting lasers are formed by arranging them as honeycomb structures on insulator-on-silicon substrates by selected area metal-organic vapour-phase epitaxy, and the lasers are optically pumped to demonstrate their room-temperature excitation modes. The lasers were optically characterised to analyse the laser wavelength and laser threshold, as well as the laser divergence. The photonic band gap of the photonic crystal during excitation is also demonstrated.
Keywords: Nanowires, Photonic crystal laser, Lattice mismatch, Selected Area Epitaxy (SAE), Photonic band gap.

1. Introduction

Optical communication is the foundation of the modern information age. O-band near 1300 nm is a low optical loss, low-cost and mature short-distance transmission band, which has important applications in short-distance optical communication[1]. To make use of this band for short distance communication, we need corresponding signal transmitting light source, among which laser light source is the best. The purpose of this study is to design and manufacture a suitable laser light source made of III-V nanowires integrated on the silicon photonics platform for 1300nm short range optical communication[2].

liu17@uniba.sk
liq44@cardiff.ac.uk

1.1 Laser principle

The three key elements of a laser are: the resonant cavity, the pump source and the active layer. The material of the active layer determines the wavelength at which the laser emits. As shown in Figure 1, compared with the indirect bandgap semiconductor, the bottom of the conduction band and the top of the valence band of the direct bandgap semiconductor are at the same position in k-space, and when electrons absorb photon energy, they can directly jump from the valence band to the conduction band and generate photons, resulting in higher photoluminescence efficiency, Therefore, the direct bandgap semiconductor is selected as the material for the active layer[3]. Silicon itself is an indirect bandgap semiconductor material with low light emitting efficiency, so direct bandgap III-V compound semiconductor materials are commonly used for the most efficient semiconductor lasers.

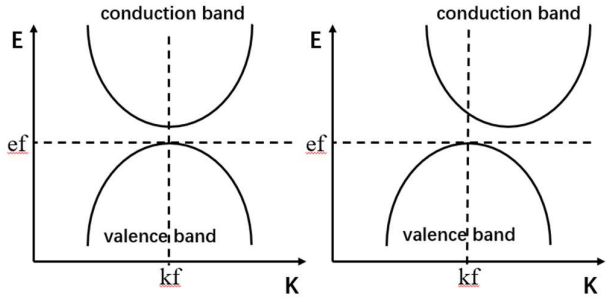


Figure 1: Semiconductor conduction bands & valence bands.

1.2 Device material and structure design

Since this device is used for photonic integrated circuits or silicon optical communications, the substrate is made of silicon on insulator (SOI) to improve photonic confinement, reduce parasitic losses, and for optoelectronic integration. The constitutive structure is a $Si/SiO_2/Si$ box structure, which takes advantage of the high refractive index of Si (3.48) and the low refractive index of SiO_2 (1.46)

to create a total reflective effect to improve the optical efficiency of the laser[4].

1.2.1 Materials Selection. The semiconductor materials are first selected bas ed on the target wavelength of 1300 nm and based on the relationship between wavelength and band gap Eg:

$$Eg = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1240}{\lambda} = 0.954eV. \quad (1)$$

InGaAs is chosen as the active layer material. The compound composition ratio of the active layer InGaAs is estimated using Vegard's law, considering the bowing parameter C=0.477 eV[5], which can be calculated using the following equation:

$$Eg_{(InAs_{1-x}GaAs_x)} = (1-x)E_g(InAs) + xE_g(GaAs) - x(1-x)C \quad (2)$$

This ternary alloy component is $In_{0.309}Ga_{0.691}As$. The lattice constant is derived as $a_{In_{0.309}Ga_{0.691}As} = 0.5778nm$.

1.2.2 Device structure. To grow this active layer directly on the SOI substrate, the lattice mismatch between them needs to be considered. The lattice mismatch ratio can be calculated by the following equation:

$$f = \left|\frac{(a_s - a_e)}{a_s}\right| = 6.4\%. \quad (3)$$

As shown in the Figure 2, based on the Matthews and Blakeslee critical layer thickness versus lattice mismatch strain (MB model), it can be concluded that if the material is grown directly on the SOI, to avoid generation of crystalline defects, the critical thickness of this active layer needs to be less than 1 nm, which is not possible to achieve[6].

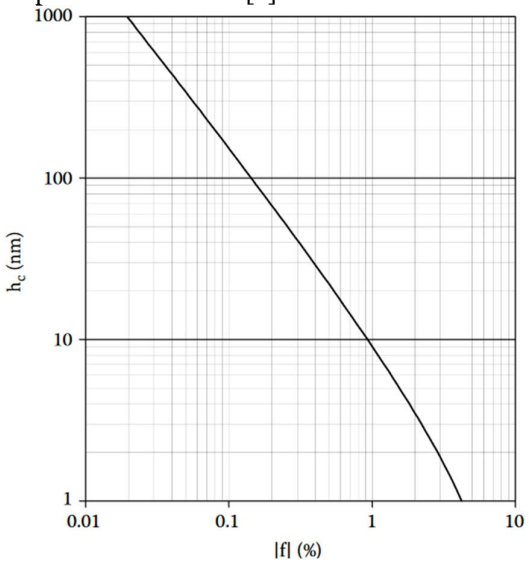


Figure 2: Relationship between critical layer thickness and lattice mismatch strain. Image from: [6].

To solve this problem, a special structure is required to grow this active layer and we have chosen a nanowire structure. As shown in the Figure 3, in this special structure, as the radius of the nanocrystals in the epitaxy layer becomes smaller, the critical thickness of the nanowire mismatch layer increases. When the radius is as small as a certain degree, its critical thickness is nearly infinite, which solves the problem of the lattice mismatch leading to defects[7]. This is because as the nanowire radius decreases, the stress generated by the lattice mismatch can be released through the outer edge of the nanowire.

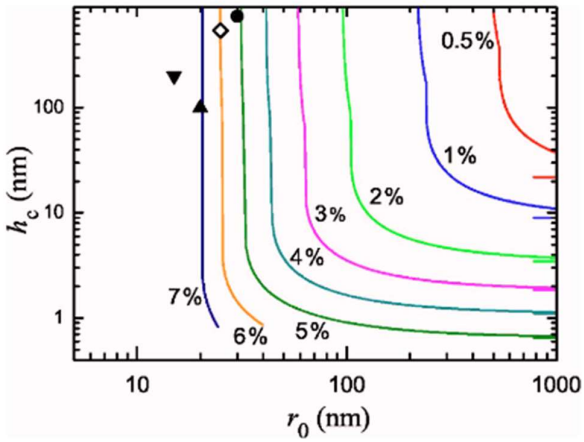


Figure 3: Variation of critical thickness of the dislocation layer at the top of nano whiskers with whisker radius. Image from:[7]

The nanowire uses three III-V compound semiconductor materials to form nanowire heterostructures. These three semiconductor materials form a wide bandwidth system/narrow bandgap/wide bandgap type I quantum well structure (as shown in the Figure 4).



Figure 4: Nanowire energy band alignment.

Due to the nanostructure of the nanowire (although the height of this nanowire is very high so that the quantum confinement effect is weak), the

electrons can only move in the direction of the well, while the direction perpendicular to the well is restricted. Due to the quantum confinement effect, the quantum well causes a narrowing of the bandgap of the active layer, a widening of the energy level spacing, and a blueshift in the luminescence wavelength[8]. Since the blueshift effect due to this quantum well is weak, we can ignore this effect. GaAs was used as the first layer material for nanowire growth as a seeding layer with lattice constant between Si and InGaAs. So, the final choice of nanowire is core-shell GaAs/InGaAs/InGaP. To obtain the lowest possible lattice mismatch of the outermost InGaP layer with the active layer, the approximate composition of this ternary alloy needs to be calculated using Vegard's law[9]. The composition of this ternary alloy can be calculated as follows: $In_{0.786}Ga_{0.214}P$. The cross-sectional structure of this nanowire are shown in Figure 5.

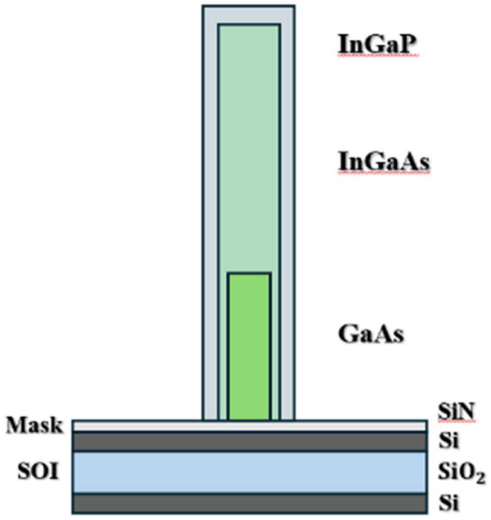


Figure 5: Schematic of the longitudinal cross-section of the nanowire.

1.3 Growth Methods

Nanowire growth is typically grown using Vapour liquid Solid (VLS) or Vapour-Solid (VS) techniques. As shown in Figure 6, the VLS method introduces Au as a catalyst compared to the VS method, and Au causes deep energy level defects in Si, which is something we want to try to avoid in the growth of SOI-based devices, so the VS method is chosen to grow nanowires[10]. Since the nanowires that make up the PCSEL need to have precise growth location planning to form the resonator structure of the laser, the Selected Area Epitaxy (SAE) technique is required to grow the nanowires for this PCSEL[11].

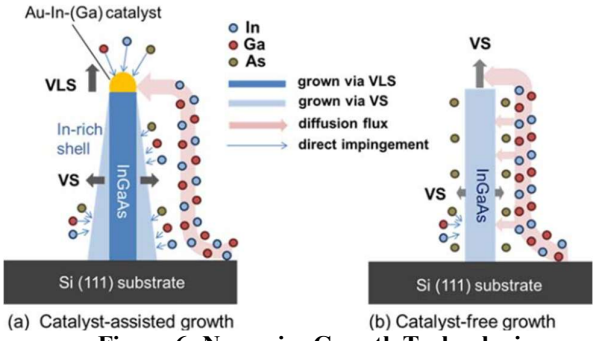


Figure 6: Nanowire Growth Technologies: Vapour Liquid Solid (VLS) & Vapour Solid (VS). Image from:[9]

1.4 Photonic crystal lasers (PCSELs)

Using this nanowire structure, we can construct a photonic crystal face-emitting laser. Compared with conventional vertical cavity surface emitting lasers (VCSELs), photonic crystal surface emmitting lasers (PCSELs) have the advantages of single mode output, high modulation frequency and high power.

A photonic crystal is a periodic dielectric structure that modulates the propagation of photons. By designing the structure of a photonic crystal, a photonic bandgap can be formed, i.e., in certain frequency ranges, photons cannot propagate through the crystal. Instead, by introducing defects in the photonic bandgap, localised states can be formed at the defects, and these localised states can act as laser resonant cavities. As shown in Figure 7, a nanowire honeycomb structure is grown using the SAE process to form a photonic crystal, thereby controlling the propagation of light through the periodic structure of the photonic crystal to achieve laser oscillation.

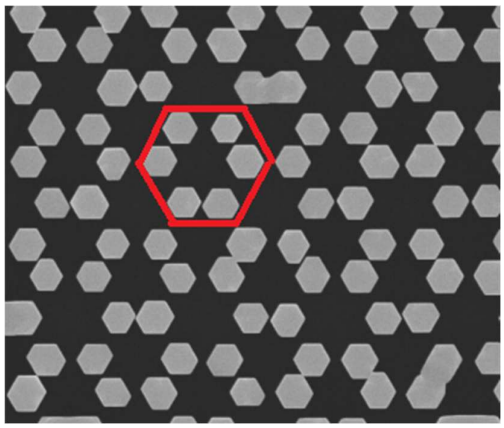


Figure 7: Photonic crystals made of nanowires.

2. Methodology

The main objective of this project is to design, fabricate and characterise an infrared laser using the above nanowire structure with a target wavelength of 1300 nm. The laser is a laser-pumped photonic crystal laser, the active layer is InGaAs, the resonant cavity consists of a honeycomb structure of nanowires grown by SAE, and the pumping source is an external laser source. This PCSEL laser needs to be tested and characterised by optical inspection means, including: the photoluminescence spectroscopy (PL) , the laser wavelength & the lasing threshold, the photonic band-gap of the photonic crystal, the divergence of laser.

The optical platform used for testing was constructed according to the optical path diagram shown in Figure 8. Use the following instruments: I.High Power Pulsed Laser (YSL SC PRO 7) with AOTF filter (YSL AOTF PRO); II. 633nm low power continuous HeNe laser (Thorlabs HNLS008R-EC); III.Reflector; IV.White light source; V.Long-pass dichroic mirror; VI.CCD (charge coupled device) camera; VII.Infinity corrected objective (50X Mitutoyo Plan Apo NIR HR); VIII.Sample Holding Platform; IX.Infrared filter; X.Spectrometer (Acton SpectraPro SP-2750).

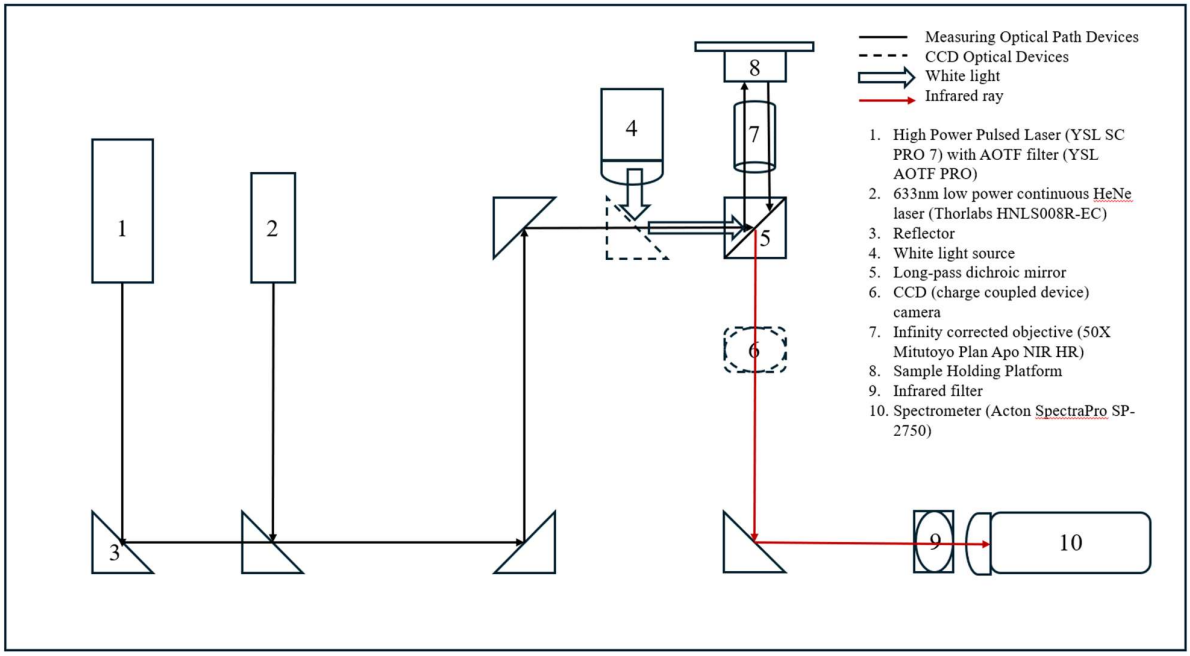


Figure 8: Constructing optical path diagrams for optical platforms used in testing.

2.1 PL measurement

Photoluminescence (PL) refers to the process in which a substance absorbs a photon and then re-radiates the photon. PL spectroscopy can be used to study the electronic structure, defect states, and photoluminescence properties of materials[12]. PL Spectroscopy uses an external light source to excite the electron migration of the sample. By collecting the photons released when the sample electrons migrate back to the ground state and measuring the wavelength and intensity of the photons, information about the electronic structure and defects of the substance can be obtained[13]. Also to improve the resolution of the PL spectrometer, prisms, gratings and the Fresnel diffraction principle can be used to disperse the spectrum. The spectrometer used in this case uses gratings for dispersion.

The PL spectroscopy of the sample was first tested using a low power continuous HeNe laser. This low-power laser passes through a refractor into a long-pass dichroic mirror, which is calibrated with an infinity-corrected objective lens to excite the nanowire sample on the sample holder, and the excitation light emitted from the sample is filtered by the long-pass dichroic mirror to leave the infrared wavelengths only. The excitation light from the sample is filtered by the long-pass dichroic mirror, leaving only the infrared wavelengths. The infrared excitation light is then filtered again by an AOTF filter and enters the spectrometer (Acton SpectraPro SP-2750). This spectrometer needs to be cooled to -

70°C with liquid nitrogen to eliminate temperature-driven noise. The incident spectrum is dispersed using a spectroscopic grating, which can be rotated to detect different wavelengths. The detector is an InGaAs 2D array detector (NIRvana 640) with a detection range from 900 nm to 1700 nm. Using PL we obtained nanowire photoluminescence spectra as a way of analysing whether the nanowire components match the design and the effect of nanowire diameter on them.

2.2 Laser measurement

The laser tests were performed using the same PL spectrometer test, where the optical path was first calibrated using a low-power continuous HeNe laser, and then the nanowires were optically pumped with a pulsed laser source instead of the low-power laser source, and their infrared laser performance was tested by detecting their centre peaks by a spectrometer. The laser power curves were obtained by adjusting the AOTF filter of the pumping source to regulate its pumping power during the laser tests. The threshold power of laser pumping can be obtained by analysing the curve[14].

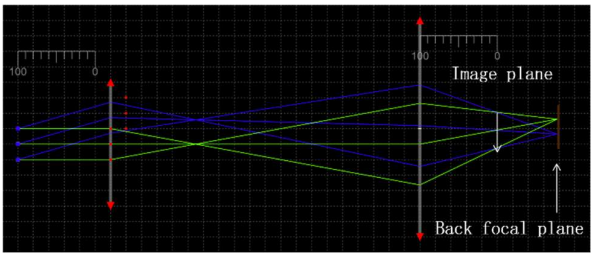
2.3 Photonic band-gap

A photonic forbidden band is a special material structure that prohibits light in a specific frequency range from travelling through it. Photonic forbidden bands are mainly due to the periodic structure inside the material. This periodic structure diffracts light and prevents light of a specific wavelength from travelling through the material due to phase cancellation interference. Materials with photonic forbidden band properties are often called photonic crystals[15].

In order to measure the forbidden bands of photonic crystals consisting of nanowires, the sample is rotated to a suitable angle and then analysed using PL spectroscopy.

2.4 Divergence of laser

The divergence angle of the laser is a far-field optical measurement that requires moving the position of the focusing lens in the optical stage[16]. As shown in Figure 9, moving the lens causes the image plane to move forward from the detector so that the detector probes the back-focusing plane[17]. Eventually there will be two focused spots on the detector, the larger and darker one is the PL spot, the diameter of which depends on the divergence angle of the focusing objective lens in front of the sample (the divergence angle of the focusing objective lens in front of the sample is known to be 40°), and the



smaller and brighter one is the laser spot, and by comparing the diameters of the two spots, the laser divergence angle can be obtained.

Figure 9: Schematic diagram of the optical path for laser divergence angle measurement.

3. Results and discussion

The dimensions of the nanowires were analysed using SEM images prior to optical measurements. As shown in Figure 10, the diameter of the nanowire was analysed to be 164 nm and the height of the nanowire was calculated to be 714 nm due to the sample having a tilt angle of 30° during the SEM test.This diameter and height are as expected. The growth of the nanowires was also evaluated, and the height and diameter of the growth were more homogeneous, with less merging of the nanowire growth[18].

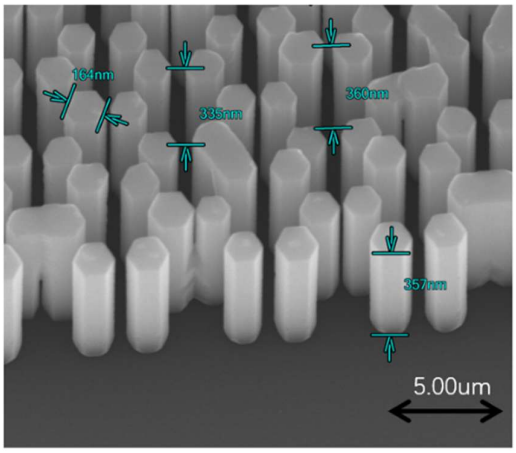


Figure 10: Nanowire SEM results.

3.1 PL Inspection

The results of the sample PL measurements consist of two parts: PL with different HeNe Laser Power and Nanowire Composition Analysis.

3.1.1 PL with different HeNe Laser Power.

As shown in figure 11, as the energy input to the light source increases, more electrons are excited into the conduction band, occupying higher energy levels, resulting in an approximate widening of the band gap and a blueshift of the photoluminescence wavelength.

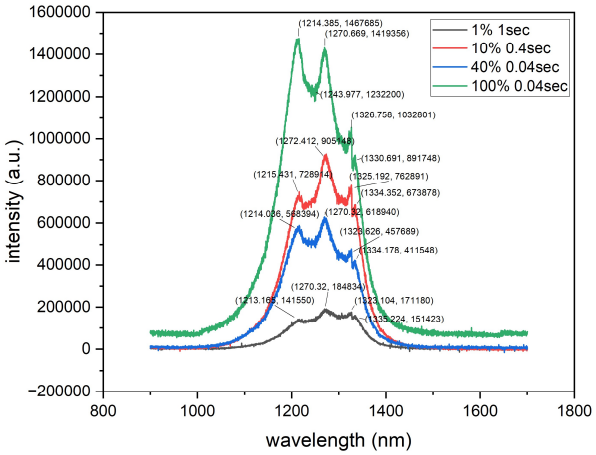


Figure 11: PL with different HeNe Laser Power.

3.1.2 Nanowire Composition Analysis. The sample goes from 6-2 to 6-4 and the nanowire diameter increases in this way. As shown in figure 12, as the nanopore diameter increases, the nanowire diameter becomes larger and its quantum confinement effect becomes weaker and closer to the bulk semiconductor, red shifting its wavelength. Perform the following calculation by Vegard's law. Known from PL spectra: $\lambda = 1243nm$, the bowing parameter C = 0.477 eV

$$Eg_{(InAs_{1-x}GaAs_x)} = (1-x)E_g(InAs) + xE_g(GaAs) - x(1-x)C \quad (4)$$

$$Eg = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1240}{\lambda} = 0.998eV \quad (5)$$

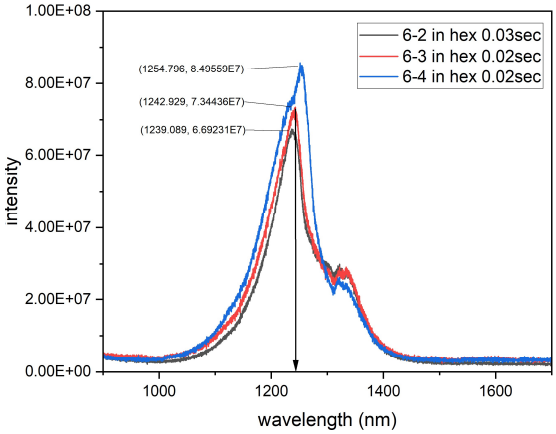


Figure 12: PL HeNe Laser with different columns.

This ternary alloy component is $In_{0.304}Ga_{0.696}As$. The resulting nanowire fractions are close to the design fractions. The reason for the deviation may be the error due to the precision of controlling the growth conditions during growth.

3.2 Laser Spectrum & Power Curves

By adjusting the intensity of the pump light source, laser spectra with different excitation intensities can be obtained, as shown in Figure 13.

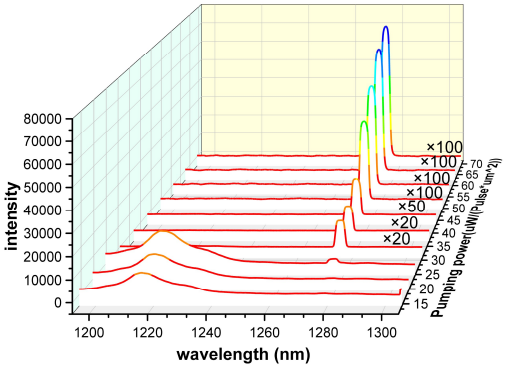


Figure 13: PL HeNe Laser with different columns.

From the PL spectrum, it can be found that the centre wavelength of the PL spectrum of this nanowire has a difference of about 60 nm from the laser wavelength. The reason for this difference is that the PL spectrum is determined by the III-V component of the nanowire, and the laser spectrum is jointly determined by this component and the resonant cavity of the photonic crystal composed of the nanowire. The resonant cavity selects a wavelength close to 1300 nm, which results in a final laser centre wavelength of 1275 nm.

From the data obtained from the above figure, its laser power curve is made, as shown in Figure 14. The lasing threshold power of this PESCL is 32.7 $uw/(Pulse \times um^2)$.After the pump source reaches this power, significant lasing occurs at a wavelength of 1275 nm. According to the parameters of the pump source (high power pulsed laser), the laser pumping threshold power can be converted to obtain the laser threshold as 3.27 uJ/cm^2.

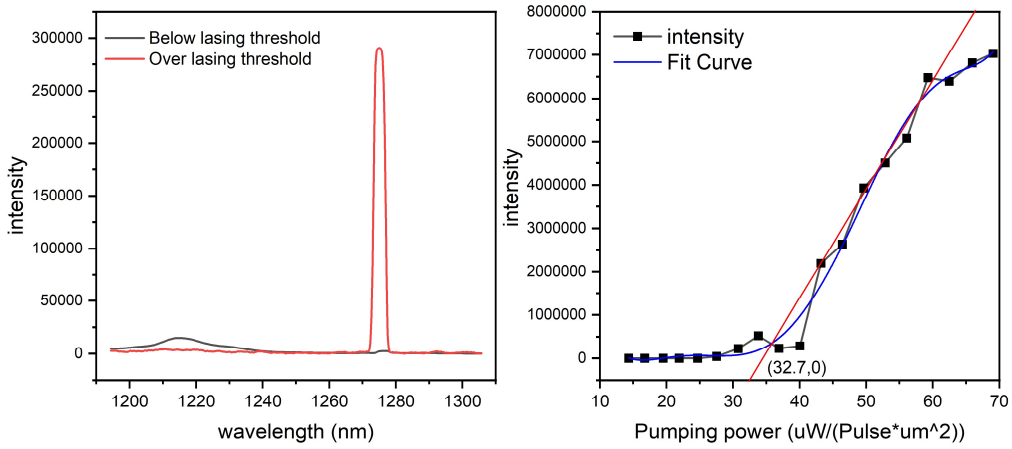


Figure 14: Laser Threshold Before & After Comparison & Laser Power Curve.

3.3 Photonic band-gap

As shown in Figure 15, the photonic band gap of a photonic crystal consisting of nanowires can be clearly measured using an PL spectrometer.

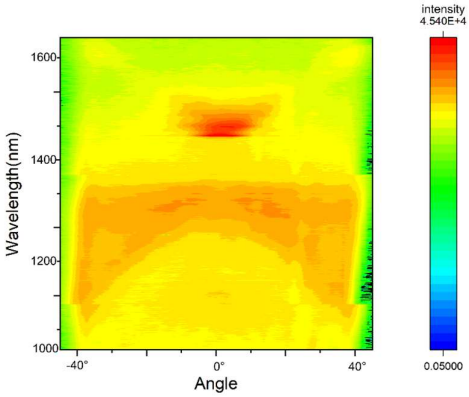


Figure 15: Photonic band-gap.

3.4 Divergence of laser

The laser divergence angle was measured using the far field and the results are shown in Figure 16. The laser divergence angle of 4.73 ° was obtained by comparing it with the 40° divergence angle of the objective lens.

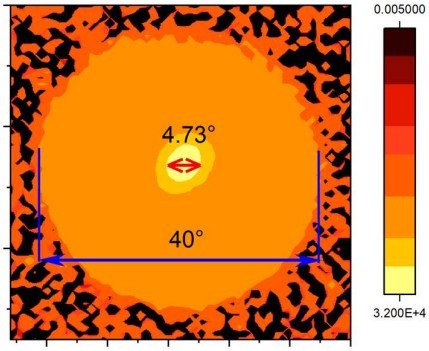


Figure 16: Divergence of laser.

4. Conclusions

III-V nanowire lasers were successfully prepared and characterised. The lasing threshold is as low as 3.27 uJ/cm^2, the centre wavelength is 1275 nm, and the divergence angle is 4.73 °. A more obvious photonic band gap can be observed, indicating that its photonic crystal structure is well grown. This indicates that the design and growth of this nanowire PCSEL laser is more successful and reaches the expected goal.

Acknowledgements

This thesis needs to thank my supervisor Dr. Qiangli for his help and guidance and post-doctoral fellow Bogdan Ratiu for his help in lab. I would also like to thank Dr Amy Morreau, the Director of my postgraduate studies, who has helped me a lot with

my studies and my life. Finally, I would like to thank my classmates: Sai GuruKrishna Vadlamudi, Hemant, Sri Datta Aneesh, Ali Büyükpınar, Vijay Subramanian, Abood and Tom bossm, who have helped me throughout my year at MSC, which has been an integral part of this thesis.

References

[1] X. Lin *et al.*, 'Collinear holographic data storage technologies', *Opto-Electron. Adv.*, vol. 3, no. 3, pp. 190004–190004, 2020, doi: 10.29026/oea.2020.190004.

[2] H. Kim, T.-Y. Chang, W.-J. Lee, and D. L. Huffaker, 'III–V nanowire array telecom lasers on (001) silicon-on-insulator photonic platforms', *Appl. Phys. Lett.*, vol. 115, no. 21, p. 213101, Nov. 2019, doi: 10.1063/1.5126721.

[3] M. I. Abedin, A. Islam, and Q. Delwar Hossain, 'A self-adjusting Lin-Log active pixel for wide dynamic range CMOS image sensor', in *2015 IEEE International Conference on Telecommunications and Photonics (ICTP)*, Dhaka, Bangladesh: IEEE, Dec. 2015, pp. 1–4. doi: 10.1109/ICTP.2015.7427935.

[4] X. Zhang, H. Yang, Y. Zhang, and H. Liu, 'Design of high-quality reflectors for vertical III–V nanowire lasers on Si', *Nanotechnology*, vol. 33, no. 3, p. 035202, Jan. 2022, doi: 10.1088/1361-6528/ac2f22.

[5] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan, 'Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys', *J. Appl. Phys.*, vol. 89, no. 11, pp. 5815–5875, Jun. 2001, doi: 10.1063/1.1368156.

[6] J. E. Ayers, 'Mismatched Heteroepitaxial Growth and Strain Relaxation', *Heteroepitaxy Semicond.*, 2007.

[7] F. Glas, 'Critical dimensions for the plastic relaxation of strained axial heterostructures in free-standing nanowires', *Phys. Rev. B*, vol. 74, no. 12, p. 121302, Sep. 2006, doi: 10.1103/PhysRevB.74.121302.

[8] O. Arif *et al.*, 'Growth and Strain Relaxation Mechanisms of InAs/InP/GaAsSb Core-Dual-Shell Nanowires', *Cryst. Growth Des.*, vol. 20, no. 2, pp. 1088–1096, Feb. 2020, doi: 10.1021/acs.cgd.9b01421.

[9] G. Koblmüller and G. Abstreiter, 'Growth and properties of InGaAs nanowires on silicon', *Phys. Status Solidi RRL – Rapid Res. Lett.*, vol. 8, no. 1, pp. 11–30, Jan. 2014, doi: 10.1002/pssr.201308207.

[10] C. Messina *et al.*, 'Deformed Honeycomb Lattices of InGaAs Nanowires Grown on Silicon-on-Insulator for Photonic Crystal Surface-Emitting Lasers', *Adv. Opt. Mater.*, vol. 11, no. 5, p. 2201809, Mar. 2023, doi: 10.1002/adom.202201809.

[11] K. Arimoto *et al.*, 'Strain relaxation mechanisms in step-graded SiGe/Si(110) heterostructures grown by gas-source MBE at high temperatures', *J. Cryst. Growth*, vol. 311, no. 3, pp. 819–824, Jan. 2009, doi: 10.1016/j.jcrysgro.2008.09.064.

[12] M. Furukori, Y. Nagamune, Y. Nakayama, and T. Hosokai, 'High-throughput transient photoluminescence spectrometer for deep learning of thermally activated delayed fluorescence materials', *J. Mater. Chem. C*, vol. 11, no. 13, pp. 4357–4364, 2023, doi: 10.1039/D3TC00482A.

[13] N. P. Dasgupta *et al.*, '25th Anniversary Article: Semiconductor Nanowires – Synthesis, Characterization, and Applications', *Adv. Mater.*, vol. 26, no. 14, pp. 2137–2184, Apr. 2014, doi: 10.1002/adma.201305929.

[14] D. Jevtics *et al.*, 'Characterization, Selection, and Microassembly of Nanowire Laser Systems', *Nano Lett.*, vol. 20, no. 3, pp. 1862–1868, Mar. 2020, doi: 10.1021/acs.nanolett.9b05078.

[15] L. N. Quan, J. Kang, C.-Z. Ning, and P. Yang, 'Nanowires for Photonics', *Chem. Rev.*, vol. 119, no. 15, pp. 9153–9169, Aug. 2019, doi: 10.1021/acs.chemrev.9b00240.

[16] S. Iadanza, A. A. Liles, S. M. Butler, S. P. Hegarty, and L. O'Faolain, 'Photonic crystal lasers: from photonic crystal surface emitting lasers (PCSELs) to hybrid external cavity lasers (HECLs) and topological PhC lasers [Invited]', *Opt. Mater. Express*, vol. 11, no. 9, p. 3245, Sep. 2021, doi: 10.1364/OME.430748.

[17] H. Kim, W.-J. Lee, A. C. Farrell, A. Balgarkashi, and D. L. Huffaker, 'Telecom-Wavelength Bottom-up Nanobeam Lasers on Silicon-on-Insulator', *Nano Lett.*, vol. 17, no. 9, pp. 5244–5250, Sep. 2017, doi: 10.1021/acs.nanolett.7b01360.

[18] B.-P. Ratiu *et al.*, 'Curved InGaAs nanowire array lasers grown directly on silicon-on-insulator', *Opt. Express*, vol. 31, no. 22, p. 36668, Oct. 2023, doi: 10.1364/OE.499696.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 186–188
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Yevhenii Popov, Leonid Satrapinskyy

Fabrication, Oxidation, and Property Modulation of Iron-Doped Titanium Nanotubes

Yevhenii Popov[1*] and Leonid Satrapinskyy[1†]

[1]*Comenius University Bratislava, Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, Department of Experimental Physics, Mlynská dolina, 842 48, Bratislava, Slovak Republic.*

Abstract:

Titanium dioxide nanotubes are versatile nanomaterials with transformative potential across energy, environmental, and medical fields, driven by their tunable structure and exceptional properties [1]. However, pure TiO_2 usage is limited by a relatively wide energy gap.

The fabrication and oxidation processes of iron-doped titanium nanotubes were investigated in this paper. The influence of various iron concentrations on the structural, morphological, and electrochemical properties of precursor films prepared by magnetron sputtering was analyzed. Advanced characterization techniques, including scanning electron microscopy (SEM), X-ray diffraction (XRD), and energy-dispersive spectroscopy (EDS), were used to examine the relationship between iron concentration and material characteristics. Optimized precursor films were deposited by magnetron sputtering. The as-deposited films were subsequently oxidized in an organic-based electrolyte at 40 volts for 30 minutes to obtain an oriented array of Ti-Fe nanotubes. To improve their sensorics properties, the samples were annealed at 600°C for 2 hours. Sensitivity to hydrogen was measured at various temperatures.

1. Materials and methods:

Synthesis of thin film by the sputtering method:
Prior to sputtering onto a silicon wafer, the substrate was sequentially ultrasonically cleaned in acetone, isopropyl alcohol, and deionized water under sonication. Similarly to [2], magnetron spattering with partial target coverage by Fe strip was employed for precursor film deposition (Figure 1). During the process, the parameters were kept as following: voltage 500 V, current 500 μA, gas pressure (Ar) 2,5 Pa. The sputtering process was carried out for 10 minutes. The elemental composition and atomic ratio of iron, silicon, and titanium in the deposited films were analyzed using energy-dispersive spectroscopy (EDS).

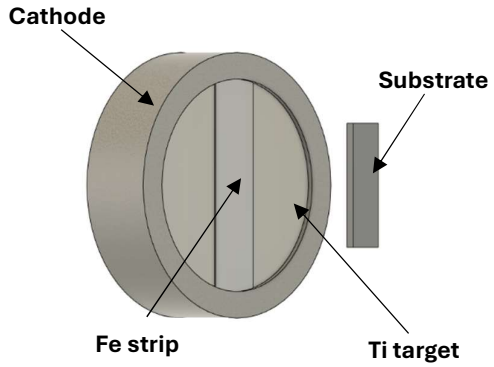


Fig. 1 The setup scheme

Anodization process:
A single-step anodization was performed at a voltage up to 40 V in an electrolyte based on ethylene glycol ($C_2H_6O_2$) and wt. 0.5% ammonium fluoride (NH_4F) for 30 minutes [3]. The formation of nanotube structures was examined by SEM to assess their presence and determine the inner diameter. Additionally, EDS was utilized to quantify the elements content, while X-ray diffraction (XRD) was employed to characterize the crystal lattice structure.

Annealing:
The films were subjected to furnace annealing in air at 600°C for 2 hours to induce crystallization [4,5]. Post-annealing structural transformations were analyzed using XRD to identify the modified crystal lattice. Furthermore, the hydrogen sensitivity of the annealed films was evaluated at various temperatures.

* popov13@uniba.sk

† leonid.satrapinskyy@fmph.uniba.sk

2. Results and discussion:

It was found that our setup with partial coverage produces a non-uniform element distribution (Figure 2), with concentrations varying depending on the sample's distance from the center. The lowest concentrations of sputtered elements and the highest silicon content were observed at the edges of the deposition area. To ensure a more homogeneous composition, samples were positioned within a 2 cm radius from the center, where the elemental distribution was approximately uniform.

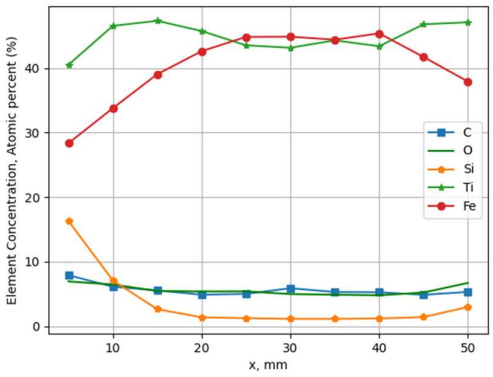


Fig. 2 Concentration distribution in a perpendicular direction to Fe strip.

After sputtering, the resulting films had a thickness of approximately 1000 nm. The iron content varied around at% 50, while the titanium content remained near at% 40. The films exhibited a relatively uniform distribution of elements, though slight compositional variations were observed depending on the deposition parameters and substrate position. The surface morphology of the films appeared smooth with no visible cracks or defects before further processing.

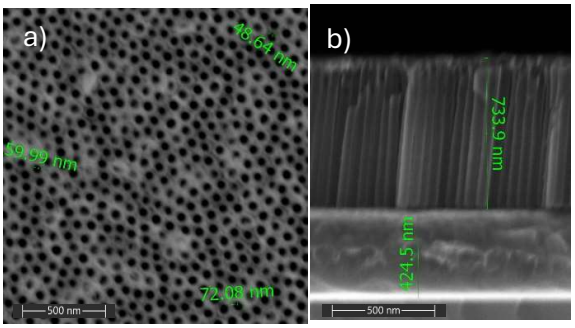


Fig. 3 Electron microscope images of a Ti-Fe nanotube array: topographic view with tube diameter measurement (a), cross-section of the anodized layer (b).

After the anodization process, well-ordered nanotube arrays with lengths ranging from 300 to 800 nm were observed (Figure 3.b). These nanotubes' inner diameter was approximately 50 nm (Figure 3.a). Additionally, small "bridge" connections were observed between the nanotubes, which may have formed due to partial dissolution or localized variations in the oxidation rate. The composition of the nanotubes array was at% 25 Ti, at% 19 Fe, and at% 29 O. Additionally, fluorine was detected in the samples. The relative content of titanium was increased due to iron oxide partial dissolution. The ratio of metals (Ti + Fe) to oxygen is significantly different from 1:2, what probably means insufficient oxidation. Notably, some residual precursor film is present (*Figure 2.b*), due to the reaction of silicon substrate with fluorine, which limited the oxidation time.

As-oxidized nanotube arrays exhibited an amorphous structure [2], which is supposed to transform into a crystalline structure upon heat treatment. Nevertheless, XRD analysis of the annealed sample didn't show any significant Rutile or Anatase peaks (Fig. 4). suggesting that the applied heat treatment did not lead to polycrystalline structure formation. This could indicate that the annealing time was insufficient to induce substantial structural changes.

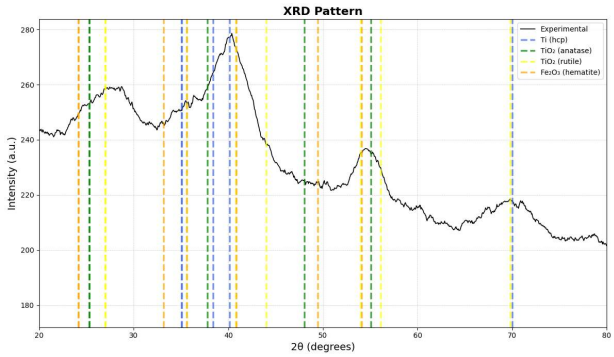


Fig. 4 GIXRD pattern of annealed sample

After annealing in a furnace, samples were tested as hydrogen sensors. During testing, the material exhibited semiconductor-like behavior, with its electrical properties responding to temperature variations. However, as shown in Figure 5, increasing the hydrogen concentration did not result in a significant change in electrical resistance. As the hydrogen concentration increased to 1000 ppm,

the resistance changed by approximately an order of magnitude. The noticeable change in electrical properties as a function of temperature suggests that the material's conductivity is primarily governed by thermal effects rather than hydrogen adsorption or interaction.

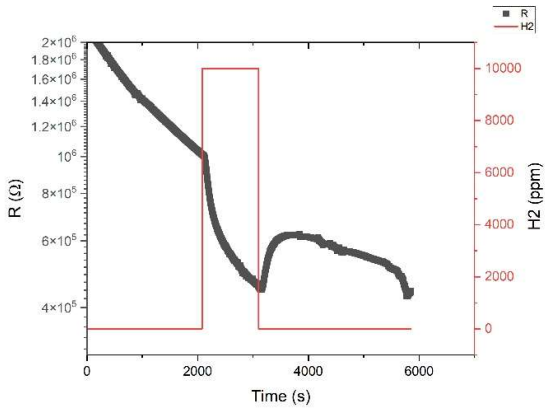


Fig. 5 Change in electrical resistance of a sample depending on time when the hydrogen concentration changes by 1000 ppm.

3. Conclusions

The study investigated the fabrication, oxidation, and annealing of iron-doped titanium nanotubes, focusing on their structural, morphological, and electrochemical properties. The following key conclusions were drawn:

1. **Formation of uniform Nanotube Arrays During Anodization:**
   Well-ordered Ti-Fe nanotube arrays with lengths ranging from 300 to 700 nm and inner diameters of approximately 50-60 nm were successfully obtained. Ti:Fe ratio was near 1:1, with an oxygen concentration of ~30 at%. The presence of silicon limited complete oxidation by inducing partial etching.
2. **Crystallization and Semiconductor Behavior After Annealing:**
   XRD analysis revealed that the diffraction patterns after oxidation and after annealing did not significantly differ. This indicates that the annealing time may have been insufficient to complete crystallization.
3. **Hydrogen Sensing Properties:**
   Iron-doped titanium nanotubes showed some response to hydrogen gas. Further optimization of the annealing process or material composition may lead to enhanced hydrogen sensitivity.

Overall, the results suggest that while iron-doped titanium nanotubes can be effectively synthesized and structured through anodization, their sensing properties require further tuning, potentially through modified annealing conditions or workflow adjustment.

4. References

[1] Grimes, C. A., & Mor, G. K. (2009). *TiO2 nanotube arrays: synthesis, properties, and applications*. Springer Science & Business Media.

[2] Makarov, H., Satrapinskyy, L., Vidiš, M., Roch, T., Plesch, G., and Mikula, M. (2023). Ti-Mo-O nanotube arrays grown by anodization of magnetron sputtered films. Coatings, 13(8), 1309.

[3] Motola, M.; Satrapinskyy, L.; Roch, T.; Šubrt, J.; Kupčík, J.; Klementová, M.; Jakubičková, M.; Peterka, F.; Plesch. (2017). G. Anatase TiO_2 nanotube arrays and titania films on titanium mesh for photocatalytic NOX removal and water cleaning. Catal. Today, 28, 59–64.

[4] Motola, M.; Satrapinskyy, L.; Čaplovicová, M. (2018). Intrinsic properties of high-aspect ratio single- and double-wall anodic TiO_2 nanotube layers annealed at different temperatures. Appl. Surf. Sci., 434, 1257–1265.

[5] Guo, M.; Gao, Y. Shao. (2016). Intrinsic properties of high-aspect ratio single- and double-wall anodic TiO_2 nanotube layers annealed at different temperatures. Phys. Chem. Chem. Phys., 18, 2818–2829.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 189–196
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Boris Gajdušek, Veronika Hidaši Turiničová

Vplyv nehomogénneho elektrického poľa generovaného nabitým hydroxyapatitom na visiacu kvapku

Boris Gajdušek[1*] Veronika Hidaši Turiničová[1†‡]

Centrum nanotechnológií a pokročilých materiálov, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt: Hydroxyapatit je anorganický biomateriál prirodzene sa vyskytujúci v kostiach a zuboch. Vďaka svojej vysokej biokompatibilite sa bežne využíva, napr. v kostných náhradách. Štúdie navyše ukazujú, že elektrická modifikácia môže viesť na zvýšenie jeho bioaktivity a potenciálne urýchliť regeneráciu kostných poranení. V tejto práci bol hydroxyapatit modifikovaný elektrónovým lúčom v skenovacom elektrónovom mikroskope. V dôsledku jeho dielektrických vlastností sa elektrický náboj z elektrónového lúča (rádovo 10^{-9} C) zachytával v povrchovej vrstve s hrúbkou niekoľkých mikrometrov. Takto nabitá vzorka bola umiestnená pod visiacu kvapku deionizovanej vody na podstavec so známou permitivitou. Keďže nabitá oblasť mala konečné rozmery, generovala nehomogénne elektrické pole, a to modifikovalo pôvodný rovnovážny tvar kvapky. Pod vplyvom elektrického poľa dochádzalo najmä k vertikálnemu naťahovaniu kvapky, pričom miera tejto deformácie rástla so zvyšujúcou sa intenzitou poľa. V našej štúdii sme zmenu intenzity pôsobiaceho elektrického poľa dosiahli zmenou vzdialenosti nabitej vzorky a použitím podstavcov s rôznymi dielektrickými vlastnosťami. V rámci experimentov boli analyzované podstavce vyrobené zo siedmich materiálov: polyvinylchlorid (ε = 3,3), polymetylmetakrylát (ε = 3,1), teflón (ε = 2,1), silón (ε = 3,9), voda (ε = 80) a z kovov, medi a hliníku. Experimenty potvrdili, že dielektrické vlastnosti podstavcov majú zásadný vplyv na mieru deformácie kvapky v elektrickom poli. Merania tiež ukázali vplyv triboelektrického nabíjania väčšiny dielektrických materiálov, pričom jediným materiálom bez prejavov triboelektrického efektu bol silón.

Kľúčové slová: Hydroxyapatit, visiaca kvapka, elektrické pole, permitivita

1 Úvod

Výskum biomateriálov vhodných pre implantovanie do ľudského tela predstavuje obzvlášť komplexné odvetvie. Pri vývoji je totiž potrebné adresovať okrem zamýšľanej funkcionality implantátu aj jeho biokompatibilitu a bioaktivitu. Neuváženie týchto aspektov môže viesť na obmedzenie implantátu, či spôsobiť zdravotné komplikácie a vyvolať nežiadúce imunitné odpovede (napr. zápal) [Tofail, 2012]. Keďže prvotné reakcie medzi telesnými zložkami a implantátom prebiehajú na povrchu, povrchové vlastnosti a ich modifikácia predstavujú kľúčovú oblasť biomateriáloveho výskumu. Medzi vhodné metódy úpravy povrchov patrí elektrická modifikácia, ktorá preukázateľne ovplyvňuje bioaktivitu vybraných biomateriálov [Tofail, 2012]. Keďže elektrostatické interakcie a zmeny elektrického potenciálu na povrchu zohrávajú zásadnú úlohu v procese adhézie buniek a proteínov [Plecenik et al., 2012][Robin et al., 2011], elektrická modifikácia môže výrazne ovplyvniť ich adsorpciu na povrch materiálu.

Hydroxyapatit (HAp) je keramický dielektrický biomateriál, prirodzene sa vyskytujúci v kostiach a zuboch. Je vysoko biokompatibilný a bioaktívny, vďaka čomu nachádza široké uplatnenie v medicíne. Navyše vďaka svojim elektrickým vlastnostiam, vrátane vysokej permitivity, možnej ferroelektrickej orientácie a piezoelektricity, predstavuje vhodného kandidáta na elektrickú modifikáciu.[Aronov et al., 2008][Lang et al., 2013] Tá sa môže realizovať predovšetkým ožarovaním elektrónovým lúčom, pričom experimentálne štúdie preukázali, že elektrónové ožarovanie HAp umožňuje kontrolovať adhéziu rôznych typov ľudských buniek, proteínov a baktérií.[Plecenik et al., 2012][Robin et al., 2011]

V našej práci skúmame elektrickú modifikáciu hydroxyapatitu ožarovaného v skenovacom elektrónovom mikroskope. Keďže nabitá oblasť má konečné rozmery, generované pole je nehomogénne a jeho intenzita sa mení so vzdialenosťou. Navyše intenzitu elektrického poľa vieme modulovať aj zme-

*gajdusek4@uniba.sk
†veronika.turinicova@fmph.uniba.sk
‡Školiteľ

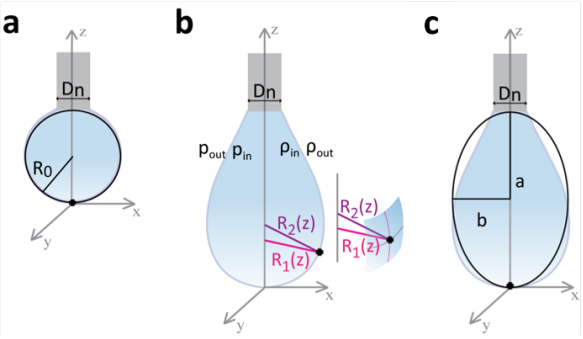
nou tvaru materiálu podstavca, na ktorom je modifikovaná vzorka umiestnená a ktorý toto pole čiastočne odtieňuje. V našej práci sú tieto zmeny skúmané metódou visiacej kvapky, ktorá je založená na analýze osovosymetrickej kvapky visiacej z ihly v gravitačnom poli a štandardne sa využíva na meranie povrchového napätia kvapalín. Umiestnením nabitej vzorky pod visiacu kvapku pridáme do tohto systému dodatočné elektrické pole, ktoré kvapku polarizuje a nať ahuje [Gong and Peng, 2008][Kim et al., 2007]. Táto tvarová deformácia sa pri meraní metódou visiacej kvapky prejavuje ako zdanlivá zmena povrchového napätia [Bateni et al., 2004]. Nakoľko sa jedná o merateľnú veličinu, môžeme pomocou nej sledovať zmeny intenzity elektrického poľa vplyvom podstavcov alebo vzdialenosti medzi nabitou vzorkou a visiacou kvapkou. V práci sa postupne zameriame na štyri dielektrické podstavce, dva kovové podstavce a jedno meranie nad vodnou hladinou.

2 Visiaca kvapka

Metóda visiacej kvapky (z anglického Pendant drop method) sa využíva na skúmanie povrchového napätia kvapaliny v okolitej atmosfére. Princíp spočíva v analýze rovnovážneho tvaru osovosymetrickej kvapky (ASDA – Axisymmetric Drop Shape Analysis), ktorá visí z ihly v gravitačnom poli Zeme. Technika zahŕňa zaznamenanie tvaru kvapky a následné numerické fitovanie jej tvaru. Najčastejšie sa používa na meranie voľného povrchového napätia (SFT – Surface Free Tension) nových kvapalín, ako aj na sledovanie zmien SFT vplyvom vyparovania, zmien okolitého prostredia či vonkajších síl a polí. Povrchové napätie vyjadruje množstvo energie potrebnej na vytvorenie jednotkovej plochy rozhrania medzi dvoma nemiešateľnými kvapalinami alebo medzi kvapalinou a plynom.

2.1 Visiaca kvapka v gravitačnom poli

Kvapaliny sa prirodzene snažia minimalizovať svoju povrchovú energiu redukciou svojho povrchu. Preto kvapka, na ktorú nepôsobí žiadna vonkajšia sila, nadobúda guľový tvar, ako je znázornené na Obr. 1 (a). Vplyvom gravitačnej sily sa však jej tvar mení na hruškovitý, podobne ako na Obr. 1 (b). Tento tvar vzniká ako dôsledok rovnováhy medzi gravitačnou silou a povrchovým napätím. Pri malých objemoch prevláda tendencia minimalizovať povrchovú ener-



Obr. 1: (a) Visiaca kvapka malého objemu takmer sférického tvaru s polomerom krivosti R_0. (b) Visiaca kvapka väčšieho objemu natiahnutá vplyvom gravitačného poľa. $R_1(z)$ a $R_2(z)$ sú polomery krivosti v bode z, p_{in} a p_{out} sú vnútorný a vonkajší tlak, ρ_{in} a ρ_{out} sú hustoty kvapaliny, ktorá tvorí kvapku a vzduchu v okolí kvapky. (c) Aproximácia kvapky hruškovitého tvaru elipsoidom s polosami a a b. Dn je polomer ihly.

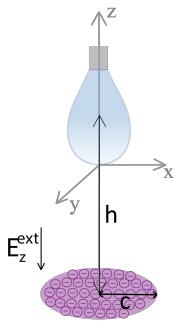
giu, čím kvapka udržiava sférický tvar. S rastúcim objemom začína dominovať gravitačná sila, v dôsledku čoho kvapka nadobúda natiahnutý tvar, ktorý môžeme aproximovať elipsoidom, ako je znázornené na Obr. 1 (c). Rovnovážny stav kvapky je opísaný Young-Laplaceovou rovnicou:

$$\gamma\left(\frac{1}{R_1(z)}+\frac{1}{R_2(z)}\right)=\Delta p(z)= \\ =(p_{in}-p_{out})-(\rho_{in}gz-\rho_{out}gz), \quad (1)$$

kde γ je povrchové napätie (SFT), z je súradnica polohy, $R_1(z)$ a $R_2(z)$ sú polomery krivosti v danom bode z, Obr. 1 (b), a $\Delta p(z)$ predstavuje rozdiel medzi rozdielom vnútorného a vonkajšieho molekulárneho tlaku $(p_{in}-p_{out})$ a rozdielom hydrostatických tlakov vo vnútri a mimo kvapky $(\rho_{in}gz-\rho_{out}gz)$. ρ_{in} a ρ_{out} označujú hustoty kvapaliny vo vnútri a mimo kvapky a g je gravitačné zrýchlenie.[Berry et al., 2015] [Rusanov and Prokhorov, 1996] [Chen et al., 2017]

2.2 Visiaca kvapka v elektrickom poli

Keď kvapku umiestnime do elektrického poľa, dôjde k jej polarizácii. Miera polarizácie závisí od vlastností kvapaliny, ako sú dipólový moment a atómová polarizovateľnosť molekúl tvoriacich kvapalinu, prítomnosť a koncentrácia rôznych katiónov a aniónov, ako aj od vlastností okolitého prostredia. Pre zjedno-



Obr. 2: Kvapka visiaca nad nabitou kruhovou plochou polomeru c, h je vzdialenosť stredu nabitej plochy od stredu kvapky. E_z^{ext} je nehomogénne elektrické pole generované nabitou vzorkou.

dušenie sa budeme zaoberať systémom deionizovanej vody vo vzduchu. Tým môžeme zanedbať vplyv iónov a voľných nábojov v kvapke a jej okolí, budeme sa sústrediť výlučne na polarizáciu atómov vnútri kvapky.

Uvažujme teraz nehomogénne elektrické pole $E^{ext}(x,y,z)$, ktoré je generované rovnomerne nabitou kruhovou plochou s polomerom c, viď Obr. 2. Jeho intenzita bude závisieť od polohy v rámci kvapky. Polarizácia kvapky je úmerná vonkajšiemu poľu, teda $\vec{P}(x,y,z) \propto \vec{E}^{ext}(x,y,z)$. To znamená, že aj polarizácia sa mení v závislosti od polohy. Vzhľadom na to, že táto závislosť by značne komplikovala analýzu, použijeme zjednodušenie.[Turiničová et al., 2023] Budeme uvažovať len hodnotu elektrického poľa $E_z^{ext}(h)$ v strede kvapky. Túto hodnotu vypočítame pomocou vzťahu, ktorý predstavuje intenzitu elektrického poľa homogénne nabitej kruhovej plochy s polomerom c vo vzdialenosti h

$$E_z^{ext}(h) = -\frac{\zeta h}{2\varepsilon_0\varepsilon_2}\left(\frac{1}{h} - \frac{1}{\sqrt{c^2+h^2}}\right), \qquad (2)$$

kde ζ predstavuje plošnú hustotu náboja Q, h je vzdialenosť stredu kvapky od stredu vzorky, ε_0 je permitivita vákua a $\varepsilon_2 = 1{,}0006$ je relatívna permitivita vzduchu [Hector and Schultz, 1936].

Nehomogenita elektrického poľa spôsobuje, že odpudivé sily pôsobiace na hornú časť kvapky sú menšie ako príťažlivé sily v jej dolnej časti. V dôsledku toho je ťažisko kvapky ťahané nadol elektrostatickou silou. Veľkosť elektrostatickej sily narastá s klesajúcou vzdialenosťou h. To znamená, že ak sa nabitá vzorka kriticky priblíži ku kvapke, dochádza až k odtrhnutiu kvapky od ihly. Keďže metóda visiacej kvapky je založená na fitovaní tvaru kvapky pomocou rovnice (1), tvarové zmeny spôsobené elektrickým poľom sú interpretované ako zmena SFT. V skutočnosti sa však materiálový parameter SFT nemení a rovnicu (1) treba upraviť pridaním dodatočného tlakového člena

$$\gamma_0\left(\frac{1}{R_1(z)} + \frac{1}{R_2(z)}\right) = \Delta p(z) = \\ = (p_{in} - p_{out}) - (\rho_{in} g z - \rho_{out} g z) + \Delta p_e(z), \quad (3)$$

kde $\Delta p_e(z) \propto E_z^{ext}(h)$ je elektrostatický tlak. Ak by sa v bežných softvéroch na analýzu visiacej kvapky používala rovnica (3), fitovanie tvaru kvapky by viedlo na štandardnú hodnotu SFT γ_0 = 71,99 mN/m pre deionizovanú vodu vo vzduchu pri 25 °C[Vargaftik et al., 1983][Turiničová et al., 2023] [Gong and Peng, 2008][Mhatre et al., 2019].

3 Experimentálne metódy

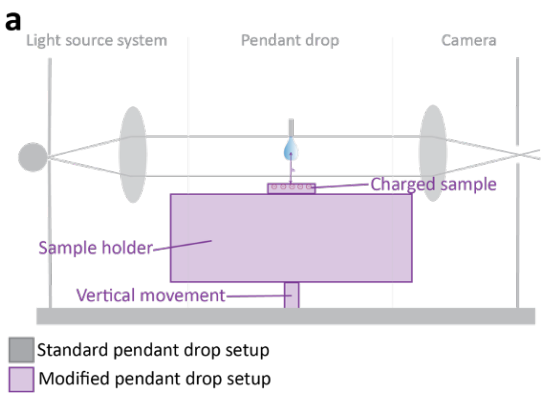
Skúmané vzorky HAp boli pripravené iskrovým plazmovým spekaním pri teplote 900°C. Výsledné vzorky sú kruhového tvaru s priemerom 1 cm a hrúbkou 1 mm. Presnejší postup, prípravy a vlastnosti vzoriek sú popísané v [Gandhi et al., 2010].

3.1 Nabíjanie vzoriek

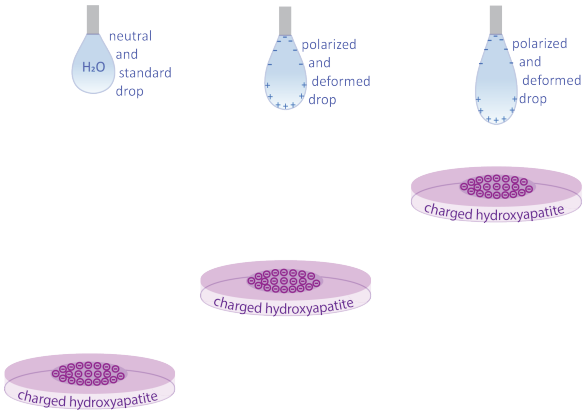
Vzorky boli nabíjané elektrónovým lúčom v skenovacom elektrónovom mikroskope (SEM). Použitím SEM s možnosťou elektrónovej litografie (Tescan Vega II) sme boli schopní presne nastaviť veľkosť ožarovanej plochy a dávku elektrónov. Ožarovali sme kruhovú plochu s polomerom c = 2350 μm. Detailné parametre nabíjania pre jednotlivé vzorky sú uvedené v Tab. 1. Nabíjaciu dávku sme rozdelili do desiatich skenov. Tlak v komore mikroskopu a urýchľovacie napätie boli pre všetky merania rovnaké, a to 10^{-3} Pa a 30 kV.

Tabuľka 1: Parametre nabíjanie vzoriek HAp.

Dávka $[\mu C/cm^2]$	**Prúd** $[pA]$	**Priemer lúču** $[nm]$	**Čas expozície** $[s]$	**Vzorky**
1,0	200	160	834	A
0,10	100	46	867	B
0,05	50	81	166	C



Obr. 3: Schéma meracej zostavy používanej na určenie povrchového napätia (SFT) pomocou metódy visiacej kvapky.



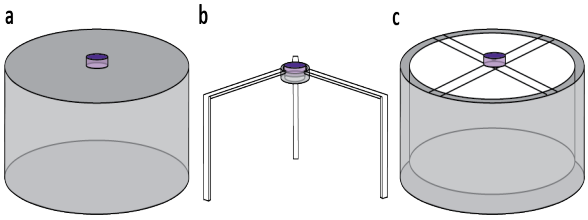
Obr. 4: Schématická ilustrácia kvapky visiacej nad nabitou vzorkou pri rôznych vzdialenostiach h medzi vzorkou a kvapkou. Vľavo $h \approx 100$ mm, v strede $h \approx 10$ mm, vpravo $h \approx 5$ mm. Pri poklese vzdialenosti h sa príťažlivosť kvapky k nabitej vzorke zvyšuje. Dôsledkom tohto je predĺženie kvapky a zdanlivý pokles SFT.

3.2 Meranie metódou visiacej kvapky v elektrickom poli

Merania visiacej kvapky v elektrickom poli boli realizované pomocou zostavy Pendant drop (Krüss DSA) znázornenej na Obr. 3. Vlhkosť okolitého vzduchu bola približne 45 - 50% a teplota bola udržiavaná na približne 24°C. Nabité vzorky HAp boli umiestnené priamo pod kvapku na držiaku s nastaviteľnou vertikálnou polohou. Stred kvapky bol zarovnaný so stredom vzorky, čo zodpovedá stredu nabitého kruhu. Postup typického merania je zobrazená na Obr. 4. Nabité vzorky boli najprv umiestnené ďaleko od kvapky ako na Obr. 4 vľavo, kde $h \approx 100$ mm. V takejto vzdialenosti je elektrické pole v blízkosti kvapky zanedbateľné a kvapka pociťuje iba gravitačné pole. V takejto situácii má povrchové napätie kvapky štandardnú hodnotu $\gamma_0 \approx 71{,}99$ mN/m. Ako sa vzdialenosť h medzi nabitou vzorkou a kvapkou znižuje, pozorujeme, že kvapka sa predlžuje, ako je vidno na Obr. 4 a povrchové napätie SFT merané softvérom ImageJ s pluginom Pendant drop klesá. [Daerr and Mogne, 2016] Predĺženie kvapky a postupný pokles SFT sú dôsledkom toho, že kvapka stále viac pociťuje príťažlivú elektrickú silu vytvorenú zachyteným nábojom.

3.3 Materiály a geometrie podstavcov

Ako už bolo uvedené, podstavce použité pri meraniach môžu ovplyvniť elektrické pole generované nabitou vzorkou. Konkrétne dochádza k jeho tieneniu, ktorého efekt určuje permitivita materiálu ε. Čím vyššia je hodnota ε, tým viac je elektrické pole tienené.



Obr. 5: (a) Podstavec valcového tvaru. (b) Prstencový podstavec, vzorka sedí v strede prstenca. (c) Podstavec so silónovými niťami, ktorého vnútro je prázdne. Pri používaní vzorka sedí na nitiach v strede podstavca.

V Tab. 2 sú uvedené použité materiály spolu s ich relatívnymi permitivitami. Na Obr. 5 (a) je znázornený valcovitý podstavec, ktorý bol v experimentoch použitý najčastejšie. Alternatívne konštrukcie podstavcov zobrazené na Obr. 5 (b) a Obr. 5 (c) boli navrhnuté tak, aby simulovali podmienky, v ktorých vzorka levituje. Všetky tri podstavce majú výšku okolo 5 cm a priemer 9 cm. Keďže vzduch má dielektrickú konštantu $\varepsilon \approx 1$, elektrické pole by v takomto prípade nemalo byť vôbec tienené a elektrická sila pôsobiaca na kvapku by mala byť vyššia väčšia. Pre zjednodušenie terminológie budeme podstavec zobrazený na Obr. 5 (b) označovať ako „prstenec“ a podstavec na Obr. 5 (c) ako „nite“.

Tabuľka 2: Materiály, ich relatívna permitivita a tvar použitých podstavcov

Materiál	ε	**Tvar podstavca**
PMMA	3,1	Valec
PTFE	2,1	Valec
PVC	3,3	Valec
Silón	3,9	Valec, prstenec, nite
Cu	∞	Valec
Al	∞	Valec
H_2O	80	Valec

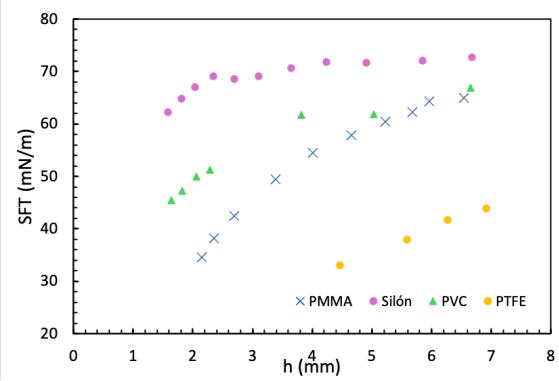
4 Výsledky a diskusia

Táto kapitola je rozdelená do troch sekcií, v ktorých postupne prezentujeme merania povrchového napätia ako funkcie vzdialenosti h pri meraniach s rôznymi podstavcami popísanými v kapitole 3.3. Prvá časť je zameraná na porovnanie siedmich valcových podstavcov a na triboelektrický efekt, ktorý vplýva na výsledky meraní. V druhej časti sa pozrieme na merania na podstavcoch, ktorých geometria bola zvolená tak, aby simulovala levitujúcu vzorku vo vzduchu. Na záver odprezentujeme merania nad vodnou hladinou.

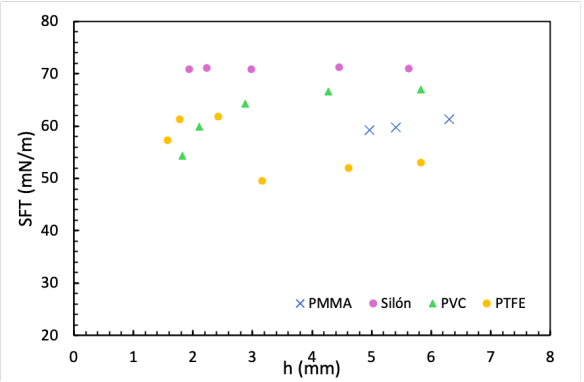
4.1 Porovnanie podstavcov z rôznych materiálov

V tejto časti sa pozrieme na vplyv materiálov z Tab. 2 na mieru deformácie kvapky. Všetky merania v tejto sekcii prebiehali na podstavcoch tvaru valca zobrazeného na Obr. 5 (a). Použitá vzorka bola nabitá rovnakými parametrami ako vzorka A z Tab. 1 . Výsledky meraní na dielektrických podstavcoch sú zobrazené na Obr. 6. Môžeme vidieť, že pri PTFE hodnota efektívneho SFT so zmenšujúcou sa vzdialenosťou h klesá najrýchlejšie. Zvyšné merania vykazujú miernejší pokles efektívneho SFT. Poradie kriviek je v zhode s hodnotami relatívnych permitivít uvedených v Tab. 2, čo zodpovedá narastajúcemu tieneniu elektrického poľa pôsobiaceho na analyzovanú visiacu kvapku.

Tým, že sme pracovali s dielektrikami, sme sa rozhodli preskúmať triboelektrické nabíjanie podstavcov, ktoré by mohlo značne ovplyvniť naše meranie. Pri meraní sme nepoužívali nabité vzorky HAp, ale len samotné podstavce vyrobené z rozličných dielektrík. Týmto spôsobom sme dokázali zmerať, či sa na



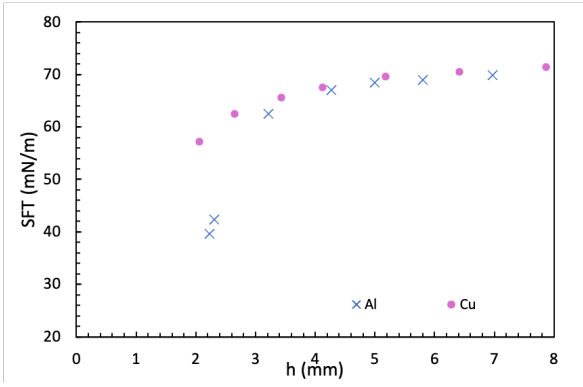
Obr. 6: Meranie SFT(h) ako funkcie vzdialenosti h na podstavcoch z dielektrických materiálov. Vzorky HAp boli nabité dávkou 1,0 $\mu C/cm^2$.



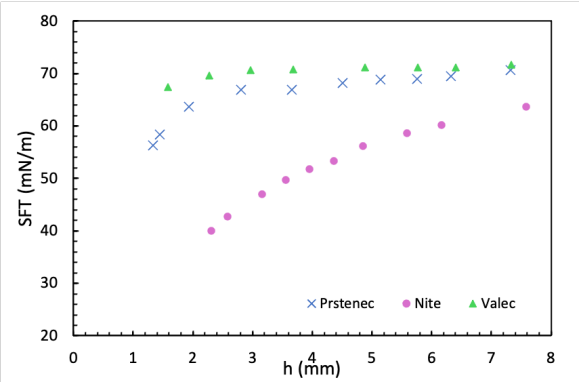
Obr. 7: Meranie SFT(h) na samotných dielektrických podstavcoch bez nabitej vzorky.

podstavcoch nachádza voľný náboj, ktorý taktiež generuje elektrické pole vplývajúce na sledovaný tvar visiacej kvapky. Z Obr. 7 môžeme vidieť, že približovanie podstavcov z PTFE, PVC a PMMA spôsobuje pokles SFT. To preukazuje prítomnosť voľného náboja na povrchu samotných podstavcov. Jediný podstavec, ktorý neovplyvnil hodnotu SFT bol vyrobený zo silónu. Kvôli tomu sme ho vybrali ako materiál pre ďalšie merania, ktorých výsledky sú v sekcii 4.2.

Ako ďalšie sme analyzovali podstavce z medi (Cu) a hliníku (Al). Na Obr. 8 vidíme, že pokles SFT bol pri medenom podstavci menší ako pri hliníkovom, avšak pri oboch podstavcoch kleslo SFT výrazne pod štandardnú hodnotu 71,99 mN/m. Tento výsledok je v rozpore s našou predstavou, ktorá predpokladala výrazné až úplné odtienenie elektrického poľa nabitej vzorky, z dôvodu nekonečnej permitivity.



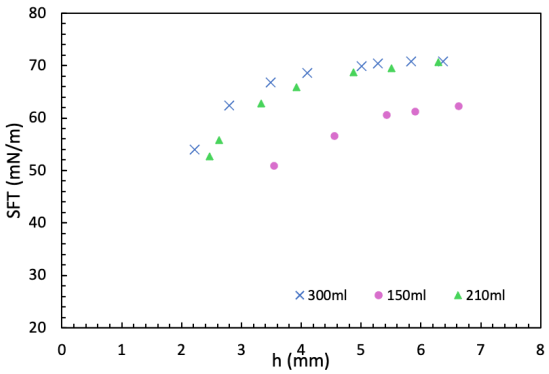
Obr. 8: Meranie SFT(h) ako funkcie vzdialenosti h na podstavcoch z kovov. Vzorky HAp boli nabité dávkou 1,0 $\mu C/cm^2$.



Obr. 9: Meranie SFT(h) ako funkcie vzdialenosti na podstavcoch zo silónu rôznych tvarov. Vzorky HAp boli nabité dávkou 0,05 $\mu C/cm^2$.

4.2 Analýza vplyvu geometrie podstavcov

Nakoľko merania z predchádzajúcej kapitoly ukázali, že všetky dielektrické podstavce okrem silónu sa ľahko triboelektrizujú, a tým vnášajú do meraní dodatočný elektrický náboj, ďalšie experimenty boli realizované výlučne na silónových podstavcoch. Tu budeme používať silónové podstavce troch rôznych tvarov, viď Obr. 5. Cieľom použitia podstavcov s minimalizovaným objemom bolo simulovať situáciu, kde nabitá vzorka levituje vo vzduchu s permitivitou $\varepsilon = 1$ V tomto experimente bola použitá vzorka C, nabitá podľa parametrov uvedených v Tab. 1. Na Obr. 9 vidíme, že pokles SFT(h) je najvýraznejší pre podstavec nite, následne pre prstenec a nakoniec najnižší pokles pre valec. Tento výsledok potvrdzuje, že plný silónový valec vplýva na meranie deformácie tvaru visiacej kvapky v poli nabitého hydroxyapatitu najviac. Čo je však zaujímavé, je výrazný rozdiel medzi meraním na prstenci a na nitiach. Oba podstavce majú výrazne redukovaný objem dielektrického materiálu, avšak ukazuje sa, že prstenec stále produkuje výrazné tienenie.



Obr. 10: Meranie SFT(h) ako funkcie vzdialenosti na podstavci nite s rôznymi vzdialenosťami medzi vodnou hladinou od vzorkou. 300 ml zodpovedá vzialenosti hladiny od vzorky 0,2 cm, 210 ml $\approx$ 1,8 cm a 150 ml $\approx$ 2,9 cm. Vzorky HAp boli nabité dávkou 0,1 $\mu C/cm^2$.

4.3 Meranie nad vodnou hladinou

Ako posledné sme sa rozhodli uskutočniť meranie nad vodnou hladinou, pri ktorom sa do podstavca so silónovými niťami postupne dolievala deionizovaná voda s permitivitou $\varepsilon = 80$ [Archer and Wang, 1990]. Následne experimenty prebiehali rovnako ako v predchádzajúcej podkapitole - nabitá vzorka bola umiestnená na stred silónových nití a podstavec so vzorkou bol približovaný k visiacej kvapke. Vzorka bola nabitá rovnako ako vzorka B v Tab. 1. Dolievaním deionizovaniej vody do podstavca sa zmenšovala vzdialenosť medzi vodnou hladinou a spodkom vzorky. Z Obr. 10 vidíme, že pri 150 ml, kedy je vzdialenosť medzi hladinou a spodom nabitej vzorky najvyššia, je pokles SFT najvýraznejší a postupným nárastom hladiny sa pokles SFT značne zmenšuje. Tento výsledok ukazuje, že nárastom objemu deionizovanej vody a/alebo priblížením hladiny k nabitej vzorke, narastá miera tienenia elektrického poľa.

Záver

V tejto práci sme porovnali vplyv podstavcov z rôznych materiálov s rôznymi permitivitami na mieru deformácie visiacej kvapky. Ukázali sme, že natiahnutie kvapky elektrickým poľom klesá s rastúcou permitivitou podstavca, na ktorom je nabitá vzorka počas merania umiestnená. Použitím dvoch podstavcov s minimalizovaným objemom materiálu sme simulovali vzorku levitujúcu vo vzduchu bez tienenia. Výsledky však ukázali, že tienenie pri vzorke položenej na tenkom prstenci bolo výrazne silnejšie ako pri vzorke položenej na tenkých nitiach. Nakoniec sme sa pozreli na zmenu pola v dôsledku pridávania vody pod nabitú vzorku. Týmto sa nám podarilo ukázať, že na deformácie kvapky vplýva zmena okolitého materiálu aj z väčších vzdialeností. Do budúcna by bolo našim cieľom vysvetliť vplyv kovových podstavcov na naše merania, ktorých správanie bolo v rozpore s predpokladaným úplným odtienením elektrického poľa vzorky.

Poďakovanie

Táto práca bola podporená grantami Univerzity Komenského UK/158/2022 a UK/288/2023.

Literatúra

[Archer and Wang, 1990] Archer, D. G. and Wang, P. (1990). The dielectric constant of water and debye-hückel limiting law slopes. *Journal of physical and chemical reference data*, 19(2):371–411.

[Aronov et al., 2008] Aronov, D., Rosen, R., Ron, E., and Rosenman, G. (2008). Electron-induced surface modification of hydroxyapatite-coated implant. *Surface and Coatings Technology*, 202(10):2093–2102.

[Bateni et al., 2004] Bateni, A., Susnar, S., Amirfazli, A., and Neumann, A. (2004). Development of a new methodology to study drop shape and surface tension in electric fields. *Langmuir*, 20(18):7589–7597.

[Berry et al., 2015] Berry, J. D., Neeson, M. J., Dagastine, R. R., Chan, D. Y., and Tabor, R. F. (2015). Measurement of surface and interfacial tension using pendant drop tensiometry. *Journal of colloid and interface science*, 454:226–237.

[Chen et al., 2017] Chen, H., Muros-Cobos, J. L., Holgado-Terriza, J. A., and Amirfazli, A. (2017). Surface tension measurement with a smartphone using a pendant drop. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 533:213–217.

[Daerr and Mogne, 2016] Daerr, A. and Mogne, A. (2016). Measuring liquid surface tension through the pendent drop method: Description of a measurement bench and an imagej plugin. *J. Open Res. Softw*, 4(1):1–12.

[Gandhi et al., 2010] Gandhi, A. A., Gunning, R. D., Ryan, K. M., and Tofail, S. A. (2010). The role of texturing and densification on optical transmittance of hydroxyapatite ceramics. *Journal of the American Ceramic Society*, 93(11):3773–3777.

[Gong and Peng, 2008] Gong, H. and Peng, Y. (2008). Polarization characteristic of droplet of water-in-oil emulsion in a high uniform electric field. In *2008 International Workshop on Modelling, Simulation and Optimization*, pages 139–142. IEEE.

[Hector and Schultz, 1936] Hector, L. and Schultz, H. (1936). The dielectric constant of air at radiofrequencies. *Physics*, 7(4):133–136.

[Kim et al., 2007] Kim, Y.-J., Ko, H. S., Lee, S., Son, S. U., Jung, D., and Byun, D. (2007). Numerical and experimental analysis of electrostatic ejection of liquid droplets. *JOURNAL-KOREAN PHYSICAL SOCIETY*, 51:S42.

[Lang et al., 2013] Lang, S., Tofail, S., Kholkin, A., Wojtaś, M., Gregor, M., Gandhi, A., Wang, Y., Bauer, S., Krause, M., and Plecenik, A. (2013). Ferroelectric polarization in nanocrystalline hydroxyapatite thin films on silicon. *Scientific reports*, 3(1):2215.

[Mhatre et al., 2019] Mhatre, S., Simon, S., and Sjöblom, J. (2019). Methodology to calculate interfacial tension under electric field using pendent drop profile analysis. *Proceedings of the Royal Society A*, 475(2225):20180852.

[Plecenik et al., 2012] Plecenik, T., Robin, S., Gregor, M., Truchly, M., Lang, S., Gandhi, A., Zahoran, M., Laffir, F., Soulimane, T., Vargova, M., et al. (2012). Directly created electrostatic micro-domains on hydroxyapatite: probing with a kelvin force probe and a protein. *Journal of Materials Science: Materials in Medicine*, 23:47–50.

[Robin et al., 2011] Robin, S., Gandhi, A. A., Gregor, M., Laffir, F. R., Plecenik, T., Plecenik, A., Soulimane, T., and Tofail, S. A. (2011). Charge specific protein placement at submicrometer and nanometer scale by direct modification of surface potential by electron beam. *Langmuir*, 27(24):14968–14974.

[Rusanov and Prokhorov, 1996] Rusanov, A. I. and Prokhorov, V. A. (1996). *Interfacial tensiometry*. Elsevier.

[Tofail, 2012] Tofail, S. (2012). *Biological Interactions with surface charge in biomaterials*. Number 21. Royal Society of Chemistry.

[Turiničová et al., 2023] Turiničová, V., Moško, M., Ďurina, P., Tofail, S. A., Roch, T., and Gregor, M. (2023). Measurement of electric charge in a charged hydroxyapatite dielectric using pendant drop. *Langmuir*,

39(20):7046–7056.

[Vargaftik et al., 1983] Vargaftik, N., Volkov, B., and Voljak, L. (1983). International tables of the surface tension of water. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 12(3):817–820.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 197
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Matej Mikula, Katarína Viskupová

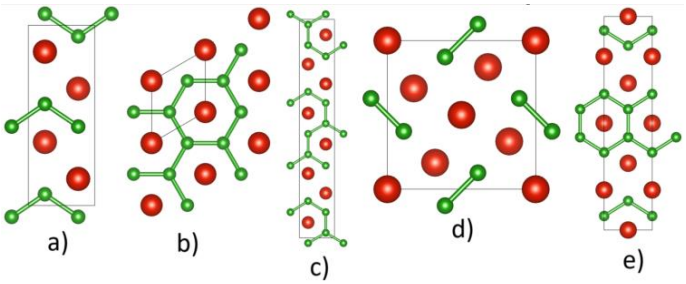
Štruktúra tvrdých VBx vrstiev pripravených magnetrónovým naprašovaním

Matej Mikula*, Katarína Viskupová[2†]
[1] Centrum nanotechnológií a pokročilých materiálov, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

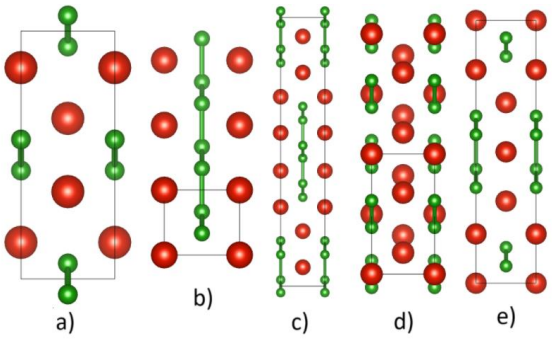
Zlúčeniny bóru s vanádom patria medzi boridy prechodových kovov (TMB_x), ktoré sú zaujímavé svojimi vlastnosťami ako vysoká tvrdosť, odolnosť voči opotrebeniu a vysokoteplotná stabilita [1]. Vďaka tomu majú potenciál pre široké uplatnenie, napríklad vo forme ochranných povlakov pre rezné nástroje v strojárstve. Vlastnosti VB_x vrstiev závisia od pomeru B/V a štruktúry. Bór v kombinácii s vanádom vytvárajú niekoľko kryštalických fáz: hexagonálnu VB_2-*P6/mmm*, ortorombické V_3B_4-*Immm*, V_5B_6–*Ammm*, V_2B_3- a VB-*Cmcm*, a tetragonálnu V_3B_2-*P4/mbm*. Cieľom tejto práce je preskúmať vplyv pomeru B/V na štruktúru a mechanické vlastnosti vrstiev.

Vzorky boli pripravované metódou magnetrónového naprašovania, kodepozíciou z vanádiového (V) a vanád diboridového (VB_2) terča. V rámci série depozícií sme menili prúd na V terči v intervale 0 až 500 mA, pričom prúd na VB_2 terči bol vo všetkých prípadoch 300 mA. Vplyvom toho sa pomer B/V vo vrstvách menil v rozsahu od 2 do 1,2. Štruktúru vrstiev sme analyzovali pomocou röntgenovej difrakčnej analýzy (XRD). Vo vzorkách s B/V > 1,3 sme pozorovali hexagonálnu *P6/mmm* fázu, pri výraznejšom poklese obsahu bóru dochádzalo k poklesu usporiadania a amorfizácii.

Vzorky boli následne podrobené vákuovému žíhaniu v rozmedzí 800 až 1200 °C. V prípade vzoriek s najvyšším obsahom bóru (VB_2) sme s teplotou pozorovali kryštalizáciu VB_2-*P6/mmm* fázy s preferenčnou 10-11 orientáciou. V ostatných prípadoch s B/V < 2 difrakčné záznamy naznačovali nad 1000 °C formovanie aj ďalších VB_x fáz. V závislosti od stechiometrie (pomer B/V) sme pozorovali fázy V_2B_3-*Cmcm*, V_3B_4-*Immm* a V_5B_6-*Ammm*. Pri najnižšom obsahu bóru ($VB_{1.2}$) dochádzalo vplyvom teploty k postupnej zmene z amorfnej na ortorombickú VB-*Cmcm* štruktúru. Čo sa týka mechanických vlastností, pridávanie vanádu malo za následok zníženie tvrdosti z 31,7 ± 1,1 GPa pre VB_2 na 25,3 ± 1,6 GPa pre $VB_{1,2}$.



Obr. 1: Atomárne štruktúry kryštalických fáz pri pohľade zhora: a) VB-*Cmcm* [100], b) VB_2-*P6/mmm* [0001], c) V_2B_3-*Cmcm* [100], d) V_3B_2-*P4/mbm* [001] a e) V_3B_4-*Immm* [100]



Obr. 2: Atomárne štruktúry kryštalických fáz pri pohľade zboku: a) VB-*Cmcm* [001], b) VB_2-*P6/mmm* [0100], c) V_2B_3-*Cmcm* [001], d) V_3B_2-*P4/mbm* [010] a e) V_3B_4-*Immm* [001]

Poďakovanie

Táto práca bola finančne podporená z grantov APVV-21-0042 a VEGA-1/0473/24.

Literatúra

[1] W.G. Fahrenholtz, G.E. Hilmas, Scr Mater 129 (2017) 94–99.

* mikula59@uniba.sk
† katarina.viskupova@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 198
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Adriana Kecerová, Pavol Ďurina, Tomáš Roch

Analýza možností využitia rezistu SU-8 na prípravu mikroštruktúr pomocou procesu pyrolýzy

Adriana Kecerová* Pavol Ďurina†§ Tomáš Roch‡
Centrum nanotechnológií a pokročilých materiálov, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

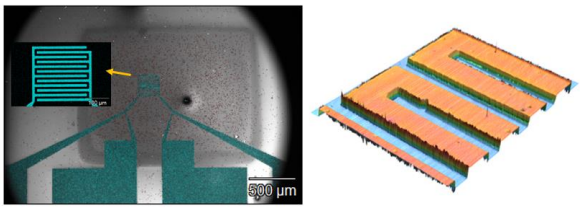
V tejto práci predstavujeme výsledky výskumu a vývoja prípravy senzorických mikroštruktúr s vodivými elektródami na báze tenkých vrstiev amorfného uhlíka. Vhodným príkladom je senzor pre detekciu vodíka na báze tenkej vrstvy TiO_2 s hrebeňovými elektródami. Takýto senzor sme pripravili pomocou procesov optickej litografie a pyrolýzy.

V tomto príspevku sa zameriavame na analýzu možností využitia negatívneho rezistu SU-8 ako východiskového materiálu na prípravu uhlíkových mikroštruktúr pomocou procesu pyrolýzy. Pyrolytický uhlík, získaný tepelným rozkladom organických materiálov pri vysokých teplotách v inertnej atmosfére, predstavuje atraktívny materiál vďaka svojim jedinečným vlastnostiam, ako sú dostatočne vysoká elektrická vodivosť, chemická stabilita, biokompatibilita a mechanická odolnosť. [Mardegan et al., 2013] [Hassan et al., 2017]

Hlavným cieľom výskumu je optimalizácia technologických parametrov procesu pyrolýzy. Na rozdiel od bežne používaných metód pyrolýzy, pri ktorých dochádza k dlhodobému ohrevu vzoriek v peci, využívame technológiu rýchleho žíhania (Rapid Thermal Annealing, RTP), ktorá umožňuje rýchle a kontrolované žíhanie v inertnej atmosfére. Táto metóda prináša výhody v podobe kratšej doby spracovania a lepšej reprodukovateľnosti výsledkov.

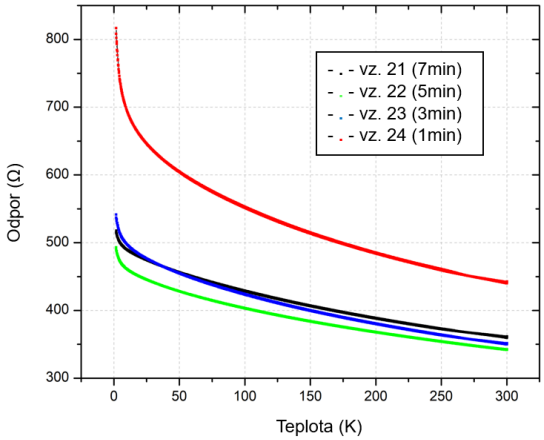
V experimentálnej časti sme sa zamerali na prípravu a charakterizáciu uhlíkových mikroštruktúr. Materiál bol vystavený pyrolýze pri rôznych teplotách (800 – 1200 °C) v prostredí dusíka, čím došlo k jeho tepelnému rozkladu a karbonizácii. Výsledné mikroštruktúry boli následne analyzované z hľadiska ich morfológie, štruktúry, zloženia a elektrických vlastností.

Na analýzu pripravených vzoriek sme použili optickú mikroskopiu, elektrónovú mikroskopiu, atómovú silovú mikroskopiu (AFM) na skúmanie povrchovej štruktúry a meranie hrúbky vrstiev. Výsledky ukázali zníženie hrúbky po pyrolýze vo vertikálnom smere z približne 510 nm na 53 nm. Elektrické vlastnosti boli skúmané prostredníctvom merania výsledného odporu mikroštruktúr v závislosti od teploty a doby trvania pyrolýzy. Výsledky ukázali, že pri zvyšovaní teploty pyrolýzy dochádza k znižovaniu elektrického odporu v dôsledku zvýšenej grafitizácie uhlíka. Optimálne vlastnosti sme dosiahli pri teplote 1200 °C s dobou trvania pyrolýzy 5 minút.



a) b)

Obr. 1: a) C-elektródy na SiO2/Si s tenkou vrstvou TiO_2: SEM a prvkové zloženie získané EDS mapovaním, b) detail meandrovej štruktúry.



Obr. 2: Závislosť elektrického odporu od teploty pre rôzne časy pyrolýzy (pri pyrolýznej teplote 1200 °C)

Literatúra

[Mardegan et al., 2013] Mardegan, A., Kamath, R., Sharma, S., Scopece, P., Ugo, P., Madou, M. (2013). Optimization of Carbon Electrodes Derived from Epoxy-based Photoresist. *Journal of The Electrochemical Society*, 160(8), B132-B137.

[Hassan et al., 2017] Hassan, Y.M., Caviglia, C., Hemanth, S., Mackenzie, D.M.A., Alstrøm, T.S., Petersen, D.H., & Keller, S.S. (2017). High temperature SU-8 pyrolysis for fabrication of carbon electrodes. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 125, 91–99.

* kecerova7@uniba.sk
† durina6@uniba.sk
§ Školiteľ
‡ roch1@uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 199
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Richard Vrablec, Branislav Grančič

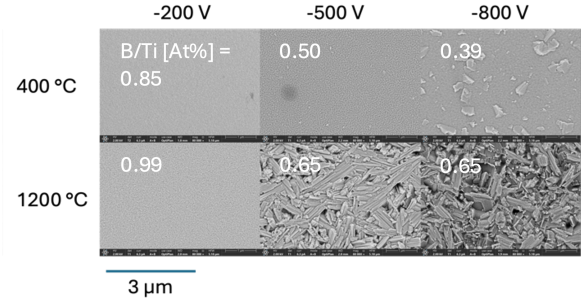
Štruktúra a vlastnosti TiB_{1+x} vrstiev

Richard Vrablec*, Branislav Grančič[1]
Centrum nanotechnológií a pokročilých materiálov, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Titan monoboridové vrstvy (B/Ti = 1:1) majú potenciálne zaujímavé mechanické vlastnosti, ovplyvnené vznikom nanolamiel tvorených kryštalickými dvojčatami [1].

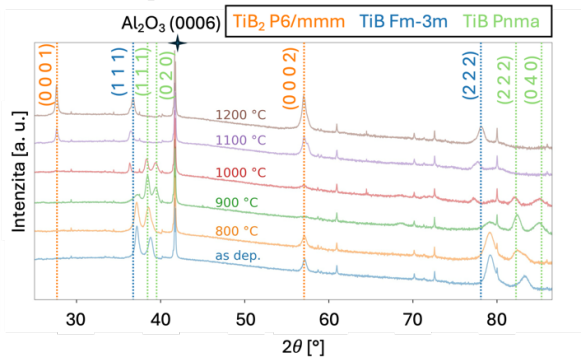
Pri príprave PVD (Physical Vapour Deposition) technikami však tieto vrstvy majú obvykle veľmi neusporiadanú štruktúru. V práci ukazujeme, že z hľadiska formovania kryštalickej fázy sa ako najperspektívnejšia technika javí HiTUS (High Target Utilization Sputtering). Touto technikou sme vykonali sériu depozícií pri rôznych hodnotách elektrického napätia na TiB terči, čím sa nám podarilo pripraviť vrstvy s meniacim sa pomerom B/Ti. Následne sme vrstvy žíhali vo vákuu na teploty v rozsahu 800 – 1200 °C, s cieľom sledovať tepelnú stabilitu a zmenu mechanických vlastností.

Elektrické napätie na terči malo zásadný vplyv na tvrdosť vrstiev. Najvyššiu tvrdosť 29 GPa mali vrstvy deponované pri -200 V, ktoré mali aj najnižšiu drsnosť približne 1 nm (Obr. 1). Mechanické vlastnosti týchto vrstiev boli stabilné v rozsahu žíhania. Tvrdosť ostatných vrstiev bola nižšia a pri žíhaní na teploty 1100 °C a 1200 °C sa zhoršila a vrstvy zdrsneli.

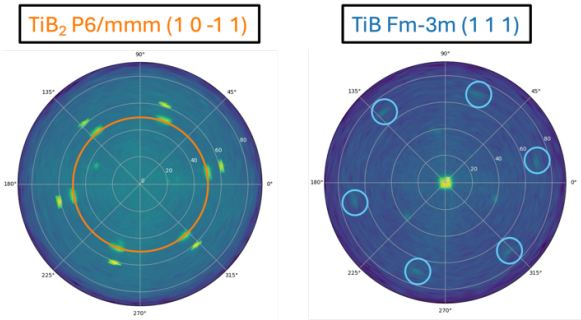


Obr. 1 Povrch deponovaných vrstiev a žíhaných na teplotu 1200 °C.

Detailnú pozornosť sme venovali štruktúrnej analýze vrstiev deponovaných pri napätí na terči -200 V. Nedostatok difrakčných maxím potrebných k jednoznačnému určeniu kryštalických fáz z röntgenových Bragg-Brentano symetrických skenov (Obr. 2) nás priviedol k rozsiahlej XRD analýze. Pomocou pólových obrazcov a mapovania recipročného priestoru sme postupne zistili, že vo vrstvách deponovaných pri napätí -200 V sa vyformovali fázy: TiB Pnma pri teplotách 400 °C – 900 °C, TiB Fm-3m, TiB_2 P6/mmm v teplotnom rozsahu 1000 °C – 1200 °C. Tieto zistenia boli vyvodené na základe výpočtu mriežkových parametrov kryštalografických fáz a bolo by ešte potrebné overiť ich iným, nezávislým meraním, ako napr. TEM. V týchto meraniach sme pozorovali aj biaxiálnu textúru (Obr. 3). V prípade TiB Pnma bola preferenčná orientácia (1 1 1), pre TiB Fm-3m tiež (1 1 1) a pre TiB_2 P6/mmm bola (0 0 0 1).



Obr. 1 BB skeny vrstiev deponovaných prinapätí na terči -200 V.



Obr. 3 Biaxiálna textúra na vzorke deponovanej pri napätí na terči -200 V a žíhanej na teplotu 1200 °C.

Poďakovanie

Práca bola financovaná z projektu Agentúry na podporu výskumu a vývoja (APVV-21-0042).

Literatúra

[1] Jiang B., et al. Deformation induced twinning and phase transition in an interstitial intermetallic compound niobium boride *Acta Materialia, 459-70 (2019).*

* vrablec4@uniba.sk
1 školiteľ

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 200–209
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Jakub Kloc, Janka Boborová

Extending the MHS-MXP abduction solver with new algorithms

Jakub Kloc[1*] Janka Boborová[1†]

Supervisor: Martin Homola[1‡]

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

Abstract: Abduction is a type of logical inference that explains some observation by finding its possible causes. We research abduction in the context of description logics, a family of languages widely used in knowledge representation. Methods of solving abduction include: Reiter's minimal hitting set algorithm (MHS), which is complete, i.e., it can find all possible explanations; MergeXplain (MXP), which is very fast but incomplete; and the hybrid MHS-MXP algorithm that uses the basic idea of MHS but utilizes MXP to achieve both completeness and greater speed. Both MHS and MHS-MXP were implemented in Java as the MHS-MXP abduction solver. In this work, we research existing algorithms (HST, RC-Tree) that are based on MHS but use different strategies to search the space of explanations. We implement them into the solver, alongside their hybrid versions (HST-MXP, RCT-MXP). We also implement the option to use MXP and another fast incomplete algorithm QuickXPlain (QXP), which were only used as parts of MHS-MXP before. The solver, renamed CATS, is now the only publicly available abduction tool providing such a wide range of algorithms with different use cases. In addition, we fix the solver's memory management issues and improve its performance by debugging and refactoring its codebase.

Keywords: abductive reasoning, description logics, ontologies

1 Introduction

Abduction [Peirce, 1878, Elsenbroich et al., 2006] is a fundamental way of reasoning, alongside induction and deduction. Its objective is to provide hypothetical explanations for a given observation. As an *ampliative* form of reasoning, it generates genuinely new knowledge that cannot be derived through classical deductive reasoning. Its application can be seen, for instance, in medicine [Rashid et al., 2023, Pukancová and Homola, 2015], system diagnosis [Hubauer et al., 2011], and multimedia interpretation [Gries et al., 2010].

Despite its broad applicability, abduction remains quite unexplored [Elsenbroich et al., 2006, Koopmann et al., 2020] in the context of ontologies [Baader et al., 2004], which are data structures that represent knowledge about a specific application domain using a unified formal language. Many well-known ontology languages, such as OWL [Grau et al., 2008], are based on description logics (DLs) [Baader et al., 2017, Baader et al., 2003, Rudolph, 2011], a prominent family of decidable formal languages with varying expressivity.

There are various types of algorithms that can be utilized to solve an abduction problem. Our research focuses mainly on those that offer the following advantageous properties [Rodler, 2023]: (1) Applicability to knowledge bases of *any expressivity*, or even to any logic (with entailment and model-theoretic semantics); (2) *Completeness*, meaning they guarantee finding all possible explanations; (3) *Black-box reasoning*, allowing supporting reasoning tasks required for computing explanations to be delegated to an external reasoner; (4) Requiring *no additional information*.

One such algorithm is the well-explored Reiter's minimal hitting set algorithm [Reiter, 1987], along with its hybrid version, MHS-MXP [Homola et al., 2023], which combines Reiter's algorithm with the efficient divide-and-conquer MergeXplain (MXP) method [Shchekotykhin et al., 2015]. Reiter's algorithm, as originally proposed, has been proven to be incomplete [Greiner et al., 1989], but it can be altered to retain completeness by omitting some optimizations in the process.

Both the altered version of Reiter's algorithm and MHS-MXP were implemented in the MHS-MXP abduction solver [Homola et al., 2023], one of the few publicly available abduction solvers [Pukancová and Homola, 2020, Koopmann et al., 2020] and the only one supporting multiple algorithms.

However, the altered version comes at the cost of certain optimisations. The solver has also been

*kloc4@uniba.sk
†janka.boborova@fmph.uniba.sk
‡martin.homola@fmph.uniba.sk

criticised for relying on Reiter's algorithm despite the availability of more recent alternatives. Furthermore, the solver experienced memory management issues, with one of its evaluations resulting in out-of-memory errors in 57% of cases [Boborová, 2023].

Based on this, we explore alternatives to Reiter's algorithm, namely Wotawa's Hitting Set Tree (HST) algorithm [Wotawa, 2001] and RC-Tree (RCT) algorithm [Pill and Quaritsch, 2015], apply them to solve the abduction problem, and propose new hybrid algorithms by combining them with the MergeXplain method. We then present an improved version of the MHS-MXP abduction solver that supports new algorithms. Finally, we provide a preliminary evaluation of the algorithms using two simple examples.

2 Preliminaries

2.1 Description logics

Description logics (DLs) [Baader et al., 2017, Baader et al., 2003, Rudolph, 2011] are a family of formal languages that are decidable fragments of first-order logic. They can describe a domain by defining singular entities (individuals), their categories (concepts) and binary relationships (roles) between them.

There are many different DLs with varying expressivity. For simplicity, we describe the basic *ALC* DL [Baader et al., 2017]. The vocabulary of *ALC* consists of three countable, mutually disjoint sets of non-logical symbols: **individuals** (denoted N_I), **atomic concepts** (denoted N_C) and **roles** (denoted N_R). (Complex) concepts can be recursively built using the following grammar:

$$C, D ::= A \mid \neg C \mid C \sqcap D \mid C \sqcup D \mid \forall r.C \mid \exists r.C,$$

where $A \in N_C$ and $r \in N_R$. The logical symbols used in the grammar, called constructors, are described in Table 2.1.

The semantics of DL symbols are defined using an **interpretation** $I = (\Delta^I, .^I)$, which consists of a domain containing real-world elements Δ^I and an interpretation function $.^I$ that maps names from the vocabulary to the elements, such that: each individual a is mapped to a single element a^I; each concept C to a set of elements C^I belonging to it; and each role r to a set of element pairs r^I that are in the given binary relation.

DL statements are called **axioms**, which are grouped together in a DL **knowledge base** $K = T \cup A$. The knowledge base consists of two parts: a **TBox** $\boldsymbol{T}$, which contains general rules and an **ABox** $\boldsymbol{A}$, which contains facts about concrete individuals. The different types of axioms are shown in the Table 2.1.

(*Note: In practical settings, ontologies formalised in DL-based languages are analogous to DL knowledge bases and the terms are used interchangeably. The same will apply in this article.*)

For our purposes, it is practical to introduce the notion of a negated ABox axiom (Definition 1), i.e., an axiom that is true when the original is not and vice versa.

Definition 1 (Negated ABox axiom)**.** *For an Abox axiom ϕ, we can construct a **negated axiom** $\neg\phi$ according to the following table, where $a, b \in N_I$, $r \in N_R$ and C is a concept:*

ϕ	$\neg\phi$
$C(a)$	$\neg C(a)$
$r(a,b)$	$\neg r(a,b)$

For any interpretation I, $\mathrm{I} \models \phi$ *if and only if* $\mathrm{I} \not\models \neg\phi$. *Note that $\neg\neg\phi$ is equivalent to ϕ.*

For reasoning with DL knowledge bases, the following terms are fundamental:

- an interpretation I **satisfies** an axiom ϕ ($I \models \phi$) if and only if ϕ's semantic meaning (see Table 2.1) is true in I;
- I is a **model** of a knowledge base K ($I \models K$) if and only if it satisfies all axioms in K;
- K is **consistent** if and only if it has a model;
- K **entails** ϕ ($K \models \phi$) if and only if ϕ is satisfied in every model of K.

2.2 Abduction

With this DL background, we can provide the formal Definition 2 of an ABox abduction problem [Homola et al., 2023, Elsenbroich et al., 2006].

Definition 2 (Abox abduction problem)**.** *Let **abducibles** Abd be a finite set of ABox axioms, **background knowledge** K a DL knowledge base, and **observation** O an ABox axiom. An **explanation** of an ABox abduction problem $P = (\mathrm{K}, \mathrm{O})$ is a finite set of ABox axioms $\mathrm{E} \subseteq$ Abd such that $\mathrm{K} \cup \mathrm{E} \models \mathrm{O}$.*

Symbol	Name	Example	Intuitive meaning
$\neg$	negation	$\neg$Human	those who are not humans
$\sqcap$	conjunction	Animal $\sqcap$ Pet	animals that are also pets
$\sqcup$	disjunction	Human $\sqcup$ Animal	those who are either people or animals or both
$\exists$	existential restriction	$\exists$hasPet.Dog	those who have a pet dog
$\forall$	value restriction	$\forall$hasPet.Dog	those who only have dogs as pets

Table 1: *ALC* constructors

TBox axioms (subsumptions)			ABox axioms (assertions)		
Name	**Syntax**	**Semantics**	**Name**	**Syntax**	**Semantics**
General concept inclusion	$C \sqsubseteq D$	$C^I \subseteq D^I$	Concept assertion	$C(a)$	$a^I \in C^I$
			Role assertion	$r(a,b)$	$(a^I, b^I) \in r^I$
				$\neg r(a,b)$	$(a^I, b^I) \notin r^I$

Table 2: Syntax and semantics of *ALC* axioms. C, D are concepts, $r, s \in N_R$, $a, b \in N_I$ and $.^I$ is an interpretation function

The space of possible explanations is limited to axioms from the set of abducibles *Abd*. This can be useful to simplify the abduction problem. If the abducibles are not intentionally limited, they can correspond to all possible axioms that can be created using *K*'s vocabulary.

Note that not every set of axioms that satisfies the definition has to be considered a meaningful explanation. It is practical to consider only those that are:

- **consistent** – don't contain contradictory axioms, e.g. some ϕ and $\neg\phi$;
- **relevant** – are not entailed by K itself, only by $K \cup E$;
- **minimal** – an explanation E is minimal if there is no other explanation E' s.t $E \subset E'$.

Since the ABox abduction problem involves finding axioms that cause entailment, it can be reduced to a consistency checking problem [Rudolph, 2011]: $K \cup E \models O$ if and only if $K' = K \cup E \cup \neg O$ *is inconsistent*, i.e., K' has no models. In such case $K \cup E$ and $\neg O$ can never be true at the same time, meaning that if $K \cup E$ holds, the opposite of $\neg O$ is always true, i.e., O is entailed.

One way how to solve an abduction problem utilising this reduction is by finding **minimal hitting sets** (Definition 3 [Reiter, 1987]). It has been proven that finding all minimal explanations of some $P = (K, O)$ corresponds to finding all minimal hitting sets of F, where F is the set of *negated models* of $K \cup \neg O$ (Definition 4) [Pukancová and Homola, 2017].

Definition 3 (Minimal hitting set)**.** *Given a collection of sets, denoted F, a hitting set for F is a set H such that* $H \cap S \neq \emptyset$ *for every set* $S \in F$*. A hitting set H for F is minimal if there is no other hitting set* H' *for F such that* $H' \subset H$*.*

Definition 4 (Negated model of *I*)**.** *The negated model, denoted ¬I, of a model I is a finite set of ABox axioms defined as:* $\{\neg A(a) \mid I \models A(a), A \in N_C, a \in N_I\} \cup \{A(a) \mid I \models \neg A(a), A \in N_C, a \in N_I\} \cup \{\neg r(a,b) \mid I \models r(a,b), r \in N_R, a, b \in N_I\} \cup \{r(a,b) \mid I \models \neg r(a,b), r \in N_R, a, b \in N_I\}$.

2.2.1 Reiter's minimal hitting set algorithm

A classical algorithm for finding all minimal hitting sets, proposed by Reiter [Reiter, 1987], has been adapted to solve ABox abduction [Pukancová and Homola, 2017].

It works by constructing a tree structure called the **hitting set tree (HS-tree)** in depth-first order. In an HS-tree, each path from the root to a node n, denoted $h(n)$, represents some subset of abducibles, i.e., $h(n) \subseteq Abd$. In each node n, a **consistency check** of $K' = K \cup h(n) \cup \neg O$ is performed. If K' is inconsistent, $h(n)$ is an explanation and the node is closed, i.e., no other children are generated for it. If K' is consistent,

it must have some model I. A negated version of I is obtained (we will refer to this as a **model extraction**) and the axioms it contains are used to generate children for n. Using negated models to generate new paths increases the probability that a minimal hitting set of negated models is found.

The algorithm also contains conditions for pruning the tree to prevent redundant and invalid branches from being created. However, it has been proven that applying all of the conditions at once can lead to the loss of some explanations, rendering the algorithm **incomplete**, i.e., unable to find all explanations [Greiner et al., 1989]. It can be altered to retain completeness by not applying all pruning, but this causes the loss of the optimisations.

If the issue with pruning is tackled, the algorithm is **complete**. The tree is constructed in a way that assures that all explanations of size x (i.e. containing x axioms) are found in the xth level of the tree. However, the algorithm doesn't know whether it has found all explanations or not, and it continues to build the tree as long as it is possible to generate new branches.

2.2.2 RC-Tree algorithm

There have been multiple alternatives to Reiter's algorithm, mostly with the goal of fixing its completeness issue. (*Note: None of the following hitting set algorithms have been adapted to solve DL abduction. However, for simplicity, we will use terminology related to abduction when describing them.*) One of them is the RC-Tree (RCT) algorithm [Pill and Quaritsch, 2015].

It differs from Reiter's algorithm in each node n having an **exclusion set** θ. It contains axioms that must not be used by n to create child edges. This includes axioms that have already been used to create edges by the n's ancestors, assuring that redundant paths will not be created.

If some branches of the tree are deleted by a pruning condition, RC-Tree updates θs of affected nodes: they remember to avoid creating some branch because the same path may already exist in another subtree, but now that subtree has been deleted. After θs are updated, there may be axioms that were excluded before but now they are not, and the nodes can create new children. As a consequence, while Reiter's algorithm always creates nodes only in the newest level of the tree, RCT can return to previous levels.

This advanced approach of reshaping the tree gives RCT the potential to always find the smallest HS-tree possible. However, it uses extra memory to store θs and it requires repeatedly traversing through the tree to propagate changes in θs.

2.2.3 HST algorithm

Another variant of Reiter's algorithm is Wotawa's Hitting Set Tree (HST; note that the structure constructed by all of these algorithms is also called a hitting set tree) algorithm [Wotawa, 2001]. It aims to remove the need for pruning by never creating redundant paths. This is achieved by generating all valid combinations of abducibles of all possible lengths, each exactly once.

However, this doesn't necessarily include all abducibles: at any point during the tree's construction, the newly generated combinations include only abducibles that have so far appeared in some negated model. If an axiom from abducibles has not yet appeared, there is no need to try it, as by Definition 3, it cannot belong to a minimal hitting set of the known negated models.

To know which abducibles have appeared and how to generate the combinations, HST assigns a unique number to each abducible axiom. As opposed to Reiter's algorithm and RC-Tree, the negated models are not needed to navigate the search space, only to check which axioms should be included in the combinations. Once all abducibles have been numbered, there is no use for the models anymore.

2.2.4 MHS-MXP algorithm

Reiter's algorithm inspired another method of solving abduction, the MHS-MXP algorithm [Homola et al., 2023]. It is the only algorithm mentioned that was specifically designed to solve ABox abduction. It utilises another approach, the **MergeXPlain (MXP)** algorithm [Shchekotykhin et al., 2015].

MXP is a method for finding conflicts, i.e., for some inconsistent knowledge base, it identifies the smallest set of axioms that are inconsistent. It is by itself composed of multiple calls of the **QuickXplain (QXP)** method [Junker, 2004]. When adapted to the abduction problem, QXP is extremely fast compared to Reiter's algorithm, but it can only find one explanation at most. MXP runs QXP multiple times to find multiple explanations at once, but it is still not complete.

The MHS-MXP algorithm builds a HS-tree, but instead of performing consistency checks in the nodes, it calls MXP, with arguments based on the current node's path. Thanks to MXP's traits, the algorithm can potentially:

- find multiple explanations per node;
- find some explanations of size x, before reaching the tree's x level;
- finish the tree faster; MHS-MXP is sometimes able to predict that no explanation would be found in some subtree, i.e., there is no meaning in generating the corresponding branch.

2.2.5 MHS-MXP abduction solver

The MHS-MXP algorithm has been implemented as a Java application in the MHS-MXP solver [Homola et al., 2023]. The solver also allows to use Reiter's algorithm, simply called MHS in the application.

The algorithms are implemented in a way that leverages multiple optimisations. Most notably, they don't need to remember the whole HS-tree, only the nodes that have already been created but have not been processed (**processing a node** corresponds to generating its children, performing consistency check/MXP calls based on their paths and extracting their models if necessary).

The solver allows the user to specify abducibles either by listing concrete axioms, or individuals and concepts that are allowed. If no abducibles are specified, every possible combination of an individual a and a concept C from the background knowledge is added to the abducibles as axioms $C(a)$ and $\neg C(a)$. However, negations in explanations can be forbidden, i.e., every pair is only added as $C(a)$, halving the number of abducible axioms.

This setting strongly affects the solver's performance, as larger abducibles massively increase the computational load of the input. Additionally, it has been observed that MHS-MXP is especially inefficient with negations allowed, as a consequence of specific MXP interactions [Homola et al., 2023].

3 Implementation

To find a better alternative to use in the solver instead of Reiter's algorithm, we researched its variants and decided to implement both HST and RCT. Analogously to how Reiter's algorithm was adapted to solve abduction and then used as a foundation for MHS-MXP, we designed abduction-focused versions of HST and RCT and then brand-new hybrid algorithms HST-MXP and RCT-MXP.

3.1 New algorithms

To implement these algorithms into the MHS-MXP solver, the solver's codebase had to undergo substantial refactoring. Originally, most of the code related to the HS-tree was located in a single class, `HybridSolver`. In places where the course of action differed between MHS and MHS-MXP, `if-else` blocks were used to choose the correct actions.

While this approach is sufficient with only two options to choose from, it would become less practical with an increasing number of available algorithms.

We designed a new approach based on the object-oriented programming principle of **composition over inheritance**: instead of each algorithm having its own class, we aimed to compose the actual behaviour from multiple objects. We reworked the `HybridSolver` class, now renamed to `SolverAlgorithm`, according to the **Strategy design pattern**: it now contains only the general structure shared by all of the algorithms. Each method that can differ between algorithms is delegated to one of two interfaces: `ITreeBuilder` or `INodeProcessor`.

`ITreeBuilder` represents the different strategies for building the HS-tree. `INodeProcessor` handles how each node is processed, plus some additional checks that are different between base MHS and MHS-MXP.

To broaden the choice of available solvers as much as possible, we additionally decided to include the option to use QXP and MXP: the two methods that were only used as subroutines inside MHS-MXP. However, these two algorithms are not based on HS-trees. To stick to the template we designed, we created the `RootOnlyTreeBuilder`, which creates only the root node, processes it (i.e., runs QXP/MXP once) and then terminates the tree construction.

A simplified class diagram of the new classes is shown in Figure 1.

During development, some unique attributes of the new algorithms became apparent. As RCT needs to update exclusion sets of existing nodes and sometimes creates new children for them, it needs to re-

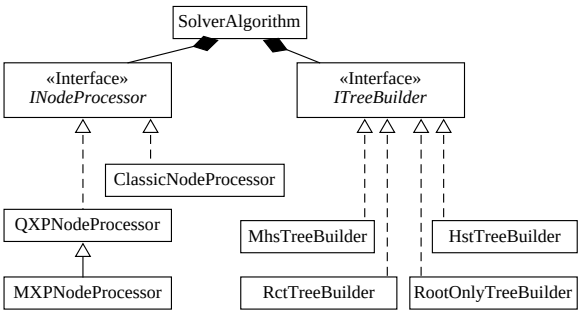


Figure 1: Class diagram of the reworked algorithm architecture

member the whole tree, losing the solver's strength of only having to store the unprocessed nodes. HST, on the other hand, has the advantage of not needing new models from some point. After the solver finds out that all abducibles are already numbered, model extractions are no longer performed.

3.2 Fixing memory management

We ran some of the inputs that crashed on memory errors in one of the previous evaluations. After analysing the state of the Java virtual machine (JVM) at the moment of the crashes, we noticed a very large amount of objects representing axioms existing in the memory.

We realised that every time model extraction was performed, a new Java object was created for each axiom both in the model and its negated version, regardless of whether the same axiom has already appeared elsewhere. This could lead to the same logical statement being represented by thousands stand-alone objects. Additionally, models could include axioms that were not in abducibles, i.e., that would never be used.

We reworked the model extraction so that every axiom from the abducibles exists only once and the extracted models contain only references to abducibles.

3.3 Detailed statistics

One of our long-term goals is to evaluate the performance of the new algorithms, find their strength and weaknesses and compare them with the original MHS and MHS-MXP.

For evaluation purposes, the solver creates log files that capture information about the solving's duration and the times when the explanations were found. This, however, provides only a limited image of how the HS-tree was created. For future evaluation, we implemented counters that keep track of most of the basic actions that happen during each algorithm's run. For each level of the HS-tree, we log a lot of different data, most notably:

- number of nodes that were processed;
- number of edges that were created from the processed nodes and how many of them were pruned;
- number of new nodes that were created;
- how many model extractions and consistency checks were performed;
- how many explanations were found;
- how many of them were filtered out (for MXP/QXP/hybrid algorithms);
- the times when the level started and when it ended;
- the times when the first and the last explanations were found in that level;
- average memory used by the JVM during that level.

3.4 General changes

Apart from these specific design goals, we refactored and debugged many other parts of the solver's codebase. During this process, we discovered multiple errors and other mishaps, such as:

- some actions being performed multiple times at different points, even though they should run only once;
- suboptimal choice of data structures;
- incorrect data logging, potentially causing some errors in previous evaluations.

We fixed all errors we managed to discover and implemented many small features to improve the experience of both the solver's users and future developers. From these minor additions, the most notable are unit tests that check the correctness of all algorithms on a variety of very small input problems.

As the solver has surpassed its original goal of realising the MHS-MXP algorithm, we renamed it to the **Comenius Abduction Team Solver (CATS)**, in honour of our research group.

4 Evaluation

After finishing the implementation, we conducted a miniature evaluation. Its primary goal was not to fully test the performance of the new algorithms, but simply to check if the solver runs correctly on the testing server, if the data is correctly logged, if we are able to process the logs, etc. However, even this preliminary data may hint at some traits of the new algorithms.

4.1 Methodology

We selected two abduction problems from datasets previously used to evaluate abduction solvers [Homola et al., 2022, Mrózek et al., 2018]. Both problems have relatively small background knowledge ontologies (Table 4.1), making it reasonable to expect that all explanations would be found quite quickly. For cases when the HS-tree keeps on building even after all explanations have been found, we set a 1-hour time-out.

Comparing the input problems, the family ontology is much smaller, but it has minimal explanations of sizes up to 4. The LUBM ontology is larger, but the problem has only explanations of size 2. Based on this, we expected both problems to be solved in a similar time, but producing differently shaped HS-trees: a narrow, but deeper tree in the case of the family ontology; and in LUBM's case, a tree that is wide, but ideally up to 2 levels deep.

For each of the 6 complete algorithms, each input was run once with allowed negations in explanations and once with forbidden negations. We will call the 4 input cases *Family-neg*, *Family-no-neg*, *Lubm-neg* and *Lubm-no-neg*.

4.2 Results

We analysed the logs of the evaluation and summarised some prominent information in Tables 4, 5, 6, 7. For each algorithm, it shows data related to the whole tree, aggregated from records for each level.

Each table has the following columns:

- **Levels** – depth of the final HS-tree;
- **Finish time** – after how many seconds the algorithm run terminated;
- **Time out** – if the run ended with a time-out (1 for yes, 0 for no);
- **First / Last explanation time** – after how many seconds the first/last valid explanation was found;
- **Average memory** – average memory used by the JVM (in megabytes);
- **Created nodes** – the total number of nodes created in the whole tree;
- **Model extractions** – the total number of model extractions performed.

Next to each table cell, there is a bar that shows the cell's relative value compared to that column's maximum in the given table – the maximal value's bar fills the whole cell.

It is important to note that while the time and memory used vary each time the solver is run, the algorithms are deterministic in the way they build the trees. As a consequence, the columns counting the nodes and model extractions, would be the same every time if the problems were run multiple times (except for the cases which ended on time-out, where abortion of the algorithm could occur at slightly different points).

4.3 Analysis

While we do not have enough data to conclude reliable generalisations, the tables showcase a few interesting situations related to the new algorithms.

All algorithms managed to find all explanations (4 in *Family* cases and 99 in *LUBM* cases), thus the main metric for how to compare their performance is to compare the time in which they finished their run. In 3 of the 4 cases, even though all algorithms found the explanations soon before 1 hour, some of them kept on building the tree and ended with time-out: in *Lubm-neg*, this was even true for all algorithms, showcasing the load of allowing negations with a bigger ontology.

MHS-MXP and RTS-MXP were the only ones to finish before time-out in both *Family-neg* and *Lubm-no-neg*. This seems promising for RCT-MXP, as it managed not only to match MHS-MXP but even to significantly surpass it in the *Family-neg* case. Even more surprising is that base RCT managed to finish much faster than all the algorithms other than RCT-MXP, also avoiding time-out. This may hint at RCT and RCT-MXP being especially efficient with smaller ontologies and it merits future attention.

Ontology	# Axioms	# Atomic Concepts	# Roles	# Individuals
Family	15	8	1	0
LUBM	93	43	25	0

Table 3: Parameters of the Family and LUBM ontologies

Family-neg	Levels	Finish time	Time out	First explanation time	Last explanation time	Average memory	Created nodes	Model extractions
MHS	7	3593.19	1	0.22	3.83	239.45	20216	96
HST	6	3593.65	1	0.58	90.14	237.00	57084	24
RCT	11	123.25	0	0.24	2.35	285.62	5597	96
MHS-MXP	14	1728.81	0	0.04	2.23	302.04	61762	1490
HST-MXP	6	3593.83	1	0.05	60.94	233.53	95401	1261
RCT-MXP	12	31.14	0	0.05	1.78	307.68	5652	1490

Table 4: Statistics for the *Family-neg* test case

Family-no-neg	Levels	Finish time	Time out	First explanation time	Last explanation time	Average memory	Created nodes	Model extractions
MHS	7	2.72	0	0.23	1.06	149.07	403	24
HST	11	12.96	0	0.51	1.81	232.51	2016	1
RCT	7	1.04	0	0.2	0.85	149.70	265	22
MHS-MXP	7	0.68	0	0.34	0.52	164.46	143	104
HST-MXP	10	1.26	0	0.36	0.64	143.43	880	130
RCT-MXP	6	0.59	0	0.29	0.42	158.73	73	104

Table 5: Statistics for the *Family-no-neg* test case

LUBM-neg	Levels	Finish time	Time out	First explanation time	Last explanation time	Average memory	Created nodes	Model extractions
MHS	3	3600.17	1	5.18	145.03	453.57	21737	12618
HST	3	3600.17	1	2.57	319.65	435.88	31041	2218
RCT	3	3600.15	1	4.7	134.34	458.06	22283	13046
MHS-MXP	3	3601.15	1	1.45	2483.99	579.12	9093	12773
HST-MXP	3	3603.27	1	1.07	1902.5	484.33	12894	12202
RCT-MXP	3	3602.59	1	1.03	2358.03	581.07	8475	13134

Table 6: Statistics for the *Lubm-neg* test case

LUBM-no-neg	Levels	Finish time	Time out	First explanation time	Last explanation time	Average memory	Created nodes	Model extractions
MHS	3	3600.15	1	4.95	125.88	431.27	22985	13789
HST	3	3600.13	1	1.64	146.17	371.02	19119	1
RCT	3	3600.18	1	3.5	121.94	603.46	23170	13545
MHS-MXP	4	9.83	0	0.13	8.58	225.68	787	184
HST-MXP	4	3600.47	1	0.12	9.15	327.90	44711	192
RCT-MXP	3	9.28	0	0.12	8.26	212.61	726	184

Table 7: Statistics for the *Lubm-no-neg* test case

The drawback of these algorithms of having to store the whole tree doesn't seem to affect them much with ontologies this small. Even though they averagely used the most memory in the cases with negations, the lead is not massive and it is not present in the other cases.

HST and HST-MXP performed less preferably. In all cases, one or both of them either took the most time to finish the tree, took the most time to find all explanations, or created the largest amount of nodes.

In the least demanding case *Family-no-neg*, it is especially apparent that HST took much more time than every other algorithm. It is notable that only one model extraction was performed in the tree. This means that after one negated model was extracted in the root, it contained all abducibles and they were all numbered right from the start. As a consequence, HST generated every single combination of abducibles possible, effectively becoming a brute-force approach.

On the other hand, except for this unfavourable test case, HST and HST-MXP used less memory than their counterparts in most cases, even if they didn't construct the smallest trees. This could be caused by the low amount of model extractions, leading to a lower number of stored models. In the future, we plan to add another statistic of how many models are being stored to further examine this possibility. More data could perhaps help us to find a way to leverage HST's optimal memory usage despite its potential performance drawbacks.

5 Future work

As already mentioned, we intend to conduct a serious evaluation of all 8 implemented algorithms, running them repeatedly and using multiple ontologies with various sizes and attributes. While we focused mostly on the complete algorithms, it may also be interesting to examine the limited sets of explanations found by QXP and MXP. We plan to submit the results of the evaluation to the 38th International Workshop On Description Logics.

Acknowledgments

This work was supported by the Faculty of Mathematics, Physics and Informatics at the Comenius University in Bratislava via the *Vedecká pomocná sila* program.

References

[Baader et al., 2003] Baader, F., Calvanese, D., McGuinness, D. L., Nardi, D., and Patel-Schneider, P. F., editors (2003). *The Description Logic Handbook: Theory, Implementation, and Applications*. Cambridge University Press.

[Baader et al., 2017] Baader, F., Horrocks, I., Lutz, C., and Sattler, U. (2017). *An Introduction to Description Logic*. Cambridge University Press.

[Baader et al., 2004] Baader, F., Horrocks, I., and Sattler, U. (2004). Description logics. In *Handbook on Ontologies*, pages 3–28. Springer.

[Boborová, 2023] Boborová, J. (2023). Optimization of the MHS-MXP algorithm.

[Elsenbroich et al., 2006] Elsenbroich, C., Kutz, O., and Sattler, U. (2006). A case for abductive reasoning over ontologies. In *Proceedings of the OWLED*06 Workshop on OWL: Experiences and Directions, Athens, Georgia, USA, November 10-11, 2006*, volume 216 of *CEUR Workshop Proceedings*. CEUR-WS.org.

[Grau et al., 2008] Grau, B. C., Horrocks, I., Motik, B., Parsia, B., Patel-Schneider, P. F., and Sattler, U. (2008). OWL 2: The next step for OWL. *J. Web Semant.*, 6(4):309–322.

[Greiner et al., 1989] Greiner, R., Smith, B. A., and Wilkerson, R. W. (1989). A correction to the algorithm in Reiter's theory of diagnosis. *Artif. Intell.*, 41(1):79–88.

[Gries et al., 2010] Gries, O., Möller, R., Nafissi, A., Rosenfeld, M., Sokolski, K., and Wessel, M. (2010). A probabilistic abduction engine for media interpretation based on ontologies. In *Web Reasoning and Rule Systems - Fourth International Conference, RR 2010, Bressanone/Brixen, Italy, September 22-24, 2010. Proceedings*, volume 6333 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 182–194. Springer.

[Homola et al., 2022] Homola, M., Pukancová, J., Balintová, I., and Boborová, J. (2022). Hybrid MHS-MXP ABox abduction solver: First empirical results. In Arieli, O., Homola, M., Jung, J. C., and Mugnier, M., editors, *Proceedings of the 35th International Workshop on Description Logics (DL 2022) co-located with Federated Logic Conference (FLoC 2022), Haifa, Israel, August 7th to 10th, 2022*, volume 3263 of *CEUR Workshop Proceedings*. CEUR-WS.org.

[Homola et al., 2023] Homola, M., Pukancová, J., Boborová, J., and Balintová, I. (2023). Merge, explain, iterate: A combination of MHS and MXP in an ABox abduction solver. In Gaggl, S. A., Martinez, M. V., and Ortiz, M., editors, *Logics in Artificial Intelligence - 18th European Conference, JELIA 2023, Dresden, Germany, September 20-22, 2023, Proceedings*,

volume 14281 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 338–352. Springer.

[Hubauer et al., 2011] Hubauer, T., Legat, C., and Seitz, C. (2011). Empowering adaptive manufacturing with interactive diagnostics: A multi-agent approach. In *Advances on Practical Applications of Agents and Multi-agent Systems - 9th International Conference on Practical Applications of Agents and Multiagent Systems, PAAMS 2011, Salamanca, Spain, 6-8 April 2011*, volume 88 of *Advances in Intelligent and Soft Computing*, pages 47–56. Springer.

[Junker, 2004] Junker, U. (2004). Quickxplain: Preferred explanations and relaxations for over-constrained problems. In McGuinness, D. L. and Ferguson, G., editors, *Proceedings of the Nineteenth National Conference on Artificial Intelligence, Sixteenth Conference on Innovative Applications of Artificial Intelligence, July 25-29, 2004, San Jose, California, USA*, pages 167–172. AAAI Press / The MIT Press.

[Koopmann et al., 2020] Koopmann, P., Del-Pinto, W., Tourret, S., and Schmidt, R. A. (2020). Signature-based abduction for expressive description logics. In *Proceedings of the 17th International Conference on Principles of Knowledge Representation and Reasoning, KR 2020, Rhodes, Greece, September 12-18, 2020*, pages 592–602.

[Mrózek et al., 2018] Mrózek, D., Pukancová, J., and Homola, M. (2018). Abox abduction solver exploiting multiple DL reasoners. In Ortiz, M. and Schneider, T., editors, *Proceedings of the 31st International Workshop on Description Logics co-located with 16th International Conference on Principles of Knowledge Representation and Reasoning (KR 2018), Tempe, Arizona, US, October 27th - to - 29th, 2018*, volume 2211 of *CEUR Workshop Proceedings*. CEUR-WS.org.

[Peirce, 1878] Peirce, C. S. (1878). Deduction, Induction, and Hypothesis. *Popular Science Monthly*, 13:470–482.

[Pill and Quaritsch, 2015] Pill, I. and Quaritsch, T. (2015). Rc-tree: A variant avoiding all the redundancy in Reiter's minimal hitting set algorithm. In *2015 IEEE International Symposium on Software Reliability Engineering Workshops, ISSRE Workshops, Gaithersburg, MD, USA, November 2-5, 2015*, pages 78–84. IEEE Computer Society.

[Pukancová and Homola, 2015] Pukancová, J. and Homola, M. (2015). Abductive reasoning with description logics: Use case in medical diagnosis. In *Proceedings of the 28th International Workshop on Description Logics, Athens,Greece, June 7-10, 2015*, volume 1350 of *CEUR Workshop Proceedings*. CEUR-WS.org.

[Pukancová and Homola, 2017] Pukancová, J. and Homola, M. (2017). Tableau-based ABox abduction for the ALCHO description logic. In Artale, A., Glimm, B., and Kontchakov, R., editors, *Proceedings of the 30th International Workshop on Description Logics, Montpellier, France, July 18-21, 2017*, volume 1879 of *CEUR Workshop Proceedings*. CEUR-WS.org.

[Pukancová and Homola, 2020] Pukancová, J. and Homola, M. (2020). The AAA ABox abduction solver. *Künstliche Intell.*, 34(4):517–522.

[Rashid et al., 2023] Rashid, S. M., McCusker, J. P., Gruen, D. M., Seneviratne, O., and McGuinness, D. L. (2023). A concise ontology to support research on complex, multimodal clinical reasoning. In *The Semantic Web - 20th International Conference, ESWC 2023, Hersonissos, Crete, Greece, May 28 - June 1, 2023, Proceedings*, volume 13870 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 390–407. Springer.

[Reiter, 1987] Reiter, R. (1987). A theory of diagnosis from first principles. *Artif. Intell.*, 32(1):57–95.

[Rodler, 2023] Rodler, P. (2023). How should I compute my candidates? A taxonomy and classification of diagnosis computation algorithms. In *ECAI 2023 - 26th European Conference on Artificial Intelligence, September 30 - October 4, 2023, Kraków, Poland - Including 12th Conference on Prestigious Applications of Intelligent Systems (PAIS 2023)*, volume 372 of *Frontiers in Artificial Intelligence and Applications*, pages 1986–1993. IOS Press.

[Rudolph, 2011] Rudolph, S. (2011). Foundations of description logics. In *Reasoning Web. Semantic Technologies for the Web of Data - 7th International Summer School 2011, Galway, Ireland, August 23-27, 2011, Tutorial Lectures*, volume 6848 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 76–136. Springer.

[Shchekotykhin et al., 2015] Shchekotykhin, K. M., Jannach, D., and Schmitz, T. (2015). Mergexplain: Fast computation of multiple conflicts for diagnosis. In Yang, Q. and Wooldridge, M. J., editors, *Proceedings of the Twenty-Fourth International Joint Conference on Artificial Intelligence, IJCAI 2015, Buenos Aires, Argentina, July 25-31, 2015*, pages 3221–3228. AAAI Press.

[Wotawa, 2001] Wotawa, F. (2001). A variant of Reiter's hitting-set algorithm. *Inf. Process. Lett.*, 79(1):45–51.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 210–222
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Ondrej Škorňák

Analýza genomickej kompozície v diagnostike rakovinových ochorení

Ondrej Škorňák[1*]

Školiteľ: Jaroslav Budiš[2 3†]

[1] Katedra informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2] Geneton s.r.o., Ilkovičova 8, 841 04 Bratislava
[3] Vedecký park Univerzity Komenského v Bratislave, Ilkovičova 8, 841 04 Bratislava

Abstrakt: Práca sa zaoberá analýzou genomickej kompozície s cieľom zlepšiť diagnostiku rakovinových ochorení. Skúmali sme rozdiely medzi zdravými a nádorovými vzorkami DNA pomocou bioinformatických metód, ktoré umožňujú vizualizovať a analyzovať špecifické vzory v genetickej informácii. V dátovej množine Prevelynch sme identifikovali významné rozdiely v zastúpení konkrétnych dinukleotidov medzi zdravými a nádorovými vzorkami. Tieto rozdiely sú koncentrované v určitých oblastiach genetickej sekvencie, ktoré vykazujú výraznú odlišnosť a potenciál pre spoľahlivé rozlíšenie zdravých od nádorových vzoriek. Predbežné výsledky naznačujú, že tieto poznatky môžu slúžiť ako základ pre vytvorenie nových diagnostických nástrojov, využívajúcich pokročilé štatistické postupy a algoritmy strojového učenia. Našim cieľom do budúcnosti je vyvinúť jednoduchý a efektívny diagnostický model založený na analýze genomickej informácie.

Kľúčové slová: genomická kompozícia, diagnostika rakoviny, dinukleotidy, štatistické metódy

1 Úvod

Moderné technológie sekvenovania DNA zaznamenali výrazný pokrok, sú čoraz rýchlejšie, presnejšie, cenovo dostupnejšie a tým aj vhodnejšie na praktické využitie. Vďaka tomu sú častejšie súčasťou medicínskych postupov, najmä v oblasti diagnostiky ochorení, kde majú zásadný význam pre skorú detekciu a následnú úspešnú liečbu pacientov. V súčasnosti existuje viacero metód sekvenovania DNA, ktoré sa líšia svojimi vlastnosťami, citlivosťou a špecifickými aplikáciami, čím výrazne prispievajú k rozvoju personalizovanej medicíny a výskumu genetických ochorení [Satam et al., 2023]. Jednou z kľúčových oblastí, kde sa tieto technológie intenzívne využívajú, je onkológia.

Rakovina predstavuje jeden z najzávažnejších zdravotných problémov súčasnosti, ktorý významne ovplyvňuje kvalitu života miliónov ľudí po celom svete. V roku 2022 bolo diagnostikovaných 20 miliónov nových prípadov a 9,7 milióna ľudí tomuto ochoreniu podľahlo. Prognózy naznačujú, že do roku 2050 sa počet nových prípadov zvýši na viac ako 35 miliónov, čo predstavuje 77% nárast oproti roku 2022 [World Health Organization, 2024].

Tradičné diagnostické metódy často narážajú na obmedzenia spojené s invazívnosťou zákrokov a obmedzenou citlivosťou [Lone et al., 2022]. Tekutá biopsia predstavuje inovatívny neinvazívny prístup, ktorý umožňuje získavanie genetického materiálu priamo z krvnej plazmy, čím otvára nové možnosti pre skorú detekciu a monitorovanie rakovinových ochorení [Ma et al., 2024].

Sekvenačné technológie však produkujú veľké objemy dát, ktorých efektívna analýza je výzvou a zároveň príležitosťou pre vedecký výskum [Karakoyun et al., 2023, Xu, 2020]. V tejto práci sa preto zameriavame na analýzu genomického materiálu získaného pomocou tekutej biopsie, s cieľom identifikovať charakteristické genetické vzory využiteľné ako potenciálne biomarkery na rozlíšenie medzi vzorkami od zdravých jedincov a pacientov s rakovinovým ochorením. Konkrétne využijeme metódy ako Frequency Chaos Game Representation (FCGR) [Löchel and Heider, 2021] a štatistickú analýzu k-merov, ktoré nám umožnia preskúmať vzory v DNA.

2 Teoretické základy

V tejto kapitole sa venujeme teoretickým základom potrebným na pochopenie princípov analýzy genetických dát s využitím Frequency Chaos Game Representation (FCGR) v kontexte diagnostiky rakovinových ochorení. Najprv stručne predstavíme základné pojmy spojené s DNA, genomickou analýzou a sekvenovaním, následne definujeme biomarkery a prí-

*skornak1@uniba.sk
†jaroslav.budis@geneton.sk

stup tekutej biopsie. V druhej časti sa zameriame na kľúčové pojmy bioinformatiky: k-mery, Chaos Game Representation (CGR) a Frequency Chaos Game Representation (FCGR).

2.1 DNA, genóm a sekvenovanie

Deoxyribonukleová kyselina (DNA) je základnou molekulou genetickej informácie vo všetkých živých organizmoch. Je tvorená dvojitou skrutkovicou pozostávajúcou z nukleotidov, ktoré obsahujú jednu zo štyroch dusíkatých báz: adenín (A), tymín (T), cytozín (C) a guanín (G). Genetická informácia je kódovaná sekvenciou týchto nukleotidov, pričom komplementarita báz zabezpečuje stabilitu DNA molekuly [Alberts et al., 2002]. Genóm predstavuje kompletnú genetickú výbavu organizmu a v prípade človeka obsahuje približne tri miliardy nukleotidov [BioNumbers Database,].

Z pohľadu bioinformatiky je genóm reprezentovaný ako reťazec symbolov $s \in \Sigma^*$, kde $\Sigma = \{A, C, G, T\}$. Analýza týchto sekvencií umožňuje identifikáciu génov, mutácií, biomarkerov a ďalších biologicky významných vzorov.

Sekvenovanie DNA je technika, ktorá umožňuje určiť presnú sekvenciu nukleotidov v molekulách DNA. Po dokončení projektu ľudského genómu v roku 2003 nastal výrazný pokrok v tejto oblasti vďaka technológiám novej generácie (Next-Generation Sequencing, NGS). Tieto technológie umožňujú sekvenovať miliardy fragmentov DNA paralelne, čo výrazne zrýchľuje a zlacňuje proces získavania genomických dát [National Human Genome Research Institute, , Goodwin et al., 2016].

2.2 cfDNA a ctDNA

Cirkulujúca bezbunková DNA (cell-free DNA, cfDNA) je DNA nachádzajúca sa voľne v krvnom obehu, mimo buniek. Väčšina cfDNA pochádza z odumretých buniek. U pacientov s rakovinou časť tejto DNA pochádza z nádorových buniek a označuje sa ako cirkulujúca nádorová DNA (circulating tumor DNA, ctDNA) [Medina et al., 2023]. Podiel ctDNA v celkovom objeme cfDNA môže výrazne kolísať (od <0,1% do >90%), čo ovplyvňuje citlivosť diagnostiky [Aquino and Pascut, 2024].

Molekuly cfDNA sú prevažne krátke dvojvláknové fragmenty (100-200 párov báz), hoci sa vyskytujú aj dlhšie fragmenty [Grabuschnig et al., 2020]. Na analýzu cfDNA/ctDNA sa používajú bioinformatické metódy ako PCR a NGS. Detekcia ctDNA je však náročná kvôli jej nízkemu zastúpeniu [Medina et al., 2023].

2.3 Biomarkery a tekutá biopsia

Biomarker, alebo biologický marker, je definovaný ako objektívne merateľný ukazovateľ, ktorý môže byť vyhodnotený ako indikátor normálnych biologických procesov, patogénnych procesov alebo reakcie na liečbu [European Food Safety Authority, , Strimbu and Tavel, 2010]. Tieto ukazovatele môžu mať rôznu povahu či už molekulárnu, genetickú, proteínovú, bunkovú či metabolickú, avšak kľúčovou požiadavkou je ich presná a reprodukovateľná merateľnosť a klinická relevancia [Strimbu and Tavel, 2010].

V kontexte onkologickej diagnostiky a výskumu zohrávajú biomarkery zásadnú úlohu, najmä vďaka svojej schopnosti odhaľovať patologické zmeny spojené s nádorovým ochorením, často už v jeho raných štádiách, monitorovať jeho progresiu a predpovedať odpoveď na liečbu.

V posledných rokoch sa do popredia dostáva tekutá biopsia ako inovatívny, minimálne invazívny diagnostický prístup. Táto metóda je založená na analýze biologických tekutín, najčastejšie krvi, s cieľom detegovať a analyzovať nádorové komponenty uvoľnené do cirkulácie [Nikanjam et al., 2022]. Na rozdiel od konvenčnej tkanivovej biopsie, ktorá vyžaduje invazívny odber vzorky priamo z nádoru, tekutá biopsia umožňuje získať cenné molekulárne informácie prostredníctvom analýzy tzv. cirkulujúcich biomarkerov. Medzi najčastejšie analyzované komponenty patria cirkulujúca nádorová DNA (ctDNA) a cirkulujúce nádorové bunky (CTC) [Nikanjam et al., 2022]. Analýza ctDNA je obzvlášť využívaná pre jej relatívnu dostupnosť a možnosť detailnej genomickej analýzy pomocou metód ako sekvenovanie novej generácie (NGS) alebo digitálna kvapôčková PCR (ddPCR).

Hlavnými výhodami tekutej biopsie sú jej neinvazívnosť, ktorá umožňuje opakované odbery a kontinuálne monitorovanie pacienta, potenciál pre včasnú diagnostiku, sledovanie odpovede na liečbu a detekciu recidívy ochorenia [Nikanjam et al., 2022, BIOGEN, , Newslab,].

Napriek týmto výhodám však tekutá biopsia v súčasnosti nie je považovaná za štandardnú primárnu

diagnostickú metódu a slúži skôr ako doplnkový nástroj k tkanivovej biopsii. Medzi jej hlavné limitácie patrí nižšia citlivosť a špecificita v porovnaní s analýzou tkaniva, najmä v skorých štádiách ochorenia s nízkou hladinou cirkulujúcich nádorových komponentov, čo môže viesť k falošne negatívnym alebo falošne pozitívnym výsledkom. Problematická môže byť aj presná lokalizácia pôvodu nádoru a vyššie ekonomické náklady spojené s niektorými analytickými postupmi [Boukovala et al., 2024]. Aj napriek týmto výzvam predstavuje tekutá biopsia významný pokrok v personalizovanej onkológii.

2.4 K-mery v bioinformatickej analýze sekvencií

V bioinformatike označuje pojem *k-mer* akýkoľvek možný podreťazec (substring) dĺžky k v rámci biologickej sekvencie (napr. DNA, RNA alebo proteínovej sekvencie)[Moeckel et al., 2024a, Clavijo, 2018]. Napríklad, pre DNA sekvenciu `ATGCA` a zvolenú dĺžku $k = 3$, získame nasledujúce 3-mery: `ATG`, `TGC` a `GCA`.

Tieto k-mery sa typicky extrahujú pomocou metódy posuvného okna (sliding window), kde sa okno dĺžky k posúva pozdĺž sekvencie o jednu pozíciu, čím sa získa celkovo $(n-k+1)$ k-merov pre sekvenciu dĺžky n.

Analýza k-merov sa stala základným kameňom mnohých bioinformatických metód vďaka svojej koncepčnej jednoduchosti a výpočtovej efektívnosti, ktorá umožňuje spracovávať rozsiahle sekvenčné dáta generované modernými technológiami, ako je NGS [Moeckel et al., 2024b, Moeckel et al., 2024a]. K-mery umožňujú reprezentovať komplexné sekvencie vo forme frekvenčných profilov alebo iných dátových štruktúr vhodných pre rýchle porovnávanie a analýzu.

Medzi kľúčové aplikácie patrí zostavovanie genómov (genome assembly), porovnávanie sekvencií bez potreby zarovnania (alignment-free methods), detekcia variantov, taxonomická klasifikácia v metagenomike a v neposlednom rade aj identifikácia genetických biomarkerov [Moeckel et al., 2024a]. Metóda FCGR (Frequency Chaos Game Representation), ktorá vizualizuje frekvencie výskytu k-merov, je jedným z príkladov využitia k-merových profilov [Moeckel et al., 2024b].

Voľba dĺžky k je dôležitým parametrom, ktorý ovplyvňuje výsledky analýzy. Kratšie k-mery (k je malé) poskytujú vyššiu citlivosť (zachytia viac podobností), ale nižšiu špecifickosť (môžu sa vyskytovať náhodne). Naopak, dlhšie k-mery (k je veľké) sú špecifickejšie pre danú sekvenciu, ale ich početnosť klesá a sú citlivejšie na chyby v sekvenovaní [Moeckel et al., 2024a, Clavijo, 2018]. Správna voľba k teda závisí od konkrétnej aplikácie a charakteru dát.

V kontexte onkologických biomarkerov môžu špecifické k-mery alebo ich frekvenčné profily slúžiť ako charakteristické signatúry spojené s prítomnosťou nádorovej DNA, napríklad v dátach získaných z tekutej biopsie, čo otvára možnosti pre vývoj nových diagnostických a prognostických nástrojov [Moeckel et al., 2024a].

2.5 Chaos Game Representation a Frequency Chaos Game Representation

Frequency Chaos Game Representation (FCGR) predstavuje rozšírenie pôvodnej Chaos Game Representation (CGR), ktoré umožňuje efektívnu reprezentáciu biologických sekvencií (jednodimenzionálnych dát) rôznych dĺžok do matíc alebo obrázov (dvojdimenzionálne dáta) konštantných rozmerov. CGR bola prvýkrát predstavená v roku 1988 v knihe Fractals everywhere Michaela Barnsleyho [Barnsley, 1988], pričom jej základným princípom je generovanie fraktálov pomocou iteratívneho procesu mapovania jednorozmernej sekvencie do dvojrozmerného priestoru.

Neskôr v roku 1990 túto metódu ako prvý použil H. Joel Jeffrey na analýzu DNA sekvencií. Jeffrey ukázal, že CGR umožňuje vizualizovať a analyzovať štruktúru DNA sekvencií prostredníctvom fraktálových obrazov, čím položil základy pre nový prístup k analýze sekvencií bez potreby ich zarovnania (alignment-free). Tento prístup umožňuje identifikovať vzory a štruktúry v sekvenciách, ktoré by inak mohli zostať skryté pri použití tradičných metód [Jeffrey, 1990].

Zatiaľ čo CGR poskytuje vizuálnu reprezentáciu (Obrázok 1), FCGR tento koncept kvantifikuje. FCGR je založená na diskretizácii pôvodných súradníc bodov CGR pomocou vopred definovanej mriežky. Tento proces rozdeľuje priestor do mriežky s rozlíšením $2^k \times 2^k$, pričom hodnota k zodpovedá dĺžke analyzovaných k-merov. Výsledkom je matica pevnej veľkosti, ktorej hodnoty zodpovedajú frekvencii jednotlivých k-merov v analyzovanej sekvencii. Každá bunka mriežky obsahuje početnosť (frek-

venciu) bodov CGR, ktoré do nej spadajú, čím sa umožňuje mapovať sekvencie rôznych dĺžok do jednotného formátu. Tieto frekvencie môžu byť následne vizualizované, napríklad pomocou škály sivej farby alebo farebných odtieňov, čím vzniká obrazová reprezentácia distribúcie k-merov v sekvencii [Löchel and Heider, 2021, Chan and Corless, 2023].

Aj keď vo veľmi ojedinelých prípadoch môže dôjsť k zhodnej FCGR matici pre rôzne sekvencie, FCGR poskytuje robustnú reprezentáciu, vhodnú na efektívne porovnávanie a klasifikáciu sekvencií bez potreby ich zarovnávania.

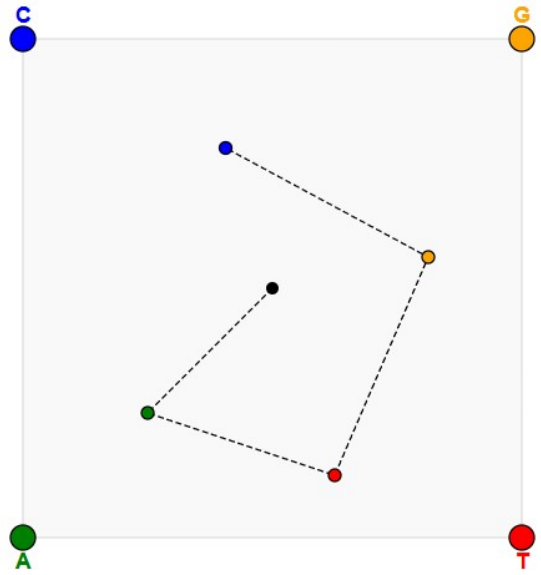
Vizualizácia FCGR zároveň umožňuje identifikovať frekvenčné motívy, absencie určitých k-merov alebo iné štruktúrne znaky. Hoci FCGR nezachytáva poradie k-merov v pôvodnej sekvencii, jej obrazová forma môže naznačiť homológiu medzi sekvenciami, najmä v kombinácii s ďalšími analytickými nástrojmi [Deschavanne et al., 1999].

Hlavnou výhodou FCGR nie je jej absolútna presnosť v reprezentácii každej sekvencie, ale jej výpočtová efektivita a schopnosť pracovať s veľkým objemom dát, vrátane sekvencií rôznych dĺžok a rôznou hĺbkou pokrytia (sequencing depth). Táto vlastnosť robí z FCGR vhodný nástroj pre metódy strojového učenia, keďže umožňuje jednotné spracovanie rôznorodých sekvenčných údajov. V rôznych štúdiách sa ukázalo, že tento prístup dosahuje vysokú presnosť pri klasifikačných úlohách a často prekonáva tradičné analytické metódy založené na zarovnávaní[Cartes et al., 2022, Arias et al., 2021].

Okrem analytických výhod ponúka FCGR aj významný vizualizačný potenciál. Kým náhodné sekvencie vytvárajú chaotické CGR obrazy, biologické sekvencie často generujú fraktálové a opakovateľné vzory. V kontexte narastajúceho významu veľkých dát a umelej inteligencie v biológii sa FCGR javí ako dôležitý nástroj grafickej bioinformatiky s perspektívou ďalšieho vývoja a aplikácií.

Štúdie zároveň poukazujú na dôležitosť správnej voľby rozlíšenia FCGR, nakoľko má výrazný vplyv na výsledky následného strojového učenia. Navyše, usporiadanie vrcholov (vertices) vo FCGR môže ovplyvniť výsledky, čo môže byť využité na augmentáciu dát pre tréning modelov [Cartes et al., 2022, Löchel and Heider, 2021].

FCGR tak predstavuje silný nástroj pre modernú bioinformatiku, ktorý kombinuje výhody grafických reprezentácií sekvencií s možnosťami pokročilých výpočtových techník, a je vhodný ako na vizualizáciu, tak aj na analýzu genetických a proteínových dát. (Obrázok 2)



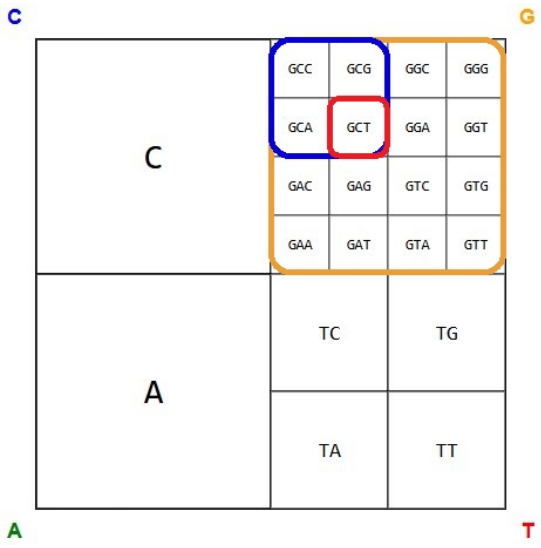
Obr. 1: Chaos Game Representation (CGR) znázorňujúca mapovanie DNA sekvencie do dvojrozmerného priestoru, kde každý nukleotid (A, C, G, T) zodpovedá jednému zo štyroch vrcholov štvorca. Body reprezentujú postupnosť nukleotidov, pričom každý bod je umiestnený v polovičnej vzdialenosti medzi predchádzajúcim bodom a vrcholom zodpovedajúcim aktuálnemu nukleotidu.

3 Metódy

3.1 Spracovanie dát a výpočet frekvencií k-merov

Vstupné dáta pre analýzu pozostávali zo sekvenčných súborov vo formáte `fastq.gz`. Hlavnú analýzu sme vykonali na dátach z dvoch klinických štúdií zameraných na onkologické ochorenia: *PreveLynch* (kolorektálny karcinóm; 438 vzoriek od pacientov s rakovinou a 954 kontrolných vzoriek) a *Genoscan* (rakovina prostaty; 114 vzoriek od pacientov s rakovinou a 114 kontrolných vzoriek). Všetky vzorky boli získané prostredníctvom tekutej biopsie a na analýzu ich poskytla spoločnosť Geneton s.r.o.

Na našu prvotnú validáciu metód sme použili aj verejne dostupné dáta sekvencií troch fylogeneticky odlišných organizmov z databázy European Nucleotide Archive (ENA): Influenza A virus (projekt PRJEB72255) [European Nucleotide Archive, 2024a],



Obr. 2: Frequency Chaos Game Representation (FCGR) vizualizujúca frekvencie výskytu k-merov v sekvenčných dátach. Rozlíšenie FCGR matice je $2^k \times 2^k$, kde hodnota k určuje dĺžku analyzovaných k-merov. V príklade sú zobrazené tri úrovne rozlíšenia pre $k = 1$ (4×4), $k = 2$ (16×16) a $k = 3$ (64×64). Na obrázku je červenou farbou vyznačený 3-mer GCT, ktorý možno v FCGR reprezentácii lokalizovať postupnosťou krokov podľa jednotlivých nukleotidov: najprv navigáciou do kvadrantu G (vpravo hore), následne do podkvadrantu C (vľavo hore v rámci G) a nakoniec do pod-podkvadrantu T (vpravo dole v rámci GC).

Klebsiella pneumoniae (projekt PRJEB72521) [European Nucleotide Archive, 2024b] a *Salmonella enterica* (projekt PRJEB75820) [European Nucleotide Archive, 2024c].

Prvým krokom spracovania bolo spočítanie frekvencií všetkých k-merov v každom `fastq.gz` súbore. Experimentálne sme zvolili dĺžku k-meru $k = 8$, čo predstavovalo kompromis medzi granularitou informácie a výpočtovou náročnosťou. Na efektívne spočítanie 8-merov sme využili nástroj Jellyfish [Marcais and Kingsford, 2011], ktorý je optimalizovaný pre rýchle paralelné spracovanie veľkých sekvenčných dát. Výstupom pre každú vzorku bol zoznam všetkých 8-merov a ich absolútnych počtov.

3.2 Generovanie a normalizácia FCGR matíc

Získané frekvencie 8-merov sme následne použili na generovanie matíc pomocou metódy *Frequency Chaos Game Representation* (FCGR). Implementovali sme modifikovanú verziu FCGR, ktorá mapuje k-mery na základe ich prefixu.

Pozícia v matici pre daný 8-mer bola určená postupným delením priestoru na štyri kvadranty podľa ôsmich nukleotidov tvoriacich k-mer, s použitím štandardného mapovania: A na (0, 0), T na (1, 0), G na (1, 1) a C na (0, 1).

Výsledkom pre každú vzorku bola matica s rozmermi $2^8 \times 2^8 = 256 \times 256$, kde hodnota v každej bunke zodpovedala absolútnemu počtu príslušného 8-meru spočítaného nástrojom Jellyfish.

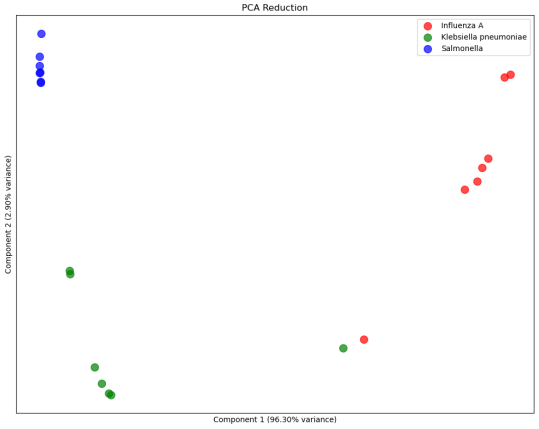
Keďže celkový počet prečítaných sekvencií (a teda aj k-merov) sa medzi vzorkami líšil, bolo potrebné matice normalizovať, aby boli vzájomne porovnateľné. Rozhodli sme sa pre jednoduchú normalizáciu delením hodnoty každej bunky celkovým počtom všetkých 8-merov v danej vzorke (súčtom hodnôt všetkých buniek v matici). Tento postup, ktorý sme označili ako "length"normalizácia, transformuje absolútne počty na relatívne frekvencie (percentuálne zastúpenie) každého 8-meru a je priamočiary a ľahko interpretovateľný. Všetky ďalšie analýzy boli vykonané na takto normalizovaných FCGR maticiach.

Celý proces od spočítania k-merov cez generovanie FCGR až po normalizáciu a následné analýzy bol implementovaný pomocou vlastných skriptov v jazyku Python, využívajúc štandardné knižnice pre numerické výpočty (NumPy) a spracovanie dát.

3.3 Porovnávacie analýzy a vizualizácia

Na posúdenie schopnosti FCGR reprezentácie a rôznych metrík vzdialenosti rozlišovať medzi skupinami vzoriek sme najprv vykonali analýzu na fylogenetických dátach (Influenza A, *K. pneumoniae*, *S. enterica*). Porovnávali sme normalizované FCGR matice pomocou viacerých metrík vzdialenosti (L1, L2, DSSIM, kosínusová podobnosť) a metódy "Descriptor Distance"[Karamichalis et al., 2015]. Táto metóda porovnáva multi-škálové štatistické deskriptory odvodené z lokálnych oblastí FCGR matíc. Výsledky sme vizualizovali pomocou metód redukcie dimenzie, ako je analýza hlavných komponentov (PCA) a viacrozmerné škálovanie (MDS). Ako ukazuje Obrázok 3, metóda Descriptor Distance v kombinácii s

PCA dokázala dobre vizuálne oddeliť tieto tri odlišné skupiny organizmov.

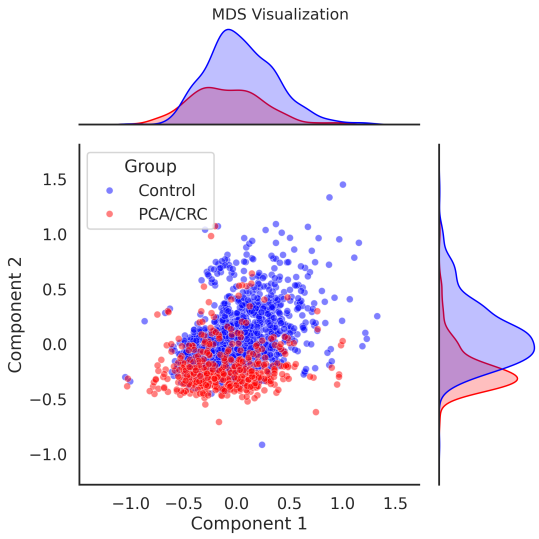


Obr. 3: Vizualizácia PCA založená na metrike Descriptor Distance pre fylogenetické dáta (Influenza A, Klebsiella pneumoniae, Salmonella enterica). Jednotlivé skupiny sú jasne oddelené.

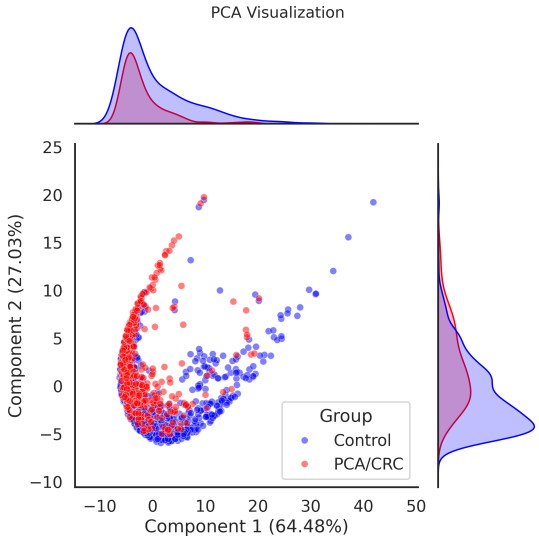
Následne sme aplikovali rovnaký prístup (FCGR s $k = 8$, "length"normalizácia, metrika Descriptor Distance) na porovnanie zdravých a nádorových vzoriek v rámci štúdií *PreveLynch* a *Genoscan*. Ukázalo sa však, že pre tento účel metóda Descriptor Distance neposkytla dostatočne jasné oddelenie medzi skupinami. V prípade dát zo štúdie *Genoscan* bolo oddelenie výrazne horšie ako v prípade dát zo štúdie *PreveLynch*. Vizualizácie pomocou MDS (Obrázok 4) a PCA (Obrázok 5) aj pre *PreveLynch* ukazujú značné prekrytie medzi zdravými (modré body) a nádorovými (červené body) vzorkami pri použití tejto metriky.

Vzhľadom na obmedzenú schopnosť globálnych metrík, ako je Descriptor Distance, efektívne odlíšiť skupiny, sme sa v ďalšej analýze sústredili na priame porovnanie hodnôt jednotlivých buniek normalizovaných FCGR matíc medzi skupinami (zdraví vs. chorí). Cieľom bolo identifikovať konkrétne 8-mery, ktorých relatívna frekvencia sa štatisticky významne líši medzi nádorovými a zdravými vzorkami. Podrobnejšia analýza odhalila potenciálne významné rozdiely, najmä v zastúpení k-merov obsahujúcich dinukleotidy CG a GC, predovšetkým v dátovej sade *Prevelynch*.

Na posúdenie štatistickej významnosti rozdielov v relatívnych frekvenciách 8-merov medzi skupinami sme použili neparametrický Mann-Whitney U-test pre každý 8-mer. Prahovú hodnotu pre štatistickú významnosť sme stanovili na $p < 0.05$, pričom v prípade *PreveLynch* sme identifikovali až 51729 (78.93%) 8-merov s p-hodnotou nižšou ako 0.05. Vzhľadom na mnohonásobné testovanie sme aplikoval

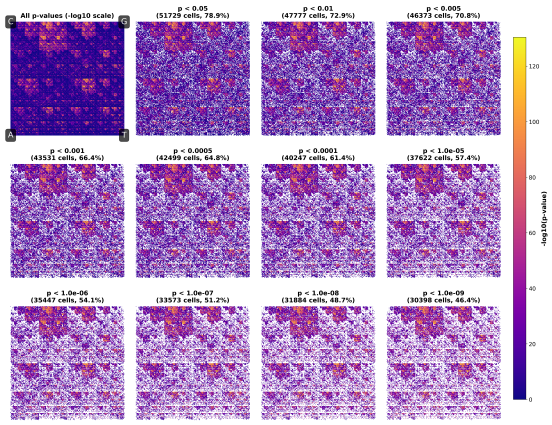


Obr. 4: Vizualizácia MDS založená na metrike Descriptor Distance pre dáta zo štúdie Prevelynch. Červené body predstavujú nádorové vzorky, modré body predstavujú kontrolné (zdravé) vzorky. Pozorujeme značné prekrytie skupín.



Obr. 5: Vizualizácia PCA založená na metrike Descriptor Distance pre dáta zo štúdie Prevelynch. Červené body predstavujú nádorové vzorky, modré body predstavujú kontrolné (zdravé) vzorky. Podobne ako pri MDS, skupiny nie sú jasne oddelené.

vali aj korekčné metódy, konkrétne FDR/Benjamini-Hochberg a Bonferroniho korekciu. Po aplikácii menej prísnej FDR korekcie zostalo signifikantných 51084 (77.95%) 8-merov, čo naznačuje robustnosť našich výsledkov. Dokonca aj pri použití veľmi konzervatívnej Bonferroniho korekcie zostalo štatisticky významných 35210 (53.73%) 8-merov. Tieto výsledky jasne ukazujú, že rozdiely v genomickej kompozícii cfDNA medzi nádorovými a zdravými vzorkami sú štatisticky robustné, čo potvrdzuje aj to, že aj pre p < 1e-6 existuje 54% 8-merov s menšou p-hodnotou (Obrázok 6).



Obr. 6: Vizualizácia p-hodnôt Mann-Whitney U-testu pre 8-mery medzi nádorovými a kontrolnými vzorkami v štúdii Prevelynch pri rôznych prahových hodnotách. Každý podgraf zobrazuje FCGR maticu, kde intenzita farby zodpovedá $-\log_{10}(p)$. Biele oblasti reprezentujú 8-mery, ktorých p-hodnota nespĺňa daný prah. S klesajúcou prahovou hodnotou p-hodnoty (vyššia štatistická významnosť) sa zmenšuje počet farebných buniek, avšak aj pri veľmi nízkych prahoch zostávajú viditeľné oblasti s významnými rozdielmi.

4 Výsledky

Po spracovaní dát a generovaní normalizovaných FCGR matíc pre všetky vzorky v štúdiách *Prevelynch* (LY) a *Genoscan* (GS) sme pristúpili k analýze rozdielov medzi nádorovými a kontrolnými skupinami.

4.1 Vizuálne porovnanie priemerných FCGR matíc

Na úvodné vizuálne posúdenie rozdielov medzi nádorovými a kontrolnými skupinami sme najprv vypočítali priemerné FCGR matice pre každú skupinu v oboch štúdiách.

Tieto matice vznikli spriemerovaním hodnôt v každej bunke (zodpovedajúcej konkrétnemu 8-meru) naprieč všetkými vzorkami danej skupiny. Už pri priamom porovnaní týchto priemerných matíc boli badateľné jemné rozdiely v intenzite niektorých oblastí, obzvlášť v dátach zo štúdie *Prevelynch*.

Pre výraznejšie zobrazenie týchto rozdielov sme následne vizualizovali pomerové matice. Hodnota každej bunky v pomerovej matici bola vypočítaná ako $\log_2$ podielu priemernej frekvencie daného 8-meru v nádorovej skupine a priemernej frekvencie v kontrolnej skupine. Táto logaritmická transformácia zvýrazňuje relatívne zmeny a zlepšuje vizuálny kontrast. Výsledné heatmapy (Obrázok 7) tak efektívne identifikujú oblasti v FCGR priestore, kde sa frekvencie 8-merov medzi skupinami najvýraznejšie líšia.

4.2 Štatistická analýza frekvencií 8-merov

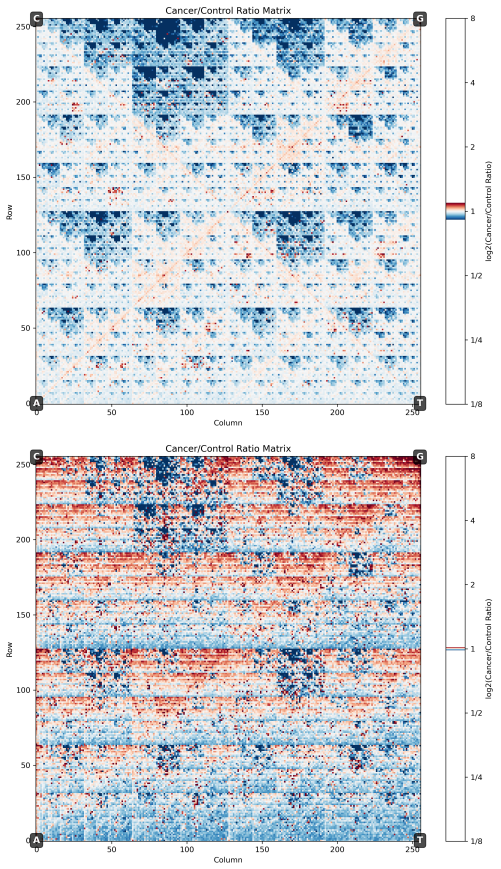
Pre kvantifikáciu pozorovaných rozdielov sme pre každý z $2^8 \times 2^8 = 65536$ 8-merov vykonali Mann-Whitney U-test porovnávajúci relatívne frekvencie medzi nádorovou a kontrolnou skupinou, a to osobitne pre dáta *Prevelynch* (LY) a *Genoscan* (GS).

V štúdii *Prevelynch* sme identifikovali značný počet 8-merov, ktorých frekvencia sa štatisticky významne líšila medzi skupinami ($p < 0.05$). Konkrétne 78.93% 8-merov vykazovalo signifikantný rozdiel (Obrázok 6).

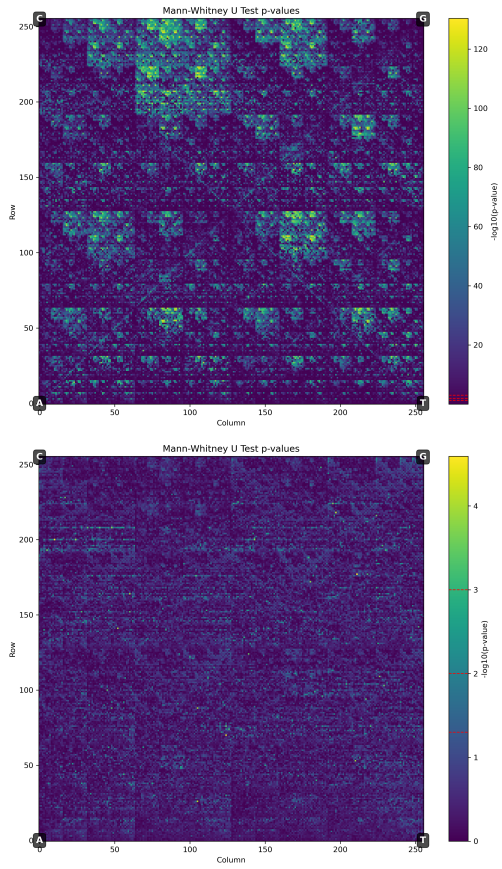
V štúdii *Genoscan* sme identifikovali štatisticky významné rozdiely vo frekvenciách 8-merov, avšak ich celkový počet bol výrazne nižší v porovnaní so štúdiou *Prevelynch*. Iba 2.80% 8-merov vykazovalo p-hodnoty menšie ako 0.05, čo naznačuje menej výrazné rozdiely medzi nádorovými a kontrolnými vzorkami v tejto štúdii (Obrázok 8).

4.3 Analýza frekvencií dinukleotidov

Po identifikácii štatisticky významných rozdielov medzi nádorovými a kontrolnými vzorkami na úrovni 8-merov sme sa rozhodli analyzovať aj kratšie podsekvencie, predovšetkým dinukleotidy (2-mery).



Obr. 7: Vizualizácia pomerových matíc medzi nádorovými a kontrolnými vzorkami reprezentovaná ako heatmapy. Farebná škála zobrazuje logaritmický pomer frekvencií 8-merov - červená farba indikuje vyššie zastúpenie v nádorových vzorkách, modrá nižšie zastúpenie oproti kontrolám. Vrchný obrázok: štúdia Prevelynch (kolorektálny karcinóm) s výraznými oblasťami rozdielov v k-meroch obsahujúcich CG a GC dinukleotidy. Spodný obrázok: štúdia Genoscan (rakovina prostaty) s menej výraznými rozdielmi.



Obr. 8: P-hodnoty Mann-Whitney U-testu pri porovnaní 8-merov medzi nádorovými a kontrolnými vzorkami. Vrchná matica: štúdia Prevelynch s významne rozdielnymi oblasťami; spodná matica: štúdia Genoscan s minimálnymi rozdielmi. Farebná škála reprezentuje $-\log_{10}(p)$, svetlejšie oblasti značia vyššiu štatistickú významnosť. Výsledky poukazujú na špecifickosť rozdielov podľa typu nádorového ochorenia.

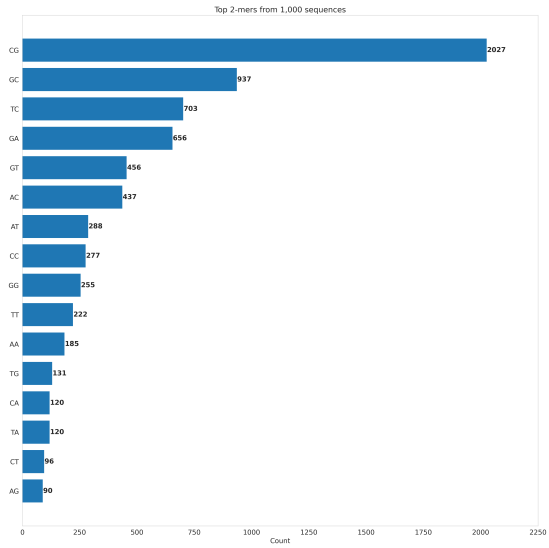
Táto analýza bola zameraná najmä na štúdiu *Prevelynch*, kde boli rozdiely najvýraznejšie. Z tisícky najvýznamnejších 8-merov (zoradených podľa p-hodnoty) sme extrahovali všetky dinukleotidy, ktoré tieto 8-mery obsahujú, a spočítali ich frekvencie.

Táto agregácia nám umožnila identifikovať najčastejšie sa vyskytujúce dinukleotidy v najvýznamnejších 8-meroch, čo poskytlo jasnejší obraz o základných sekvenčných motívoch, ktoré sa najviac líšia medzi nádorovými a kontrolnými vzorkami (Obrázok 9). Vizuálne aj štatistické analýzy pritom naznačovali, že tieto rozdiely sú koncentrované v určitých špecifických oblastiach FCGR matice.

Neskoršia a kompletná analýza dinukleotidov priniesla zaujímavé výsledky s výraznými rozdielmi medzi nádorovými a kontrolnými vzorkami pre viacero kombinácií nukleotidov. Najvýznamnejšie výsledky sme zoradili jednak podľa štatistickej významnosti (p-hodnota), jednak podľa veľkosti efektu (absolútna hodnota koeficientu), ako zobrazuje Tabuľka **??**.

Najvýraznejšie výsledky sme zistili pre nasledujúce dinukleotidy:

- **Dinukleotid CG:** 8-mery obsahujúce dinukleotid CG boli v priemere signifikantne *menej*



Obr. 9: Frekvencia výskytu dinukleotidov (2-merov) v tisícke najštatisticky významnejších 8-merov. Graf znázorňuje, že dinukleotidy CG a GC sa vyskytujú výrazne častejšie než ostatné dinukleotidy, čo naznačuje ich kľúčovú úlohu v rozlišovaní medzi nádorovými a kontrolnými vzorkami. Nasledujú ich dinukleotidy TC, GA a GT s podstatne nižším zastúpením.

časté v nádorových vzorkách v porovnaní s kontrolnými vzorkami. Priemerná zmena frekvencie v nádorových vzorkách oproti kontrolným predstavovala -2,9330% a priemerná p-hodnota bola extrémne nízka: $4{,}95 \times 10^{-30}$ (Obrázok 10a). Tento dinukleotid vykazoval jednoznačne najsilnejší efekt aj najvyššiu štatistickú významnosť.

- **Dinukleotid GC:** Taktiež 8-mery obsahujúce dinukleotid GC boli v priemere signifikantne *menej časté* v nádorových vzorkách ako v kontrolných. Priemerná zmena frekvencie v nádorových vzorkách oproti kontrolným predstavovala -0,6089% s priemernou p-hodnotou $8{,}59 \times 10^{-6}$ (Obrázok 10b).

- **Dinukleotid GA:** Zaujímavé je, že 8-mery obsahujúce GA vykazovali opačný trend a to, že boli *častejšie* v nádorových vzorkách s priemerným nárastom hodnoty o 0,5126% a vysokou štatistickou významnosťou (p-hodnota $1{,}72 \times 10^{-27}$).

- **Ostatné významné dinukleotidy:** Ďalšie výrazné rozdiely sme pozorovali pri dinukleotidoch AC a GT (nižšia frekvencia v nádorových vzorkách) a TC a AG (vyššia frekvencia v nádorových vzorkách), všetky s p-hodnotou nižšou ako 10^{-8}.

Tieto výsledky naznačujú systematickú zmenu v zastúpení viacerých dinukleotidov v analyzovaných fragmentoch DNA medzi nádorovými a zdravými jedincami v kontexte kolorektálneho karcinómu, pričom najvýraznejšie rozdiely sa prejavili pri dinukleotidoch CG, GC a GA.

Podobnú analýzu dinukleotidov sme uskutočnili aj pre dáta zo štúdie *Genoscan* (GS), avšak na rozdiel od štúdie *Prevelynch* výsledky nevykazovali štatistickú významnosť. Pre dinukleotidy CG a GC, ktoré boli výrazne významné v *Prevelynch*, sme v *Genoscan* zaznamenali vysoké p-hodnoty (CG: p = 0.9576; GC: p = 0.5926), čo indikuje zanedbateľné rozdiely medzi nádorovými a kontrolnými vzorkami. Najbližšie k hranici štatistickej významnosti sa priblížil dinukleotid TT (p = 0.0703), nasledovaný AT (p = 0.1243) a TA (p = 0.1956). Z hľadiska veľkosti efektu bol najvýraznejší rozdiel pozorovaný pri dinukleotide GG (1.2059%), zatiaľ čo rozdiely pre CG a GC boli podstatne menšie (0.5929% a 0.2458%). Tieto zistenia naznačujú, že zmeny v zastúpení dinukleotidov môžu byť špecifické pre konkrétny typ nádorového ochorenia.

Celkovo výsledky štatistickej analýzy potvrdili existenciu merateľných rozdielov v genomickej kompozícii (na úrovni frekvencií 8-merov a agregovane aj dinukleotidov) medzi nádorovými a kontrolnými vzorkami získanými tekutou biopsiou, pričom najvýraznejšie a najkonzistentnejšie vzory sme pozorovali v dátach štúdie *Prevelynch*.

5 Diskusia

5.1 Efektívnosť FCGR reprezentácie v analýze genomickej kompozície

Cieľom tejto práce bolo preskúmať potenciál analýzy genomickej kompozície pomocou metódy Frequency Chaos Game Representation (FCGR) pre rozlíšenie medzi nádorovými a zdravými vzorkami získanými prostredníctvom tekutej biopsie. Analyzovali sme dáta z dvoch štúdií, *Prevelynch* (kolorektálny karcinóm) a *Genoscan* (rakovina prostaty), so zameraním na identifikáciu špecifických vzorov vo frekvenciách k-merov (konkrétne 8-merov), ktoré by mohli slúžiť ako potenciálne biomarkery.

Tabuľka 1: Najvýznamnejšie dinukleotidy zoradené podľa p-hodnoty (od najnižšej)

Poradie	Dinukleotid	p-hodnota	Koeficient(%)	Frekv. v nádor. vzorkách
1	CG	$4{,}95 \times 10^{-30}$	−2,9330	↓
2	GA	$1{,}72 \times 10^{-27}$	0,5126	↑
3	AC	$1{,}80 \times 10^{-23}$	−0,3085	↓
4	GT	$2{,}06 \times 10^{-21}$	−0,2509	↓
5	TC	$1{,}84 \times 10^{-10}$	0,2724	↑

Tabuľka 2: Najvýznamnejšie dinukleotidy zoradené podľa absolútnej hodnoty koeficientu (od najväčšej)

Poradie	Dinukleotid	p-hodnota	Koeficient(%)	Frekv. v nádor. vzorkách
1	CG	$4{,}95 \times 10^{-30}$	−2,9330	↓
2	GC	$8{,}59 \times 10^{-06}$	−0,6089	↓
3	GA	$1{,}72 \times 10^{-27}$	0,5126	↑
4	AG	$2{,}06 \times 10^{-08}$	0,3185	↑
5	AC	$1{,}80 \times 10^{-23}$	−0,3085	↓

Naše výsledky potvrdzujú, že FCGR reprezentácia poskytuje užitočný nástroj na vizualizáciu a analýzu komplexných sekvenčných dát z tekutej biopsie. Hoci globálne metriky porovnávajúce celé FCGR matice, ako napríklad Descriptor Distance [Karamichalis et al., 2015], neukázali dostatočnú schopnosť separovať nádorové a kontrolné vzorky v našom kontexte (Obrázky 4 a 5), detailnejšia analýza na úrovni jednotlivých 8-merov odhalila štatisticky významné rozdiely. V štúdii *Prevelynch* sme zistili, že až takmer 79% všetkých možných 8-merov vykazovalo signifikantne odlišnú frekvenciu medzi nádorovými a kontrolnými skupinami. Tento vysoký podiel naznačuje významné zmeny v kompozícii analyzovaných fragmentov DNA u pacientov s kolorektálnym karcinómom. Naproti tomu, v štúdii *Genoscan* bol podiel signifikantne sa líšiacich 8-merov podstatne nižší (menej ako 3%), čo poukazuje na menej výrazné rozdiely v kompozícii cfDNA pri rakovine prostaty, aspoň na úrovni 8-merov detekovateľných našou metódou.

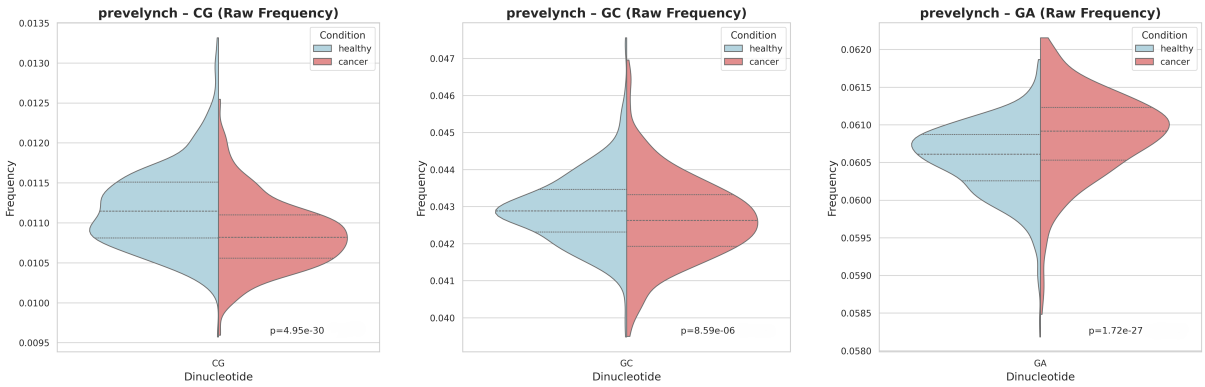
5.2 Kľúčové nálezy v štúdiách Prevelynch a Genoscan

Zaujímavým a kľúčovým zistením v štúdii *Prevelynch* bola signifikantná zmena vo frekvenciách 8-merov obsahujúcich dinukleotidy CG a GC. Podľa našich výsledkov boli obe tieto skupiny 8-merov v priemere *menej časté* v nádorových vzorkách v porovnaní s kontrolami.

5.3 Vizuálna interpretácia výsledkov

Dôležité je, že tieto štatisticky významné rozdiely, najmä tie týkajúce sa CG dinukleotidu, sa premietli aj do vizuálnej podoby FCGR matíc. Ako je vidieť na pomerových a p-hodnotových mapách pre štúdiu Prevelynch (Obrázky 7 a 8), najvýraznejšie rozdiely sú koncentrované v špecifických oblastiach matice. Predovšetkým oblasť zodpovedajúca k-merom s nižším obsahom G a C báz vykazuje viditeľné a štatisticky významné rozdiely (nižšie p-hodnoty) vo vzorkách Prevelynch. Toto vizuálne potvrdenie signifikantných rozdielov práve v biologicky relevantných oblastiach FCGR ďalej podporuje potenciál tejto metódy pre biomarkerové štúdie.

Absencia podobne silných signálov a štatisticky významných rozdielov pre CG, GC a ďalšie dinukleotidy v štúdii *Genoscan* je tiež dôležitým pozorovaním. Môže to naznačovať, že zmeny v kompozícii cfDNA sú špecifické pre daný typ nádoru. Biológia rakoviny prostaty sa líši od kolorektálneho karcinómu a je možné, že markery založené na frekvenciách k-merov nie sú pre jej detekciu z cfDNA tak informatívne, alebo by si vyžadovali analýzu iných dĺžok k-merov, prípadne zameranie na iné typy sekvenčných motívov. Rozdiely mohli byť ovplyvnené aj charakteristikami samotných štúdií (napr. veľkosť súboru, štádium ochorenia pacientov, metódy odberu a spracovania vzoriek).



(a) Dinukleotid CG (b) Dinukleotid GC (c) Dinukleotid GA

Obr. 10: Distribúcia frekvencií vybraných dinukleotidov medzi nádorovými a kontrolnými vzorkami v štúdii Prevelynch. Grafy znázorňujú výrazné rozdiely v zastúpení dinukleotidov CG (znížený v nádorových vzorkách), GC (znížený v nádorových vzorkách) a GA (zvýšený v nádorových vzorkách).

5.4 Limitácie a výzvy

Naša štúdia má aj určité limitácie. Použili sme k-mery pevnej dĺžky (k=8); je možné, že analýza kratších alebo dlhších k-merov by mohla odhaliť ďalšie relevantné vzory. Normalizácia "length"bola zvolená pre jednoduchosť, ale iné normalizačné metódy by mohli čiastočne ovplyvniť výsledky. Pri analýze cfDNA je tiež dôležité brať do úvahy faktory ako variabilita v množstve nádorovej DNA (tumor fraction) v krvi a potenciálne skreslenie spôsobené nebiologickými faktormi (napr. PCR amplifikácia, sekvenčné chyby). Tieto faktory neboli v našej analýze priamo zohľadnené.

5.5 Budúci výskum a potenciálne aplikácie

Napriek týmto limitáciám naše výsledky demonštrujú, že analýza frekvencií k-merov pomocou FCGR je sľubným prístupom pre identifikáciu rozdielov medzi cfDNA zdravých jedincov a pacientov s rakovinou, obzvlášť v prípade kolorektálneho karcinómu. Identifikované signifikantné rozdiely v zastúpení špecifických 8-merov, a najmä tie súvisiace s CG, GC a GA dinukleotidmi, predstavujú potenciálny základ pre vývoj nových neinvazívnych diagnostických alebo monitorovacích nástrojov. Budúci výskum by sa mal zamerať na validáciu týchto zistení na nezávislých a väčších kohortách pacientov, na preskúmanie biologického pozadia pozorovaných zmien a na integráciu najinformatívnejších k-merových znakov do prediktívnych modelov s využitím metód strojového učenia. Takéto modely by mohli viesť k vytvoreniu jednoduchých a efektívnych testov založených na analýze genomickej kompozície z tekutej biopsie.

6 Záver

V našej práci sme sa zamerali na využitie analýzy genomickej kompozície s použitím metódy Frequency Chaos Game Representation (FCGR) na odhalenie rozdielov medzi zdravými a nádorovými vzorkami DNA získanými z tekutej biopsie. Na základe detailnej analýzy 8-merov sme identifikovali významné rozdiely v zastúpení špecifických dinukleotidových motívov (najmä CG, GC a GA) v prípade kolorektálneho karcinómu (štúdia Prevelynch). Tieto rozdiely môžu reflektovať biologické procesy ako zmenenú DNA metyláciu, ktorá je charakteristická pre rakovinové ochorenia.

Zistené rozdiely sa však neprejavili v rovnakej miere pri rakovine prostaty (štúdia Genoscan), čo poukazuje na možnú špecifickosť genomických vzorov pre jednotlivé typy rakoviny a zároveň zdôrazňuje potrebu ďalšieho skúmania v rôznych onkologických kontextoch.

Výsledky našej práce potvrdzujú potenciál využitia analýzy genomickej kompozície v diagnostike rakoviny a poskytujú podklad pre ďalší výskum smerujúci k vývoju efektívnych a neinvazívnych diagnostických nástrojov založených na analýze cfDNA. Budúci výskum by mal zahŕňať validáciu na rozsiahlejších súboroch vzoriek, optimalizáciu výpočtových metód a integráciu našich zistení s algoritmami stro-

jového učenia, čo môže výrazne prispieť k zlepšeniu včasnej detekcie a monitoringu nádorových ochorení.

Poďakovanie

Rád by som poďakoval môjmu školiteľovi, Mgr. Jaroslav Budiš, PhD., za jeho odborné vedenie, cenné rady a trpezlivú podporu pri spracovaní tejto práce. Ďalej by som chcel vyjadriť poďakovanie spoločnosti Geneton s.r.o. spolu s Vedeckým parkom Univerzity Komenského v Bratislave za poskytnutie dát a vytvorenie zázemia na realizáciu výskumu. V neposlednom rade ďakujem svojej rodine a kolegom z Katedry informatiky FMFI UK za ich povzbudenie a pomoc pri riešení odborných i organizačných výziev.

Literatúra

[Alberts et al., 2002] Alberts, B., Johnson, A., Lewis, J., et al. (2002). The structure and function of dna. In *Molecular Biology of the Cell*. Garland Science, New York, 4 edition.

[Aquino and Pascut, 2024] Aquino, I. M. C. and Pascut, D. (2024). Liquid biopsy: New opportunities for precision medicine in hepatocellular carcinoma care. *Annals of Hepatology*, 29(2):101176.

[Arias et al., 2021] Arias, P. M., Alipour, F., Hill, K. A., and Kari, L. (2021). Delucs: Deep learning for unsupervised clustering of dna sequences. *bioRxiv*.

[Barnsley, 1988] Barnsley, M. F. (1988). *Fractals Everywhere*. Academic Press, San Diego, CA.

[BIOGEN,] BIOGEN. Gatcliquid - detekce cirkulující nádorové dna pomocí tekuté biopsie.

[BioNumbers Database,] BioNumbers Database. Overall genome size. BioNumbers: The Database of Useful Biological Numbers.

[Boukovala et al., 2024] Boukovala, M., Westphalen, C. B., and Probst, V. (2024). Liquid biopsy into the clinics: Current evidence and future perspectives. *The Journal of Liquid Biopsy*, 4:100146.

[Cartes et al., 2022] Cartes, J. A., Anand, S., Ciccolella, S., Bonizzoni, P., and Della Vedova, G. (2022). Accurate and fast clade assignment via deep learning and frequency chaos game representation. *bioRxiv*.

[Chan and Corless, 2023] Chan, E. Y. and Corless, R. M. (2023). Chaos game representation. *SIAM Review*, 65(1):261–290.

[Cisneros-Villanueva et al., 2022] Cisneros-Villanueva, M., Hidalgo-Pérez, L., Rios-Romero, M., Cedro-Tanda, A., Ruiz-Villavicencio, C. A., Page, K., Hastings, R., Fernandez-Garcia, D., Allsopp, R., Fonseca-Montaño, M. A., Jimenez-Morales, S., Padilla-Palma, V., Shaw, J. A., and Hidalgo-Miranda, A. (2022). Cell-free dna analysis in current cancer clinical trials: a review. *British Journal of Cancer*, 126(3):391–400.

[Clavijo, 2018] Clavijo, B. J. (2018). k-mer counting, part i: Introduction. BioInfologics Blog.

[Deschavanne et al., 1999] Deschavanne, P. J., Giron, A., Vilain, J., Fagot, G., and Fertil, B. (1999). Genomic signature: characterization and classification of species assessed by chaos game representation of sequences. *Molecular biology and evolution*, 16(10):1391–1399.

[European Food Safety Authority,] European Food Safety Authority. Biomarker.

[European Nucleotide Archive, 2024a] European Nucleotide Archive (2024a). Influenza a.

[European Nucleotide Archive, 2024b] European Nucleotide Archive (2024b). Klebsiella.

[European Nucleotide Archive, 2024c] European Nucleotide Archive (2024c). Salmonella.

[Goodwin et al., 2016] Goodwin, S., McPherson, J. D., and McCombie, W. R. (2016). Coming of age: ten years of next-generation sequencing technologies. *Nature Reviews Genetics*, 17(6):333–351.

[Grabuschnig et al., 2020] Grabuschnig, S., Bronkhorst, A. J., Holdenrieder, S., Rosales Rodriguez, I., Schliep, K. P., Schwendenwein, D., Ungerer, V., and Sensen, C. W. (2020). Putative origins of cell-free dna in humans: A review of active and passive nucleic acid release mechanisms. *International Journal of Molecular Sciences*, 21(21):8062. PMID: 33137955; PMCID: PMC7662960.

[Jeffrey, 1990] Jeffrey, H. J. (1990). Chaos game representation of gene structure. *Nucleic Acids Research*, 18(8):2163–2170. PMID: 2336393; PMCID: PMC330698.

[Karakoyun et al., 2023] Karakoyun, H. K., Sayar, C., and Yararbaş, K. (2023). Challenges in clinical interpretation of next-generation sequencing data: Advantages and pitfalls. *Results in Engineering*, 20:101421.

[Karamichalis et al., 2015] Karamichalis, R., Kari, L., Konstantinidis, S., and Kopecki, S. (2015). An investigation into inter- and intragenomic variations of graphic genomic signatures. *BMC bioinformatics*, 16(1):1–17.

[Löchel and Heider, 2021] Löchel, H. F. and Heider, D. (2021). Chaos game representation and its applications in bioinformatics. *Computational and Structural Biotechnology Journal*, 19:6263–6271. PMID: 34900136; PMCID: PMC8636998.

[Lone et al., 2022] Lone, S. N., Nisar, S., Masoodi, T., Singh, M., Rizwan, A., Hashem, S., El-Rifai, W., Bedognetti, D., Batra, S. K., Haris, M., Bhat, A. A., and Macha, M. A. (2022). Liquid biopsy: a step closer to transform diagnosis, prognosis and future of cancer treatments. *Molecular Cancer*, 21(1):79.

[Löchel and Heider, 2021] Löchel, H. F. and Heider, D. (2021). Chaos game representation and its applications in bioinformatics. *Computational and Structural Biotechnology Journal*, 19:6263–6271.

[Ma et al., 2024] Ma, L., Guo, H., Zhao, Y., Liu, Z., Wang, C., Bu, J., Sun, T., and Wei, J. (2024). Liquid biopsy in cancer: current status, challenges and future prospects. *Signal Transduction and Targeted Therapy*, 9(1):336.

[Marcais and Kingsford, 2011] Marcais, G. and Kingsford, C. (2011). A fast, lock-free approach for efficient parallel counting of occurrences of k-mers. *Bioinformatics*, 27(6):764–770.

[Medina et al., 2023] Medina, J. E., Dracopoli, N. C., Bach, P. B., Lau, A., Scharpf, R. B., Meijer, G. A., Andersen, C. L., and Velculescu, V. E. (2023). Cell-free dna approaches for cancer early detection and interception. *J Immunother Cancer*, 11(9):e006013. PMID: 37696619; PMCID: PMC10496721.

[Moeckel et al., 2024a] Moeckel, C., Mareboina, M., Konnaris, M. A., Chan, C. S., Mouratidis, I., Montgomery, A., Chantzi, N., Pavlopoulos, G. A., and Georgakopoulos-Soares, I. (2024a). A survey of k-mer methods and applications in bioinformatics. *Computational and Structural Biotechnology Journal*, 23:2289–2303.

[Moeckel et al., 2024b] Moeckel, C., Mareboina, M., Konnaris, M. A., Chan, C. S., Mouratidis, I., Montgomery, A., Chantzi, N., Pavlopoulos, G. A., and Georgakopoulos-Soares, I. (2024b). A survey of k-mer methods and applications in bioinformatics. *Computational and Structural Biotechnology Journal*, 23:2289–2303.

[National Human Genome Research Institute,] National Human Genome Research Institute. Dna sequencing. Genetics Glossary.

[Newslab,] Newslab. Tekutá biopsia v klinickej praxi.

[Nikanjam et al., 2022] Nikanjam, M., Kato, S., and Kurzrock, R. (2022). Liquid biopsy: current technology and clinical applications. *Journal of Hematology & Oncology*, 15(1):131.

[Satam et al., 2023] Satam, H., Joshi, K., Mangrolia, U., Waghoo, S., Zaidi, G., Rawool, S., Thakare, R. P., Banday, S., Mishra, A. K., Das, G., and Malonia, S. K. (2023). Next-generation sequencing technology: Current trends and advancements. *Biology (Basel)*, 12(7):997. PMID: 37508427; PMCID: PMC10376292; Erratum in: Biology (Basel). 2024 Apr 24;13(5):286. doi: 10.3390/biology13050286.

[Strimbu and Tavel, 2010] Strimbu, K. and Tavel, J. A. (2010). What are biomarkers? *Current Opinion in HIV and AIDS*, 5(6):463–466. PMID: 20978388; PMCID: PMC3078627.

[World Health Organization, 2024] World Health Organization (2024). Global cancer burden growing amidst mounting need for services. Technical report, World Health Organization.

[Xu, 2020] Xu, H. (2020). Chapter 7 - big data challenges in genomics. In Srinivasa Rao, A. S. and Rao, C., editors, *Principles and Methods for Data Science*, volume 43 of *Handbook of Statistics*, pages 337–348. Elsevier.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 223–228
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Viktor Samuel Podhradský

Statistical model for structural prediction of short tandem repeats employing population data

Viktor Samuel Podhradský[1*]

Supervisor: Andrej Baláž[2†]

[1] Department of Computer Science, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2] Geneton s.r.o., Ilkovičova 8, 841 04 Bratislava

Abstract: Short tandem repeats (STRs) are DNA sequences in which a short motif, typically 2 to 6 bases long, is repeated multiple times consecutively. STRs, also known as microsatellites, exhibit high variability among individuals in terms of the number of repeats and the presence of small nucleotide changes (interruptions). This variability is associated with several genetic disorders, including amyotrophic lateral sclerosis (ALS), Huntington's disease (HD), and Baratela-Scott syndrome (BSS). Accurate prediction of STR structure is therefore crucial for understanding their biological function and their relation to diseases.

In this study, we apply statistical methods inspired by the Expectation-Maximization (EM) algorithm to predict STR structure. By leveraging population genetic data, our approach aims to accurately derive STR repeat patterns, capture their variability, and enhance prediction precision at the nucleotide level.

Keywords: Short Tandem Repeats (STRs), Expectation-Maximization (EM), Genetic Disorders

1 Introduction

1.1 Bioinformatics and Computational genomics

Bioinformatics is an interdisciplinary scientific field that integrates principles of computer science to analyze and interpret biological data.

If the biological data being analyzed consists specifically of genomic information, the field branches into computational genomics, which focuses on the development and application of computational methods to study the structure, function, and evolution of genomes.

The genome encompasses all the instructions necessary for the development, functioning, and reproduction of life. This genetic blueprint is organized into DNA (deoxyribonucleic acid) molecules, which are structured as long, double-stranded helices composed of nucleotide units. Each nucleotide consists of a phosphate group, a sugar molecule, and a nitrogenous base: adenine (A), thymine (T), cytosine (C), or guanine (G). The sequence of these bases encodes genetic information in the form of genes, regulatory regions, and non-coding sequences. DNA, as the molecular basis of heredity, is organized into chromosomes.

Typically, DNA sequences are expressed as strings of the letters A, T, C, and G, corresponding to the four nucleotide bases. This representation allows for computational processing using algorithms that detect patterns, variations, and functional elements within the sequence.

The sheer scale of genomic data necessitates computational approaches. The human genome consists of approximately 3 billion base pairs and encodes around 20,000 to 25,000 genes. It also includes an average of 4 to 5 million single nucleotide polymorphisms (SNPs) per individual and thousands of short tandem repeat (STR) regions. However, only a small fraction of these STR regions have been associated with known diseases, such as amyotrophic lateral sclerosis (ALS) and Huntington's disease (HD). These disease-related STR regions require the highest level of prediction accuracy at the nucleotide level to identify small variations that may influence disease mechanisms. Additionally, integrating confidence metrics into predictions could further enhance the interpretability and reliability of computational models, potentially improving the application of methods like Expectation-Maximization (EM) in future studies.

1.2 Expectation Maximization

The Expectation-Maximization (EM) algorithm is a statistical method designed to optimize model parameters when dealing with data that include unobserved or hidden variables. It provides a framework for es-

*podhradsky13@uniba.sk
†andrejbalaz001@gmail.com

timating maximum likelihood (ML) or maximum a posteriori (MAP) values by iteratively refining parameter estimates, making it suitable for applications in areas like machine learning, bioinformatics, and computational biology.

The core idea of the EM algorithm lies in leveraging the observed data and partially inferring the hidden structure of the data. By cycling between two complementary steps—the Expectation (E) step and the Maximization (M) step—the EM algorithm gradually refines its model to better fit the data.

Key Steps of the EM Algorithm

Initialization

The algorithm begins with an initial approximation of the model parameters, which can be derived from prior knowledge, heuristics, or even random selection. This initial state serves as the starting point for the iterative process. While the choice of initialization does not guarantee reaching a global maximum of the likelihood function, it significantly influences the quality and speed of convergence.

Expectation Step (E-Step)

In the E-step, the algorithm estimates the expected values, given the current model parameters. It uses the observed data to infer the probabilistic distribution of these hidden components under the assumption of the current parameter settings. Intuitively, this step provides information on how well the current model explains the dataset.

Maximization Step (M-Step)

The M-step refines the model parameters by maximizing the likelihood of the observed data, conditioned on the hidden variable estimates from the E-step. It adjusts the parameter values to maximize agreement between the model and the data, making the model's predictions progressively better.

This step corresponds to updating the model parameters so that the likelihood function increases, aligning the model closer to the observed reality.

Iteration and Convergence

The algorithm converges when the difference in parameter updates or the increase in the likelihood function falls below a predefined threshold, signifying that further iterations will not yield significant improvement.

1.3 Short Tandem Repeats

Short Tandem Repeats (STRs) are repetitive DNA sequences consisting of short motifs, typically 1 to 6 base pairs in length, repeated consecutively. These sequences are distributed throughout the genome, with each specific position on a chromosome known as an STR locus. STRs are characterized by their high variability in the number of repeat units among individuals.

1.3.1 Biological Significance and Applications of STRs

STR regions vary significantly among individuals because of their high mutation rate, primarily caused by replication slippage during DNA replication. This variability makes STRs valuable genetic markers for a wide range of applications:

- **Forensic Science:** STRs are extensively used in DNA fingerprinting and forensic investigations to establish identity and kinship due to their high discriminatory power.
- **Population Genetics:** STRs serve as tools for studying genetic diversity, population structure, and evolutionary relationships.
- **Medical Genetics:** Variations in STRs are associated with several genetic disorders, such as Huntington's disease, fragile X syndrome, and amyotrophic lateral sclerosis. Specifically, STR expansions in genes and regulatory regions can disrupt gene function and lead to disease phenotypes.
- **Gene Expression Regulation:** STRs located in promoter or regulatory regions can influence gene expression levels, contributing to phenotypic diversity and adaptation.

1.3.2 Challenges in STR Research

Despite their importance, the study of STRs presents several challenges:

- **Complexity of STR Variability:** The high mutation rate and variability in repeat number complicate the accurate characterization of STR loci.

This variability can result in alleles with differing repeat lengths, making genotyping and analysis challenging.

- **Technical Limitations:** Traditional sequencing technologies, such as short-read sequencing, often struggle to resolve STR regions accurately due to their repetitive nature.
- **Data Interpretation:** The biological significance of STR variations, particularly in non-coding regions, remains poorly understood.
- **Ethical Considerations:** The use of STR data in forensic and medical contexts raises ethical concerns related to privacy, consent, and the potential for misuse of genetic information.

1.3.3 Future Directions and Opportunities

Advances in sequencing technologies and bioinformatics offer promising opportunities to address these challenges.

The study of STRs also holds potential for novel applications, such as the development of personalized medicine approaches based on individual STR profiles and the exploration of STRs as biomarkers for disease diagnosis and prognosis. Furthermore, comparative genomics studies of STRs across species can provide insights into their evolutionary significance and functional roles.

2 STRs Prediction

Accurate prediction of STR structures is essential for understanding their biological significance and applications. In this study, we employ the Expectation-Maximization (EM) algorithm to infer STR structures from sequencing data. Our approach leverages probabilistic modeling to improve the accuracy of STR prediction by iteratively estimating motif frequencies. The dataset used for this study consists of population allele occurrences and short sequencing reads from a reference genome.

2.1 STRs Prediction Statistical Model

The procedure is divided into three phases: a Pre-EM initialization step, an Expectation (E) step, and a Maximization (M) step. Each step is described in detail below.

2.1.1 Pre-EM Initialization

Before iteratively applying the EM algorithm, we perform several preparatory operations to establish robust initial probability estimates and mappings.

Read Selection and Read Base Probability Calculation For a candidate STR locus, we first select reads covering the relevant genomic region. For each read, we calculate the probability of observing each possible base at every position using quality scores. For a read r at position j, the probability of observing base b_k, where $k \in \{A, C, G, T\}$, is computed as:

$$P(b_k \mid r, j) = \begin{cases} 1 - q, & \text{if } b_k = \text{observed base at } (r, j), \\ \frac{q}{3}, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Here, q is the error probability derived from the quality score for the corresponding position in the read.

Mapping Reads to Motif Variants Candidate motif variants represent expanded STR motifs combined with flanking sequences derived from the reference genome. For each motif variant, flanking regions of length 1000 bases are extracted from the reference genome based on the motif's genomic coordinates. These flanking sequences are then appended to the fully written out motif at both ends to create the complete candidate sequence for alignment. This construction ensures that the alignment captures not only the STR structure but also the surrounding genomic context, which is essential for accurate read mapping.

Reads are then aligned to candidate motif variants using a semi-global alignment strategy. This alignment does not penalize gaps at the beginning or end of the alignment, making it particularly advantageous for reads that may only partially cover the STR region.

Base Probability Calculation Following alignment, a probability is calculated for each motif position. For a motif M_i and its j-th position, the probability of observing base b_k is determined by analyzing all reads aligned to that position. Specifically, the probability $P(b_k \mid M_i, j)$ is calculated as the ratio of the number of bases b_k aligned to position j in motif M_i to the total number of bases aligned to that position. Formally:

$$P(b_k \mid M_i, j) = \frac{C(b_k, j)}{\sum_{b \in \{A,C,G,T\}} C(b, j)},$$

where:

- $C(b_k, j)$ represents the number of reads aligned to position j in motif M_i where base b_k is observed,
- $\sum_{b \in \{A,C,G,T\}} C(b, j)$ is the total number of reads aligned to position j, considering all possible bases $b \in \{A, C, G, T\}$.

This formulation ensures that the probability distribution accounts for the relative frequency of each base at the given position, reflecting the observed genomic variability.

Initialization of Motif Frequency Matrix The initial motif frequencies $f(M_i)$ for the EM algorithm are derived from population allele data. These frequencies are not arbitrary guesses but rather normalized values computed from the observed allele frequencies in the population. Specifically, for a motif variant M_i, the initial frequency $f(M_i)$ is obtained by dividing its raw number of occurrences by the total sum of occurrences across all motif variants:

$$f(M_i) = \frac{\mathrm{O}(M_i)}{\sum_{j=1}^{\mathrm{c}} \mathrm{O}(M_j)},$$

where:

- $\mathrm{O}(M_i)$ represents the observed occurrence of motif M_i in the population data,
- c is the total number of motif variants.

This normalization ensures that the initial frequencies form a valid probability distribution, with the sum of all frequencies equal to 1. These normalized values are then used as the starting point for the Expectation-Maximization iterations.

2.1.2 E-Step (Expectation Step)

In the E-step, the posterior probability that a read r originates from motif variant M_i is computed using Bayes' theorem:

$$P(M_i \mid r) = \frac{P(r \mid M_i) \cdot f(M_i)}{\sum_j P(r \mid M_j) \cdot f(M_j)},$$

where $f(M_i)$ is the current frequency estimate for motif M_i. This posterior probability quantifies the confidence that read r originates from motif M_i.

The likelihood of observing read r from motif M_i is the product of base-specific probabilities at all aligned positions:

$$P(r \mid M_i) = \prod_{j \in \mathrm{A}} P(j \mid M_i, r).$$

where A is the alignment of read r with motif variant M_i.

To compute $P(j \mid M_i, r)$, we consider two cases:

- If the j-th position in the alignment involves an indel, then $P(j \mid M_i, r) = 0.05$. This constant represents the error probability of the sequencing technology.
- Otherwise, we consider the possibility that the reference base n can be one of A, C, T, or G:

$$P(j \mid M_i, r) = \sum_{n \in \{A,C,T,G\}} P(n \mid M_i, j) \cdot P(n \mid r, j)$$

2.1.3 M-Step (Maximization Step)

In the M-step, the motif frequencies are updated to maximize the expected likelihood. For each motif M_i, the updated frequency is given by:

$$f^{(t+1)}(M_i) = \frac{\sum_{r \in R} P(M_i \mid r)}{|R|}.$$

The iterative EM process continues until the changes in motif frequencies fall below a predefined threshold, ensuring convergence to robust estimates of STR structures. This approach effectively handles noisy sequencing data and provides precise and interpretable predictions for bioinformatics applications.

2.1.4 Convergence Criterion

The algorithm iterates until motif frequency updates $\Delta f(M)$ fall below a predefined threshold ε, ensuring convergence. Where $\Delta f(M)$ represents the largest change across all motif variants.

2.2 Implementation

The implementation of the EM algorithm for STR prediction is divided into several detailed steps, leveraging standard bioinformatics tools and Python libraries for data parsing, mapping, and analysis.

2.2.1 Data Preprocessing

- **Parsing Population Allele Frequencies:** Population allele frequencies are read from a reference file using standard Python file-handling functions.
- **Reference Genome Extraction:** The reference genome is loaded from a FASTA file using the Biopython library. Specifically, we use `SeqIO.parse` from the module `Bio.SeqIO`.
- **Extraction of Reads and Quality Scores:** Sequencing reads and their quality scores are extracted from a BAM file with the help of `pysam.AlignmentFile`. The quality scores are then converted to error probabilities.

2.2.2 Read Filtering and Mapping

- **Read Filtering:** Sequencing reads are filtered using `pysam.AlignmentFile` to select only those that overlap the STR regions of interest.
- **Mapping to Candidate Motifs:** Each filtered read is aligned to candidate motif variants. These candidate motifs are created by taking the expanded motif (with the full repeat count) and appending flanking sequences of length 1000 bases extracted from the reference genome.
- **Alignment Using Parasail:** The mapping is performed using the Parasail library. Specifically, we use the function `parasail.sg` to perform a semi-global alignment, which does not penalize gaps at the beginning or end of the alignment.
- **Index Extraction:** After alignment, mapping indices are extracted using a custom function (`extraction`). This function processes the alignment traceback to obtain the indices, flags, and boundaries of the aligned segments, ensuring accurate association of read positions to motif positions.

2.2.3 EM Iterations

- **Initialization:** Initial motif probabilities are set based on the population allele frequencies parsed during data preprocessing.
- **Iterative E-step and M-step:** In each iteration, the E-step recomputes the association probabilities between motifs and reads, while the M-step updates the motif frequency estimates using these newly computed associations. Adjustments are also made to the sequence probability distributions to reflect the updated frequencies.
- **Convergence:** The iterations continue until the maximum change in motif frequency (the convergence criterion) falls below a small threshold, ensuring the algorithm reaches a stable solution.

2.2.4 Output Generation

Once convergence is achieved, the final motif frequencies are stored.

The two most probable variants for each motif are identified based on their frequency estimates. A predefined threshold is then applied: if both variants exceed the threshold, both are retained; otherwise, only the variant with the higher frequency is selected as the final genotype.

The selected variant(s) repeat counts for each motif are then written to structured output files for downstream analysis and validation.

This implementation employs standard Python libraries and bioinformatics tools to systematically parse genomic data, perform accurate mapping via Parasail, and iteratively optimize STR predictions using the EM algorithm.

2.3 Results

Genome in a Bottle (GIAB) is a consortium hosted by the National Institute of Standards and Technology (NIST). GIAB aims to develop highly characterized benchmark human genomes for use in validating and optimizing genome sequencing technologies. These benchmark genomes provide high-confidence variant calls and regions, making them ideal for comparing the accuracy of different genotyping tools.

To evaluate the performance of our STR prediction algorithm, we compared the genotypes predicted by our statistical model (EM) and two other tools, Expansion Hunter (EH), and Dante, against the benchmark genotypes provided by GIAB. GIAB was used as the benchmark for calculating the average differences and Jaccard index between the predictions made by each model and the reference.

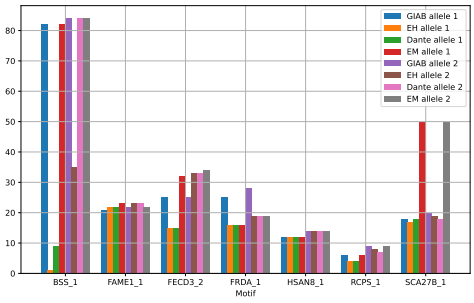


Figure 1: Comparison of predicted repeat counts for selected motifs

The following metrics were used to quantify the differences between the models and the GIAB reference:

1. **Distance:** The average number of repeat units by which the predictions differ from the reference.

2. **Jaccard Index:** A measure of similarity between the sets of predicted repeat units and the reference, calculated as the ratio of the intersection size to the union size of the sets.

The results of the comparison are summarized in Table 1.

Model	Distance from GIAB	Jaccard Index
Expansion Hunter (EH)	4.53	0.44
Dante	3.73	0.43
Expectation Maximization (EM)	3.70	0.48

Table 1: Comparison of STR prediction models

Furthermore, Figure 1 presents a bar graph visualizing the different numbers of repeats predicted by each model from a small sample of motifs. The graph highlights the variability in predictions and provides a visual comparison of the models' performance.

Acknowledgments

I would like to express my gratitude to my thesis instructor, Andrej Baláž, for his guidance, support, and encouragement throughout the course of this research. His expertise and insights have been instrumental in shaping the direction and quality of this work. I am profoundly grateful for the time and effort he has dedicated to mentoring me.

References

[Dempster et al., 1977] Dempster, A. P., Laird, N. M., and Rubin, D. B. (1977). Maximum likelihood from incomplete data via the em algorithm. *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Methodological)*, 39:1–22.

[Dolzhenko et al., 2017] Dolzhenko, M. et al. (2017). Expansionhunter: A sequence-graph-based tool to analyze variation in short tandem repeat regions. *Bioinformatics*, 33:569–571.

[Goodwin et al., 2019] Goodwin, M. et al. (2019). Coming of age: ten years of next-generation sequencing technologies. *Nature Reviews Genetics*, 20:1–18.

[Jobling et al., 2013] Jobling, M. et al. (2013). Human evolutionary genetics: origins, peoples disease. *Garland Science*, pages 1–650.

[Kojima et al., 2016] Kojima, K., Kawai, Y., Nariai, N., Mimori, T., Hasegawa, T., and Nagasaki, M. (2016). Short tandem repeat number estimation from paired-end reads for multiple individuals by considering coalescent tree. *BMC Genomics*, 17:494.

[Miller, 2016] Miller, C. S. (2010-2016). Emirge: Expectation-maximization iterative reconstruction of genes from the environment. GitHub repository.

[Miller et al., 2011] Miller, C. S., Baker, B. J., Thomas, B. C., Singer, S. W., and Banfield, J. F. (2011). Emirge: reconstruction of full-length ribosomal genes from microbial community short read sequencing data. *Genome Biology*, 12:R44.

[Pellegrini, 2015] Pellegrini, M. (2015). Tandem repeats in proteins: Prediction algorithms and biological role. *Front. Bioeng. Biotechnol.*, 3:143.

[Pellegrini et al., 2015] Pellegrini, M. et al. (2015). Statistical approaches to detecting and analyzing tandem repeats in biological sequences. *Front. Bioeng. Biotechnol.*, 3:31.

[Sammut and Webb, 2011] Sammut, C. and Webb, G. I. (2011). *Expectation-Maximization Algorithm*. Springer, Boston, MA.

[Sherry et al., 2018] Sherry, S. T. et al. (2018). Challenges in the study of short tandem repeats. *Nature Reviews Genetics*, 19:1–15.

[Zook et al., 2014] Zook, Z. et al. (2014). Integrating human sequence data sets provides a resource of benchmark snp and indel genotype calls. *Nature Biotechnology*, 32:246–251.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 229
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Filip Tuch, Richard Ostertág

Rekonštrukcia obrazu zachyteného pomocou TempestSDR

Filip Tuch[1*] Richard Ostertág[1†‡]

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

Z počítača je obraz do VGA monitora prenášaný ako tok RGB pixelov, ktorých intenzita je analógovo zakódovaná do príslušných napäťových úrovní signálu prenášaného VGA káblom. V dôsledku pravidelného vysokofrekvenčného prenosu týchto signálov dochádza k nežiaducim emisiám elektromagnetických vĺn, ktoré je možné zachytiť a následne analyzovať [Kuhn, 2005].

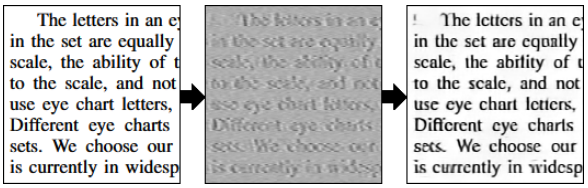
TempestSDR [Marinov, 2014] je softvér umožňujúci rekonštrukciu obrazu z elektromagnetických emisií, pričom zachytený signál mapuje na odtiene šedej a výsledný obraz vytvára v reálnom čase. Výstupný obraz je však zašumený, často až nečitateľný. Navyše, pri použití bežného vybavenia je možné „odpočúvať“ obraz len z krátkej vzdialenosti, približne do 50 cm. V tejto práci navrhujeme dve metódy na zlepšenie kvality zachyteného obrazu.

Prvý prístup spočíva v použití smerovej Yagi-Uda antény optimalizovanej na frekvenciu 130 MHz, na ktorej je v našom prípade anténa a sila signálu rozumne veľká. Za anténu sme zapojili zosilňovač +30 dB pre zosilnenie požadovaného signálu. Výstup zosilňovača prechádza cez pásmovú priepusť pre frekvenčný rozsah 125 MHz až 135 MHz, čím sa utlmia nežiadúce signály (najmä od blízkych rádiových staníc). Týmto spôsobom sa nám podarilo zvýšiť vzdialenosť zachytenia obrazu na približne 20 m.

Druhý prístup využíva hlboké strojové učenie pre vylepšenú rekonštrukciu obrazu. Vychádzali sme z článku Deep-Tempest [Fernández et al., 2024] a ako denoiser sme použili konvolučnú sieť DRUNet [Zhang et al., 2021]. Na rozdiel od Deep-Tempest, v ktorom sieť trénovali na datasete s komplexnými a prevažne syntetickými snímkami obrazu, rozhodli sme sa sieť trénovať priamo na obraze zrekonštruovanom softvérom TempestSDR. Vytvorili sme skripty, ktoré automatizujú TempestSDR a celkovú tvorbu datasetu. To nám umožnilo vytvoriť dataset obsahujúci 800 referenčných snímok obrazovky, pričom každému prislúcha v priemere 6 snímkov z TempestSDR, každý zachytený s inou polohou antény a z rôznej vzdialenosti. Tréning siete prebiehal počas 100 epoch s použitím stratovej funkcie L2. Na testovacom datasete sme pomocou rôznych metrík[1] porovnali kvalitu DRUNetom zrekonštruovaného a neupraveného obrazu zachyteného TempestSDR. Výsledkom je výrazné zlepšenie vo všetkých parametroch (viď tabuľka 1 a obrázok 1).

Metóda	**PSNR ↑**	**MSE ↓**	**SSIM ↑**	**CER ↓**
TempestSDR	8.54 dB	109.10	0.42	89%
DRUNet	**18.36 dB**	**37.70**	**0.86**	**52%**

Tabuľka 1: Porovnanie kvality zachytených (TempestSDR) a rekonštruovaných (DRUNet) snímkov.



Obr. 1: Príklad rekonštrukcie obrazu. Referenčná snímka, TempestSDR, DRUNet (zľava doprava).

Poďakovanie. Táto publikácia vznikla vďaka podpore v rámci Operačného programu Integrovaná infraštruktúra pre projekt: Advancing University Capacity and Competence in Research, Development a Innovation (ACCORD, ITMS2014+:313021X329), spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

Literatúra

[Fernández et al., 2024] Fernández, S., Martínez, E., Varela, J., Musé, P., and Larroca, F. (2024). Deep-TEMPEST: Using Deep Learning to Eavesdrop on HDMI from its Unintended Electromagnetic Emanations. In *Proceedings of the 13th Latin-American Symposium on Dependable and Secure Computing*.

[Kuhn, 2005] Kuhn, M. G. (2005). Electromagnetic eavesdropping risks of flat-panel displays. In Martin, D. and Serjantov, A., editors, *Privacy Enhancing Technologies*, pages 88–107. Springer Berlin Heidelberg.

[Marinov, 2014] Marinov, M. (2014). *Remote video eavesdropping using a software-defined radio platform*. PhD thesis, St Edmund's College.

[Zhang et al., 2021] Zhang, K., Li, Y., Zuo, W., Zhang, L., Van Gool, L., and Timofte, R. (2021). Plug-and-play image restoration with deep denoiser prior. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 44(10):6360–6376.

*tuch1@uniba.sk
†ostertag1@uniba.sk
‡školiteľ

[1] PSNR – Peak Signal-to-Noise Ratio, MSE – Mean Squared Error, SSIM – Structural Similarity Index Measure, CER – Character Error Rate

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 230
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Dennis Vita, Richard Ostertág

Hardvérové MITM útoky na komunikáciu po zberniciach

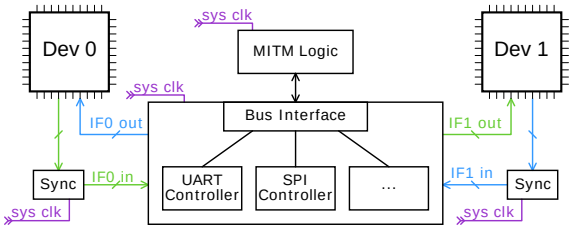
Dennis Vita[1*] Richard Ostertág[1†‡]

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

Mnohé dnešné hardvérové zariadenia pozostávajú z viacerých integrovaných obvodov, ktoré sú navzájom prepojené komunikačnými zbernicami. Z bezpečnostného hľadiska je zaujímavým aspektom aktívne zasahovanie do komunikácie medzi týmito obvodmi, napríklad za účelom zmeny konfiguračných parametrov, získania kľúčov alebo modifikácie odpovede. Takýmito hardvérovými „Man-in-the-middle“ (MITM) útokmi sa zaoberá viacero prác [Khelif et al., 2021, Khelif et al., 2020, Shwartz et al., 2017]. Tieto útoky zneužívajú nedostatočnú ochranu komunikácie medzi hardvérovými komponentami, ktorá sa pri návrhu zariadení často zanedbáva.

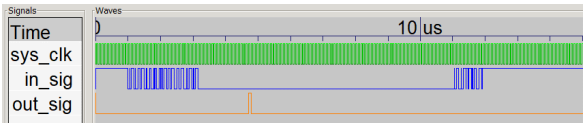
V práci sme implementovali hardvérový MITM pre komunikačné zbernice UART a SPI. Útok je implementovaný na FPGA, čo umožňuje zasahovať do komunikácie v reálnom čase. Návrh je všeobecný a umožňuje ľahko implementovať nové útoky.

Implementácia je rozdelená do viacerých modulov, ktoré umožňujú flexibilnú úpravu FPGA obvodu podľa potreby. Pre tento účel sme navrhli aj niekoľko základných primitív (napr. detektor hrán signálu, buffer, čítač, generátor impulzov a pod.), ktoré je možné znovu použiť pri rozširovaní implementácie o dodatočnú funkcionalitu.



Obr. 1: Návrh FPGA obvodu pre MITM útok.

Najdôležitejšou časťou implementácie je oddelenie zbernicového rozhrania od logiky MITM útoku (viď. obrázok 1), čo umožňuje väčšiu flexibilitu pri úprave útoku pre inú zbernicu. V rámci zbernicového rozhrania sú pre UART a SPI zbernice vytvorené špecifické ovládače, ktoré zohľadňujú ich odlišné vlastnosti, ako asynchrónnosť UART a synchrónnosť SPI zbernice. Zároveň sme poukázali na niektoré vlastnosti zbernicových protokolov, ktoré principiálne nemožno pred MITM logikou abstrahovať. Príkladom takej vlastnosti je asymetrická master-slave architektúra. Tá prináša obmedzenia, ktoré môžu závisieť od obsahu prenášaných dát.



Obr. 2: Odstránenie zákmitov signálu zo vstupu.

Pri implementácii sme dbali aj na štandardné problémy pri návrhu FPGA obvodov ako napríklad synchronizácia vstupov a odstránenie zákmitov signálu (angl. signal debouncing, viď obrázok 2). Konfigurácia obvodu je prispôsobiteľná cez parametre (napr. frekvencia systémových hodín) a syntéza je automatizovaná skriptom. Práca demonštruje výhody FPGA oproti softvérovým riešeniam, ako je rýchlosť a kontrola na úrovni logických hradiel, a ponúka rozšíriteľný základ pre ďalšie zbernicové protokoly. Použiteľnosť riešenia sme demonštrovali na konkrétnom príklade útoku na komunikáciu cez UART rozhranie.

Poďakovanie. Táto publikácia vznikla vďaka podpore v rámci Operačného programu Integrovaná infraštruktúra pre projekt: Advancing University Capacity and Competence in Research, Development a Innovation (ACCORD, ITMS2014+:313021X329), spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

Literatúra

[Khelif et al., 2021] Khelif, M. A., Lorandel, J., and Romain, O. (2021). Non-invasive i2c hardware trojan attack vector. In *2021 IEEE International Symposium on Defect and Fault Tolerance in VLSI and Nanotechnology Systems (DFT)*.

[Khelif et al., 2020] Khelif, M. A., Lorandel, J., Romain, O., Regnery, M., Baheux, D., and Barbu, G. (2020). Toward a hardware man-in-the-middle attack on PCIe bus. *Microprocessors and Microsystems*, page 103198.

[Shwartz et al., 2017] Shwartz, O., Cohen, A., Shabtai, A., and Oren, Y. (2017). Shattered trust: When replacement smartphone components attack. In *11th USENIX Workshop on Offensive Technologies (WOOT 17)*.

*vita3@uniba.sk
†ostertag1@uniba.sk
‡školiteľ

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 231
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Peter Grochal, Martin Stanek

Testing the limits of differential MITM attacks

Peter Grochal* Martin Stanek†‡

Department of Computer Science, Comenius University, Slovakia

SLIM and LBCIoT are lightweight iterated 32-bit block ciphers. Their 32-bit block is divided into left and right 16-bit halves, and they use an 80-bit key to derive 32 round keys, each 16 bits long. Both ciphers were previously analyzed using differential cryptanalysis [Chan et al., 2023].

We apply differential meet-in-the-middle (MITM) cryptanalysis [Boura et al., 2023] on SLIM and LBCIoT. We propose and analyze a few improvements for the attack such as the *deterministic bits*, which allow us to detect situations when a particular differential certainly did not occur, thus making the attack faster. We also propose a variation of the attack, which instead of outputting a set of viable candidates, outputs just one: a vector of *identical bits* – bits whose value is the same across all most frequent candidates – and a mask informing where the identical bits are located.

Our attacks are the first differential MITM attacks on round-reduced SLIM and LBCIoT. Moreover, the attack on 26-round LBCIoT is the best partial key recovery attack on LBCIoT reported to date.

Low probability differentials

Let $E : \{0,1\}^k \times \{0,1\}^n \to \{0,1\}^n$ be a block cipher, with a k-bit key and n-bit block. We show a problem with differentials with probability close to 2^{-n}. This problem stems from the fact, that the probability of a differential $(\alpha \to \beta)$ is calculated as:

$$Pr[E(x) \oplus E(x \oplus \alpha) = \beta \ ; \ k \in_R \{0,1\}^k, x \in_R \{0,1\}^n].$$

To apply any differential or differential MITM attack, we require that the probability holds for each k. Our experiments have shown, that there exists a significant percentage of keys, such that the differential does not occur for any plaintext pair. In such cases, any differential or differential MITM attack using that specific differential fails.

Since we know of no other way to detect if a key has this property other than encrypting all 2^n plaintexts, one cannot simply claim that after the main attack fails, one enumerates the set of "bad" keys and thus finds the key faster than an exhaustive search. Furthermore, we expect similar problems to occur for other ciphers.

r	α	β	2^p	% of keys
12	0b82 000a	0a00 801b	2^{-28}	30.06%
13	a208 a000	a000 b208	2^{-31}	40.61%
18	6000 0040	0000 0800	2^{-30}	5.95%

Table 1: Keys for which the differential never occurs in SLIM (upper) and LBCIoT (lower)

Complexity estimates

We also highlight a problem with commonly used assumptions for complexity estimates of cryptanalytic attacks. More specifically, the multiple authors assume that for an incorrect candidate pair, the distribution of ciphertexts follows the uniform distribution. Thus, they expect that out of N candidates, only $N/2^n$ will pass through an n-bit filter. This assumption improves (lowers) the complexity of the attack, and thus should not be assumed without proof. Such assumption was used, to our knowledge, in all previous analyses of the differential MITM attack, including the original article [Boura et al., 2023].

Our attacks on both SLIM and LBCIoT show that even for a nontrivial number of rounds (8,18 out of 32), the number of expected candidates, calculated using the above assumptions, is much smaller than the actual number of candidates found. In some cases, the standard analysis yields trivially wrong estimates (such as 2^{-9} candidates). Moreover, we have been unable to find any number of rounds from which the expectations would begin to hold. This calls to question the correctness of other complexity estimates, which may even be significantly misleading.

References

[Boura et al., 2023] Boura, C., David, N., Derbez, P., Leander, G., and Naya-Plasencia, M. (2023). Differential meet-in-the-middle cryptanalysis. In *Advances in Cryptology – CRYPTO 2023*, pages 240–272. Springer.

[Chan et al., 2023] Chan, Y. Y., Khor, C.-Y., Khoo, B. T., Teh, J. S., Teng, W. J., and Jamil, N. (2023). On the resistance of new lightweight block ciphers against differential cryptanalysis. *Heliyon*, 9(4).

*grochal2@uniba.sk
†stanek@fmph.uniba.sk
‡Supervisor

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 232
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Andrej Ravinger,

Usefullness of information for bounded regular languages

Andrej Ravinger*

Supervisor: Branislav Rovan†

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

We continue to study usefulness of information in the setting of formal languages, which has been studied in this department for many years. It can be described as follows: *Information is useful if it helps to solve a problem easier*. Formalized with regular languages and deterministic finite automata (DFA), a problem is a language L and a solution is a DFA accepting it. We measure the complexity of a problem L by the number of states of the minimal DFA accepting L, denoted $sc(A)$. A supplementary information (advice) about the input (that it belongs to L_{adv}) enables to solve a simpler problem L_{new} instead of the original L. A supplementary information L_{adv} given by A_{adv} is useful if there exists a problem L_{new} given by a A_{new} such that $L_{new} \cap L_{adv} = L$, $sc(A_{adv}) < sc(A)$ and $sc(A_{new}) < sc(A)$. We call this a *decomposition* of a language and L is said to be *decomposable*.

Unary languages have been studied and characterized upon decomposition into DFAs [Pighizzini et al., 2022]. We followed upon this result and studied deterministic decomposition of bounded regular languages. A language L is called *bounded* if there exist words $w_1, \ldots, w_n$ such, that $L \subseteq w_1^* \ldots w_n^*$. We focus on regular languages bounded under a^*b^*, which we denote *ab-languages*.

A DFA for an *ab*-language has an *a*-part which reads symbols *a* and resembles a unary automaton - an *a*-tail and an *a*-cycle. From any state of the *a*-part symbol *b* can be read in a *b*-path, which can reach a *b*-cycle. These *b*-paths and *b*-cycles form a *b*-part. We identified an important subclass of *ab*-languages which we named *simple bicyclic languages*: Simple bicyclic language L is a concatenation of two unary languages: $L = L^aL^b$, where $L^a \subseteq a^*$ and $L^b \subseteq b^*$.

We characterized simple bicyclic languages upon deterministic decomposition into *ab*-languages. There are three distinct types of decomposition. First uses the fact that such language is a concatenation of two unary languages. In the first decomposing automaton we replace the *a*-part by a single state reading all symbols *a* and in the second we replace the *b*-part by a single state. If $L = L^aL^b$, then the decomposing languages are $L_1 = a^*L^b$ and $L_2 = L^ab^*$. Then $L_1 \cap L_2 = (a^* \cap L^a)(L^b \cap b^*) = L$. The second type uses the decomposition of the unary language L^b. If $L^b = L_1^b \cap L_2^b$, then L is decomposable into $L_1 = L^aL_1^b$ and $L_2 = L^aL_2^b$ and $L_1 \cap L_2 = L^a(L_1^b \cap L_2^b) = L$. The third type uses decomposition of the unary language L^a in a similar way. These decompositions have additional conditions on the languages L^a and L^b such, that the decomposing automata are smaller than the one accepting L.

In case of the general *ab*-languages we discovered that any such language can be partitioned into several simple bicyclic or unary languages. The partition is determined by an automaton accepting the language: After the first transition on *b* we isolate the rest of the *b*-path leading to a *b*-cycle and obtain a simple bicyclic language that is a subset of the *ab*-language accepted by the automaton. We call such partition *normal*. If $L = L[1] \cup \ldots \cup L[n]$ is a normal partition of L into simple bicyclic languages and there exists some $L[i]$ that is decomposable based on the unary language $L[i]^b$, then L is also decomposable. The main idea is that we decompose $L[i]$ as a simple bicyclic language. Then if there were some *b*-paths leading to *b*-path or *b*-cycle of $L[i]$, we can add these *b*-paths to the decomposing automata so, that the decomposition works.

Decomposing an *ab*-language which is not simple bicyclic via the *a*-part is not as straightforward. Our main focus was on such decomposition, where in both decomposing automata the *a*-cycle is smaller than in the DFA accepting L. We characterized languages, where the normal partition has only two languages, i.e., $L = L[1] \cup L[2]$ upon this type of decomposition.

References

[Pighizzini et al., 2022] Pighizzini, G., Rovan, B., and Sádovský, Š. (2022). Usefulness of information and decomposability of unary regular languages. *Information and Computation*, page 104868.

[Ravinger, 2023] Ravinger, A. (2023). Usefulnes of information for non-unary languages.

*ravinger1@uniba.sk

†rovan@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 233
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Vincent Hlaváč, Branislav Rovan

Power of Supplementary Information for Unary Regular Languages

Vincent Hlaváč* Branislav Rovan†‡

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

Given a problem, we shall consider a supplementary information (advice) useful, if it allows us to find a simpler solution of the problem. We build on the research published in [Pighizzini et al., 2022].

We formalize a problem by a regular language L and its solution by an automaton A accepting the language L. We measure the complexity of the solution using the state complexity of the automaton A. We denote it by $sc(A)$. A language L_{adv} accepted by an automaton A_{adv} provides a supplementary information (advice) about the input, which enables us to solve a new problem L_{new} instead of the original problem L. We consider this information useful if the solution of the new problem, an automaton A_{new} accepting the language L_{new}, is simpler than the best solution of the original problem. Verifying the correctness of the advice L_{adv} should also be simpler than the best solution of the original problem. Formally, we require $L = L_{new} \cap L_{adv}$, $sc(A_{new}) < sc(A_{min})$, $sc(A_{adv}) < sc(A_{min})$, where A_{min} is the minimal automaton accepting the language L, i.e., the best solution of the given problem. We formalize this concept using the notion of decomposability of a finite automaton.

Definition 1. *Let A be a DFA. We say that a pair of DFAs $[A_1, A_2]$ forms a decomposition of A if $L(A) = L(A_1) \cap L(A_2)$, $sc(A_1) < sc(A)$ and $sc(A_2) < sc(A)$. In case such decomposition of A exists we say that A is decomposable.*

We shall limit our research to DFA over unary alphabet, in short UDFA. Such automata consist of a tail, of possibly zero length, and exactly one cycle. The size of a UDFA A is given by the pair (λ, μ), where λ is the number of states in the cycle and μ is the number of states in the tail of the automaton A. The minimal UDFA is an automaton with both the minimal size of the tail and the minimal size of the cycle.

Let us have a UDFA A, such that it is minimal accepting the language $L(A)$. We say that $L(A)$ provides useful information to L if there exists a decomposition of the minimal automaton accepting the language L, which contains the automaton A. We denote by $\mathscr{L}_A$ the family of problems such that $L(A)$ provides useful information to them. We shall explore the family $\mathscr{L}_A$ and the relation *provide useful information*. The core of our research is the decomposition lemma, for UDFAs without tails formalized as follows.

Lemma 1. *Let A be a UDFA of size $(\lambda, 0)$, such that $L(A) \neq \Sigma^*$ and $L(A) \neq \emptyset$. Let us consider a UDFA B of size $(p, 0)$, where p is a prime larger then λ, i.e., B has a longer cycle than A. Moreover, let B have exactly one accepting state. Let M be the minimal UDFA accepting the language $L(A) \cap L(B)$. Then the automata A and B form a 2-decomposition of M.*

We further extend the lemma for UDFAs with tails of the nonzero length. Now we shall provide selected results from our research.

Let A be a UDFA of size (λ, μ) such that $L(A)$ and its complement $L(A)^C$ are both infinite languages. Then there exist infinitely many languages such that A is a part of a decomposition of their minimal automaton. Thus the family $\mathscr{L}_A$ is infinite. In other words every language provides useful information for infinitely many problems.

Let A and B be arbitrary UDFAs such that $\mathscr{L}_A \subseteq \mathscr{L}_B$. Then the same inclusion holds for the respective languages, i.e., $L(A) \subseteq L(B)$. Thus we have $\mathscr{L}_A = \mathscr{L}_B$ if and only if $L(A) = L(B)$.

Furthermore by finding infinite sequences of counterexamples we proved that several propositions do not hold. Most notably the unintuitive fact that the relation *provide useful information* is not transitive. Thus there exist languages L_A, L_B, L_C such that L_B provides useful information to L_A, L_C provides useful information to L_B, however L_C does not provide useful information to L_A.

References

[Pighizzini et al., 2022] Pighizzini, G., Rovan, B., and Sádovský, Š. (2022). Usefulness of information and decomposability of unary regular languages. *Information and Computation*, page 104868.

*hlavac28@uniba.sk
†rovan@dsc.fmph.uniba.sk
‡Supervisor

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 234
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Martin Makuch, Branislav Rovan

Equivalence Between Multi-Head Finite Automata and Parallel Communicating Finite Automata Systems

Martin Makuch* Branislav Rovan†‡

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

The goal of this article is to investigate parallelism in automata theory by further analyzing the equivalence between multi-head finite automata and parallel communicating finite automata systems. Building on previously established equivalence results, this work broadens the study by systematically exploring how communication structure affects computational capabilities. Through examining these extended settings, this article highlights the fundamental role of communication and deepens our understanding of parallelism and cooperation in computational models.

We assume familiarity with standard concepts from automata theory, including the k-head finite automaton, or FA(k) for short, as well as basic notions from graph theory.

A *parallel communicating finite automata system of degree k*, or PCFA(k) for short, consists of k finite automata, called components, that operate on a shared input word in synchronized steps. Each component maintains its own internal state and processes its input independently. To enable cooperation, components may query the current state of other components during computation.

The *communication structure* of a PCFA(k) describes how the components within the system can interact. It is represented by a simple directed graph without loops, where each vertex corresponds to a single component of the system, and a directed edge from component A_r to A_s indicates that component A_r can query the current state of component A_s.

A communication structure is called *Hamiltonian* if it contains a *Hamiltonian closed walk*, i.e., a walk that starts and ends in the same component and visits every component of the system at least once. A PCFA(k) with such a communication structure is also called *Hamiltonian*, and is denoted by hamPCFA(k).

The equivalence between FA(k) and PCFA(k) was first established in [Martin-Vide et al., 2002], where it was shown that any FA(k) can be simulated by a PCFA(k).

A rough idea of the construction is as follows: For each of the k heads of a given FA(k), a corresponding component is constructed. Since the transition function of the FA(k) depends on the symbols read by all heads, the PCFA(k) simulates a global transition by collecting these symbols from each component in successive steps. Each component reads and stores its input symbol—possibly the empty one—and passes the information to the next. Once all components have contributed, a new state is computed and distributed back to them.

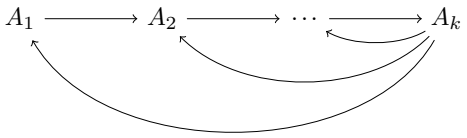


Figure 1: Illustration of the communication structure underlying the simulation in [Martin-Vide et al., 2002].

The central contribution of this article is as follows: For every FA(k) and every Hamiltonian communication structure of a PCFA(k), there exists an equivalent PCFA(k) that employs the given structure.

Theorem 1. $\mathcal{L}_{\mathrm{FA}(k)} \subseteq \mathcal{L}_{\mathrm{hamPCFA}(k)}$

References

[Martin-Vide et al., 2002] Martin-Vide, C., Mateescu, A., and Mitrana, V. (2002). Parallel finite automata systems communicating by states. *International Journal of Foundations of Computer Science*, 13(05):733–749.

*makuch8@uniba.sk
†rovan@dsc.fmph.uniba.sk
‡Supervisor

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 235
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Ján Kelemen

Monitorovanie validity, funkčnosti a bezpečnosti internetovych SSL certifikátov

Ján Kelemen[1*]

Školiteľ: Roman Ďurikovič[1†]

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

SSL certifikáty, prípadne ich novšia verzia TLS sa využívajú v internetovom protokole https, ktorý umožňuje šifrovanú komunikáciu. Tieto certifikáty taktiež poskytujú mechanizmy, ktoré dokážu overiť či sa pripájame na nami požadovaný webový server a nie sme obeťou spoofing útoku (útoku, pri ktorom útočník ukradne identitu nami známemu webovému serveru).

V mojej práci som navrhol a vytvoril systém, ktorý dokáže monitorovať certifikáty na používateľom špecifikovaných webových serveroch, v súboroch uložených na disku, prípadne v súboroch, ktoré objavil systém rekurzívnym prehľadávaním súborového systému. Toto monitorovanie prebieha periodicky a pozostáva zo stiahnutia certifikátu do systému, kde následne dochádza k jeho analýze. Výsledky analýzy si používateľ môže pozrieť vo webovej aplikácií, alebo dostane upozornenie pomocou jeho zvoleným upozorňovacím systémom (ako napríklad mailom, Slackom alebo Pushoverom).

Táto analýza pozostáva z jednotlivých kontrol, ktoré som navrhol a naprogramoval po preštudovaní odbornej literatúry, odporúčaní RFC a po konzultáciách s vedením firmy, v ktorej pracujem (bonet.systems, s. r. o.), ktorá má dlhoročné skúsenosti s internetovou bezpečnosťou, keďže jej dlhoročnými partnermi sú firmy ako ESET, Telekom či Denník N. Medzi tieto kontroly napríklad patrí kontrola časovej validity certifikátu (či certifikát už platí, prípadne exspiroval), kontrola odňatia platnosti (anglicky revoked certificate), kontrola povinných polí certifikátu, kontrola validity SCT (Signed Certificate Timestamps) či kontrola ostatných certifikátov v certifikačnej reťazi. Každá z týchto kontrol môže vyprodukovať jednu alebo viac chybových hlášok ohľadom certifikátu, ktoré sú následne zapisované do databázy. V mojej práci som týmito kontrolami analyzoval všetky aktuálne „.sk" domény, ktorých zoznam som získal zo stránky sk nic-u a všetky aktuálne „.cz" domény, ktorých zoznam som získal z rôznych zdrojov, keďže cz nic neposkytuje sťahovanie zoznamu aktuálnych „.cz" domén. Výsledky mojich záverov som porovnal s výsledkami podobnej práce, ktorá robila analýzu nad estónskymi doménami [Parsovs, 2014] a výsledkami práce, ktorá robila analýzu certifikátov podľa certifikačných autorít, ktorými boli vydané [Serrano et al., 2019].

Výsledkom mojej práce sú taktiež poznatky, ktoré som nadobudol pri implementácií už spomínaného systému, ktorý musí zvládať periodickú kontrolu státisíce certifikátov v rozumnom čase. Všetkých 465 110 slovenských domén môj systém stihol zanalyzovať za necelých 40 minút na stroji, ktorý mal procesor s 20 vláknami o 4.6GHz a 32GB RAM. Tieto výsledky systém dosiahol konkuretnými výpočtami, ktoré som implementoval v jazyku Golang, ktorý momentálne patrí medzi jazyky s najlepším konkurentným modelom. Najčastejšou chybou v certifikátoch na slovenských aj českých internetových weboch bola tá, že boli vydané pre zlú doménu, pretože pri vydávaní osoba za to zodpovedná nechala vo formulári na vydanie certifikátu prednastavené hodnoty. Taktiež okolo 15% všetkých „.sk" domén a 27% všetkých „.sk" domén nepodporovalo protokol https, a teda nedisponovalo ani SSL certifikátom. Najčastejším vydavateľom chybného certifikátu bola slovenská spoločnosť Websupport, čo bolo aj očakávané, keďže vyše tretina všetkých slovenských domén je zaregistrovaných touto spoločnosťou. Taktiež som zistil, že 64% všetkých „.sk" domén a 65% všetkých „.cz" domén stále nepodporuje internetový protokol IPv6. Popisujem tiež technické výzvy s časťou systému, ktorá je inštalovaná na operačný systém používateľa, takzvaného „agenta", ktorý musí vedieť nájsť certifikáty na disku bez toho, aby čerpal veľa výpočtovej sily od hosťovského systému, na ktorom je nainštalovaný.

*kelemen19@uniba.sk
†Roman.Durikovic@fmph.uniba.sk

Kľúčové slová: SSL/TLS certifikáty, kryptografia, počítačová bezpečnosť

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 236–243
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Karol Sučák, Miroslav Ješkovský, Ivan Kontuľ, Boris Bobáľ

Stanovenie veku artefaktov pomocou urýchľovačovej hmotnostnej spektrometrie a prvkového zloženia vzoriek

Karol Sučák* Ivan Kontuľ† Miroslav Ješkovský‡ Boris Bobáľ§
Školiteľ: Miroslav Ješkovský
KJFB, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

Analýza historických artefaktov nám môže priblížiť vývoj rozličných kultúr po celom svete. Medzi obľúbené techniky patrí datovanie artefaktov na určenie obdobia, z ktorého predmety pochádzajú a prvková analýza na identifikáciu z čoho boli artefakty vytvorené. V tejto práci sme datovali artefakty rádiouhlíkovou metódou s využitím urýchľovačovej hmotnostnej spektrometrie (AMS) za účelom identifikovania veku starožitností a metódou PIXE na identifikáciu prvkového zloženia pigmentov nanesených na vzorkách. Dokopy sme analyzovali štyri artefakty, z toho dva boli obrazy, jeden okrasný tanierik a matriošku. Na rádiouhlíkové datovanie sme museli odoberať relatívne drobnú časť vzorky z málo viditeľnej časti artefaktu a chemicky ju spracovať. Keďže v tejto metóde sa analyzovalo drevo zo vzoriek, tanierik sa nedatoval. S využitím externého zväzku pri PIXE meraniach sme mali príležitosť analyzovať artefakty bez ich úpravy. PIXE metódou boli analyzované všetky vzorky. Oba typy meraní sme vykonali v laboratóriu CENTA, ktoré je vybavené lineárnym tandemovým urýchľovačom Pelletron. Odhadovaný vek artefaktov nebol väčší ako 150 rokov. V prvkovej analýze boli identifikované rozdiely medzi zložením jednotlivých farieb nanesených na vzorkách vzhľadom k obdobiu kedy boli artefakty natreté. V pigmentoch sme identifikovali bežné prvky (K, Ca, Fe…), ale aj ťažké kovy (Pb, Hg).

Kľúčové slová: AMS, PIXE, artefakty, pigmenty

1 Úvod

Od počiatku ľudia vytvárali výrobky, ktoré slúžili nielen ako úžitkové prostriedky ale aj okrasné či rituálne objekty. Pri objavovaní týchto historických artefaktov nie je vždy samozrejmé, z ktorého obdobia pochádzajú. Skutočný vek historických artefaktov nám pomáha odhaliť správanie starovekých civilizácií a ich vývoj. Z tohto dôvodu ľudstvo postupne vyvinulo techniky, s ktorými dokážeme odhadnúť vek skúmaného objektu. Jednou z najznámejších techník je rádiouhlíkové datovanie, v ktorom sa analyzuje obsah rádiouhlíka (^{14}C) vo vzorke. Rádiouhlíkové datovanie nám pomohlo zaradiť historické artefakty do obdobia ich pôvodu, čo v minulosti nebola jednoduchá úloha.

Príkladom radiouhlíkového datovania môže byť novoodkrytá stredoveká stropná maľba v Katedrále v Stavangeri (Nórsko) (Barrett et al., 2025). V práci výskumníci analyzovali maltu a omietku, o ktorých sa predpokladalo, že sa nanášali na klenbu stropu pri jej rekonštrukcii po požiari v 1272. Namerané výsledky spochybňujú originálny predpoklad a odhadujú jej pôvod na obdobie 1216 - 1271 (99,7%). Ďalším príkladom, kde sa využilo rádiouhlíkové datovanie, je práca (Richardin et al., 2010), v ktorej bol identifikovaný vek čínskych rukopisov. Vzorka na rádiouhlíkovú analýzu bola odobraná z dreva väzby rukopisov. Analýza potvrdila predošlé odhadované obdobie (762 - 786) vyhotovenia rukopisov.

Rádiouhlíkovým datovaním môžeme určiť aj originalitu exempláru. Príkladom je práca (Beck et al., 2022), v ktorej výskumný tým analyzoval obraz od autora, ktorý zomrel v 40. rokoch minulého storočia. Všetky indície (pigmenty, zhotovenie plátna, vek dreveného rámu) ukazovali, že dielo je originálnym dielom autora. Až radiouhlíkové datovanie vlákien plátna ukázalo, že plátno môže pochádzať z obdobia 1956 - 1957 alebo 2000 - 2010 a teda sa jedná o falzifikát.

Ďalšou obľúbenou technikou na analýzu historických artefaktov je identifikácia prvkového zloženia pigmentov nanesených na artefaktoch. Jednou z využívaných metód na analýzu prvkového zloženia je metóda PIXE (Particle induced X-ray emission). Táto metóda neslúži na samotné datovanie vzoriek, ale stále je možné ju využiť na určenie približného obdobia pôvodu artefaktu. Toto tvrdenie je podložené tým, že v jednotlivých etapách histórie sa využívali farby s rozličným chemickým zložením a tým pádom je teoreticky

* karol.sucak@uniba.sk
† ivan.kontul@fmph.uniba.sk
‡ miroslav.jeskovsky@fmph.uniba.sk
§ boris.bobal@fmph.uniba.sk

možné odhadnúť obdobie, z ktorého študovaná vzorka pochádza. Z tohto dôvodu prvková analýza je vynikajúca technika na odhalenie premaľovaných častí artefaktu, poprípade na odhalenie falzifikátu.

Metóda PIXE bola využitá napríklad v práci Corregidor et al., 2015), v ktorej bolo analyzované prvkové zloženie nanesených farieb na obraze od Flámskeho maliara Frans Francken II. Prvková analýza sa na tomto obraze uskutočnila po prvý krát. Na analýzu obrazu sa využil 2 MeV externý mikro zväzok protónov pre merania na vzduchu. Vo farbách boli identifikované prvky, ktoré sú bežné aj v pigmentoch využívaných v súčasnosti. Druhou úlohou výskumu bolo 2D mapovanie časti obrazu o veľkosti 800×800 μm^2. Koncentráciou študovaného prvku bolo možné určiť množstvo pigmentu naneseného na danom mieste.

Kombinácia oboch spomínaných metód bola využitá v práci (Calligaro et al., 2022) na maľbe od neznámeho autora. Vzorky pre rádiouhlíkové datovanie boli odoberané z rámu obrazu a pôvod bol určený na tri možné obdobia (približne 1550, približne 1660 alebo približne 1790). Merania PIXE metódou ukázali, že zinok bol nanesený rovnomerne po celej maľbe. Zinok sa mohol nachádzať na obraze v podobe síranu zinočnatého ako súčasť sikatívu nachádzajúceho sa v laku. Prvková analýza tiež ukázala, že použitá modrá je pravdepodobne Pruská modrá, ktorá bola vyvinutá v 1709 (Calligaro et al., 2022). Z tohto zistenia vyplynulo, že obraz s najväčšou pravdepodobnosťou pochádza z obdobia okolo roku 1790.

2 Metodika

Analýza vzoriek prebehla v laboratórium CENTA (Centrum pre nukleárne a urýchľovačové technológie). Laboratórium je vybavené 3 MV lineárnym tandemovým urýchľovačom Pelletron. Urýchľovač je navrhnutý na merania metódami: IBA (Ion Beam Analysis – analýza iónovým zväzkom), IBM (Ion Beam Modification - modifikácie materiálov iónovými zväzkami), NRA a AMS (Accelerator Mass Spectrometry – urýchľovačová hmotnostná spektrometria) (Kaizer et al., 2024; Kontul et al., 2024; Kvasniak et al., 2024; Povinec et al., 2024).

V tejto práci sa datovali vzorky rádiouhlíkovou metódou, pre ktorú sme využili AMS a na určenie prvkového zloženia pigmentov sme využili metódu PIXE (Particle induced X-ray emission – časticami vyvolané röntgenové (RTG) žiarenie), ktorá patrí medzi IBA techniky.

2.1 AMS

^{14}C sa tvorí interakciami kozmického žiarenia s časticami v atmosfére a následne môže byť absorbované živými organizmami do ich tkaniva. Absorpcia ^{14}C je zastavená po uhynutí živočícha a koncentrácia izotopu v tkanive vplyvom rádioaktívnej premeny sa postupne znižuje až kým neostanú len stabilné izotopy uhlíka (^{12}C a ^{13}C) v látkach. Z pomerov stabilných izotopov a rádioaktívneho uhlíka dokážeme určiť vek meranej vzorky. Koncentrácie izotopov uhlíka vo vzorkách sa môžu merať s urýchlovačovou hmotnostnou spektrometriou (z angl. accelerator mass spectrometry, AMS).

AMS je analytická technika, ktorá dokáže z relatívne malého množstva veľmi presne určiť koncentráciu rôznych izotopov podľa ich hmotnosti a náboja. Nevýhodou AMS je, že vzorky sa musia chemicky spracovávať a teda patrí medzi deštruktívne metódy. Táto skutočnosť v kombinácii s vysokou citlivosťou metódy AMS vytvára značné výzvy pre spracovanie vzoriek, najmä pri znižovaní kontaminácie.

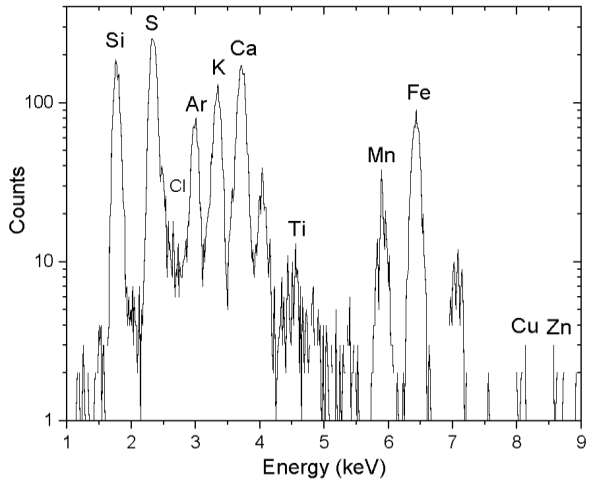
V tejto práci sme na radiouhlíkové datovanie vzorky pripravovali ABA metódou (kyselina - zásada - kyselina) a separáciou celulózy. V ABA metóde sa vzorky lúhujú najprv v kyseline následne v zásade a nakoniec znovu v kyseline. V každom kroku sa vzorka v chemikálii nechala lúhovať cez noc pri 70°C a následne sa prepláchla destilovanou vodou. Využitá kyselina pri príprave bola v oboch prípadoch 1M HCl a ako zásada sa využilo 1M NaOH. V poslednom kroku, na uvoľnenie uhličitanov, sme vzorky bielili chloritanom sodným cez noc pri 70°C. Po chemickej úprave vo vzorke ostáva už len celulóza. Následne boli vzorky (4 - 5 mg) spaľované spoločne s CuO (200 mg) pri 850°C. Pri spaľovaní vzniká CO_2, ktoré bolo následne grafitizované v grafitizačnom reaktore spoločne s Fe práškom (SigmaAldrich, 325 mesh, 97 %), ktorý slúži ako katalyzátor. Reaktor sme naplnili vzorkovým CO_2, nechali sme ho vymraziť tekutým dusíkom a pridali sme 2,5-krát toľko vodíka ako je CO_2. Všetko sme nechali splyniť a železný prášok bol zohrievaný na 600 °C. Tým bola začatá katalytická redukcia CO_2 na grafit (grafitizácia), ktorá trvá 3 – 4 hodiny. Vzniknutá voda pri premene CO_2 na C v reaktore je zachytávaná vodnou pascou. V poslednom kroku sa grafit s Fe práškom nalisuje do hliníkovej katódy, ktorá sa vkladá do iónového zdroja urýchľovača. Vzorky spoločne s Fe práškom mali približne 4 – 5 mg.

2.2 PIXE

PIXE metóda patrí medzi nedeštruktívne analytické metódy. V metóde je potrebné urýchlenie iónov, typicky protónov, na energiu 2 - 4 MeV a ich fokusovanie na vzorku. Interakcia urýchlených iónov s prvkami vo vzorke vzbudzuje alebo ionizuje atómy vo vzorke. V každom prípade ostane prázdne miesto na spodnej energetickej hladine atómového

obalu, ktoré je následne zaplnené iným elektrónom z vyššej energetickej hladiny. v tomto prípade sa uvoľňuje energia v podobe RTG kvánt, ktoré sú v metóde PIXE detegované vhodným detektorom. Každý prvok má špecifickú energiu RTG kvánt, podľa ktorej dokážeme identifikovať daný prvok.

V danej práci sme na analýzu prvkového zloženia pigmentov urýchlili zväzok protónov na energiu 3MeV. Následne sme zväzok vyviedli cez 7,5 μm kaptónové okienko a namierili sme ho na vzorku. Analýzu vzoriek sme uskutočnili na vzduchu pri atmosférickom tlaku, pričom vzorky sme nainštalovali 5 mm od okienka. Na detekciu RTG kvánt bol využitý kremíkový detektor SiPIN XR-100 (AMPTEC Inc.) vzdialený od vzorky 50 mm pod uhlom 45°.

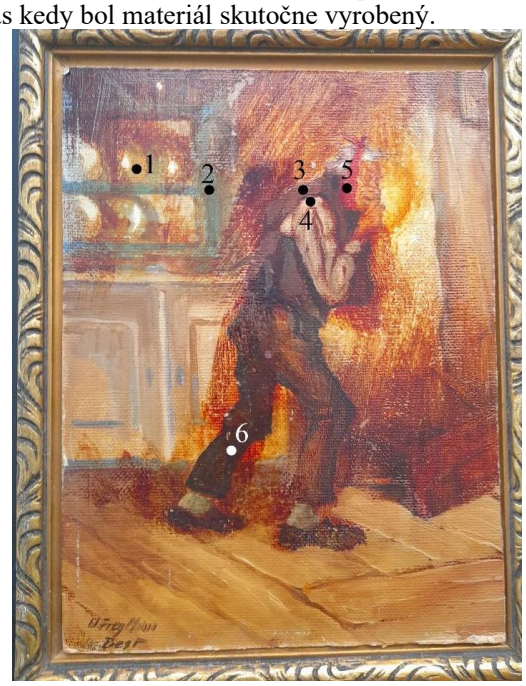


Obr. 1 Typické namerané spektrum PIXE metódou.

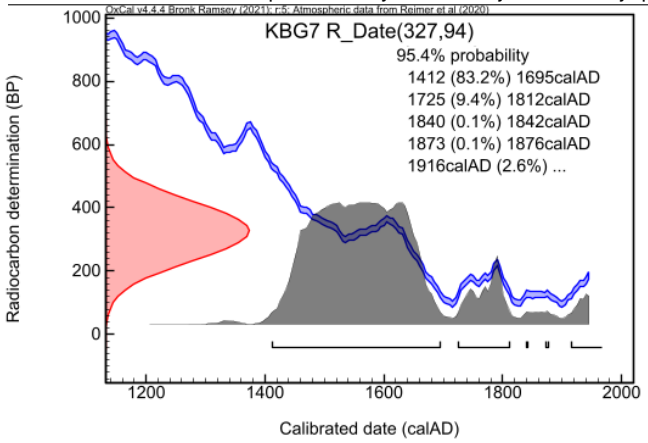
Účinnostná krivka detektora bola stanovená pomocou Monte Carlo programu MC-DET (Taylor et al., 2010) dodávaného spolu so softvérom GUPIX. Pri výpočte účinnosti sme použili geometriu konfigurácie, materiály a rozmery jednotlivých častí detektora (okienko, kolimátor, kryštál detektora a pod.) a vzduch s atmosférickom tlakom, ktorým RTG kvantá prechádzali. Zaznamenané spektrá sme spracovali v softvére GUPIX (Campbell et al., 2010). Nastavenie externého zväzku sme nakalibrovali pomocou certifikovaného referenčného materiálu Urban Aerosols č. 28 od japonského inštitútu NIES (Yamakawa et al., 2020), zatiaľ čo na normalizáciu náboja sme použili argónový pík z atmosférického vzduchu. Typické merané spektrum je znázornené na obr. 1.

3 Výsledky

Prvou analyzovanou vzorkou bol obraz od autora Frey (Obr. 2) a nazvali sme si ho „Bolesť zuba“. Obraz bol zakúpený na blšom trhu. Autor ho namaľoval na drevovláknitú dosku, z ktorej sme odoberali vzorku na rádiouhlíkové datovanie. Výsledky z meraní sú zobrazené na Obr. 3, ktorý ukazuje viacero možných období, z ktorých môže obraz pochádzať. S najväčšou pravdepodobnosťou obraz pochádza z obdobia 1412 – 1695 (83,2%). Zhodou okolností na zadnej strane obrazu bol uvedený rok 1596, ktorý by sa zhodoval s najpravdepodobnejším obdobím, kedy bol obraz namaľovaný. Reálne nepredpokladáme, že uvedený rok je správny z dvoch dôvodov. Prvým je, že typ materiálu, na ktorom je obraz namaľovaný sa začal vyrábať podstatne neskôr. Samotný materiál, z ktorého je drevovláknitá doska vyrobená, je ďalším dôvodom prečo spomínané obdobie nebude správne. Materiál môže byť vyrobený z viacerých druhov dreva s rozličným vekom a z rozličných chemikálií (vosky, lepidlá, atď), ktoré fungujú ako spojivá. Všetky spomínané materiály môžu pochádzať z rôznych období, alebo môžu obsahovať látky s relatívne vysokou koncentráciou stabilného uhlíka, a teda nebudú prezrádzať reálny čas kedy bol materiál skutočne vyrobený.



Obr. 2 Obraz Bolesť zuba (Frey). Metóda PIXE bola využitá na šiestich bodoch, ktoré sú vyznačené na obrázku (1 – žltá, 2 – modrá, 3 – hnedá, 4 – biela, 5 – červená a 6 – tmavá).



Obr. 3 Namerané údaje rádiouhlíkového datovania pre obraz Bolesť zuba (Frey).

PIXE metódu sme použili na analýzu v šiestich rôznych miestach (obr. 2) a identifikované prvky v pigmentoch a ich namerané koncentrácie sú uvedené v tabuľke 1. Okrem uvedených prvkov v bielej farbe boli namerané aj Al, Si a K, ktoré nie sú uvedené v tabuľke pre ich relatívne veľké neistoty. Všetky farby obsahovali relatívne veľké koncentrácie olova. Hlavne biela farba mala výrazné množstvo spomínaného prvku, čo by mohlo nasvedčovať tomu, že sa jedná o farbu tzv. olovená biela (Gettens et al., 1993). Všetky farby okrem olova obsahovali aj výraznejšie množstvá zinku. Olovo aj zinok sú bežnou zložkou bielej farby. Prítomnosť týchto dvoch prvkov v každej farbe by mohla nasvedčovať štyrom veciam: prvky sú priamo vo farbách, farby boli miešané s bielou farbou, na dosku sa najprv natrela biela vrstva, na ktorú sa potom obraz namaľoval alebo prvky sú priamo v doske.

Najzaujímavejšou farbou, z pohľadu prvkové zloženia bola červená farba (na obrázku 2 vyznačená piatym bodom), ktorá obsahovala ortuť (Hg). Identifikácia ortuti naznačuje tomu, že sa jedná konkrétne o farbu tzv. rumelková červená, ktorá sa vyrábala z cinabaritu (HgS) (Miguel et al., 2014). Rumelková červená sa využívala prevažne v 19. storočí (Kühn, 1969). Z uvedených dôvodov predpokladáme, že obraz bol namaľovaný na prelome 19. a 20. storočia.

Obraz, ktorý sme si nazvali „Kvety a ovocie“ (obr. 4) bol zakúpený na blšom trhu podobne ako predchádzajúci obraz. Obraz bol namaľovaný na plátne, ktoré bolo zachytené na drevenom ráme. Vzorku na rádiouhlíkovú analýzu sme odobrali z dreveného rámu. Obsah rádiouhlíka bol najväčší v porovnaní s ostatnými vzorkami a s najväčšou pravdepodobnosťou pochádza z obdobia 1965 – 1967 (obr. 5). Tento vek v skutočnosti prezrádza len kedy bol vyhotovení rám a samotná maľba môže byť o niečo mladšia. Problém je aj to, že sme nevedeli určiť či drevo pochádza z vnútornej alebo vonkajšej časti stromu.



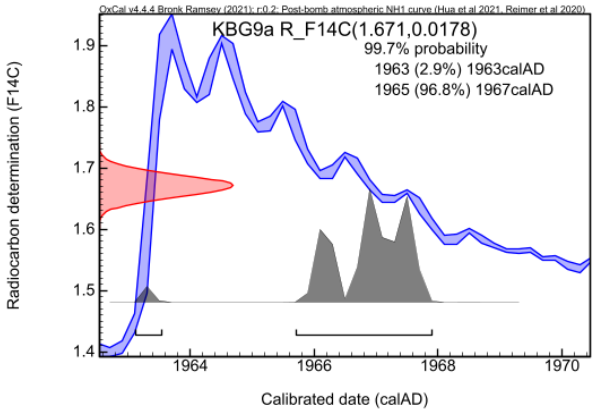
Obr. 4 Obraz Kvety a ovocie. Na obrázku sú vyznačené body, na ktorých sa meralo prvkové zloženie pigmentov PIXE metódou (1 – modrá, 2 – čierna, 3 – zelená, 4 – žltá a 5 – červená).

Analýza prvkového zloženia bola vykonaná na piatich farbách (červená, čierna, modrá, zelená a žltá). Namerané koncentrácie identifikovaných prvkov sú uvedené v tabuľke 2. Okrem uvedených prvkov, hliník bol tiež identifikovaný vo všetkých farbách okrem červenej, len pre vysoké neistoty

Tab. 1 Namerané koncentrácie prvkov v jednotkách ppm pre jednotlivé farby. (LOD – pod limitom detekcie).

	biela	červená	hnedá	modrá	tmavá	žltá
P	600 ± 520	LOD	LOD	LOD	LOD	LOD
S	LOD	12300 ± 1200	LOD	LOD	100 ± 190	70 ± 130
Ca	350 ± 130	1450 ± 150	7200 ± 510	411 ± 89	490 ± 110	450 ± 100
Ti	LOD	1700 ± 620	840 ± 270	53 ± 67	125 ± 83	LOD
Mn	LOD	LOD	900 ± 160	89 ± 42	45 ± 44	100 ± 53
Fe	470 ± 100	2570 ± 190	23800 ± 1300	2970 ± 210	1610 ± 180	1420 ± 140
Cu	1100 ± 210	440 ± 100	2360 ± 310	58 ± 52	25 ± 61	100 ± 63
Zn	48500 ± 2400	13400 ± 730	33200 ± 1900	11930 ± 650	1280 ± 250	21300 ± 1100
Ba	3290 ± 480	78200 ± 3500	9420 ± 990	880 ± 240	490 ± 290	2360 ± 330
Hg	530 ± 990	140700 ± 7100	LOD	LOD	LOD	LOD
Pb	$(470 \pm 24)\times10^3$	$(130 \pm 7)\times10^3$	$(303 \pm 18)\times10^3$	$(201 \pm 10)\times10^3$	$(15 \pm 3)\times10^3$	$(202 \pm 10)\times10^3$

jeho koncentrácia nebola vyhodnotená. Obraz Kvety a ovocie je jediná vzorka, v ktorej sa nám nepodarilo identifikovať olovo. To naznačuje, že obraz bol vytvorený v období, keď už boli známe škodlivé účinky olova a jeho používanie vo výrobkoch bolo obmedzené. Použité farby obsahovali relatívne vysoké koncentrácie titánu a zinku, ktoré sú kľúčovými zložkami bielej farby (Laver, 1997; Kuhn, 1986). Je pravdepodobné, že plátno bolo pred namaľovaním obrazu natreté bielou farbou, o čom svedčia nenatreté biele plochy pozdĺž okrajov plátna. Tieto prvky mohli byť súčasťou zmienenej farby. Alternatívne je možné, že farby boli zmiešané s bielou farbou, čo je teória podporovaná skutočnosťou, že čierna farba obsahuje najnižšie množstvá Ti a Zn. Aj keď pôvodné farby mohli obsahovať niektoré z týchto prvkov, ich prítomnosť bola pravdepodobne minimálna. Medzi ďalšie významné prvky nachádzajúce sa vo farbách patrí bárium v červenej, zelenej a žltej farbe a vápnik v čiernej a modrej farbe.

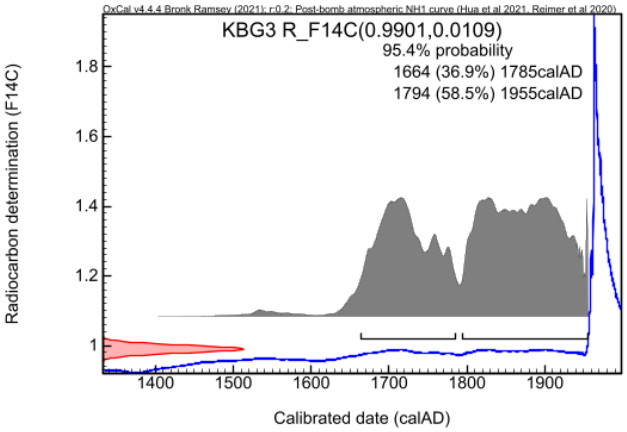


Obr. 5 Údaje získané rádiouhlíkovým datovaním pre vzorku z rámu obrazu Kvety a ovocie.

Ďalším analyzovaným artefaktom bola drevená soška matrioška (Obr.6). Vzorku dreva pre rádiouhlíkové datovanie sme odoberali z vnútornej, nenalakovanej časti sošky. Z nameraného obsahu rádiouhlíka vyplýva, že soška môže pochádzať z dvoch období s relatívne širokými intervalmi (1664 – 1785 (36,9%) a 1794 – 1955 (58,5%)), čo nám nepomohlo určiť presné obdobie produkcie tejto starožitnosti. Nepriaznivý výsledok bol zapríčinený tvarom kalibračnej krivky (Obr.7) v danom období, čo komplikuje rádiouhlíkové datovanie. Na základe vzhľadu matriošky, ktorý naznačuje, že bola vyrobená strojom môžeme dedukovať, že pochádza z druhej polovice druhého intervalu.



Obr. 6 Matrioška meraná PIXE metódou na troch vyznačených miestach (1- červená, 2 – biela a 3 – čierna).



Obr. 7 Výsledky rádiouhlikového datovania vzorky matrioška.

Prvkovú analýzu sme vykonali na troch miestach, tak aby boli zastúpené všetky farby nanesené na matrioške. Namerané koncentrácie prvkov, okrem dvoch, pre jednotlivé pigmenty sú uvedené v tabuľke 3. Dva identifikované prvky,

Tab. 2 Namerané koncentrácie prvkov vo vybraných farbách obrazu „Kvety a ovocie“. Jednotlivé koncentrácie sú v ppm. (LOD – pod limitom detekcie).

	červená	čierna	modrá	zelená	žltá
Si	LOD	13000 ± 7300	62000 ± 18000	22000 ± 10000	76000 ± 23000
S	33300 ± 3100	2800 ± 620	21900 ± 2200	9300 ± 1300	53700 ± 6200
Cl	7340 ± 930	740 ± 220	3830 ± 630	670 ± 370	9700 ± 1500
Ca	16000 ± 1200	35600 ± 2000	69800 ± 4500	15000 ± 1000	37200 ± 3800
Ti	16000 ± 1400	4100 ± 380	38300 ± 2600	19600 ± 1400	80600 ± 8200
Fe	1330 ± 240	530 ± 140	6860 ± 590	18200 ± 1300	4280 ± 640
Zn	217000 ± 15000	136 ± 138	100000 ± 6700	21000 ± 1800	68200 ± 7200
Ba	75300 ± 5800	3400 ± 1100	16400 ± 3800	36400 ± 3600	105000 ± 13000

ktoré nie sú zahrnuté v tabuľke sú hliník a kremík pre ich relatívne vysoké neistoty. Vo všetkých farbách bolo relatívne veľké zastúpenie olova. V rámci neistoty, koncentrácie olova pre všetky farby sú rovnaké. To môže nasvedčovať tomu, že tento prvok je v laku, ktorým bola drevená soška natretá. Všetky farby mali relatívne veľké koncentrácie draslíka a vápnika. Spomínané prvky nemusia byť nevyhnutne vo farbách ale môžu sa nachádzať v laku alebo v samotnom dreve. Najzaujímavejší identifikovaný prvok bolo bárium, ktoré sa nachádzalo v červenej a bielej farbe.

Tab. 3 Namerané koncentrácie prvkov troch farieb, ktoré boli nanesené na matrioške. Koncentrácie prvkov sú v jednotkách ppm. (LOD – pod limitom detekcie).

	červená	biela	čierna
S	3770 ± 590	2950 ± 520	2820 ± 240
Cl	2380 ± 380	3020 ± 420	1220 ± 230
K	5280 ± 400	7000 ± 470	4500 ± 300
Ca	4360 ± 340	4130 ± 320	4760 ± 290
Ti	95 ± 63	117 ± 72	206 ± 54
Mn	553 ± 89	566 ± 89	1020 ± 82
Fe	313 ± 77	690 ± 110	575 ± 64
Cu	156 ± 78	49 ± 54	57 ± 40
Zn	119 ± 86	155 ± 96	187 ± 55
Ba	170 ± 220	200 ± 250	LOD
Pb	3000 ± 1400	4200 ± 1600	4980 ± 820

Okrasnému tanieriku sme merali len prvkové zloženie pigmentov metódou PIXE, metóda AMS v tomto prípade bola vynechaná. Tanierik s vyznačenými bodmi, na ktoré bol namierený zväzok iónov pri meraniach je znázornený na obr. 8 a namerané koncentrácie prvkov sú uvedené v tabuľke 4. Prvok s najvyššou nameranou koncentráciou bol olovo pre každý pigment. Predpokladáme, že tento prvok nebol priamo vo farbách ale bol súčasťou glazúry podobne ako to bolo pri matrioške. Ďalším prvokom, ktorý nemusel byť súčasťou pigmentov a namerali sme mu relatívne vysokú koncentráciu bol kremík. S najväčšou pravdepodobnosťou väčšie zastúpenie tohto prvku bolo v samotnej keramike. Ďalšími prvkami s vyššími nameranými koncentráciami boli vápnik a draslík. Najzaujímavejší identifikovaný prvok bol kobalt v modrej farbe. Prítomnosť Co v pigmente naznačuje tomu, že sa jedná konkrétne buď o farbu tzv. blankytná modrá alebo kobaltová modrá. Tmavosť modrého pigmentu skôr naznačuje tomu, že je to kobaltová modrá. V oboch prípadoch sa spomínané farby začali syntetizovať a používať začiatkom 19. storočia (Muntwyler et al., 2023; Kühn, 1969). Z tohto môžeme dedukovať, že keramika nemôže byť staršia ako uvedené obdobie. Hornú hranicu výroby tanierika môžeme určiť podľa obsahu olova, ktoré v súčasnosti má obmedzené používanie.



Obr. 8 Okrasný tanierik, ktorý sme merali na piatich vyznačených miestach (1- červená, 2 – hnedá, 3 – modro hnedá a 4 – modrá a 5 – zelená).

4 Záver

V tejto práci sme analyzovali vzorky rádiouhlíkovým datovaním s využitím AMS za účelom určenia veku artefaktov a metódou PIXE na identifikáciu prvkového zloženia pigmentov nanesených na artefaktoch. Merania sme uskutočnili v laboratórium CENTA na tandemovom urýchľovači. Tri vzorky boli analyzované oboma metódami a jedna vzorka bola analyzovaná len

Tab. 4 Namerané koncentrácie prvkov v pigmentoch nanesených na tanieriku. Koncentrácie sú v jednotkách ppm. (LOD – pod limitom detekcie).

	červená	hnedá	modrá	modro hnedá	zelená
Si	77000 ± 14000	113000 ± 16000	181000 ± 25000	25300 ± 8200	206000 ± 28000
Cl	3400 ± 1300	LOD	LOD	LOD	LOD
K	4430 ± 690	7080 ± 850	7900 ± 1100	2000 ± 460	10500 ± 1300
Ca	6000 ± 640	8250 ± 780	9400 ± 970	2020 ± 380	11800 ± 1200
Ti	350 ± 190	760 ± 210	490 ± 250	180 ± 140	660 ± 270
Fe	3540 ± 440	2460 ± 370	2450 ± 420	760 ± 220	2510 ± 460
Co	LOD	LOD	3550 ± 550	330 ± 190	LOD
Zn	3570 ± 640	3320 ± 590	5390 ± 920	1290 ± 410	4700 ± 870
Pb	707000 ± 44000	782000 ± 49000	107000 ± 72000	420000 ± 30000	115000 ± 79000

PIXE metódou. Z nameraných údajov sme dokázali určiť, že ani jedna vzorka nie je staršia ako 150 rokov. Zároveň ani jedna vzorka nepochádza z aktuálneho storočia. Okrem rádiouhlikového datovania to dokazuje aj prvkové zloženie pigmentov, ktoré mali v troch prípadoch relatívne veľké koncentrácie olova. V prípade, v ktorom sme nedokázali využiť metódu rádiouhlíkového datovania sme vek vzorky odhadli pomocou prítomnosti kobaltu v modrej farbe.

Poďakovanie

Táto práca bola podporovaná Univerzitou Komenského v Bratislave grantom mladých (číslo projektu UK/3172/2024)

Literatúra

Barrett, G. T., Ebert, B., & Allen, K. (2025). Radiocarbon mortar dating of newly uncovered medieval ceiling paintings at Stavanger Cathedral, Norway. *Journal of Cultural Heritage*, *71*, 402–411. https://doi.org/10.1016/j.culher.2024.12.017

Beck, L., Caffy, I., Mussard, S., Delqué-Količ, E., Moreau, C., Sieudat, M., Dumoulin, J. P., Perron, M., Thellier, B., Hain, S., Foy, E., Moulherat, C., & OCBC. (2022). Detecting recent forgeries of Impressionist and Pointillist paintings with high-precision radiocarbon dating. *Forensic Science International*, *333*. https://doi.org/10.1016/j.forsciint.2022.111214

Calligaro, T., Banas, A., Banas, K., Radović, I. B., Brajković, M., Chiari, M., Forss, A. M., Hajdas, I., Krmpotić, M., Mazzinghi, A., Menart, E., Mizohata, K., Oinonen, M., Pichon, L., Raisanen, J., Siketić, Z., Šmit, Ž., & Simon, A. (2022). Emerging nuclear methods for historical painting authentication: AMS-14C dating, MeV-SIMS and O-PTIR imaging, global IBA, differential-PIXE and full-field PIXE mapping. *Forensic Science International*, *336*. https://doi.org/10.1016/j.forsciint.2022.111327

Campbell, J. L., Boyd, N. I., Grassi, N., Bonnick, P., & Maxwell, J. A. (2010). The Guelph PIXE software package IV. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, *268*(20), 3356–3363. https://doi.org/10.1016/j.nimb.2010.07.012

Corregidor, V., Oliveira, A. R., Rodrigues, P. A., & Alves, L. C. (2015). Paintings on copper by the Flemish artist Frans Francken II: PIXE characterization by external microbeam. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, *348*, 291–295. https://doi.org/10.1016/j.nimb.2014.12.072

Gettens, R. J., Kühn, H., Chase, W.T. (1993). Lead white in Artists' Pigments. A Handbook of Their History and Characteristics. *Oxford University Press*, *2*, 67–81.

Kaizer, J., Bujdoš, M., Buompane, R., Dulanská, S., Ješkovský, M., Kontuľ, I., Nisi, S., Povinec, P. P., Sirignano, C., Terrasi, F., & Zeman, J. (2024). Mass spectrometry developments of 232Th and 238U radiopurity measurements for LEGEND. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, *333*(7), 3431–3437. https://doi.org/10.1007/s10967-024-09352-6

Kontul, I., Cherkinsky, A., Ješkovský, M., Kaizer, J., Povinec, P. P., Sučák, K., & Zeman, J. (2024). Contributions of fossil and non-fossil fractions to total carbon in urban aerosols in Bratislava (Slovakia). *Journal of Environmental Radioactivity*, *278*. https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2024.107512

Kühn, H. (1969). Pigmente in den Gemälden der Schack-Galerie. *Bayerische Staatsgemäldesammlungen (Ed.) Schack-Galerie (Gemäldekataloge Bd. II)*.

Kuhn, H. (1986). Zinc White, in Artists' Pigments. A Handbook of Their History and Characteristics. *Cambridge University Press, London*, *1*, 169–186.

Kvasniak, J., Ješkovský, M., Zeman, J., Kontuľ, I., Kaizer, J., Sučák, K., & Povinec, P. P. (2024). Improvements in the PIXE system of the CENTA laboratory with application in the contamination studies of tree rings in Slovakia. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, *548*, 165254. https://doi.org/10.1016/j.nimb.2024.165254

Laver M. (1997). Titanium Dioxide Whites in Artists' Pigments, A Handbook of Their History and Characteristics. *E.W. Fitzhugh (Ed.) Oxford University Press*, *3*, 295–355.

Miguel, C., Pinto, J. V., Clarke, M., & Melo, M. J. (2014). The alchemy of red mercury sulphide: The production of vermilion for medieval art. *Dyes and Pigments*, 210–217.

Muntwyler S., Lipscher J., Schneider HP. (2023). Das Farbenbuch, *Alataverlag Elsau*, 94–95.

Povinec, P. P., Kontuľ, I., Ješkovský, M., Kaizer, J., Kvasniak, J., Pánik, J., & Zeman, J. (2024). Development and applications of accelerator mass spectrometry methods for measurement of 14C, 10Be and 26Al in the CENTA laboratory. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, *333*(7), 3497–3509. https://doi.org/10.1007/s10967-023-09294-5

Richardin, P., Cuisance, F., Buisson, N., Asensi-Amoros, V., & Lavier, C. (2010). AMS radiocarbon dating and scientific examination of high historical value manuscripts: Application to two Chinese manuscripts from Dunhuang. *Journal of Cultural Heritage*, *11*(4), 398–403. https://doi.org/10.1016/j.culher.2010.05.001

Taylor, S. M., Andrushenko, S. M., O'Meara, J. M., & Campbell, J. L. (2010). A versatile Monte Carlo package for computation of efficiencies of Si(Li), SDD and Ge detectors. *X-Ray Spectrometry*, *39*(3), 191–201. https://doi.org/10.1002/xrs.1246

Yamakawa, A., Bérail, S., Amouroux, D., Tessier, E., Barre, J., Sano, T., Nagano, K., Kanwal, S., Yoshinaga, J., & Donard, O. F. X. (2020). Hg isotopic composition and total Hg mass fraction in NIES Certified Reference Material No. 28 Urban Aerosols. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, *412*(19), 4483–4493. https://doi.org/10.1007/s00216-020-02691-9

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 244–248
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Tatiana Grečnárová

Study of beta decay of isotopes in the ^{179}Au chain

Tatiana Grečnárová[1*]

Supervisor: Martin Venhart[2†]

[1] Department of Nuclear Physics and Biophysics, Faculty of Mathematics, Physics and Informatics of Comenius University Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2] Institute of Physics, Slovak Academy of Sciences Dúbravská cesta 9, 845 11 Bratislava

Abstract: This work investigates the population of excited states of isotopes within a beta-decay chain of the ^{179}Au parent isotope using modern experimental facilities at the University of Jyväskylä in Finland. The main subject of the study is the extremely neutron-deficient isotope ^{179}Au. Understanding the ^{179}Au isotope is important for addressing key questions related to the nuclear structure of odd-mass Au isotopes in general. The main objectives of this research were to analyze the specific peak at 153.4 keV using the running gate method. The research revealed that the 153.4 keV peak is a doublet, indicating the presence of two nuclear transitions with very similar energy. This led to the identification of three new excited states in the ^{179}Pt isotope. These findings contribute to the knowledge in nuclear physics and open up possibilities for future studies.

Keywords: Nuclear structure, gamma-ray spectroscopy, neutron-deficient isotopes, "running gates" method

1 Introduction

Neutron-deficient odd-mass nuclei in the region of Z=79 represent an important test ground for the study of nuclear structure far from stability. In particular, these isotopes β^+/EC-decay chains can populate excited states in daughter nuclei that remain poorly known or entirely unobserved. One such case is the β^+/EC-decay of ^{179}Au, a short-lived isotope whose decay leads to a sequence of neutron-deficient nuclei in the platinum region.

Previous experiments lacked the energy resolution required to investigate the fine structure of the gamma-ray spectrum following the β^+/EC-decay of ^{179}Au in detail [Venhart et al., 2017] and [Harkness-Brennan et al., 2014]. The implementation of BEGe detectors in the M20 experiment at the University of Jyväskylä enabled high-precision measurements of gamma radiation at the focal plane of the RITU separator [Leino et al., 1995] and [Saren et al., 2023]. Their excellent energy resolution was crucial for resolving closely spaced transitions, such as the doublet structure observed near the 153.4 keV peak. The present work focuses on the identification and analysis of gamma-ray transitions associated with the β^+/EC-decay of ^{179}Au and its daughter isotopes, with particular emphasis on the 153.4 keV region, where evidence suggests the existence of previously unobserved deexcitation pathways in ^{179}Pt.

2 Experimental setup

This work is based on data acquired during the M20 experiment conducted at the Accelerator Laboratory of the University of Jyväskylä (ACCLAB-JYFL), Finland. The neutron-deficient isotope ^{179}Au was produced via the fusion-evaporation reaction ^{147}Sm(^{36}Ar, p3n)^{179}Au, using a ^{36}Ar beam accelerated to 183 MeV, delivered by the K=130 MeV cyclotron. Beam intensities reached up to 200 pnA, allowing for efficient production of the isotope of interest.

The reaction products were separated in flight using the RITU (Recoil Ion Transport Unit) gas-filled magnetic separator, as shown in Fig. 1. The separator uses a combination of quadrupole and dipole magnets to focus the beam and separate recoils according to their average ionic charge state [Saren et al., 2023]. At the focal plane, a time-of-flight system consisting of two multi-wire proportional chambers (MWPCs) was employed to distinguish evaporation residues from scattered beam particles. The recoils were subsequently stopped in a passive aluminum foil.

*grecnarova7@uniba.sk
†martin.venhart@savba.sk

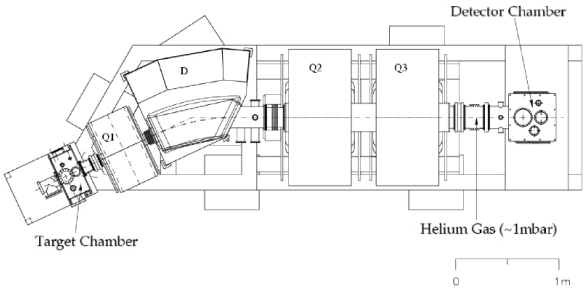


Figure 1: Schematic arrangement of the RITU gas-filled separator. Figure adapted from [Leino et al., 1995].

Gamma radiation following the β^+/EC-decay of ^{179}Au and its daughter isotopes was detected using an array of high-purity germanium detectors (HPGe). The detection setup, depicted in Fig. 2, consisted of two BEGe (Broad Energy Germanium) detectors of type BE6530, one coaxial HPGe detector, and one clover germanium detector. The BEGe detectors, placed at the focal plane, were chosen for their excellent energy resolution and nearly Gaussian peak shapes, which are particularly beneficial in the low-energy region.



Figure 2: Setup of germanium detectors used in the M20 experiment at the focal plane of the RITU separator.

2.1 Broad energy germanium detectors

BEGe detectors are a novell of high-purity germanium (HPGe) detectors optimized for gamma-ray spectroscopy over a wide energy range. Their excellent energy resolution and nearly ideal Gaussian peak shapes make them particularly well suited for the detection of low- and medium-energy gamma rays, where high precision is essential [Knoll, 2010].

These detectors have a compact, wide geometry with an area of 65 cm^2 and a thickness of 30 mm. Their energy range extends from 3 keV to 3 MeV, with optimised performance between 3 and 662 keV. The relative efficiency of the BE6530 detectors reaches approximately 60% compared to a standard 3.5" × 3.5" NaI(Tl) detector. Their energy resolution (FWHM) is approximately 0.75 keV at 122 keV and 2.00 keV at 1332 keV [Mirion Technologies, 2020].

3 Running gates method

The running gates method is a powerful technique in gamma-ray coincidence analysis that enables the resolution of multiplets in two-dimensional coincidence matrices [Rupnik et al., 1998]. These matrices contain events where gamma rays were detected simultaneously by the BEGe detector and by one of the other HPGe detectors placed at the focal plane of the RITU separator.

The method involves pulling a one-channel-wide gate on one axis of the matrix and shifting it channel by channel across the energy region of interest. For each gate position, a coincident spectrum is generated by projecting the corresponding events onto the other axis. The area of a selected peak in the coincident spectrum is then plotted as a function of gate energy. This approach allows for a detailed investigation of closely spaced transitions based on their coincidence relationships, enabling their separation and identification.

In this work, the method was applied to investigate a structure of the 153.4 keV peak, which was previously considered to be a single gamma-ray transition. The gate was scanned over channels 1008–1037, covering the energy region around 153.4 keV (with one channel representing 0.15 keV). For each gate position, the corresponding coincident spectrum was analyzed, and the energies and intensities of all visible gamma-ray peaks were extracted.

Figures 3 and 4 show examples of coincident spectra for gate positions at channels 1021 and 1025, corresponding to energies of 153.075 keV and 153.675 keV, respectively. Several transitions, including those at 524, 544, 257, 324, 591, and 614 keV, were identified as significant based on their behavior across the scanned gate range. A background peak at 132 keV, likely originating from long-lived implanted activity or natural radioactivity, was also observed.

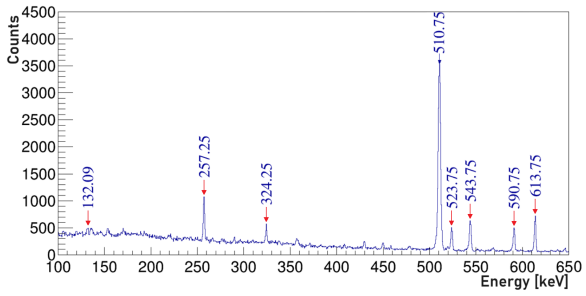


Figure 3: Spectrum of coincident gamma rays with gate set at channel 1021 (153.075 keV) of the coincidence matrix.

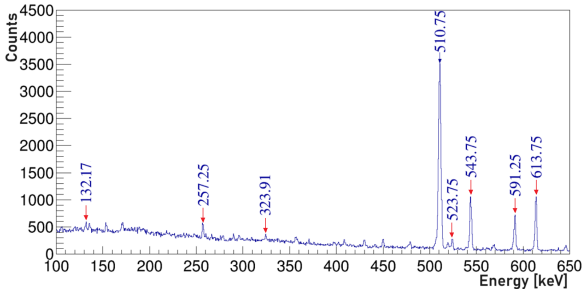


Figure 4: Spectrum of coincident gamma rays with gate set at channel 1025 (153.675 keV) of the coincidence matrix.

The peak area as a function of the gate mean energy is shown in Fig. 5. This dependence clearly confirms that the 153.4 keV peak is in fact a doublet, composed of two distinct transitions. Each component was subsequently analyzed based on its coincidence relationships to determine its nuclear origin and associated deexcitation paths.

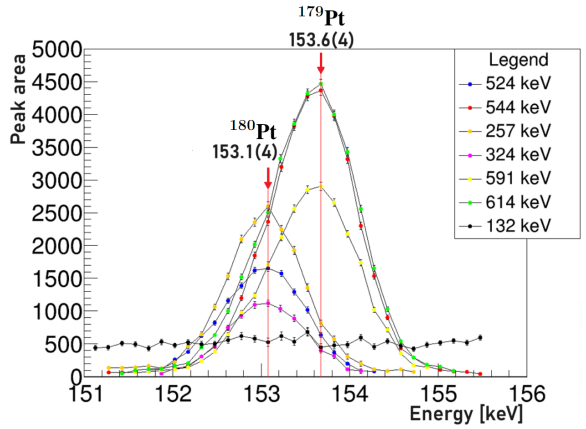


Figure 5: Doublet structure of the peak with an energy of 153.4 keV.

4 Main result

The application of the running gates method to the 153.4 keV region revealed that the observed peak consists of two separate gamma-ray transitions. The first component, located at 153.1(4) keV, matches a known transition in the β^+/EC-decay of ^{180}Au [Davidson et al., 1999]. The second component, at 153.6(4) keV, is characterized by a coincidence pattern that points to a different nuclear origin.

This higher-energy transition was found to be in coincidence with three additional gamma rays at 544, 591 and 614 keV. These are de-excitations of three new excited states in ^{179}Pt, see the level scheme given in Fig. 6.

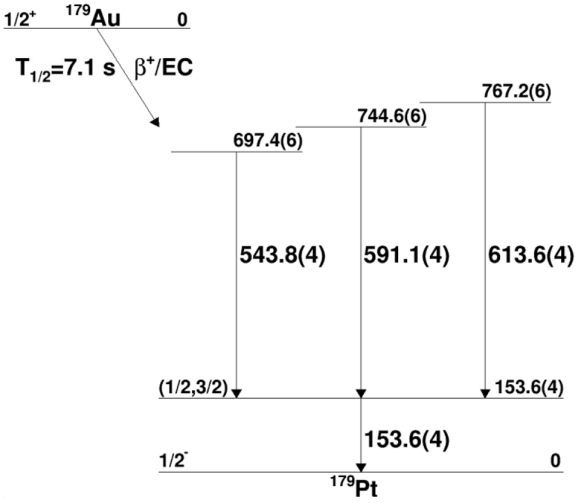


Figure 6: Partial level scheme of ^{179}Pt deduced in the present work.

To lend a weight to the above interpretation, the running gates method was also applied to the low-energy region of the spectrum, where characteristic X-rays of various elements appear. Figure 7 shows the X-ray region from 50 to 80 keV, with red arrows indicating the Pt X-ray lines. In the coincidence spectra, the 153.4 keV transition was used as a gate, and the resulting intensities of the X-ray peaks were recorded. The resulting plot, shown in the second graph in Fig. 7, reveals four peaks corresponding to the characteristic X rays of platinum, while the other lines correspond to background from different elements. The Pt X rays are produced during the atomic relaxation process, either as a result of internal conversion or electron capture decay.

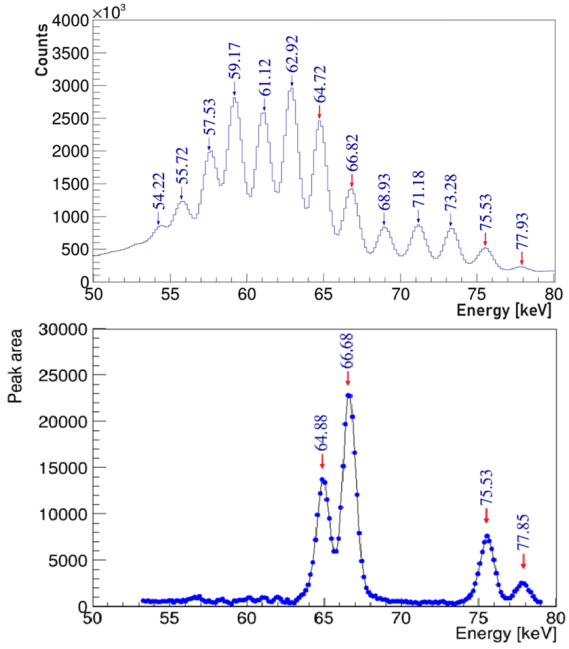


Figure 7: In the first graph are X-rays of elements Au, Pt, Ir, Os, Re, W and Ta from experiment M20. In the second graph, a running gate is applied to X-rays with peaks corresponding to Pt.

Support for the interpretation of the 153.6 keV transition as originating from the β^+/EC-decay of ^{179}Au to excited states in ^{179}Pt is also found in previous experimental work [Harding et al., 2021]. Harding et al. reported the observation of a gamma-ray line with an energy of 153.7 keV in decay studies of ^{179}Au performed at ISOLDE. Although the exact uncertainty of that measurement was not specified, the close agreement with our measured value of 153.6(4) keV strengthens the assignment of this transition to ^{179}Pt. Moreover, the coincidence relationships observed in the present work—specifically the cascade involving 544, 591 and 614 keV transitions—indicate a structured deexcitation pattern not previously reported. This newly proposed sequence of levels in ^{179}Pt expands the known level scheme and provides evidence for additional nuclear states populated in the decay of ^{179}Au.

The presence of characteristic Pt X-rays in coincidence with the 153.6 keV transition strongly supports the assignment of this line, and the associated cascade, to ^{179}Pt. A partial level scheme summarizing the newly identified transitions is shown in Fig. 6. Although spin and parity values for the new states could not be established within this work, the relative intensities and coincidence relationships provide compelling evidence for their existence.

Conclusion

In this work, the β^+/EC-decay of the neutron-deficient isotope ^{179}Au was studied to investigate the population of excited states in the ^{179}Pt daughter nuclei. Using the high-resolution capabilities of BEGe detectors and the running gates coincidence method, the 153.4 keV peak—originally interpreted as a single transition—the doublet components were resolved. Detailed coincidence analysis revealed that one of the components corresponds to a previously known transition in ^{180}Pt, while the other is associated with a new deexcitation path in ^{179}Pt. In coincidence with this second component, three previously unobserved gamma ray transitions were identified, suggesting the existence of three new intermediate energy levels in ^{179}Pt. These findings contribute to the extension of the known level scheme of ^{179}Pt and highlight the potential of precise coincidence spectroscopy for advancing the understanding of nuclear structure in exotic, neutron-deficient nuclei.

Acknowledgments

This work has been supported by the ESET Foundation (Slovakia), the Slovak Research and Development Agency under contract No. APVV-20-0532, Slovak grant agency VEGA (contract No. 2/0067/21).

References

[Davidson et al., 1999] Davidson, P., Dracoulis, G., Kibédi, T., Byrne, A., Anderssen, S., Baxter, A., Fabricius, B., Lane, G., and Stuchbery, A. (1999). Non-yrast states and shape co-existence in light Pt isotopes. *Nuclear Physics A*, 657:219–250.

[Harding et al., 2021] Harding, R. D., Andreyev, A. N., Barzakh, A. E., Cubiss, J. G., Duppen, P. V., Monthery, M. A., Althubiti, N. A., Andel, B., Antalic, S., Cocolios, T. E., Goodacre, T. D., Dockx, K., Farooq-Smith, G. J., Fedorov, D. V., Fedosseev, V. N., Fink, D. A., Gaffney, L. P., Ghys, L., Johnson, J. D., Joss, D. T., Huyse, M., Imai, N., Lynch, K. M., Marsh, B. A., Palenzuela, Y. M., Molkanov, P. L., O'Neill, G. G., Page, R. D., Rossel, R. E., Rothe, S., Seliverstov, M. D., Sels, S., Beveren, C. V., , and Verstraelen,

E. (2021). Laser-assisted nuclear decay spectroscopy of ^{176,177,179}Au. *Physical Review C*, 104:024326.

[Harkness-Brennan et al., 2014] Harkness-Brennan, L., Judson, D., Boston, A., Boston, H., Colosimo, S., Cresswell, J., Nolan, P., Adekola, A., Colaresi, J., Cocks, J., and Mueller, W. (2014). An experimental characterisation of a broad energy germanium detector. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A*, 760:28–39.

[Knoll, 2010] Knoll, G. F. (2010). *Radiation Detection and Measurement*. John Wiley & Sons, 4th edition.

[Leino et al., 1995] Leino, M., Jyvästö, J., Enqvist, T., Heikkinen, P., Jokinen, A., Nurmia, M., Ostrowski, A., Trzaska, W., Uusitalo, J., Eskola, K., Armbruster, P., and Ninov, V. (1995). Gas-filled recoil separator for studies of heavy elements. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*, 99:653–656.

[Mirion Technologies, 2020] Mirion Technologies (2020). BEGe^{TM} broad energy germanium detectors. `https://assets-mirion.mirion.com/prod-20220822/cms4_mirion/files/pdf/spec-sheets/spc-134-en-a-bege.pdf`. OPS-1424.

[Rupnik et al., 1998] Rupnik, D., Zganjar, E. F., Wood, J. L., Semmes, P. B., and Mantica, P. F. (1998). Levels of ^{187}au: A detailed study of shape coexistence in an odd-mass nucleus. *Physical Review C*, 58(2):771–793.

[Saren et al., 2023] Saren, J., Uusitalo, J., and Joukainen, H. (2023). In-flight recoil separators RITU and MARA and the standard detector setups. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*, 541:33–36.

[Venhart et al., 2017] Venhart, M., Wood, J., Boston, A., Cocolios, T., Harkness-Brennan, L., Herzberg, R.-D., Joss, D., Judson, D., Kliman, J., Matoušek, V., Motyčák, , Page, R., Patel, A., Petrík, K., Sedlák, M., and Veselský, M. (2017). Application of the broad energy germanium detector: A technique for elucidating - decay schemes which involve daughter nuclei with very low energy excited states. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A*, 849:112–118.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 249–254
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Patrik Soós

Možnosti protónovej emisie nových izotopov nad uzavretou vrstvou $Z = 82$

Patrik Soós[1]*

Školiteľ: Stanislav Antalic[1]†

FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt: Cieľom tejto práce je určiť ktoré izotopy ťažkých prvkov nad olovom môžu podliehať protónovej emisií a určiť tzv. protónový dripline, ktorý definuje hranicu existencie jadier. V práci sú porovnané teoretické modely pre výpočtet polčasu rozpadu $T_{1/2}$ pre protónovú emisiu a α rozpad. Následne modely s najmenšou chybou sú aplikované do oblasti nad olovom $Z > 82$. Nakoniec sú z polčasov rozpadov vyhodnotené vetviace pomery, ktoré vyjadrujú pravdepodobnosť rozpadu izotopu daným rozpadovým módom. Výstupom práce sú predpovede rozpadových charakteristík neutrónovo-deficitných izotopov bizmutu, astátu a francia.

1 Úvod

Rádioaktivita je spontánny proces, pri ktorom sa z jadra emitujú častice, alebo gama žiarenie, aby jadro dosiahlo viac energeticky výhodný stav. Jedným zriedkavým typom rádioaktívneho rozpadu jadier je protónová emisia, ktorá sa vyskytuje sa u neutrónovo deficitných izotopoch. Štúdium protónovej emisie patrí k popredným smerom jadrového výskumu, jej význam spočíva v určení tzv. protónového driplinu, ktorý definuje hranicu existencie jadier. Jadrá za touto hranicou sú neviazané voči emisii nukleónu, a preto nemôžu stabilne existovať. Súčasné modely na opis jadier nedokážu jadrá v tejto oblasti vhodne popísať. Preto je dôležité získavať nové experimentálne dáta o izotopoch v tejto oblasti. Doposiaľ všetky experimentálne merania pre protónovú emisiu zo základného stavu boli získané pre izotopy pod olovom ($Z < 82$), je preto dôležité zodpovedať otázku, ktoré izotopy nad olovom ($Z > 82$) treba študovať, s cieľom identifikovať tento typ rozpadu. Izotopy v tejto oblasti podliehajú najmä rozpadu pomocou emisie α častice, preto je potreba zhodnotiť pravdepodobnosť rozpadu pomocou protónovej emisie voči α rozpadu.

* soos20@uniba.sk
† stanislav.antalic@fmph.uniba.sk

V práci sú odhadnuté polčasy rozpadu pre nové neutrónovo deficitné izotopy ťažkých prvkov. Pre tieto izotopy sú následne vyhodnotené vetviace pomery pre protónovú emisiu. Z vybraných izotopov je spravený výber pre experimentálne merania. Limit pre experimentálne merania je polčas rozpadu dlhší než 1 mikrosekunda. Jadrá s kratším polčasom rozpadu nemožno zmerať pomocou dnešných experimentálnych metód.

2 Metodika práce

2.1 Q hodnota

Pomocou výpočtu Q hodnoty protónu sa dá zistiť, či daný izotop môže poliehať rozpadu pomocou emisie protónu. Ak $Q_P > 0$, tak je emisia protónu energeticky povolená. Q hodnota je hlavným vstupným parametrom pre výpočet polčasov rozpadu. Vypočíta sa

$$Q_i = (\Delta M_p - \Delta M_d - \Delta M_i)c^2 \tag{1}$$

kde ΔM_p, ΔM_d a ΔM_i sú hmotnostné prebytky pre meterské jadro, dcérske jadro a emitovanú časticu relatívne. Ich hodnoty boli prevzaté z NuDat databázy [NuDat, 2024] pre experimentálne zmerané izotopy, a z tabuliek [Moller et al., 2012] pre nezmerané izotopy. Pre emisiu protónu bol použitý hmotnostný prebytok $\Delta M_{i=\mathrm{P}} = 7.289\,\mathrm{MeV}$, a pre α rozpad $\Delta M_{i=\alpha} = 2.425\,\mathrm{MeV}$.

2.2 Tunelovanie

Na zistenie polčasu rozpadu nových izotopov cez kavntové tunelovanie použijeme známy vzťah

$$T_{1/2,\mathrm{tunel}} = \frac{\ln(2)}{Pf}, \tag{2}$$

kde

$$P = \exp\left(-2\int_{r_a}^{r_b}\sqrt{\frac{2m_i}{\hbar^2}(U(x)-Q_i)}\,dx\right)$$

je pravdepodobnosť častice, že pretuneluje cez potenciálovú bariéru, $f = v_{\mathrm{P}}/2a$ je frekvencia nárazov na bariéru, $v_{\mathrm{P}} = \sqrt{2Q_i/m_i}$, m_i je hmotnosť emitovanej častice, $\hbar = 1.054571817 \cdot 10^{-34}$ Js je redukovaná Plancková konštanta, $v = \sqrt{2Q_{\mathrm{P}}/\mu}$ je rýchlosť emitovaného protónu, $r_d \approx 1.2 \cdot A^{1/3}$ fm je polomer dcérskeho jadra vypočítaného zo vzťahov [(14), (15), (16), (17), (18) a (19)] z [Medeiros et al., 2008], $U(x)$ je columbovský potenciál, a miesto kam častica pretuneluje cez bariéru je $r_b = Z_d e^2/4\pi\varepsilon_0 Q_{\mathrm{P}}$. Všetky veličiny sú dosádzané v SI jednotkách.

2.3 Semi-empirické modely pre protónovú emisiu

2.3.1 Delion:

Model Delion prezentovaný v [Delion et al., 2006] používa na výpočet polčasu rozpadu jednoduchý vzťah v tvare Geiger-Nuttallovho zákona. Tento vzťah je korigovaný o vplyv odstredivej bariéry, a je v ňom zahrnutý coulombovský parameter pre protónovú emisiu. Výsledný vzťah je daný v tvare

$$\log\left(T_{1/2,\mathrm{Del}}\right) = a_k(\chi - 20) + b_k, \tag{3}$$

kde

$$\chi = 2(Z_d - 1)e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar v$$

je coulombovský parameter, Z_d je protónové číslo materského izotopu, $e = 1.60217663 \cdot 10^{-19}$ C je elementárny náboj, $\mu = \frac{m_d m_{\mathrm{P}}}{m_d + m_{\mathrm{P}}}$ je redukovaná hmotnosť protónu a dcérskeho jadra, $a_1 = 1.31$ a $b_1 = -2.44$ sú konštanty pre $Z < 68$, a $a_2 = 1.25$ a $b_2 = -4.71$ sú konštanty pre $Z > 68$. Všetky veličiny sú dosádzané v SI jednotkách.

2.3.2 Universal decay law of proton emission (UDLP):

Model UDLP prezentovaný v [Qi et al., 2012] je odvodený na základe mikroskopického mechanizmu rozpadu. Okrem vplyvu odstredivej bariéry a coulombovkého parametra zahŕňa navyše pravdepodobnosť predvytvorenia protónu na okraji jadra. Polčas rozpadu je daný vzťahom

$$\log\left(T_{1/2,\mathrm{UDLP}}\right) = a\chi' + b\rho' + c, \tag{4}$$

kde

$$\chi' = \mathscr{A}^{1/2} Z_{\mathrm{P}} Z_d Q_{\mathrm{P}}^{-1/2},$$

$$\rho' = \sqrt{\mathscr{A} Z_P Z_d \left(A_d^{1/3} + A_{\mathrm{P}}^{1/3}\right)},$$

$$\mathscr{A} = A_d A_{\mathrm{P}}/(A_d + A_{\mathrm{P}}),$$

$c = -17.8$ je parameter závislý na pravdepodobnosti predvytvorenia častice, konštanty sú $a = 0.386$ a $b = -0.502$, a v prípade protónovej emisie $Z_{\mathrm{P}} = A_{\mathrm{P}} = 1$. Q_{P} hodnota je dosádzaná v jednotkách MeV.

2.4 Semi-empirické modely pre α rozpad

2.4.1 Universal decay law (UDL):

Model UDL prezentovaný v [Qi et al., 2009] je odvodený na základe rovnakého postupu ako UDLP, pričom UDL je všeobecný vzťah používaný na opis α rozpadov a klastrových rozpadov. Vzťah pre výpočet polčasov rozpadu je daný ako

$$\log\left(T_{1/2,\mathrm{UDL}}\right) = a\chi' + b\rho' + c, \tag{5}$$

kde

$$\chi' = \mathscr{A}^{1/2} Z_\alpha Z_d Q_\alpha^{-1/2},$$

$$\rho' = \sqrt{\mathscr{A} Z_\alpha Z_d \left(A_d^{1/3} + A_\alpha^{1/3}\right)},$$

$$\mathscr{A} = A_d A_\alpha/(A_d + A_\alpha),$$

$c = -21.9453$ konštanty sú $a = 0.4314$, $b = -0.4608$, a v prípade α rozpadu $Z_\alpha = 2$ a $A_\alpha = 4$. Q_α hodnota je dosádzaná v jednotkách MeV.

2.4.2 Poenaru:

Vzťah prezentovaný v [Poenaru et al., 1980] je odvodený na základe teórie α rozpadu, pričom zohľadňuje vzdialenosť počtu protónov a neutrónov jadra od najbližších uzavretých vrstiev. Vzťah pre výpočet polčasov rozpadu je daný ako

$$\log\left(T_{1/2,\mathrm{Poe}}\right) = (B_1 + B_2 y + B_3 + B_4 y^2 + B_5 yz + \\ + B_6 z^2) \cdot \frac{K_s}{\ln(10)} - 20.446 \tag{6}$$

kde

$$K_s = 2.52956 Z_d \left(A_d/A_p Q_\alpha\right)^{1/2} \left(\operatorname{acos}\sqrt{x} - \sqrt{x(1-x)}\right),$$

$$x = 0.4253 Q_\alpha \left(1.5874 + A_d^{1/3}\right)/Z_d,$$

$$A_d = A_p - 4, \quad Z_d = Z_p - 2,$$

$$y = (N - N_i)/(N_{i+1} - N_i), \quad N_i < N \leq N_{i+1},$$

$$N_i = ...,51,83,127,185,...,$$

$$z = (Z - Z_i)/(Z_{i+1} - Z_i), \quad Z_i < Z \leq Z_{i+1},$$

$$Z_i = ...,51,83,115,121,...,$$

a konštanty sú

$$B_1 = 0.988662, \quad B_2 = 0.016314, \quad B_3 = 0.020433,$$

$$B_4 = 0.027896, \quad B_5 = -0.003033, \quad B_6 = -0.003033.$$

2.5 Vetviaci pomer

Na zhodnotenie pravdepodobnosti rozpadového módu izotopu sa v jadrovej fyzike používa tzv. vetviaci pomer. Pravdepodobnosť izotopu rozpadnúť sa rozpadovým módom j dostaneme ako

$$b_j = \frac{1/T_{1/2,j}}{\sum_i 1/T_{1/2,i}}. \tag{7}$$

3 Výsledky

Za účelom dosiahnutia čo najpresnejších odhadov polčasov rozpadu boli porovnané postupy podľa Delion [Delion et al., 2006], UDLP [Qi et al., 2012] a výpočet cez tunelovanie. Najlepšiu zhodu vykazoval model UDLP, a to s priemernou odchýlkou $\overline{\Delta\log(T_{1/2,\mathrm{UDLP}})} = 0.54$. Dosiahnuté výsledky sú uvedené v tabuľke 1.

Pre α rozpad boli na odhad polčasov rozpadu porovnané postupy UDL [Qi et al., 2009], Poenaru [Poenaru et al., 1980], a výpočet cez tunelovanie. Najlepšiu zhodu vykazoval model Poenaru s priemernou odchýlkou $\overline{\Delta\log(T_{1/2,\mathrm{Poe}})} = 0.769$. Dosiahnuté výsledky sú uvedené v tabuľke 2.

V prvom je rade dôležité si všimnúť (Tab. 3/Obr. 1), že izotopy $^{180-183}$Bi, $^{184-185}$Bi a ^{189}Fr majú odhadnuté polčasy rozpadu príliš krátke na to, aby mohli byť experimentálne zmerané. Ako bolo spomenuté v úvode, limit pre experimentálne merania je okolo $1\,\mu s$. Z toho dôvodu, napriek tomu, že by sa tieto izotopy mali rozpadať emisiou protónu, nebudú predmetom blízkych experimentálnych meraní.

Rozpady izotopov ^{186}Bi, ^{184}Bi, ^{191}At a ^{197}Fr už boli experimentálne zmerané, a bolo pre ne určené, že sa rozpadajú emisiou α častice [NuDat, 2024]. To sedí s výsledkami prezentovanými v tejto práci, ktoré hovoria že pre všetky tieto izotopy bude pravdepodobnosť rozpadu emisiou protónu blízka nule. Izotop ^{184}Bi sa podľa našich výsledkov rozpadá emisiou protónu s pravdepodobnosťou $b_\mathrm{P} = 0.014 = 1.4\%$, podľa databázy NuDat sa tento izotop rozpadá emisiou α častice so 100% pravdepodobnosťou. Tento fakt sa nevylučuje s našimi výsledkami, pretože pri syntéze tohto izotopu sa ich vyprodukovalo iba 10 [Andreyev et al., 2003]. Pravdepodobnosť že by sa všetkých 10 jadier rozpadlo emisiou α častice je $P(10 \times \alpha \text{ rozpad}) = 0.986^{10} = 87\%$.

Izotop ^{185}Bi je jediný experimentálne zmeraný izotop nad uzavretou vrstvou $Z = 82$. Na základe experimentálnych meraní bol preň určený vetviaci pomer $b_\mathrm{P} = 92\%$ [NuDat, 2024], a polčas rozpadu $T_{1/2} = 2.8^{+2.3}_{-1.0}\,\mu s$ [Doherty et al., 2021]. To je v súlade s našimi výpočtami $b_\mathrm{P} = 86\%$ a $T_{1/2,\mathrm{P}} = 2.5\mu s$.

Izotop ^{190}At bol experimentálne zmeraný, a bol preň pozorovaný α rozpad [Andreyev et al., 2023]. To je v súlade s našim výsledkom $b_\mathrm{P} = 0\%$.

Pre izotopy ^{188}At, $^{192-194}$Fr a ^{196}Fr sme dostali $b_\mathrm{P} \approx 0$, preto nebudú predmetom experimentálnych meraní za účelom nájdenia nových protónových emitorov.

Nakoniec, izotopy ^{186,187}At a ^{190,191}Fr sa podľa našich výpočtov budú rozpadať emisiou protónu s pravdepodobnosťou $b_\mathrm{P} \approx 100\%$, a izotopy ^{189}At, ^{195}Fr s pravdepodobnosťou $b_\mathrm{P} \approx 50\%$. Tieto izotopy majú všetky polčas rozpadu dlhší ako $1\,\mu s$, teda by sa mali dať experimentálne zmerať.

Na výber izotopu, ktorý bude predmetom merania nestačia polčasy rozpadu a vetviace pomery, pre vybraných kandidátov treba ešte zhodnotiť ich možnosti produkcie. Produkcia izotopu má význam počtu vyprodukovaných jadier za jednotku času. Vhodnými kandidátmi pre ďalšie experimentálne merania s príslušnými Q_P hodnotami, polčasmi rozpadu a vetviacimi pomermi sú izotopy uvedené v tabuľke 4.

Referencie

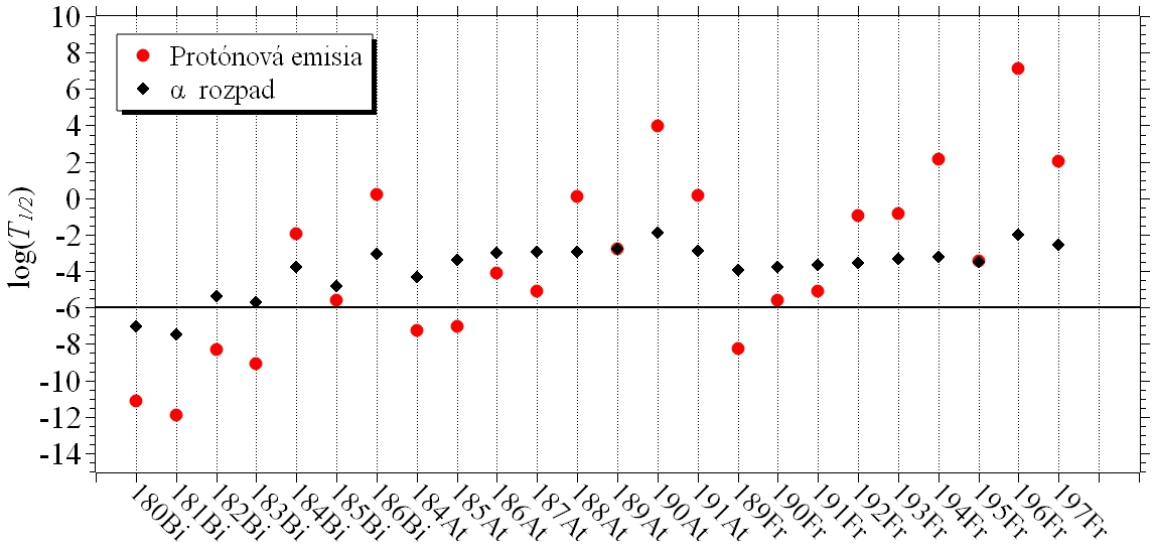
[Möller et al., 2016] P. Möller, A.J. Sierk, T. Ichikawa, H. Sagawa (2016). Nuclear ground-state masses and deformations: FRDM(2012). *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 109–110.

[NuDat, 2024] Nuclear National Data Center, (2024). nsr_20240723.

[Medeiros et al., 2007] E.L. Medeiros, M.M.N. Rodrigues, S.B. Duarte, O.A.P. Tavares (2007). Systematics of half-lives for proton radioactivity. *The European Physical Journal A*, 34:417–427.

[Delion et al., 2006] D.S. Delion, R.J. Liotta, R. Wyss (2006). Systematics of Proton Emission. *Physical*

Obr. 1: Porovnanie očakávaných polčasov rozpadu izotopov bizmutu, astátu a francia pre protónovú emisiu a alfa rozpad. Horizontálna čiara predstavuje limit pre experimentálne merania $T_{1/2} \geq 10^{-6}$ s



Review Letters, 96:072501.

[Qi et al., 2012] C. Qi et al. (2012). Effects of formation properties in one-proton radioactivity. *Physical Review C*, 85:011303.

[Qi et al., 2009] C. Qi et al. (2009). Microscopic mechanism of charged-particle radioactivity and generalization of the Geiger-Nuttall law. *Physical Review C*, 80:044326.

[Poenaru et al., 1980] D.N. Poenaru, M. Ivascu, D. Mazilu (1980). A new semiempirical formula for the alpha decay half-lives. *Journal de Physique Lettres*, 41:589–590.

[Andreyev et al., 2003] A.N. Andreyev et al. (2003). α-decay spectroscopy of light odd-odd Bi isotopes - II: 186Bi and the new nuclide 184Bi. *The European Physical Journal A*, 18:55–64.

[Doherty et al., 2021] D.T. Doherty et al. (2021). Solving the Puzzles of the Decay of the Heaviest Known Proton-Emitting Nucleus ^{185}Bi. *Physical Review Letters*, 127:202501.

[Andreyev et al., 2023] A.N. Andreyev et al. (2023). α decay of the neutron-deficient isotope ^{190}At. *Physical Review C*, 108:034303.

Tabuľka 1: Porovnanie experimentálne zmeraných polčasov rozpadu s teoretickými predpoveďami polčasov rozpadu pre protónovú emisiu.

Izotop	Q_{P}[MeV]	$\log(T_{1/2,\text{P-tunel}})$	$\log(T_{1/2,\text{Del}})$	$\log(T_{1/2,\text{UDLP}})$	$\log(T_{1/2,\text{exp}})$
^{109}I	0.820	−4.81	−5.05	−4.39	−4.03
^{113}Cs	0.973	−6.18	−6.15	−5.62	−4.77
^{161}Re	1.197	−2.59	−3.16	−2.69	−3.36
^{171}Au	1.448	−4.19	−4.26	−4.16	−4.66
^{176}Tl	1.265	−1.65	−1.79	−1.92	−2.28
^{177}Tl	1.156	−0.24	−0.50	−0.67	−1.17
	$\overline{\Delta\log(T_{1/2})}$	0.83	0.69	0.54	

Polčasy rozpadov sú v tabuľke uvedené ako $\log(T_{1/2}[\mathrm{s}])$, teda predstavujú rádovú hodnotu polčasov rozpadu. Energie uvoľnené pri rozpade jadra emisiou protónu Q_{P} a experimentálne hodnoty polčasov rozpadov $T_{1/2,\text{exp}}$ boli prebrané z databázy NuDat [NuDat, 2024].
Polčasy rozpadu $T_{1/2,\text{Del}}$ boli vypočítané podľa vzťahu (3), $T_{1/2,\text{UDLP}}$ podľa vzťahu (4), a $T_{1/2,\text{P-tunel}}$ podľa analytického výpočtu cez tunelovanie (2).
Hodnota $\overline{\Delta\log(T_{1/2})}$ je priemerná odchýlka príslušných modelov od experimentálnych dát.

Tabuľka 2: Porovnanie experimentálne zmeraných polčasov rozpadu s teoretickými modelmi pre α rozpad.

Izotop	Q_α[MeV]	$\log(T_{1/2,\alpha\text{-tunel}})$	$\log(T_{1/2,\text{UDL}})$	$\log(T_{1/2,\text{Poe}})$	$\log(T_{1/2,\text{exp}})$
^{186}Bi	7.757	−3.496	−3.555	−3.079	−1.830
^{187}Bi	7.779	−3.581	−3.646	−3.150	−1.432
^{188}Bi	7.264	−1.962	−1.940	−1.520	−1.222
^{189}Bi	7.268	−1.994	−1.975	−1.536	−0.164
^{191}At	7.822	−2.998	−3.031	−2.794	−2.770
^{192}At	7.700	−2.638	−2.652	−2.387	−1.056
^{193}At	7.572	−2.249	−2.243	−1.994	−1.553
^{194}At	7.454	−1.881	−1.858	−1.621	−0.544
^{197}Fr	7.900	−2.561	−2.573	−2.269	−3.222
^{198}Fr	7.869	−2.483	−2.492	−2.172	−1.824
^{199}Fr	7.817	−2.338	−2.341	−2.009	−2.347
^{200}Fr	7.622	−1.731	−1.702	−1.384	−1.301
	$\overline{\Delta\log(T_{1/2})}$	0.999	1.004	0.769	

Polčasy rozpadov sú v tabuľke uvedené ako $\log(T_{1/2}[\mathrm{s}])$, teda predstavujú rádovú hodnotu polčasov rozpadu. Energie uvoľnené pri α rozpade Q_α a experimentálne hodnoty polčasov rozpadov $T_{1/2,\text{exp}}$ boli prebrané z databázy NuDat [NuDat, 2024].
Polčasy rozpadu $T_{1/2,\text{UDL}}$ boli vypočítané podľa vzťahu (5), $T_{1/2,\text{Poe}}$ podľa vzťahu (6), a $T_{1/2,\alpha\text{-tunel}}$ podľa výpočtu cez tunelovanie.
Hodnota $\overline{\Delta\log(T_{1/2})}$ je priemerná odchýlka príslušných modelov od experimentálnych dát.

Tabuľka 3: Predpovede rozpadových charakteristík bizmutu, astátu a francia pre protónovú emisiu a α rozpad. Konkrétne energií uvoľnených pri rozpadoch Q_{P} a Q_α, polčasov rozpadov $\log(T_{1/2,\mathrm{P,UDLP}})$ a $\log(T_{1/2,\alpha,Poe})$, a vetviaci pomer pre protónovú emisiu b_{P}.

Izotop	Q_{P}[MeV]	$\log(T_{1/2,\mathrm{P,UDLP}})$	Q_α[MeV]	$\log(T_{1/2,\alpha,Poe})$	b_{P}
^{180}Bi	2.959	−11.127	9.310	−7.046	1
^{181}Bi	3.220	−11.896	9.500	−7.470	1
^{182}Bi	2.219	−8.305	8.600	−5.381	.999
^{183}Bi	2.394	−9.103	8.720	−5.690	1
^{184}Bi	1.309	−1.922	8.000	−3.781	.014
^{185}Bi	1.741	−5.598	8.369	−4.805	.861
^{186}Bi	1.125	0.232	7.792	−3.079	0
^{184}At	2.079	−7.232	8.371	−4.333	.999
^{185}At	2.039	−7.023	8.031	−3.395	1
^{186}At	1.599	−4.106	7.891	−2.992	.929
^{187}At	1.727	−5.080	7.871	−2.936	.993
^{188}At	1.179	0.084	7.881	−2.970	.001
^{189}At	1.443	−2.786	7.821	−2.793	.496
^{190}At	0.921	3.978	7.526	−1.879	0
^{191}At	1.172	0.146	7.858	−2.909	.001
^{189}Fr	2.350	−8.247	8.473	−3.914	1
^{190}Fr	1.860	−5.577	8.413	−3.755	.985
^{191}Fr	1.790	−5.116	8.373	−3.648	.967
^{192}Fr	1.310	−0.944	8.333	−3.540	.003
^{193}Fr	1.300	−0.842	8.263	−3.346	.003
^{194}Fr	1.070	2.119	8.223	−3.234	0
^{195}Fr	1.565	−3.431	8.309	−3.479	.473
^{196}Fr	0.800	7.111	7.803	−1.980	0
^{197}Fr	1.075	2.019	8.000	−2.582	0

Hodnoty Q_{P} a Q_α boli vypočítané podľa vzťahu (5), pričom hmotnostné úbytky ΔM_p a ΔM_d sú teoretické, a boli prebrané z FRDM(2012) [Möller et al., 2016].
Hodnoty $\log(T_{1/2,\mathrm{P,UDLP}})$ boli vypočítané podľa vzťahu (4), a hodnoty $\log(T_{1/2,\alpha,\mathrm{Poe}})$ boli vypočítané podľa vzťahu (6).
Vetviaci pomer pre protónovú emisiu b_{P} bol vypočítaný podľa vzťahu (7).

Tabuľka 4 - Výber nových potenciálnych protónových emitorov pre experimentálne merania, s ich príslušnými rozpadovými charakteristikami

Izotop	^{186}At	^{187}At	^{189}At	^{190}Fr	^{191}Fr	^{195}Fr
Q_{P}[MeV]	1.599	1.727	1.443	1.860	1.790	1.565
$T_{1/2,\mathrm{P}}$	$78\,\mu s$	$8.32\,\mu s$	$1.66\,ms$	$2.65\,\mu s$	$7.66\,\mu s$	$371\,\mu s$
b_{P}	92.9%	99.3%	49.6%	98.5%	96.7%	47.3%

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 255
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Miriam Chvostálová

Majorana neutrino masses and neutrino-antineutrino oscillations

Miriam Chvostálová[1*]

Supervisor: Fedor Šimkovic[1†]

Department of Nuclear Physics and Biophysics, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

The observation of a total lepton number violating (LNV) process would serve as clear evidence of Majorana neutrinos. A celebrated example of the LNV process, most advanced experimentally and theoretically, is neutrinoless double-beta decay ($0\nu\beta\beta$-decay). In the case of the normal hierarchy of neutrino masses, a range of neutrino masses and mixing parameters exists where $m_{\beta\beta}$ value is substantially suppressed. This scenario could hinder the observation of $0\nu\beta\beta$-decay for the foreseeable future. In this case, a more promising method for demonstrating the Majorana nature of neutrinos is by exploiting processes that involve neutrino-antineutrino (and vice versa) oscillations.

In the basis of three flavor neutrinos, the Majorana neutrino mass term can be written as [Bilenky and Petcov, 1987]:

$$\mathscr{L}^M = -\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\gamma=e,\mu,\tau} \overline{(\nu_{\alpha L})^C}\, M_{\alpha\gamma}\, \nu_{\gamma L} + H.C. \quad (1)$$

Here, M is a complex symmetric mass matrix and $\nu_{\alpha L}$ (α = e, μ and τ) is the left-handed component of the flavor neutrino field. U is a unitary PMNS mixing matrix which diagonalizes M. Elements of U are parametrized by three mixing angles θ_{12}, θ_{13}, θ_{23}, one Dirac phase δ and two Majorana phases ϕ_1, ϕ_2. The values of the first four parameters are given by the global fit of neutrino oscillation data. Majorana phases are unknown, since they do not affect neutrino flavor oscillations. Without losing generality, we restricted them to the range $(-\pi/2,\ \pi/2)$.

The neutrino to antineutrino oscillation probability takes the form [Kovalenko and Šimkovic, 2024]

$$P_{\nu_\alpha\to\overline{\nu}_\gamma}(E,L) = \frac{(m^L_{\alpha\overline{\gamma}})^2}{E^2}, \quad (2)$$

where

$$m^L_{\alpha\overline{\gamma}} = |\sum_i U^*_{\alpha i}\, U^*_{\gamma i}\, m_i\, e^{-i\frac{m_i^2}{2E}L}|. \quad (3)$$

Here, L is the distance from the source to the detector and E is the energy of a propagating neutrino.

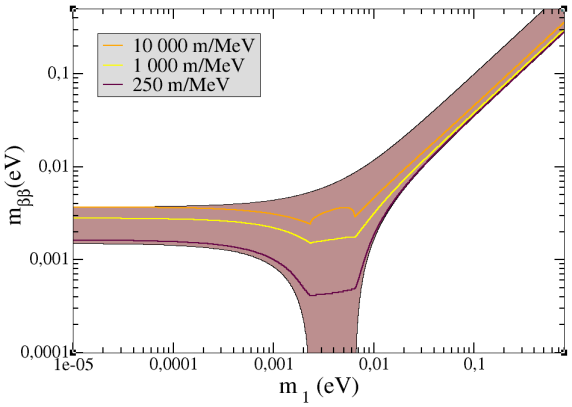


Figure 1: The effective Majorana mass $m_{\beta\beta}$ for arbitrary values of Majorana phases. For a set of L/E values, m^L_{ee} is presented for Majorana phases, which minimize value of $m_{\beta\beta}$.

For L=0 we have $m^{L=0}_{\alpha\gamma} = |M_{\alpha\gamma}|$. In particular case $m^{L=0}_{ee} = |m_{\beta\beta}|$, where $m_{\beta\beta}$ is the effective Majorana mass measured in $0\nu\beta\beta$-decay experiments.

In fig. 1 $m_{\beta\beta}$ is presented as a function of the lightest neutrino mass m_1, assuming a normal hierarchy of neutrino masses. The same allowed region also corresponds to m^L_{ee}. However, for the same point on this plane, ϕ_1 and ϕ_2 take on different values, also depending on L/E. We examined $m^L_{\overline{e}e}$, $m^L_{\overline{e}\overline{e}}$ for the Majorana phases that minimize $m_{\beta\beta}$. To the lowest value of $m_{\beta\beta}$ corresponds significantly larger value of m^L_{ee}, if a proper factor L/E is chosen. This fact might favor observation of neutrino to antineutrino oscillations, if $0\nu\beta\beta$-decay is strongly suppressed due to $m_{\beta\beta} \simeq 0$.

References

[Bilenky and Petcov, 1987] Bilenky, S. M. and Petcov, S. T. (1987). Massive neutrinos and neutrino oscillations. *Rev. Mod. Phys.*, 59:671–754.

[Kovalenko and Šimkovic, 2024] Kovalenko, S. and Šimkovic, F. (2024). Neutrino oscillations as a single feynman diagram. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 51.

*chvostalova5@uniba.sk
†simkovic@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 256
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Kristína Trnovská

Shapes of electron energy spectra in forbidden beta decays

Kristína Trnovská*

Supervisor: Rastislav Dvornický†

Department of Nuclear Physics and Biophysics, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Beta decay, or in this case beta minus decay, is a process in which an atomic nucleus decays into another one that consists of one more proton whilst keeping the same mass number, accompanied by the emission of an electron and an antineutrino:

$$(A,Z) \rightarrow (A,Z+1) + e^- + \overline{\nu}_e. \quad (1)$$

The description of allowed nuclear beta decays and their theoretical shapes of electron energy spectra is provided by the Fermi theory of weak interactions [Fermi, 1934]. In multiple experiments concerning single beta decay, the majority of the observed transitions are forbidden ones, meaning transitions with a larger transferred angular momentum and/or parity change, and their electron energy spectra are not known precisely, as there are additional factors.

1 Shapes of beta spectra

The standard form for the weak interaction Hamiltonian [Doi et al., 1985] is

$$\mathscr{H}(x) = \frac{G_\beta}{\sqrt{2}} \bar{e}(x)\gamma_\mu(1-\gamma^5)\nu_e(x)J^\mu(x) + h.c. \quad (2)$$

with $G_\beta = G_F V_{ud}$. In the non-relativistic impulse approximation, we obtain for the hadron current operator the following form:

$$J^\mu(\vec{x}) = \sum_n \tau_n^+ \delta(\vec{x}-\vec{x}_n)[\delta^{\mu 0} g_V + (\vec{\sigma}_n)^k \delta^{\mu k} g_A]. \quad (3)$$

There appear the Fermi and Gamow-Teller operators which are associated with the allowed beta transitions.

For allowed decays ($\Delta J^\pi = 1^+$), we have derived theoretical electron spectra, i.e. differential decay rates, as follows:

$$\begin{aligned} \frac{d\Gamma}{dE_e} &= \frac{2}{\pi^2} G_F^2 V_{ud}^2 g_A^2 B_{1^+} p_e E_e F_0(Z+1,E_e) \\ &\times (E_0-E_e)\sqrt{(E_0-E_e)^2 - m_\beta^2}. \end{aligned} \quad (4)$$

In there, we used the matrix element and the relativistic Fermi function [Dvornický et al., 2011] (for k=1) as shown below:

$$B_{1^+} = \frac{\left| <J_f \parallel \sum_n \tau_n^+ \{ \sigma_1(n) \otimes Y_0(n) \}_1 \parallel J_i > \right|^2}{2J_i+1}, \quad (5)$$

$$\begin{aligned} F_{k-1}(Z,E_e) &= \left(\frac{\Gamma(2k+1)}{\Gamma(k)\Gamma(1+2\gamma_k)} \right)^2 (2p_eR)^{\gamma_k - k} \\ &\times |\Gamma(\gamma_k + iy)|^2 e^{\pi y}, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\gamma_k = \sqrt{k^2 - (\alpha Z)^2}, \quad y = \alpha Z \frac{E_e}{p_e}. \quad (7)$$

In the case of forbidden decays, considering a transition with the change of the angular momentum and parity $\Delta J^\pi = 2^-$ (first unique forbidden beta decay), we obtained for the differential decay rate the following formula:

$$\begin{aligned} \frac{d\Gamma}{dE_e} &= \frac{2}{\pi^2} G_F^2 V_{ud}^2 g_A^2 B_{2^-} p_e E_e (E_0-E_e) \\ &\times \sqrt{(E_0-E_e)^2 - m_\beta^2} \\ &\times \left(\left(\frac{1}{3} p_e R \right)^2 F_1 + \left(\frac{1}{3} p_\nu R \right)^2 F_0 \right). \end{aligned} \quad (8)$$

The additional factors here come from the higher order of the partial wave expansion and represent the electron in the $p_{3/2}$ and the $s_{1/2}$ states. The matrix element is given by

$$B_{2^-} = \frac{\left| <J_f \parallel \sum_n \frac{r_n}{R} \tau_n^+ \{ \sigma_1(n) \otimes Y_1(n) \}_2 \parallel J_i > \right|^2}{2J_i+1} \quad (9)$$

References

[Doi et al., 1985] Doi, M., Kotani, T., and Takasugi, E. (1985). Double Beta Decay and Majorana Neutrino. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, 83:1–175.

[Dvornický et al., 2011] Dvornický, R., Muto, K., Šimkovic, F., and Faessler, A. (2011). Absolute mass of neutrinos and the first unique forbidden β decay of ^{187}Re. *Physical Review C*, 83:164–167.

[Fermi, 1934] Fermi, E. (1934). Versuch Einer Theorie der β-Strahlen. *Zeitschrift für Physik*, 88:161–171.

*trnovska15@uniba.sk
†rastislav.dvornicky@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 257
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Benjamín Dutka

Calibration of the Digital Optical Module of the KM3NeT neutrino telescope

Benjamín Dutka[1*]

Supervisor: Rastislav Dvornický[1†]

Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

1 Introduction

Neutrinos were first predicted by Wolfgang Pauli in 1930 when he was trying to solve the problem with β-decay. Neutrinos were suggested to be elusive particles that rarely interact with matter and have almost no mass and zero electric charge. As a result, neutrinos are unaffected by electromagnetic fields and can pass through solid matter without losing energy or diverging from their course, making them great messengers for observing celestial bodies and processes happening in the universe [Aiello, 2022].

2 KM3NeT neutrino telescope

KM3NeT neutrino telescope is a 3D array of DOMs (Digital Optical Modules), located in the Mediterranean sea, that works on detection of Cherenkov radiation emitted by particles from neutrino interactions. DOM comprises of 31 PMTs encased inside a glass sphere. Detection Unit consists of 18 DOMs that are placed in the vertical string. KM3NeT is made up of two neutrino telescopes, ARCA, which is located 100 km off-shore Sicilly, built at the depth of 3.5 km and focuses on detection of high energy neutrinos from outer space , and ORCA, which is located 40 km off-shore France, built at the depth of 2.5 km and focuses on detection of low energy neutrinos from Earth's atmosphere. By detecting these neutrinos we are able to better understand neutrino oscillations and processes happening in the space [Rea and the KM3NeT Collaboration, 2024]. While ORCA is dense grid of DOMs, ARCA is a sparse grid of DOMs to cover bigger volume of water.

3 Cherenkov radiation detection

Using the Frank-Tamm formula we calculated, that the number of emitted photons from Cherenkov radiation created by particle passing through medium per 1 cm is 244 photons.

$$N = \int_{\lambda_{min}=300nm}^{\lambda_{max}=650nm} d\lambda \frac{2\pi\alpha}{\lambda^2}\left(1-\frac{1}{\beta^2 n^2}\right), \quad (1)$$

where α is fine-structure constant, $\beta = \frac{v}{c}$ and n is refraction index of seawater. We assume that each pulse recorded by PMT follows the same general shape, consisting of Gaussian with exponential tail. A threshold is set $V_0 = V(t = 0, q_0)$. When pulse exceeds or drops bellow this threshold a time stamp is applied. Using these time stamps we are able to calculate $\Delta T = t_2 - t_1$ ToT (Time over Threshold). If more than 30 p.e. are detected a saturation effect is observed which leads to flattening of the curve with increasing charge. ToT is used to reconstruct the energy and direction from which neutrinos came from.

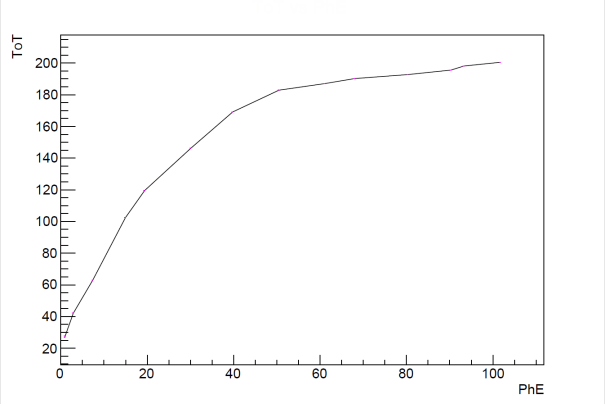


Fig.1 ToT as function of charge calculated by total of Photo Electrons detected by PMT .

References

[Aiello, 2022] Aiello, S. (2022). The km3net multi-pmt optical module. *Journal of Instrumentation (JINST)*, 17:28.

[Rea and the KM3NeT Collaboration, 2024] Rea, I. C. and the KM3NeT Collaboration (2024). The multi-pmt optical module of km3net. In *Proceedings of Science*, volume PoS(ICHEP2024), page 3.

*dutka4@uniba.sk
†rastislav.dvornicky@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 258–269
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Erik Řehulka, Jozef Rajník

Cyclic edge-connectivity of junctions of multipoles

Erik Řehulka[1*] Jozef Rajník[1†‡]

Department of Computer Science, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstract: Cyclic edge-connectivity is an interesting property of cubic graphs that has proven to be significant in graph theory. Research has shown that high cyclic edge-connectivity correlates with certain structural properties of cubic graphs, and notably, minimal potential counterexamples to several open problems need to have high cyclic edge-connectivity. However, the theoretical tools for determining cyclic edge-connectivity remain limited. In this work, we study cubic graphs built from smaller building blocks and demonstrate how we can determine the cyclic edge-connectivity of the resulting graph by imposing certain conditions for these blocks.

Keywords: cubic graphs, cyclic edge-connectivity, multipoles

Introduction

In the study of cubic, that is 3-regular graphs, the traditional edge-connectivity faces a natural limitation: it cannot exceed three, the minimum degree of such graphs. This constraint significantly restricts the exploration of properties of cubic graphs with different values of edge-connectivity.

Cyclic edge-connectivity, on the other hand, offers a wider range of values by imposing additional condition on edge-cuts. Specifically, the cyclic edge-connectivity of a graph G is defined as the size of the smallest cycle-separating edge-cut – an edge-cut whose removal yields two components, each containing a cycle. Unlike traditional edge-connectivity, this property has no fixed upper bound in cubic graphs, enabling the study of graphs with high cyclic edge-connectivity.

Research has shown that high cyclic edge-connectivity correlates with various structural properties of cubic graphs [Došlić, 2003, McCuaig, 1992a, Andersen et al., 1988]. Moreover, it has been proven that the smallest possible counterexample for several open problems must have high cyclic edge-connectivity [Máčajová and Mazzuoccolo, 2020, Kochol, 2004].

Our work focuses on cubic graphs constructed from smaller building blocks. Through several theoretical results, we establish conditions for these blocks that enable us to determine the cyclic edge-connectivity of the resulting graphs.

Such constructions of graphs with specific cyclic edge-connectivity remain relatively unexplored. The second author has explored how these building blocks with specific properties can be extended to form graphs with desired cyclic edge-connectivity [Rajník, 2023]. However, this research focused primarily on the existence of such graphs rather than determining the cyclic edge-connectivity of graphs built from more than two building blocks.

The paper is organized as follows: Section 1 introduces essential definitions and theorems. In Section 2 we explore what properties should the building blocks have and prove they are helpful in proving the cyclic edge-connectivity of the resulting graph. Section 3 and Section 4 present theoretical results for graphs constructed from two or more building blocks. Finally, Section 5 demonstrates practical applications of these theoretical tools through specific examples.

1 Preliminaries

In this section we establish the fundamental definitions essential for understanding our work. Definitions not provided in our work can be found in the book *Graph Theory* by Diestel [Diestel, 2017]. All graphs considered in this work are undirected and finite. We permit multiple edges, as well as loops.

A *girth* of a graph G, denoted by $g(G)$ is the minimum length of a cycle in G. If G does not contain a cycle, we set the girth to ∞. The distance between two vertices x and y in a graph G, denoted by $d_G(x,y)$, is defined as the number of edges on a shortest path between x and y in G. If no such path exists, we set $d_G(x,y) = \infty$. If the specific graph G is evident from the context, we shall only use $d(x,y)$.

1.1 Multipoles

In our work, we allow a specific type of graph, which allows ends of its edges to not be incident with a ver-

*rehulka3@uniba.sk
†jozef.rajnik@fmph.uniba.sk
‡Supervisor

tex, resulting in a graph with dangling edges. Such structures are called *multipoles*. A multipole is a pair $M = (V,E)$ of distinct finite sets of vertices V and edges E, where every edge $e \in E$ has two edge ends, which may or need not be incident with a vertex. The concept of multipoles was first introduced by Fiol [Fiol, 1991].

A *link* is an edge incident with two distinct vertices and a *dangling edge* is an edge with only one end incident with a vertex.

A multipole is considered connected if there exists a path between any pair of edge ends.

In multipoles, same as in graphs, an edge-cut in M is a set of edges $E(V_1,V_2)$, such that $\{V_1,V_2\}$ is a partition of $V(M)$. Note that all of the edges in an edge cut are links, since they connect two vertices.

The edge ends not incident with any vertex are called *semiedges*. The semiedges in a multipole are endowed with a linear order and we denote the tuple of its semiedges as $S(M)$.

A multipole M with n semiedges and $S(M) = (a_1,\ldots,a_n)$ can also be denoted as $M(a_1,\ldots,a_n)$. Similarly to graphs, the *order* of a multipole M, denoted by $|M|$, is the number of its vertices. Also the *degree* of a vertex v of a multipole is the number of edge ends incident with v. A multipole with k semiedges is usually called a *k-pole*. It can be seen, that a graph can be defined as a 0-pole.

One of the features of multipoles is connecting them to form larger multipoles or even graphs. They can be seen as small building blocks for constructing larger graphs or multipoles.

Let e and f be edges (not necessarily distinct) with at least one semiedge and e', f' two of their semiedges respectively, such that $e' \neq f'$. If $e \neq f$, the result of the *junction* of e' and f' is a new edge between the other edge ends of e and f, and a deletion of e and f. If $e = f$, the result of the *junction* of e' and f' is just the deletion of the edge.

The junction of two k-poles $M(a_1,\ldots,a_k)$ and $N(b_1,\ldots,b_k)$ consists of k individual junctions of semiedges a_i and $b_{f(i)}$, for i from 1 to k and a bijection $f : \{1,\ldots,k\} \to \{1,\ldots,k\}$. We denote the junction as $M *_f N$, if we use an arbitrary bijection we simply denote it as $M * N$. An example of a junction can be seen in Figure 1.

Consider two multipoles $M(a_1,\ldots,a_n)$ and $N(b_1,\ldots,b_m)$. Their *partial junction of size k* is a junction of some semiedges $(a_{i_1},\ldots,a_{i_k})$ and $(b_{j_1},\ldots,b_{j_k})$, where $k \leq n$ and $k \leq m$. Note that the vertices of the resulting multipole will be $V(M) \cup V(N)$, for clarity we can require the multipoles to have distinct vertices. In contrast to a normal junction, which results in a graph, the partial junction can result in a multipole. An example of a partial junction can be seen in Figure 2, note that the result is still a multipole with some semiedges and not a graph as in the example before.

We say that a multipole M contains a multipole N, or simply N is in M when there exists a multipole P with at least one vertex and a partial junction $*$ such that $M = N * P$, or $M = N$.

Same as in graphs, a multipole is cyclic if it contains a cycle.

The distance between two semiedges a and b is equal to

- 0 if both are part of the same edge,
- $d(x,y)$ where x and y are the vertices with which are incident the edges containing a and b, respectively.

By cutting a link $e = v_1v_2$, we mean the removal of e, along with adding two new dangling edges: v_1e_1 and v_2e_2, where e_1 and e_2 are new edge ends.

By removing a vertex v we mean the removal of all edges incident with v, as well as v itself.

1.2 Cyclic edge-connectivity

An edge-cut $E(V_1,V_2)$ in a graph G is called *cycle-separating*, if both induced subgraphs $G[V_1]$ and $G[V_2]$ contain a cycle. In cubic graphs there are only three graphs which do not contain a cycle-separating edge-cut: $K_{3,3}, K_4$ and Θ_2, which consists of two vertices connected by three edges [Nedela and Škoviera, 1995].

Similarly to edge-connectivity, we say that graph G is *cyclically k-edge-connected*, if there is no cycle-separating edge-cut with less than k edges.

Let $\beta(G) = |E| - |V| + 1$ be the cycle rank of G. Deleting any set of $k \geq \beta(G)$ edges yields either a disconnected graph or a graph without cycles, thus if G contains a cycle-separating edge-cut, it must contain one with no more than $\beta(G) - 1$ edges [Nedela and Škoviera, 1995].

Definition 1 ([Nedela and Škoviera, 1995])**.** *Let G be a graph. The cyclic edge-conectivity of G, denoted by $\zeta(G)$ is the largest integer $k \leq \beta(G)$ such that G is cyclically k-edge-connected.*

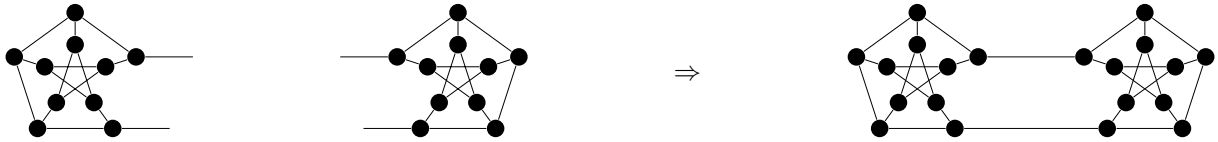


Figure 1: Junction of two multipoles

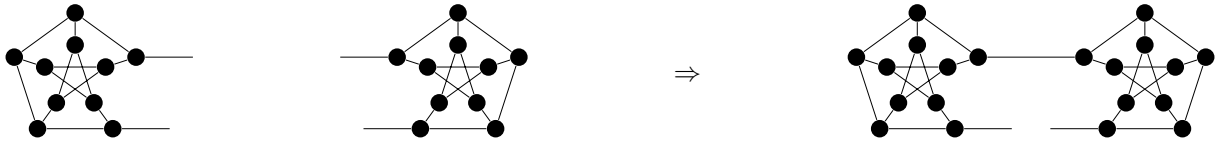


Figure 2: Partial junction of two multipoles

This means, that if a graph G does not contain a cycle-separating edge-cut, its cyclic edge-connectivity is equal to $\beta(G)$. Note that for acyclic graphs this number is 0, for the three mentioned cubic graphs the values are $\zeta(K_{3,3}) = 4$, $\zeta(K_4) = 3$ and $\zeta(\Theta_2) = 2$.

We begin by examining a result by Nedela and Škoviera regarding the upper bound of cyclic edge-connectivity in cubic graphs.

Proposition 1 ([Nedela and Škoviera, 1995, Proposition 2])**.** *For every connected cubic graph G it holds that $\zeta(G) \leq g(G)$.*

We can also examine cyclic connectivity in graphs from an alternative perspective by using vertex cuts. A vertex set X of a graph G is called a *cycle-separating* vertex-cut if G can be expressed as a union of two edge-disjoint cyclic subgraphs G_1 and G_2 such that $V(G_1) \cap V(G_2) = X$. We say that a graph is cyclically k-vertex-connected if it contains no cycle-separating vertex-cut with fewer than k vertices. Analogous to cyclic edge-connectivity, the cyclic vertex-connectivity of a graph is defined as the largest integer k for which G is cyclically k-vertex-connected.

While this property might appear to offer a distinct perspective for analyzing cubic graphs, the following theorem demonstrates that, in cubic graphs, cyclic vertex-connectivity and cyclic edge-connectivity are actually equivalent properties.

Theorem 1 ([McCuaig, 1992b])**.** *Let G be a connected cubic graph not isomorphic to $K_{3,3}, K_4$ or Θ_2. Then the following conditions are equivalent:*

(i) G is cyclically k-edge-connected,

(ii) G is cyclically k-vertex-connected,

(iii) Each independent edge-cut of G has size at least k.

Consequently, any theorem concerning cyclic edge-connectivity in cubic graphs automatically yields corresponding results about cyclic vertex-connectivity and vice-versa.

Note the equivalence with the statement about independent edge-cuts. It holds, that in cubic graphs each independent edge-cut is cycle-separating [Nedela and Škoviera, 1995].

Definition 2. *Let G be a graph and let X be a minimum cycle-separating edge-cut in G. Then the components which arise after cutting X in G are called cyclic parts of G. More specifically, if $|X| = k$, then we can refer to them as cyclic k-parts.*

This definition implies that determining whether a multipole M is a cyclic part requires finding a graph G containing a minimum cycle-separating cut X such that M is one of the components of $G - X$. As the following theorem demonstrates, these cyclic parts can serve as building blocks in constructing graphs with specific cyclic connectivity.

Theorem 2 ([Rajník, 2023, Theorem 5.2])**.** *Let M_1 and M_2 be cyclic k-parts such that both M_1 and M_2 are different from the cycle of length k or $k \leq 5$. Let G be a junction of M_1 and M_2. Then G is cyclically k-connected unless the girth of G is smaller than k.*

We mention a lemma used in proving this theorem, since it is useful for our proofs as well.

Lemma 1 ([Rajník, 2023, Lemma 5.1])**.** *Let M be a cyclic s-pole with girth at least k different from a k-cycle for some $s \leq k$. Then $|M| \geq 2k - 4$.*

1.3 Transitive graphs

In proving the results of our work, we have used so-called *transitive graphs*, for which there are some proved theorems and can be helpful with their properties for our results. To properly define them, we need to dive a bit into an algebraic graph theory, and prove what it means for a graph to be transitive. All of these definitions were taken from a book by Godsil and Royle [Godsil and Royle, 2001].

An automorphism on a graph G is an isomorphism from G to itself, in other words a permutation of the vertices of G that maps edges to edges and nonedges to nonedges. Trivial case of an automorphism is an identity permutation. It holds that the set of all automorphisms of G forms a group.

A graph G is called *vertex-transitive* if for any two vertices $x, y \in V(G)$ there is an automorphism of G mapping x to y. Similarly, it is called *edge-transitive* if for any two edges e, f there is an automorphism of G that maps e to f.

An important property of transitive graphs is that their cyclic edge-connectivity coincides with their girth. This result proves particularly useful in our work, specifically in establishing the existence of multipoles with desired properties.

Theorem 3 ([Nedela and Škoviera, 1995, Theorem 17])**.** *Let G be a cubic vertex-transitive or edge-transitive graph of girth g. Then $\zeta(G) = g$.*

For now we shall mention the following theorem about the existence of k-regular vertex-transitive graph with arbitrary girth and k, which we will use to construct cubic vertex-transitive graphs.

Theorem 4 ([Nedela and Škoviera, 2001])**.** *For every pair of integers $k \geq 3$ and $g \geq 3$ there exists a k-regular vertex-transitive graph of girth g.*

Thus there is a cubic vertex-transitive graph of arbitrary girth, implying arbitrarily large cyclic edge-connectivity.

2 Potentially cyclically k-connected multipoles

For the remainder of this work, we consider only cubic graphs and multipoles.

We now establish the necessary conditions for multipoles that can be used to construct graphs with desired cyclic edge-connectivity. Two key restrictions emerge: first, the multipole cannot contain any independent edge-cut yielding a cyclic multipole with a small number of semiedges, as this could imply the existence of a small independent edge-cut in the resulting graph as well, contradicting the desired cyclic edge-connectivity. Second, if the multipole itself is cyclic and not a graph, meaning some partial junction must still be performed to obtain a graph, it cannot have a small number of semiedges. The reason is that the resulting graph would contain this cyclic multipole with small number of semiedges, again contradicting the desired cyclic edge-connectivity.

For this reason we introduce a new property of multipoles, which proves to be fundamental in our subsequent theorems.

Definition 3. *Let M be a multipole. We say that M is potentially cyclically k-connected if it has at least k semiedges when cyclic and not a graph, and there exists no independent edge-cut whose removal yields a cyclic component with less than k semiedges.*

Since a graph can be viewed as a special case of a multipole, we can examine the relationship between their property of being cyclically k-connected and potentially cyclically k-connected. As the following lemma demonstrates, these properties are, in fact, equivalent.

Lemma 2. *A graph G is cyclically k-connected for integer k if and only if it is potentially cyclically k-connected.*

Proof. We prove both implications indirectly. First suppose G is not potentially cyclically k-connected. This means there exists an independent edge-cut yielding a cyclic component with $l < k$ semiedges. Since the edge-cut is independent, it is cycle-separating and of size less than k, meaning G is not cyclically k-connected.

Conversely, suppose G is not cyclically k-connected. This means there exists an independent edge-cut of size $l < k$, separating G into two cyclic l-poles M_1 and M_2, meaning G is not potentially cyclically k-connected. □

The next lemma demonstrates that in a cyclic multipole, the cut separating another cyclic multipole with minimal number of semiedges must be independent.

Lemma 3. *Let M be a cyclic k-pole containing a cyclic multipole with fewer than k semiedges. Let X be such a multipole with minimal number l of semiedges. Then the edge-cut yielding X is independent.*

Proof. Suppose the edge-cut is not independent, meaning there exists a vertex v with two edges e_1, e_2 in the cut. If e_3 is as well in the cut, we remove all three from the cut. Otherwise, modify this edge-cut by removing e_1, e_2 and adding the third edge e_3 incident with v (unless e_3 is dangling, then just remove e_1, e_2).

These modifications ensure the multipole stays cyclic. Since any vertex incident with two or more edges in the cut cannot be part of a cycle after their severing, modifying the cut, resulting either in adding the vertex into X or removing it from X, preserves the cyclic property.

Therefore, this modification either yields a cyclic multipole with fewer than l semiedges, contradicting the minimality of l, or creates an empty cut, implying M itself has fewer than k semiedges, again leading to a contradiction. □

We now prove an equivalence lemma for multipoles with at least one semiedge, where we show that the property of being potentially cyclically k-connected is equivalent to them not containing a cyclic multipole with a small number of semiedges.

Lemma 4. *A multipole M with at least one semiedge is potentially cyclically k-connected if and only if there exists no cyclic multipole in M with less than k semiedges.*

Proof. Suppose, by contradiction, that M is potentially cyclically k-connected and contains a cyclic l-pole X, where $l < k$ and l is minimal. By Lemma 3 this edge-cut is independent, leading to a contradiction.

For the converse implication, suppose that M has no cyclic l-pole for any $l < k$, however it is not potentially cyclically k-connected. This can mean two things:

- M is cyclic and it has less than k semiedges. However this would mean that M contains cyclic multipole with less than k semiedges – itself, leading to a contradiction.
- There is an independent edge-cut in M which yields a cyclic multipole with less than k semiedges, say X. However this would mean that M contains X which is cyclic and has less than k semiedges, leading to a contradiction.

Again, both cases lead to a contradiction, meaning the whole proof is complete. □

This lemma is widely used in our proofs, where we come to contradictions with the fact that a multipole is potentially cyclically k-connected, by coming to a case that it contains a cyclic l-pole for some $l < k$. Given its frequent application, we will use this result implicitly without explicit reference.

3 Cyclic parts

In this section, we explore cyclic parts and present an alternative approach to determining whether a cyclic multipole is a cyclic part, without needing to find an original graph of desired cyclic edge-connectivity from which the multipole could be obtained as a cyclic part.

Let C_k denote the k-pole consisting of the k-cycle where each vertex is additionally incident with one dangling edge.

Lemma 5. *For each integer $k \geq 1$ the k-pole C_k is a cyclic k-part.*

Proof. First, we tackle the small cases of C_1, C_2, C_3 and C_4. It can be verified, that for an arbitrary junction of $C_i * C_i$ it holds that $\zeta(C_i * C_i) = i$, for each $i \in \{1,2,3,4\}$.

Now suppose that $k > 4$. For a given k, we can construct a cubic vertex-transitive graph with girth k according to Theorem 4. Let us denote this graph as G_k. Then $\zeta(G_k) = k$ by Theorem 3. Since the girth of G_k is k, it contains a cycle of length k and thus $G_k = C_k * P$ for some other k-pole P.

Let P' be a modification of P, such that all edges other than links are removed, thus the result is a graph. We prove that $\delta(P') = 2$, meaning P' is cyclic, and this implies that P is cyclic as well, since by adding more edges to a cyclic multipole it remains cyclic.

Suppose $\delta(P') < 2$, this would mean that there is a vertex in P incident with more than one dangling edge. Let us denote two of these dangling edges by e', f' (note that there can be three dangling edges, it is however sufficient to explore two of them). In the process of junction $C_k * P$, separate junctions are performed between the semiedges on e' and f' and some

semiedges in C_k, say s_1 and s_2. Let X be the shortest path between s_1 and s_2 in C_k. We see that $|X| \leq \frac{k}{2}$ since C_k is a k-cycle. Let e, f be the links in G_k resulting from the junction of C_k and P such that e resulted from a junction of the semiedge in e' and s_1, and f from a junction of the semiedge in f' and s_2. Then there is a cycle eXf in G_k of length at most $\frac{k}{2}+2$. The girth of G_k is k thus $k \leq \frac{k}{2}+2$, leading to the fact that $k \leq 4$, which leads to a contradiction.

Thus P contains a cycle, the edge-cut $E(V(C_k), V(P))$ in G_k is cycle-separating and since $|E(V(C_k), V(P))| = k$ (both are k-poles) and $\zeta(G_k) = k$, C_k is a cyclic k-part. □

We now present a lemma that determines the upper bound on the number of vertices in an acyclic multipole. The proof uses an intuition of viewing such multipoles as forests, where instead of the leaf vertices there are semiedges.

Lemma 6. *Let M be an acyclic k-pole for some integer k. Then $|M| \leq k-2$.*

Proof. Consider M as a forest where semiedges are in place of leaf vertices. The total edge count e is thus at most $k+|M|-1$. Counting edges by vertex degrees (where each vertex contributes three edges) and including dangling edges gives us $k+3|M|$. Since this method counts each edge twice, we have:

$$k+3|M| = 2e \leq 2k+2|M|-2.$$

This inequality yields $|M| \leq k-2$. □

The following theorem, one of our main results, establishes necessary conditions for achieving desired cyclic edge-connectivity in graphs formed by a junction of two multipoles. While this theorem is a modification of a theorem proved by the second author [Rajník, 2023] and it follows a similar proof structure, it required several modifications to address additional edge cases arising from our consideration of a broader class of multipoles. In the original proof, cyclic k-parts were used where our version employs cyclic potentially cyclically k-connected k-poles.

Theorem 5. *Let M_1 and M_2 be cyclic potentially cyclically k-connected k-poles. Let both M_1 and M_2 be different from the cycle of length k or $k \leq 5$. Let G be the junction of M_1 and M_2. Then $\zeta(G) = k$ unless the girth of G is smaller than k.*

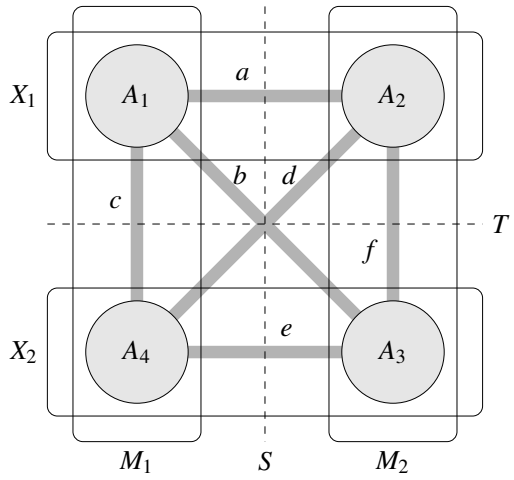


Figure 3: [Rajník, 2023] Intersecting cuts S and T in the graph G

Proof. Let us denote the k-cut obtained after the junction $M_1 * M_2$ by S. Suppose by contradiction that G has girth at least k and contains a cycle-separating edge-cut T of minimal size, such that $|T| = l < k$ and it separates G into two components X_1 and X_2. Note that in this case $\zeta(G) = l$. Let A_1, A_2, A_3, A_4 denote the subgraphs of G induced by $V(X_1) \cap V(M_1)$, $V(X_1) \cap V(M_2)$, $V(X_2) \cap V(M_2)$ and $V(X_2) \cap V(M_1)$ respectively. Let a, b, c, d, e and f denote the number of edges connecting A_1 and A_2, A_1 and A_3, A_1 and A_4, A_2 and A_4, A_3 and A_4, A_2 and A_3 respectively as seen in Figure 3.

Next let $r_i = |\delta(A_i)|$ for each $i \in \{1,2,3,4\}$. We see that each of such r_i is determined by the values of a, b, c, d, e and f, for instance $r_1 = a+b+c$. We prove by contradiction that each of A_1, A_2, A_3 and A_4 is non-empty. Suppose that some A_i for $i \in \{1,2,3,4\}$ is empty. Then M_1 or M_2 would contain the whole cyclic l-pole X_1 or X_2, contradicting the assumption about M_1 and M_2.

From the sizes of S and T we know that

$$a+b+d+e = k,$$
$$l = c+b+d+f < k.$$

We now show that for each $i \in \{1,2,3,4\}$ at least one of the inequalities $r_i \geq k$ or $r_{i+1} \geq k$ is true, taking the indices modulo 4. Suppose to the contrary that there exists such $i \in \{1,2,3,4\}$ for which $r_j \leq k-1$ for both $j \in \{i, i+1\}$. Let us look at the properties of one of such A_j. We know that it contains less than k semiedges, say m. It must be

acyclic, otherwise A_j would be a cyclic multipole with less than k semiedges in M_1 or M_2. Thus we get that $|A_j| \leq r_j - 2 \leq k-3$ by Lemma 6 for both $j \in \{i, i+1\}$. By denoting M as $G[A_i \cup A_{i+1}]$ we have $|M| \leq 2k-6$ (A_i and A_{i+1} are vertex disjoint). Note that M is by its definition one of the multipoles X_1, X_2, M_1, or M_2. This means that M is cyclic and $|M| \geq k$ due to the girth of G which must be at least k. From $k \leq |M| \leq 2k-6$ we have $k \geq 6$ so by the assumption of the theorem M_1 and M_2 are different from k-cycles. Also, both X_1 and X_2 are different from k-cycles since they have less than k semiedges. Therefore M is not a k-cycle and it is a cyclic multipole with at most k semiedges and girth at least k, so by Lemma 1, $|M| \geq 2k-4$, contradicting the fact that $|M| \leq 2k-6$.

Thus for each $i \in \{1,2,3,4\}$ we have $r_i \geq k$ or $r_{i+1} \geq k$, from which it follows that

$$r_1 = a+b+c \geq a+b+d+e = k$$
and
$$r_3 = b+e+f \geq a+b+d+e = k$$

or

$$r_2 = a+d+f \geq a+b+d+e = k$$
and
$$r_4 = c+d+e \geq a+b+d+e = k$$

is true. After summing, the first inequalities imply that $c+f \geq a+2d+e \geq a+e$ and the second imply that $c+f \geq a+2b+e \geq a+e$. In both cases we have obtained $c+f \geq a+e$. However we have

$$l = b+c+d+f < a+b+d+e = k$$

so $c+f < a+e$, leading to a contradiction.

We see that there is no cycle-separating edge-cut in G with less than k edges. Also there is the cycle-separating k-edge-cut S, thus it must be minimal and $\zeta(G) = k$.

If the girth of G would be less than k, then $\zeta(G) < k$ as well, because of Proposition 1. □

Lemma 7. *Let M_1 and M_2 be multipoles with girth at least k. Let d_i be the minimal distance between a pair of distinct semiedges in M_i. Let M be a partial junction $M_1 * M_2$. If $d_1 + d_2 \geq k-2$ then $g(M) \geq k$.*

Proof. Let C be a cycle in M. We prove that its length must be at least k. If C lies entirely within either M_1 or M_2, its length must be at least k since both multipoles have girth at least k.

If C spans both M_1 and M_2, it must contain edges from both multipoles, as well as at least two edges connecting them. Note that these edges between the pair of multipoles are created by the partial junction.

Let $e_1, \ldots, e_j$ denote the edges in M that were created by the partial junction between M_1 and M_2. Then C must contain:

(i) two distinct edges e_{i_1}, e_{i_2} connecting M_1 and M_2,

(ii) a path P in M_1 between a pair of distinct edges connecting M_1 and M_2,

(iii) a path Q in M_2 between a pair of distinct edges connecting M_1 and M_2.

Note that the sets of edges in the three cases are pairwise disjoint. Also, each edge between M_1 and M_2 was a dangling edge in both former multipoles M_1 and M_2. Now by the definition of d_1 and d_2 we obtain:

(i) Path P has length at least d_1,

(ii) Path Q has length at least d_2,

(iii) The edges e_1 and e_2 contribute length 2.

Therefore, the total length of this path is at least $2 + d_1 + d_2 \geq 2 + (k-2) = k$, implying C has length at least k. □

If we could construct, for each k, a cyclic k-pole that has girth at least k and avoids creating short cycles when connected to other cyclic k-poles, we could have a simpler method for determining whether a given cyclic k-pole is a cyclic k-part.

The following lemma establishes the existence through properties of vertex-transitive graphs.

Lemma 8. *For each $k \geq 1$, there exists a cyclic k-pole with the following properties:*

(i) it is potentially cyclically k-connected,

(ii) the distance between any pair of semiedges is at least $k-2$.

Proof. For k equal to 1 and 2 we see that C_k fulfils the requirements, we shall only explore $k \geq 3$.

For a given k, we construct a cubic vertex-transitive graph with girth $2k$ according to Theorem 4. Let us

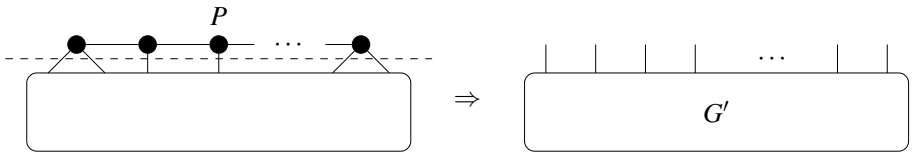


Figure 4: Obtaining the multipole G' by removing P

denote this graph as G. Then $\zeta(G) = 2k$ by Theorem 3. Next, let P be a path of length $k-3$ in G. Since $k \geq 3$ and $|V(G)|$ is evidently at least $2k$ because of its girth, there will always be such path. Sever the edges in the edge-cut $E(V(P), V(G) - V(P))$ and denote the component not containing the path P as G'. This process is depicted in Figure 4.

We prove that the distance between any pair of semiedges in G' is at least $k-2$ by contradiction. Suppose that there are two semiedges s_1 and s_2, such that $d(s_1, s_2) \leq k-3$. Let us denote the shortest path between them as Q. Before severing the edges, these edge ends were formerly incident with vertices v_1 and v_2 in P respectively, not necessarily distinct. Since v_1 and v_2 are on P, it holds that $d(v_1, v_2) \leq k-3$, let us denote the shortest path as P'. Now let e_1 and e_2 be the edges containing the edge ends which, after the severing of the edges, became semiedges s_1 and s_2 respectively. Then $e_1 Q e_2 P'$ is a closed path of length at most $2 + (k-3) + (k-3) = 2k-4$, contradicting the fact that G has girth $2k$.

Now we shall prove that G' is a cyclic k-pole, meaning it contains a cycle and has k semiedges. Let H' be a modification of G', such that all edges other than links are removed, thus the result is a graph. We prove that $\delta(H') = 2$, meaning H' is cyclic, and this implies that G' is cyclic as well, since by adding edges and vertices to a cyclic multipole it remains cyclic.

Suppose there is a vertex v in H' with degree less than two. In G' this vertex was incident with two dangling edges, thus at least two distinct edges $e_1 = vv_1$ and $e_2 = vv_2$ were severed during the creation of G', such that v_1 and v_2 are in P. Since v_1 and v_2 are on a path P of length $k-3$, the distance between them is at most $k-3$. Let us denote the shortest path between them as P'. Then $e_1 P' e_2$ is a cycle of length at most $k-1$ in G, contradicting the fact that the girth of G is at least $2k$.

We prove G' has exactly k semiedges by proving the size of the edge-cut $E(V(P), V(G'))$ has size k. Note that no two non-adjacent vertices on the path P are connected by an edge, as this would create a cycle of length at most $k-2$, contradicting our assumption.

On path of length $k-3$ there are $k-2$ vertices. If $k = 3$, we just cut three edges incident with one vertex (a path of length 0) and the result has three semiedges. If $k > 3$, there are two end vertices of the path and $k-4$ internal. Each internal vertex contributes by one edge to the edge-cut, the end vertices by two. This means that the size of the edge-cut is $2 \cdot 2 + (k-4) = k$, proving that G' will have exactly k semiedges.

Finally, we prove that G' is potentially cyclically k-connected, thus contains no cyclic multipole with fewer than k semiedges. Assume, for contradiction, that it contains a cyclic l-pole M where $l < k$. We see that M is in G as well, thus $G = M * N$ for some other l-pole N. Suppose N is acyclic. By Lemma 6, we know that $|N| \leq l-2$. However N contains all vertices of path P, since no vertex from the path P is in G', thus not in M. This means, that $|N| \geq k$, which yields $k \leq l-2$ contradicting our assumption that $l < k$.

Therefore, N must be cyclic, meaning the edge-cut in G separating M and N is cycle-separating and of size $l < k$. This contradicts $\zeta(G) = 2k$, proving that G' cannot contain any cyclic multipole with fewer than k semiedges. □

Let us denote the cyclic k-poles constructed in this way as W_k.

The following theorem builds upon our previous results concerning cyclic parts. We demonstrate that the problem of determining whether or not a cyclic multipole is a cyclic part does not have to rely on finding an original graph from which the cyclic part could be obtained, but rather only examine the properties of the multipole itself.

Theorem 6. *A cyclic k-pole M is a cyclic k-part if and only if it is potentially cyclically k-connected.*

Proof. If M is a cyclic k-part then $G = M * N$ for some graph G with $\zeta(G) = k$ and some other cyclic k-part N. Suppose M is not potentially cyclically

k-connected, thus contains a cyclic l-pole X for $l < k$. However, then $G = X * N'$, N' contains N thus is cyclic as well and the edge-cut induced by the junction is cycle-separating of size at most l, contradicting the cyclic edge-connectivity of G.

For the converse implication, we can assume that M is different from a k-cycle, since each k-cycle C_k is a cyclic part as proven in Lemma 5. Let W_k be a cyclic k-pole satisfying Lemma 8 and let G be a junction $M * W_k$.

Since M is potentially cyclically k-connected, its girth must be at least k. Same holds for W_k. Also the minimal distance between a pair of semiedges in W_k is $k-2$, thus by Lemma 7 it holds that $g(G) \geq k$.

For $k \geq 4$, the multipole W_k cannot be a k-cycle. If it were, it would contain a pair of semiedges with distance 1 between them, contradicting the requirement that the distance between any pair of semiedges must be at least $k-2$.

Thus we see that G is a cyclic cubic graph with girth at least k, resulting from the junction $M * W_k$. Since both M and W_k are potentially cyclically k-connected, both are different from a cycle of length k or $k < 4$ and their junction G has girth at least k, we can apply Theorem 5 and conclude that $\zeta(G) = k$. Because of this fact, we have proved that M is in fact a cyclic k-part. □

4 Junctions of multiple multipoles

In this section we explore junctions of possibly more than two multipoles, and what properties of the multipoles must hold for the result to have desired cyclic connectivity.

As our work frequently involves discussing smallest independent edge-cuts in multipoles, we introduce the following notation.

Definition 4. *For a multipole M, let $i(M)$ denote the size of its smallest independent edge-cut, or ∞ if M contains no such cut.*

Now we prove a helpful lemma, establishing the size of the smallest independent edge-cut of a partial junction of two multipoles.

Lemma 9. *Let M_1 and M_2 be multipoles and let M be the result of a partial junction $M_1 * M_2$ of size j. Then $i(M) \geq \min\{i(M_1), i(M_2), j\}$.*

Proof. Suppose that $\min\{i(M_1), i(M_2), j\} > 0$, otherwise it would evidently be true, since each edge-cut has size at least 0.

Now suppose that the minimal independent edge-cut in M has size m_X and it holds that $m_X < \min\{i(M_1), i(M_2), j\}$.

Since $m_X < j$, severing only the edges created by the partial junction cannot disconnect the graph, as it would not cut all such edges (because $m_X < j$) and both M_1 and M_2 are connected (since $\min\{i(M_1), i(M_2), j\} > 0$). Therefore, the cut needs to contain some edges from M_1 or M_2, suppose M_1. However, since these edges would be an independent edge-cut in M_1, it would mean that $m_X \geq i(M_1)$, leading to a contradiction. □

We now present a theorem which establishes the conditions under which a partial junction of two potentially cyclically k-connected multipoles remains potentially cyclically k-connected.

Theorem 7. *Let M_1 and M_2 be potentially cyclically k-connected multipoles. Let M be a result of a partial junction $M_1 * M_2$ of size j. Let us denote by s_i the number of remaining semiedges after the partial junction in M_i, meaning $s_i = |S(M_i)| - j$. If all of the following conditions hold:*

(i) $i(M_1) + i(M_2) \geq k$,

(ii) $s_1 + s_2 \geq k$,

(iii) $i(M_1) + s_2 \geq k$ *and* $s_1 + i(M_2) \geq k$,

then M is potentially cyclically k-connected and $i(M) \geq \min\{i(M_1), i(M_2), j\}$.

Proof. Let us denote the j-cut obtained after the partial junction junction $M_1 * M_2$ by S. Suppose by contradiction that M contains a cyclic l-pole X_1 such that $l < k$ and l is the smallest possible. Let T be the minimal edge-cut in M yielding X_1 and denote the second component by X_2. Let A_1, A_2, A_3, A_4 denote the subgraphs of G induced by $V(X_1) \cap V(M_1), V(X_1) \cap V(M_2), V(X_2) \cap V(M_2)$ and $V(X_2) \cap V(M_1)$ respectively. Let a, b, c, d, e and f denote the number of edges connecting A_1 and A_2, A_1 and A_3, A_1 and A_4, A_2 and A_4, A_3 and A_4, A_2 and A_3 respectively. Let x_i be the number of dangling edges from A_i as seen in Figure 5. We see that $b + c + d + f + x_1 + x_2 = l < k$.

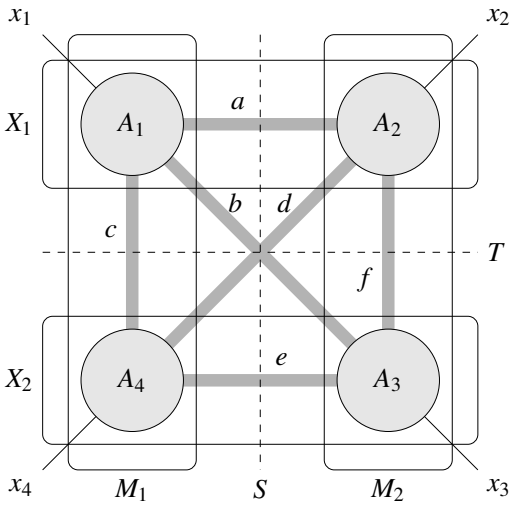


Figure 5: Intersecting cuts S and T in the multipole M

We first prove that A_1 and A_2 are non-empty. Suppose that one is empty, say A_1. Then M_2 would contain the whole cyclic l-pole X_1, contradicting the assumption about M_2.

Next, we prove that A_3 and A_4 cannot be empty at the same time, meaning X_2 cannot be empty. Suppose that both were empty, meaning $X_1 = M$. This would mean that $|S(M)| = |S(X_1)| = l < k$, contradicting the fact that $s_1 + s_2 \geq k$.

The cut T separating X_1 from X_2 is independent by Lemma 3. Now we shall explore A_3 and A_4. If both are non-empty, c and f represent independent edge-cuts in M_1 and M_2 respectively, meaning $c \geq i(M_1)$ and $f \geq i(M_2)$. However $i(M_1) + i(M_2) \geq k$, thus $c + f \geq k$, contradicting the assumption that $b + c + d + f + x_1 + x_2 < k$.

Now suppose one of A_3 and A_4 is empty, say A_3. In this case c represents an independent edge-cut in M_1, thus $c \geq i(M_1)$. Also, we see that in this case $x_3 = 0$ and thus $x_2 = s_2$. Since $i(M_1) + s_2 \geq k$, it holds that $c + x_2 \geq k$, contradicting the assumption that $b + c + d + f + x_1 + x_2 < k$.

As all possible cases lead to contradictions, we conclude that M is potentially cyclically k-connected.

The fact that $i(M) \geq \min\{i(M_1), i(M_2), j\}$ follows from Lemma 9. □

The size of a smallest independent edge-cut in a multipole proves to be an important property for establishing that the result is potentially cyclically k-connected. As we demonstrate in the following theorem, this property remains significant when considering junctions, thus resulting in graphs.

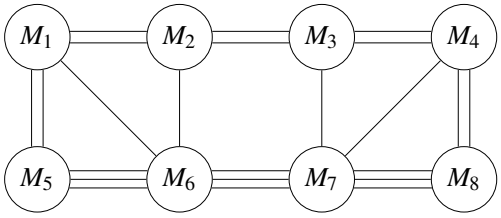


Figure 6: Cyclically 5-connected graph constructed from 8 multipoles

Theorem 8. *Let M_1 and M_2 be potentially cyclically k-connected multipoles. Let G be a junction $M_1 * M_2$. If $i(M_1) + i(M_2) \geq k$ then G is cyclically k-connected.*

Proof. Suppose by contradiction that G contains an independent cycle-separating edge-cut T of minimal size, such that $|T| = l < k$ and it separates G into two cyclic l-poles X_1 and X_2. We maintain the notation used in the previous theorem, an illustration is depicted in Figure 3.

We first prove that all $A_1, \ldots, A_4$ are non-empty. Suppose that one is empty, say A_1. Then M_2 would contain the whole cyclic l-pole X_1, contradicting the assumption about M_2.

Since T is independent and all $A_1, \ldots, A_4$ are non-empty c and f represent independent edge-cuts in M_1 and M_2 respectively. This means that $c \geq i(M_1)$ and $f \geq i(M_2)$. However, from the assumption of the theorem it holds that $i(M_1) + i(M_2) \geq k$, thus $c + f \geq k$, contradicting the assumption that $b + c + d + f < k$. □

5 Examples

In this section we illustrate the practical application of our theorems, showing how they can be used to verify the cyclic edge-connectivity of graphs built from multipoles satisfying certain conditions.

Example 1. Let $M_1, \ldots, M_8$ be potentially cyclically 5-connected multipoles, such that:

- M_6 and M_7 are 8-poles, and other are 5-poles,
- Let either $i(M_1)$ or $i(M_2)$ be at least 2, and other at least 3.

Let G be the graph shown in Figure 6, resulting from a sequence of partial junctions between $M_1, \ldots, M_8$.

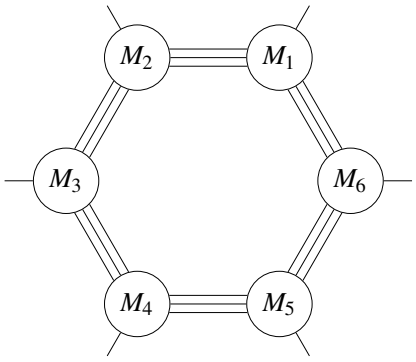


Figure 7: Potentially cyclically 6-connected multipole constructed from six 7-poles

By utilizing the theorems proved in our work, we prove that the result is cyclically 5-connected.

First, take the partial junction $M_1 * M_2$ of size two. By Theorem 7 the result is potentially cyclically 5-connected and $i(M_1 * M_2) \geq 2$. Similarly we perform two more partial junctions of size two, first with M_3, and then with M_4 such that we will obtain an 8-pole $N_1 = ((M_1 * M_2) * M_3) * M_4$. It holds that N_1 is potentially cyclically 5-connected and $i(N_1) \geq 2$.

Now take the partial junction $M_5 * M_6$ of size three. By Theorem 7 the result is potentially cyclically 5-connected and $i(M_5 * M_6) \geq 3$. Again, we perform two more partial junctions of size three, first with M_7, and then with M_8 such that we will obtain an 8-pole $N_2 = ((M_5 * M_6) * M_7) * M_8$. It holds that N_2 is potentially cyclically 5-connected and $i(N_2) \geq 3$.

Finally, we perform a junction $N_1 * N_2$ such that the resulting graph G will be as shown in Figure 6. By Theorem 8 it holds that G is cyclically 5-connected.

Note that the graph illustrated in Figure 6 represents just one possible outcome of the described sequence of partial junctions. Our theorems do not specify on which semiedges the partial junction should be performed, thus the showcased result represents only one of the possible outcomes.

Example 2. Let $M_1, \ldots, M_6$ be potentially cyclically 6-connected 7-poles. Let $i(M_j) \geq 3$ for each $j \in \{1, \ldots, 6\}$. We prove that the multipole M shown in Figure 7 resulting from a sequence of partial junctions between $M_1, \ldots, M_6$ is potentially cyclically 6-connected.

First take the partial junction $M_1 * M_2$ of size three. By Theorem 7 the result is potentially cyclically 6-connected and $i(M_1 * M_2) \geq 3$. Similarly we perform a partial junction of the result and M_3, obtaining a potentially cyclically 6-connected 9-pole $N_1 = (M_1 * M_2) * M_3$, such that $i(N_1) \geq 3$.

We perform the same operations on M_4, M_5 and M_6, obtaining $N_2 = (M_4 * M_5) * M_6$ with the same properties. We then perform a partial junction $N_1 * N_2$ of size 6, resulting in a 6-pole N. By Theorem 7 it holds that N is potentially cyclically 6-connected.

Again, note that the multipole illustrated in Figure 7 represents just one possible outcome of the described sequence of partial junctions.

Conclusion

We have shown that two key properties of multipoles correspond to their suitability for constructing cubic graphs with specific cyclic edge-connectivity: the sizes of their minimal independent edge-cuts and no cyclic multipoles with a small number of semiedges contained in them. We have proven several theorems demonstrating that when building blocks satisfy certain conditions, their junction either serves as a larger building block for further construction or directly yields a graph with the desired cyclic edge-connectivity. These theoretical results have been illustrated through specific examples.

Furthermore, we have presented an alternative approach to determining whether a multipole is a cyclic part: instead of finding an original graph from which the multipole might have been obtained as a cyclic part, it suffices to verify that it contains no cyclic multipole with a small number of semiedges.

Acknowledgments

I am deeply grateful to my supervisor, Jozef Rajník, whose guidance has been essential to this work. His insightful comments, direction toward meaningful results, and careful proofreading have been instrumental in completing this research.

I would also like to thank the Faculty of Mathematics, Physics and Informatics for their support of this research.

References

[Andersen et al., 1988] Andersen, L. D., Fleischner, H., and Jackson, B. (1988). Removable edges in cyclically 4-edge-connected cubic graphs. *Graphs and Combinatorics*, 4.

[Diestel, 2017] Diestel, R. (2017). *Graph Theory (5th Edition)*. Springer.

[Došlić, 2003] Došlić, T. (2003). Cyclical edge-connectivity of fullerene graphs and (k, 6)-cages. *Journal of Mathematical Chemistry*, 33.

[Fiol, 1991] Fiol, M. A. (1991). A boolean algebra approach to the construction of snarks. *Graph theory, combinatorics, and applications, Vol. 1 (Kalamazoo, MI, 1988)*.

[Godsil and Royle, 2001] Godsil, C. and Royle, G. F. (2001). *Algebraic Graph Theory*. Number Book 207 in Graduate Texts in Mathematics. Springer.

[Kochol, 2004] Kochol, M. (2004). Reduction of the 5-flow conjecture to cyclically 6-edge-connected snarks. *Journal of Combinatorial Theory. Series B*, 90.

[McCuaig, 1992a] McCuaig, W. (1992a). Cycles through edges in cyclically k-connected cubic graphs. *Discrete Mathematics*, 103.

[McCuaig, 1992b] McCuaig, W. (1992b). Edge reductions in cyclically k-connected cubic graphs. *Journal of Combinatorial Theory, Series B*, 56(1):16–44.

[Máčajová and Mazzuoccolo, 2020] Máčajová, E. and Mazzuoccolo, G. (2020). Reduction of the berge-fulkerson conjecture to cyclically 5-edge-connected snarks. *Proceedings of the American Mathematical Society*, 148.

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

[Nedela and Škoviera, 2001] Nedela, R. and Škoviera, M. (2001). Regular maps on surfaces with large planar width. *European Journal of Combinatorics*, 22.

[Rajník, 2023] Rajník, J. (2023). *Cyclic connectivity and flows on graphs*. PhD thesis, Comenius University in Bratislava.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 270–278
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Lukáš Gáborik

Flow triangulations of cubic graphs

Lukáš Gáborik*

Supervisor: Jozef Rajník†

Department of Computer Science, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstract: Alongside research on two-dimensional flows, Mattiolo et al. introduced a representation of a two-dimensional nowhere-zero flow on a cubic graph by a collection of triangles, the so-called flow triangulation. In this paper, we examine this concept further, noticing that sometimes the flow triangulation may induce a tessellation of the plane. Such triangulations contain more geometric context of the flow, which is promising in calculating upper bounds on the flow number exactly. Moreover, we show that their existence depends on whether the graph is toroidal. We also develop an algorithm for finding a flow triangulation without overlays.

Keywords: graph theory, nowhere-zero flow, triangulation, tessellation, toroidal graph, Jain S^2-flow conjecture

Introduction

A *flow* on a graph is an assignment of flow values to the darts of the graph. There are two conditions concerning the flow values. Firstly, they are being chosen from an abelian group. Moreover, for any vertex, values assigned to darts pointing to that vertex sum up to the same sum as values assigned to outcoming edges. It can be intuitively viewed as a current in an electrical circuit, where the inflow to a junction is equal to the outflow from that junction. If the flow value of some edge is zero, then the given flow is de facto a flow on the graph after deleting that edge. Hence, we require the flow to be *nowhere-zero*. Moreover, we can restrict the range of flow values permitted. A *nowhere-zero k-flow* can use only integral values between 1 and $k-1$ and their additive inverses.

Research on integral nowhere-zero flows started in the early 1950s by Tutte [Smith and Tutte, 1950]. In less than five years, Tutte came up with many interesting results [Tutte, 1954] – i. e. described the relationship between the nowhere-zero flows and vertex colourings of graphs and conjectured that each bridgeless graph has a nowhere-zero 5-flow.

There were many attempts to settle this problem. Jaeger [Jaeger, 1979] proved that every bridgeless graph has a nowhere-zero 8-flow. Two years later, Seymour [Seymour, 1981] improved the general result showing that each bridgeless graph allows a nowhere-zero 6-flow. This is the best known general result up to now. Note that the gap between the known and conjectured results was narrowed to only two possibilities – either there exists a nowhere-zero 5-flow on any bridgeless graph, or there is a counterexample that necessarily requires a flow value 5 or -5.

As for many problems in graph theory, the problem of the general existence of a nowhere-zero 5-flow can be reduced to 3-regular (cubic) graphs. In other words, proving Tutte's 5-flow conjecture for cubic graphs would guarantee its validity in general.

Over time, many generalisations of the problem have arisen. One worth mentioning is the idea of fractional flows introduced by Goddyn et al. [Goddyn et al., 1998], which has evolved into *circular flows* allowing real flow values. Steffen [Steffen, 2001] showed that irrational flow values are unnecessary, since each flow can be modified such that it uses only rational values, and the maximal value is not being increased.

Another interesting and useful generalisation considers multidimensional real vectors as flow values. Then in multidimensional nowhere-zero r-flow, we are restricted to use only vectors with $1 \leq \|v\|_2 \leq r-1$. Jain [Jain, 2007] conjectured that in three or more dimensions, unit vectors are sufficient to construct a flow (and so each graph has a 3D nowhere-zero 2-flow), and then, Thomassen [Thomassen, 2014] proved analogous result in seven dimensions. Therefore, only the two-dimensional case had been left with no conjecture on some possible upper bound.

Recently, Mattiolo et al. [Mattiolo et al., 2023] have researched two-dimensional flows. In two dimensions, there is no guarantee of a flow using only rational flow values (as it is in the one-dimensional case). It follows that explicit representation of flow values may be complicated. Therefore, they introduced a method to represent a flow on a cubic graph

*gaborik5@uniba.sk
†jozef.rajnik@fmph.uniba.sk

by a collection of triangles – a *flow triangulation*. The main idea is, that due to the flow conservation constraint, the flow vectors pointing into a specific vertex sum up to zero, and hence form a triangle. However, in the original definition, triangles of the flow triangulation were considered as geometrically unrelated. This paper aims to define constraints for a flow triangulation, such that the triangles in the visual representation of the triangulation are more geometrically related – more precisely, we are attaching triangles corresponding to adjacent vertices as far as it is possible.

This idea leads to a class of flow triangulations, in which we are able to attach triangles independently of the order and position. Then this triangulation induces a tessellation of the plane. Moreover, for some flows found numerically by a computer, we were able to derive explicit values of flow vectors due to the existence of a tessellable triangulation. However, this method is not applicable to all graphs, since as we prove, the only graphs with a tessellable triangulation are the toroidal ones.

1 Nowhere-zero flows

In this paper, we consider only unoriented simple connected graphs $\Gamma = (V,E)$ without weights assigned to the vertices or to the edges. Then we can replace each unoriented edge uv with two oriented edges $\vec{uv}$, $\vec{vu}$, called *darts*. By the *dart-set* $D(S)$ of $S \subseteq V$ we mean the set of all darts with an initial vertex in the set S.

Definition 1. *Let $\Gamma = (V,E)$ be a bridgeless graph, d be a positive integer and $r \geq 2$ be a real constant. A* d-dimensional Euclidean circular nowhere-zero r-flow *(or dD NZ r-flow) is an assignment $\varphi\colon D(V) \to \mathbb{R}^d$ of real numbers to the darts satisfying $\varphi(\vec{uv}) = -\varphi(\vec{vu})$ and $1 \leq \|\varphi(\vec{uv})\|_2 \leq r-1$ for any dart $\vec{uv} \in D(V)$, and*

$$\sum_{\vec{d} \in D(\{v\})} \varphi\left(\vec{d}\right) = 0 \tag{1}$$

for each vertex v of Γ. The equality (1) *is often referred to as the flow conservation constraint.*

In the above definition, we explicitly stated that the flows are Euclidean, because we are measuring length with the Euclidean norm. In general, there are interesting results also with the Chebyshev $\|\cdot\|_\infty$ one [Gáborik, 2024]. However, almost all ideas presented in this paper are similarly applicable considering other norms, and the Euclidean norm is the most intuitive in the sense of comparing lengths, so we derive all results considering the Euclidean norm.

We also establish the notation $\varphi(e)$ for $e = uv \in E$, where $\varphi(e)$ is the maximum of $\varphi(\vec{uv}), \varphi(\vec{vu})$ in the lexical ordering.

The flow conservation constraint (1) is generalisable to any subset of vertices. Hence, having a graph Γ with a bridge e, the interpretation of the flow conservation constraint for one of the components of $\Gamma - e$ results in the following observation.

Proposition 1. *If $e \in E$ is a bridge in Γ, then $\varphi(e) = 0$. Moreover, Γ allows a dD NZ r-flow for no real r.*

Therefore, nowhere-zero flows are examined only on bridgeless graphs.

As for many problems in graph theory, it is sufficient to explore the problem on 3-regular (or cubic) graphs due to a folklore reduction.

Proposition 2. *There exists a dD NZ r-flow on any bridgeless graph if and only if there exists a dD NZ r-flow on any cubic bridgeless graph.*

It is not hard to see that a graph with a dD NZ r-flow also admits a dD NZ R-flow for any $R > r$. Hence it makes sense to seek for the smallest r such that a graph admits a dD NZ r-flow.

Definition 2. *Let Γ be a bridgeless graph. A* d-dimensional Euclidean circular flow number of Γ *is*

$$\Phi^2_d(\Gamma) := \inf\{r \mid \exists dD\ NZ\ r\text{-}flow\ on\ \Gamma\},$$

where the superscript 2 *indicates we are considering Euclidean flows.*

The d-dimensional Euclidean circular flow number has some interesting properties, so let us mention them. First, the flow number is always attained, i.e. the infimum in the definition can be replaced by a minimum [Mattiolo et al., 2023, p. 2]. Next, the one-dimensional flow number is always rational [Goddyn et al., 1998] and in more dimensions, the flow number must be an algebraic number [Rieg, 2025].

Since the flow number is a minimum, we would like to have upper bounds on it. In the one-dimensional case, flow number is at most 6 [Seymour, 1981, p. 133] and there is no known graph

with $\Phi_1^2(\Gamma) = 6$, so the conjectured bound is $\Phi_1^2 \leq 5$ [Tutte, 1954, p. 83].

Moving to the two-dimensional case, the proved upper bound is $\Phi_2^2(\Gamma) \leq 1 + \sqrt{5} \approx 3.24$ [Mattiolo et al., 2023, p. 4]. There is also a conjectured one $\Phi_2^2(\Gamma) \leq 1 + \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 2.62$, but there is no example of tightness for any of the two mentioned bounds [Mattiolo et al., 2023, p. 4].

In more dimensions, Jain conjectured, we can construct a flow using only unit vectors, and so the flow number is equal to 2.

Conjecture 1 (S^2-flow conjecture)**.** [Jain, 2007] *For any bridgeless graph,* $\Phi_3^2(\Gamma) = 2$.

Then Thomassen proved this result in the seven-dimensional case [Thomassen, 2014, p. 89] and therefore, it remains unsettled in dimensions $3, 4, 5$ and 6.

2 Toroidal graphs

The main theorem of this paper concerns graphs that are embeddable in a solid named a torus. Hence, we need some definitions.

Definition 3. *A* torus *is a solid of revolution generated by rotating a circle around a non-intersecting line in the same plane.*

Now, similarly to plane graphs and their faces, and planar graphs, we define a drawing of a graph in the torus and a graph, that can be drawn in the torus.

Definition 4. *Consider a graph* $\Gamma = (V, E)$.

(i) A toroidal embedding of Γ *is a set of points in torus representing vertices of* Γ *and a set of curves in torus representing edges of* Γ *such that the curve corresponding to an edge uv starts in the point corresponding to u, ends in a point corresponding to v and any intersection of two curves must be an endpoint of both those curves.*

(ii) A face *of a toroidal embedding is a connected region of the torus bounded by the curves corresponding to edges. We denote the set of all faces by* $F(\Gamma)$.

(iii) A graph Γ *is* toroidal *if it has a toroidal embedding.*

There is also an equivalent view of the torus. By taking a vertical cut of the torus, we get a cylinder. Then, by taking a horizontal cut, we get a rectangle. Hence, a drawing on the torus is the same as a drawing on the rectangle with some constraints on periodicity.

Definition 5. *A* rectangle with periodic boundary conditions (PBC) *is a rectangle, where the top and the bottom sides and also the left and the right sides are identified.*

Proposition 3. *A graph has a toroidal embedding if and only if it has an embedding in the rectangle with PBC.*

Moreover, we can simplify the embeddings in the rectangle with PBC by having all curves corresponding to the edges straight.

Theorem 1. [Kocay et al., 2001, p. 16] *Each 2-vertex-connected toroidal graph has a straight line embedding in the torus.*

One other important structure concerning graphs embeddable in surfaces is a graph, in which we switch the role of vertices and faces.

Definition 6. *A* dual graph Γ^* *of a toroidal embedding* Γ *is a graph, where* $V(\Gamma^*) = F(\Gamma)$ *and the vertices in* Γ^* *are adjacent if and only if the corresponding faces in* Γ *are adjacent.*

A nice property of the operation of taking the dual graph is, that it preserves embeddability in surfaces.

Proposition 4. *The dual graph of any toroidal embedding is again toroidal.*

3 Flow triangulations

Assume a two-dimensional nowhere-zero flow on an arbitrary bridgeless cubic graph. Considering the Euclidean norm, we have only a guarantee of the flow values being algebraic. There are many irrational values with an ugly explicit form, and so the constructions of some flows might be intricate. Thus, we would like to visualise a flow such that we avoid complicated expressions.

Now we present a flow representation introduced by Mattiolo et al. [Mattiolo et al., 2023]. Since flow values are two-dimensional vectors, we can represent them by vectors in the Gaussian plane. Now,

it remains to understand a relationship between flow vectors surrounding a specific vertex v. Since we assume a cubic graph, v has exactly three neighbours v_1, v_2, v_3. Denote the flow values incoming to v from v_i as $\overrightarrow{\varphi_i} := \varphi(\overrightarrow{v_i v})$ for $i = 1,2,3$. From the flow conservation constraint (1) we know that $\overrightarrow{\varphi_1} + \overrightarrow{\varphi_2} + \overrightarrow{\varphi_3} = 0$ and therefore, by chaining flow vectors $\overrightarrow{\varphi_1}, \overrightarrow{\varphi_2}, \overrightarrow{\varphi_3}$ in the way that beginning of $\overrightarrow{\varphi_{i+1}}$ lies in the end of $\overrightarrow{\varphi_i}$, we return to the beggining. Hence the three vectors form a (possibly degenerate) triangle. This idea results in representing the two-dimensional flow by a *flow triangulation*, where each vertex of the graph with corresponding flow values is represented by a triangle consisting of vectors $\overrightarrow{\varphi_1}, \overrightarrow{\varphi_2}, \overrightarrow{\varphi_3}$. There are two possible orientations of the triangle, so we choose the one with an anti-clockwise ordering of vectors $\overrightarrow{\varphi_1}, \overrightarrow{\varphi_2}, \overrightarrow{\varphi_3}$. Note that we consider a triangle as the set of its internal and side points.

Definition 7. [Mattiolo et al., 2023, p. 6] *Let s_1, s_2 be sides of triangles $T_1, T_2 \subseteq \mathbb{R}^2$, respectively. We say that s_1 and s_2 are attachable if we can translate T_1 to T_1' in such a way that the image of s_1 coincides with s_2 (so $|s_1| = |s_2|$ and $\angle(s_1, s_2) = 0$) and T_1' and T_2 have no common internal points.*

Then a 2D r-flow triangulation of a bridgeless cubic graph Γ is a collection $\mathscr{T}$ of triangles $\{T_v \subseteq \mathbb{R}^2 \mid v \in V(\Gamma)\}$ corresponding to graph vertices such that

(i) for each vertex v of Γ, each dart pointing to v corresponds to a unique side of T_v,

(ii) lengths of sides of all triangles from $\mathscr{T}$ are from the interval $[1, r-1]$ and

(iii) for each edge uv of Γ, the sides of the triangles T_u and T_v corresponding to uv are attachable.

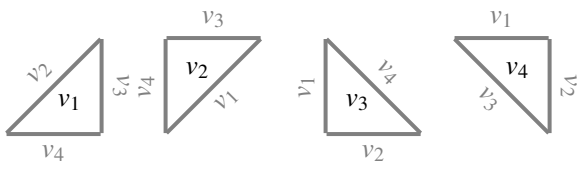


Figure 1: $\left(1+\sqrt{2}\right)$-flow triangulation of K_4

First note that there is no condition on relative positions of triangles, so we can consider them each separately. Next, this definition is standalone and does not require an underlying flow, from which the idea arose. Hence it serves as an alternative representation of the nowhere-zero flow, supported by the following equivalence.

Proposition 5. [Mattiolo et al., 2023, p. 6] *A bridgeless cubic graph has a 2D NZ r-flow if and only if it has a 2D r-flow triangulation.*

Remark. It might be interesting to define flow triangulations also for more (especially three) dimensions. Then, the Conjecture 1 could be proved by justifying the existence of a triangulation with equilateral triangles for any bridgeless graph. However, one needs to extend the definition of the *attachability*, since in three dimensions it is important whether we look at the "front" or the "back" side of the triangle.

As we already mentioned, the triangles are not relatively positioned. However, since the sides of triangles corresponding to adjacent vertices are attachable, we can try attaching triangles to get a connected figure. To formalise it, we need to check, that every pair of triangles is connected by a path on triangles, and therefore we need a triangulation of the path defined below.

Definition 8. *Let $\mathscr{T}$ be a 2D r-flow triangulation of a bridgeless cubic graph Γ and $W = v_0 v_1 v_2 \dots v_k$ be a walk in Γ. Then a $\mathscr{T}$-*triangulation of the walk W *is a collection $\mathscr{T}^W$ of triangles $T_0^W, \dots, T_k^W$ such that*

(i) for each $0 \le i \le k$, the triangle T_i^W is a translation of T_{v_i} and

(ii) for each $0 \le i < k$, the intersection of T_i^W, T_{i+1}^W is exactly the side corresponding to the edge $v_i v_{i+1}$.

Moreover, if each translation in the condition (i) is the identity (meaning that $T_i^W \equiv T_{v_i}$), we call the $\mathscr{T}$-triangulation of the walk W fixed.

Defining the connected flow triangulation, we would naturally require, that each two triangles have a fixed flow triangulation of a walk between them. Except that, we also want to avoid the figure being misleading. The triangulation may be misleading, when two triangles have a common overlay. Another possible problem is a "degenerate" triangle, i.e. vertex surrounded by three linearly dependent flow vectors. However, this problem is due to the triangle inequality relevant only when $r \ge 3$. Now we are ready to define connected triangulations.

Definition 9. *We say that the 2D r-flow triangulation $\mathscr{T}$ of Γ is connected, if and only if*

(i) there is no degenerate triangle in $\mathscr{T}$,

(ii) for any two distinct vertices u, v of Γ, there exists a uv-path P having a fixed $\mathscr{T}$-triangulation,

(iii) interiors of triangles from $\mathscr{T}$ are pairwise disjoint and

(iv) whenever the intersection of T_u and T_v for some vertices u, v of Γ consists of more than one point, there is an edge uv in Γ and the mentioned intersection is exactly the side corresponding to that edge.

Note that a visual representation of the flow by a connected flow triangulation has two advantages. Firstly, it covers much less space and hence, the resolution of the figure may be better. Second, the triangles corresponding to adjacent vertices have also very natural geometric relation in the triangulation, so it is more self-explanatory for the reader. On the other hand, we do not know whether it is always possible. Although we have found connected flow triangulations for all flows generated for cubic graphs with at most 14 vertices, we observe no indication that it should hold in general, which prompts us to propose the following problem.

Problem 1. *Determine whether there exists a connected 2D r-flow triangulation for any 2D NZ r-flow with $r < 3$.*

4 Tessellations

As we observed before, by attaching triangles to the triangulation, one can often find a conflict of overlaying triangles. However, we found also some special triangulations, where getting a conflict is not possible. Note that each sequence of attached triangles simulates a walk in the graph, and thus any pair of overlaying triangles corresponds to a conflicting triangulation of that walk.

Definition 10. *We say that the 2D r-flow triangulation $\mathscr{T}$ of a bridgeless cubic graph* Γ admits a tessellation*, if*

(i) for any walk $W = v_0 v_1 \dots v_k$ with distinct v_0, v_k and for any $\mathscr{T}$-triangulation of W, interiors of T_0^W and T_k^W are disjoint and

(ii) for any closed walk $W = v_0 v_1 \dots v_{k-1} v_k$ with $v_k = v_0$ and for any $\mathscr{T}$-triangulation of W, either interiors of T_0^W and T_k^W are disjoint or $T_0^W = T_k^W$.

Although admitting a is tessellation formally a property of the flow triangulation with exactly one triangle per vertex, tessellable flow triangulation can be also viewed as an infinite set of triangles periodically tessellating the plane, as shown in Figure 2. Note that triangles in such triangulation cannot overlay, since otherwise we would have a walk in Γ violating the condition (i) in the previous definition.

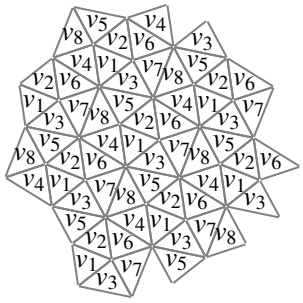


Figure 2: Example of a tessellation of the flow triangulation

Now we formalise the periodicity of a tessellation.

Definition 11. *Consider a flow triangulation $\mathscr{T}$ of Γ admitting a tessellation and a closed walk $W = v_0 v_1 \dots v_{k-1} v_k$ with $v_k = v_0$ and some of its $\mathscr{T}$-triangulation. Let M_0, M_k be the centroids of T_0^W, T_k^W, respectively. Assume that $T_0^W \not\equiv T_k^W$. Then the vector $\mathbf{x} = M_k - M_0$ is a* period *of $\mathscr{T}$.*

We would expect a stronger condition from periodicity, i.e. for any triangle, there is a triangle corresponding to the same vertex translated by the period. However, this is a straightforward corollary of the definition.

Lemma 1. *Consider a flow triangulation $\mathscr{T}$ of Γ admitting a tessellation and its period $\mathbf{x}$. Then for each vertex $v \in \Gamma$, there exists a closed vv-walk $W = v_0 v_1 \dots v_k$, such that the centroids M_0, M_k of respective triangles T_0^W, T_k^W satisfy $T_k^W = T_0^W + \mathbf{x}$.*

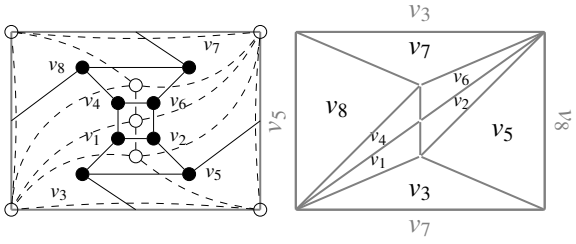
Proof. From the definition of the period, there is a closed uu-walk W_1 such that the initial and the terminal triangles in its $\mathscr{T}$-triangulation have centroids translated by $\mathbf{x}$. If $v = u$, we are done. Otherwise, since Γ is connected, we have a vu-walk W_2 in Γ. Let

W_2' be a uv-walk, that goes through the vertices of W_2 in the reverse order. We claim that $W = W_2W_1W_2'$ has a $\mathscr{T}$-triangulation satisfying the condition from the statement. Take a $\mathscr{T}$-triangulation of W_2 and by $\mathbf{y}$ denote the difference of the initial and the terminal centroids. Note that rearranging triangles from that triangulation in the reverse order forms a $\mathscr{T}$-triangulation of W_2' with the centroid difference equal to $-\mathbf{y}$. Hence, the $\mathscr{T}$-triangulation of W has the centroid difference equal to $\mathbf{y}+\mathbf{x}-\mathbf{y}=\mathbf{x}$ as desired. □

Tessellable triangulations are more constrained than connected triangulations, and we were also not able to prove the general existence of the connected ones. Hence there is an expectation, tessellable flow triangulations do not exist in general. This is shown to be true by the following theorem.

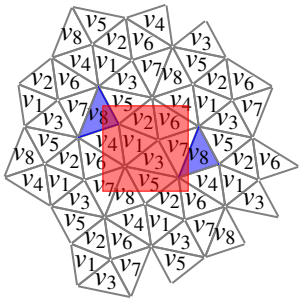
Theorem 2. *A connected bridgeless cubic graph* Γ *has a flow triangulation admitting a tessellation if and only if* Γ *is toroidal.*

Proof. Let us begin with the "⇐" implication. Consider Γ as a specific toroidal embedding of the graph. Then, its dual Γ^* is toroidal, too. Note that due to Theorem 1, there exists a straight line embedding of Γ^* in the rectangle with PBC. In a dual graph, faces $f_u, f_v \in F(\Gamma^*)$ corresponding to adjacent vertices $u, v \in V(\Gamma)$ are adjacent, too. Moreover, since the degree of any vertex in Γ is 3, each face of Γ^* has length 3 and can be viewed as a triangle in the flow triangulation $\mathscr{T}$ of Γ. Now, we consider a tessellation of the plane by PBC rectangles. We are able to track any walk in this tessellation due to adjacency condition, and hence we have a $\mathscr{T}$-triangulation of any walk in Γ. Therefore, $\mathscr{T}$ admits a tessellation.



Continuing with the "⇒" implication, consider a flow triangulation $\mathscr{T}$ of Γ that admits a tessellation. We aim to find a parallelogram containing exactly one triangle per vertex of Γ (and therefore a toroidal embedding of Γ^*).

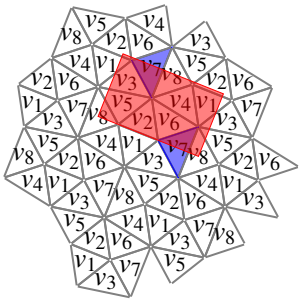
The first step of the proof is an identification of two linearly independent periods, which define a parallelogram tessellating the plane (but it need not be the one mentioned in the paragraph above). Let n denote the order of Γ, A_i denote the area of the triangle T_{v_i} and without loss of generality assume that $A_1 \leq A_2 \leq \cdots \leq A_n$. Now we take a rectangle R_1 with the area equal to $(n+1)A_n$. From the pigeonhole principle, there exists a vertex v such that at least two triangles T, T' corresponding to v have a non-empty intersection with R_1. Hence, a vector $\mathbf{a}$ connecting their centroids M_T and $M_{T'}$ is a period of the triangulation. We take the smallest multiple of $\mathbf{a}$ connecting two centroids of triangles corresponding to v (so if there is a shorter linearly dependent period, we take that one).



Next, we take another rectangle R_2 with the area $(n+1)A_n$, but moreover, let one of its sides be $\mathbf{a}$. By a similar argument, we can find a period $\mathbf{b}$ that is linearly independent to $\mathbf{a}$.

For the sake of contradiction, assume that any two triangles corresponding to the same vertex v_i partially contained in R_2 have centroids translated by $\mathbf{a}$. Then, the area of R_2 covered by these two triangles cannot be greater than A_i, since otherwise, two internal points of R_2 are the preimage and the image of translation by $\mathbf{a}$. From that, by having no periods linearly independent to $\mathbf{a}$, the total area of triangles could be at most $A_1 + A_2 + \cdots + A_n < (n+1)A_n$, a contradiction. Hence, we have a period $\mathbf{b}$ linearly independent to $\mathbf{a}$.

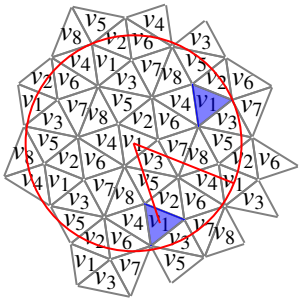
We are nearly done, since by taking an arbitrary centroid X and then a parallelogram P with nodes in $X, X+\mathbf{a}, X+\mathbf{b}, X+\mathbf{a}+\mathbf{b}$, the P tessellates a plane. The only issue is, that there might be a smaller linearly independent period of $\mathscr{T}$ in P, and hence, there are more copies of Γ^* in P. Thus, we need to take linearly independent periods $\mathbf{a}', \mathbf{b}'$ such that $\|\mathbf{a}'\|_2 + \|\mathbf{b}'\|_2$ is minimal possible and also WLOG $\|\mathbf{a}'\|_2 \geq \|\mathbf{b}'\|_2$.



We may WLOG assume that $\|\mathbf{a}\|_2 \geq \|\mathbf{b}\|_2$. Then, any candidate for a centroid giving a smaller period needs to lie in a circle with the center in X and the radius equal to $\|\mathbf{a}\|_2$. Since this circle has a finite area, there exists a parallelogram Q such that its sides are integer multiples of $\mathbf{a}$ and $\mathbf{b}$. From the periodicity, boundary partial triangles in Q together form complete triangles, and so the total area is $A_Q = c_1A_1 + \cdots + c_nA_n$ for some integral constants $c_1, \ldots, c_n$. Hence, the number of triangle centroids in Q, which is $\sum_{i=1}^{n} c_i$, can be bounded as

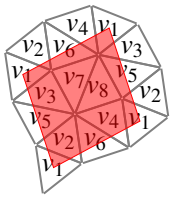
$$\sum_{i=1}^{n} c_i = \frac{1}{A_1}\sum_{i=1}^{n} c_iA_1 \leq \frac{1}{A_1}\sum_{i=1}^{n} c_iA_i = \frac{A_Q}{A_1},$$

thus is finite, and the desired minimal pair is well-defined.



It remains to show that a parallelogram P' with vertices $X, X+\mathbf{a}', X+\mathbf{b}', X+\mathbf{a}'+\mathbf{b}'$ contains each triangle (in the notion from the previous paragraph) of $\mathscr{T}$ exactly once. First we show this for the vertex v. From the choice of $\mathbf{a}', \mathbf{b}'$, there cannot exist a triangle corresponding to v with a centroid, that is not a vertex of P' – since the points in the triangle $X, X+\mathbf{a}', X+\mathbf{b}'$ are in the distance less than $\|\mathbf{a}'\|_2$ from X and the points in the triangle $X+\mathbf{a}', X+\mathbf{b}', X+\mathbf{a}'+\mathbf{b}'$ are in the distance less than $\|\mathbf{a}'\|_2$ from $X+\mathbf{a}'+\mathbf{b}'$. Moreover, notice that if somewhere in P' is a part of a triangle not containing its centroid, we can find a periodic triangle with its centroid in it. This results in the fact, that only parts of triangles corresponding to v are those with centroids in the vertices of P'. We can obviously see, they together form precisely the triangle corresponding to v.

For any other vertex u of Γ, there must be at least one centroid of a triangle corresponding to u in P'. Otherwise, from the periodicity, there would be no centroid of a triangle corresponding to u in the whole plane. But then Γ could not be connected, since there is no triangulation of vu-path in Γ. On the other hand, having more than one centroid of a triangle corresponding to u in P', we have a smaller period, a contradiction. Note that there is a one-to-one correspondence between centroids and triangles, so we have there is exactly one triangle corresponding to u in P'.



Finally, by an affine transformation, we can transform P' into a rectangle. Then we draw centroids contained in this rectangle and draw a segment between those corresponding to adjacent vertices. Therefore, we have an embedding of Γ^* in the rectangle with PBC, so it is toroidal.

□

One interesting usage of flow triangulations, that admit a tesselation, is calculating the exact flow values of computer-generated flows. This method was already used for the Petersen graph [Mattiolo et al., 2023, p. 8] with the triangulation depicted in Figure 3, but the calculation was not included in the paper – the authors showed only the final flow values in the triangulation.

This example mainly uses that some triangles in the triangulation have a right triangle, and thus we can use the Pythagorean theorem. We will demonstrate the method on an example without right angles shown in Figure 4.

We start by identifying segments of the same length, since they give us information about similar and isosceles triangles. Segments of the same length are coloured by the same colour. Next, we denote by α and β base angles of the triangles v_4 and v_3, respectively, and by x the length of the longest (red) segment. Then, by simple angle calculations, angles

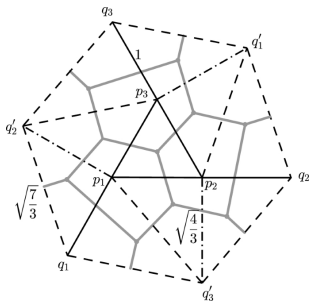


Figure 3: $(1+\sqrt{7/3})$-flow triangulation of the Petersen graph

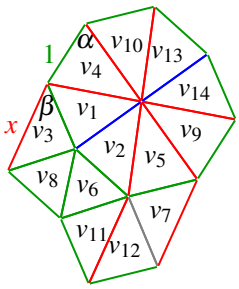


Figure 4: Flow triangulation of the 503rd graph of order 14

against the red and the green side of the triangle v_1 are $(\frac{\pi}{6}+\beta)$ and $(2\alpha-\frac{\pi}{2})$, respectively. Now, the law of cosines in v_3 gives $x = 2\cos\beta$, the law of cosines in v_4 gives $2x\cos\alpha = 1$ and the law of sines in v_1 finally gives $x\sin(2\alpha-\frac{\pi}{2}) = \sin(\frac{\pi}{6}+\beta)$. Solving this 3×3 system leads to a biquadratic equation $3x^4-6x^2+1=0$. The sought result $x=\sqrt{1+\frac{\sqrt{6}}{3}}$ can be easily derived from the quadratic formula. Finally, we know that this is a 2D r-flow triangulation with $r = 1+\sqrt{1+\frac{\sqrt{6}}{3}}$.

Finally, note that the initial idea of flow triangulations was to simply visually represent a two-dimensional flow. Therefore, there was no obvious reason to consider flow triangulations on other surfaces. However, in light of the fact, that flow tessellations might be used to calculate exact flow values for toroidal graphs, by embedding triangulations of non-toroidal graphs in other surfaces, we could possibly get a triangulation tessellating that surface. Hence, we state the following question.

Question 1. *Does there for each graph Γ, embeddable in a surface S, exist an optimal 2D nowhere-zero flow, which has a flow triangulation in S admitting a tessellation?*

5 Connected triangulations' visualisation

Consider a two-dimensional flow of a cubic graph. We would like to represent it by a connected flow triangulation. Moreover, we prefer triangulations covering less space. We find a sufficient triangulation by backtracking.

Initially, we start with a triangle of an arbitrary vertex v. Then we continue by adding neighbours of the currently processed vertex to a queue, if they are not in the triangulation already. When processing any but the first triangle, we may decide whether we want it in this position. In the first branch of the backtracking, we try attaching it to the triangulation and adding its neighbours to the queue. In the second one, we skip it and continue with another triangle. Note that this process simulates a depth-first search (DFS) in the space of all possible connected triangulations for that flow.

In connected flow triangulations, triangles cannot overlay. Therefore, if we find an overlay, we stop considering this triangulation. Since we want a triangulation with a good resolution, we prefer to have the dimensions as small as possible. At first, we compare the triangulations by the area of the smallest rectangle with sides parallel to the axes in which the triangulation fits. When having two triangulations with the same rectangular area, we prefer one that has a smaller area of the convex hull. Note that both these properties are non-decreasing in the process of attaching new triangles to a partial triangulation. Therefore, if we obtain a partial triangulation, that has a rectangular area greater than the currently found optimal triangulation, we can trash that partial triangulation. This also shows that if we find a good triangulation early, it cuts many non-optimal branches and speeds up the DFS. Also remember that we try attaching the triangle before skipping it and we also process them chronologically in the queue, so triangulations with triangles near to each other should be found earlier and improve the complexity of the search.

Conclusion

In this paper, we presented flow triangulations originally introduced by Mattiolo et al. [Mattiolo et al., 2023]. Then we have examined

Input: two-dimensional flow φ on a graph
$C_0 \leftarrow$ configuration with initial triangle in its queue
add C_0 to unprocessed configurations
while there is unprocessed configuration left **do**
  $C \leftarrow$ the newest configuration from unprocessed configurations
  if C contains all triangles **then**
    compare it with the current optimal
  end if
  $T \leftarrow$ the oldest triangle from the queue of C
  $C_1 \leftarrow C$ after removing T from its queue
  add C_1 to unprocessed configurations
  $C_2 \leftarrow C_1$ with T attached
  if C_2 has no overlays **and** C_2 is not larger than current optimal **then**
    $C_3 \leftarrow C_2$ after adding neighbours of T to its queue
    add C_3 to unprocessed configurations
  end if
end while
Output: if it exists, a connected flow triangulation of φ

Figure 5: Pseudocode of the triangulations' visualisation algorithm

two specifications of that concept. The first one, connected flow triangulations, seems to be very flexible, since we found such a representation for flows on cubic graphs up to 14 vertices. We should also admit we see no argument indicating its existence in general. The other, tessellations, is useful due to the amount of information it can hold. For several graphs, we have used it to calculate the exact value of r. On the other hand, we have shown that a flow triangulation with a tessellation exists only for toroidal graphs. However, we have found no relationship to the optimality of r. It would be interesting to examine whether there exists a 2D r-flow triangulation admitting a tessellation for any bridgeless cubic toroidal graph such that r is optimal for that graph.

References

[Gáborik, 2024] Gáborik, L. (2024). Manhattan and Chebyshev nowhere-zero flows. In Guričan, J. and Tekel, J., editors, *Proceedings of the Student Science Conference 2024*, pages 337–347, Bratislava. Library and Publishing Services FMFI UK.

[Goddyn et al., 1998] Goddyn, L. A., Tarsi, M., and Zhang, C.-Q. (1998). On (k,d)-colorings and fractional nowhere-zero flows. *Journal of Graph Theory*, 28(3):155–161.

[Jaeger, 1979] Jaeger, F. (1979). Flows and generalized coloring theorems in graphs. *Journal of Combinatorial Theory, series B*, 26(2):205–216.

[Jain, 2007] Jain, K. (2007). Unit vector flows. `http://www.openproblemgarden.org/op/unit_vector_flows`. Accessed: March 4, 2024.

[Kocay et al., 2001] Kocay, W., Neilson, D., and Szypowski, R. (2001). Drawing graphs on the torus. *Ars Combinatoria*, 59(2):259–277.

[Mattiolo et al., 2023] Mattiolo, D., Mazzuoccolo, G., Rajník, J., and Tabarelli, G. (2023). On d-dimensional nowhere-zero r-flows on a graph. *European Journal of Mathematics*, 9(4):101.

[Rieg, 2025] Rieg, F. (2025). Multidimensional nowhere-zero flows on graphs. Master's thesis, University of Stuttgart, Stuttgart.

[Seymour, 1981] Seymour, P. D. (1981). Nowhere-zero 6-flows. *Journal of combinatorial theory, series B*, 30(2):130–135.

[Smith and Tutte, 1950] Smith, C. A. and Tutte, W. (1950). A class of self-dual maps. *Canadian Journal of Mathematics*, 2:179–196.

[Steffen, 2001] Steffen, E. (2001). Circular flow numbers of regular multigraphs. *Journal of Graph Theory*, 36(1):24–34.

[Thomassen, 2014] Thomassen, C. (2014). Group flow, complex flow, unit vector flow, and the $(2+\varepsilon)$-flow conjecture. *Journal of Combinatorial Theory, Series B*, 108:81–91.

[Tutte, 1954] Tutte, W. T. (1954). A contribution to the theory of chromatic polynomials. *Canadian Journal of Mathematics*, 6:80–91.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 279–290
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Marek Mikloš, Peter Guba

Deformácia pórovitého média vplyvom toku

Marek Mikloš[*] Peter Guba[†‡]

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

Abstrakt: V tejto práci sa zaoberáme modelovaním deformácie pórovitých médií spôsobenej prúdením tekutiny. V úvode predstavujeme základné pojmy a fyzikálne veličiny potrebné na formuláciu problému, ako sú pórovitosť, Darcyho tok, celkový termodynamický tlak a tlak v kvapalnej fáze. Následne konštruujeme bezrozmerný matematický model časopriestorového vývoja pórovitosti vo forme nelineárnej advekčno-difúznej parciálnej diferenciálnej rovnice. Zavádzame zovšeobecnené nelineárne konštitučné vzťahy pre napätie matrice a permeabilitu pórovitého média. Analyticky odvádzame ustálené riešenie problému v asymptotickej limite nízkeho elastického napätia v matrici. Numerické riešenia získavame prostredníctvom Landauovej transformácie a konečno-diferenčnej diskretizácie. Poskytujeme pôvodné numerické výsledky pre pórovitosť, hĺbku deformovaného média, napätie v matrici a rýchlostné polia pevnej a tekutej zložky pórovitého média. Napokon prezentujeme výsledky pre zovšeobecný permeabilitný model Kozeny–Carman.

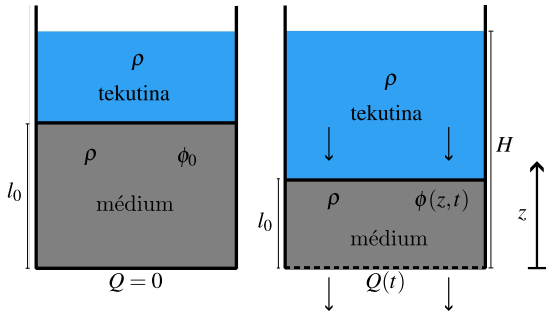
Kľúčové slová: pórovité médium, Kozenyho–Carmanov model permeability, porozita, metóda konečných diferencií

1 Úvod

Skúmanie pórovitých materiálov a ich dynamiky je kľúčové pre pochopenie mnohých bežných javov. Poromechanika nachádza uplatnenie nielen v geomechanike a materiálovom inžinierstve, ale aj v biomedicíne. Pri podávaní liekov sa využívajú hydrogelové mikročastice, ktoré sú zložené z polymérov vytvárajúcich sieť s pórmi. Tieto póry umožňujú hydrogélom efektívne absorbovať tekutiny. Hydrogél tak nasaje liek vo forme roztoku a následne sa podáva pacientovi. Na rozdiel od priameho podávania liekov hydrogély umožňujú kontrolované uvoľňovanie liečiva do organizmu, čo môže prispieť k zníženiu vedľajších účinkov [Webber and Worster, 2023], [Webber et al., 2023]. Jednou z kľúčových charakteristík pórovitých materiálov je porozita, ktorá vyjadruje percentuálny podiel pórov v celom objeme materiálu. V tejto práci uvažujeme jednosmernú deformáciu pórovitého materiálu [Hewitt et al., 2016]. V kap. 2 zostavujeme matematický model porozity deformovateľného média a špecifikujeme konštitučné vzťahy pre permeabilitu a matricový tlak. Modelový diferenciálny systém prevádzame do bezrozmerného tvaru a identifikujeme riadiace bezrozmerné parametre systému. V kap. 3 transformujeme úlohu s voľnou hranicou na problém definovaný na pevnej oblasti a vykonávame semidiskretizáciu v priestorovej oblasti. V kap. 4 prezentujeme a interpretujeme pôvodné numerické výsledky pre zovšeobecnený model permeability.

2 Formulácia problému

V tejto časti si predstavíme úlohu deformácie pórovitého média v dôsledku prúdenia tekutiny. Ide o jednorozmerný prípad, kde tekutina prúdi pod vplyvom gravitačného poľa a zároveň dochádza k zhutneniu média vo vertikálnom smere.



Obr. 1: Stavu systému pred odstránením mriežky (vľavo) a po jej odstránení (vpravo).

2.1 Geometrické usporiadanie

Uvažujeme rezervoár s priepustnou, odnímateľnou mriežkou na dne. Na dno rezervoára uložíme pórovité médium s hustotou ρ, ktoré vyplníme tekutinou rovnakej hustoty. V tejto práci sa zameriame na jednorozmerný problém v smere z. Situácie pred a po

[*] miklos28@uniba.sk
[†] peter.guba@fmph.uniba.sk
[‡] Školiteľ

odňatí mriežky ilustruje Obr. 1. V prvom prípade cez médium tekutina neprúdi, pričom médium je v relaxovanom počiatočnom stave. Po odstránení mriežky však tekutina začne prúdiť médiom, čo spôsobuje jeho zhutnenie na výšku $l(t) \leq l_0$. Dynamiku systému môžeme popísať sústavou zviazaných diferenciálnych rovníc

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}(\phi w_f) = 0, \tag{2.1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(1-\phi) + \frac{\partial}{\partial z}[(1-\phi) w_s] = 0, \tag{2.2}$$

$$\phi\,(w_f - w_s) + \frac{k}{\mu}\left(\frac{\partial p}{\partial z} + \rho g\right) = 0, \tag{2.3}$$

$$\frac{\partial P}{\partial z} + \rho g = 0, \tag{2.4}$$

kde $\phi(z,t)$ označuje kvapalný objemový zlomok (tzv. pórovitosť), w_s a w_f predstavujú rýchlosti tuhej a tekutej zložky média, p označuje tlak kvapalnej fázy v póroch, k permeabilitu média, μ viskozitu tekutiny, g gravitačné zrýchlenie a P označuje celkový termodynamický tlak pôsobiaci na médium. Vzťah medzi tlakom v póroch a celkovým termodynamickým tlakom je daný rovnickou $\sigma = P - p$, kde σ vyjadruje tlak pôsobiaci na tuhú zložku pórovitého média. Prvé dve rovnice (2.1) a (2.2) predstavujú rovnice kontinuity pre kvapalnú a tuhú zložku média. Výrazy ϕw_f a $(1-\phi)w_s$ reprezentujú objemové toky kvapalnej a tuhej fázy média. Rovnica (2.3) predstavuje Darcyho zákon. Posledná rovnica (2.4) vyjadruje rovnicu rovnováhy kontinua. Permeabilita k a matricový tlak σ sú vo všeobecnosti funkciami pórovitosti, teda $k = k(\phi)$, $\sigma = \sigma(\phi)$. Tieto závislosti budú špecifikované explicitne prostredníctvom konkrétnych konštitučných vzťahov pri samotnom riešení problému.

2.2 Zbezrozmernenie

Permeabilita aj tlak na tuhú zložku závisia od geometrickej štruktúry pórov v médiu, ako aj od porozity. Keďže tuhá zložka podlieha deformácii, tlak σ na túto zložku bude závisieť od veľkosti deformácie, teda $\sigma = \sigma(e)$, kde e označuje lineárnu deformáciu. Pri jednorozmernej deformácii je lineárna deformácia definovaná ako

$$e = \frac{\phi - \Phi}{1-\phi}, \tag{2.5}$$

kde Φ je pórovitosť zodpovedajúca nulovej deformácii. Ďalšou veličinou závislou od deformácie je posunutie tuhej fázy. V jednorozmernom prípade spĺňa vertikálne posunutie rovnicu

$$\frac{\partial \zeta_{\text{disp}}}{\partial z} = \frac{e}{1+e} = \frac{\phi - \Phi}{1-\Phi},$$

odkiaľ

$$\zeta_{\text{disp}}(z,t) = \int_0^z \frac{\phi(z',t) - \Phi}{1-\Phi}\mathrm{d}z'.$$

Aby sme mohli nájsť riešenie úlohy definovanej rovnicami (2.1)–(2.4), zavedieme bezrozmerné (preškálované) veličiny. Dĺžku škálujeme charakteristickou dĺžkou l_0, tlak charakteristickým napätím σ^*, permeabilitu hodnotou k^*, rýchlosti cez $k^*\sigma^*/l_0\mu$ a čas pomocou $l_0^2\mu/k^*\sigma^*$:

$$\tilde{z} = \frac{z}{l_0}, \quad \tilde{t} = \frac{t}{l_0^2\mu/k^*\sigma^*},$$

$$\tilde{p} = \frac{p}{\sigma^*}, \quad \tilde{P} = \frac{P}{\sigma^*}, \quad \tilde{w}_{f,s} = \frac{w_{f,s}}{k^*\sigma^*/l_0\mu}, \quad \tilde{k} = \frac{k}{k^*}.$$

Rovnice (2.1)–(2.4) po zavedení bezrozmerných veličín nadobúdajú nasledovný bezrozmerný tvar:

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tilde{t}} + \frac{\partial}{\partial \tilde{z}}(\phi \tilde{w}_f) = 0, \tag{2.6}$$

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{t}}(1-\phi) + \frac{\partial}{\partial \tilde{z}}[(1-\phi)\,\tilde{w}_s] = 0, \tag{2.7}$$

$$\phi\,(\tilde{w}_f - \tilde{w}_s) + \tilde{k}\left(\frac{\partial \tilde{p}}{\partial \tilde{z}} + \mathscr{H}_0\right) = 0, \tag{2.8}$$

$$\frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tilde{z}} + \mathscr{H}_0 = 0, \tag{2.9}$$

kde $\mathscr{H}_0 = \rho g l_0/\sigma^*$ je bezrozmerný tlak zodpovedajúci počiatočnej výške média. Sčítaním rovníc (2.6) a (2.7) získame rovnicu kontinuity pre celé pórovité médium:

$$\tilde{Q} \equiv \phi\tilde{w}_f + (1-\phi)\tilde{w}_s, \tag{2.10}$$

kde $\tilde{Q}$ označuje integračnú premennú závisiacu od času $\tilde{t}$; zároveň (2.10) definuje bezrozmerný Darcyho tok $\tilde{Q}(\tilde{t})$. Výraz $\phi(\tilde{w}_f - \tilde{w}_s)$ z rovnice (2.10) môžeme dosadiť do Darcyho zákona (2.8), čím získame jeho alternatívne vyjadrenie prostredníctvom $\tilde{Q}$:

$$\tilde{Q} - \tilde{w}_s + \tilde{k}\left(\frac{\partial \tilde{p}}{\partial \tilde{z}} + \mathscr{H}_0\right) = 0. \tag{2.11}$$

Dosadením vyjadrenia pre matricový tlak $\sigma = P - p$ do rovnice rovnováhy kontinua (2.9) ďalej dostávame

$$\frac{\partial \tilde{\sigma}}{\partial \tilde{z}} + \frac{\partial \tilde{p}}{\partial \tilde{z}} + \mathscr{H}_0 = 0. \tag{2.12}$$

Vyjadrením $\partial\tilde{p}/\partial\tilde{z}$ a dosadením do rovnice (2.11) získavame

$$\tilde{Q}-\tilde{w}_s=\tilde{k}\frac{\partial\tilde{\sigma}}{\partial\tilde{z}}=\tilde{k}\tilde{\sigma}'\frac{\partial\phi}{\partial\tilde{z}}, \tag{2.13}$$

kde $\tilde{\sigma}'\equiv\partial\tilde{\sigma}/\partial\phi$. Dosadením vzťahu (2.13) za $\tilde{w}_s$ do rovnice (2.7) získavame nelineárnu advekčno–difúznu rovnicu

$$\frac{\partial}{\partial\tilde{t}}(1-\phi)+\frac{\partial}{\partial\tilde{z}}\left[(1-\phi)\left(\tilde{Q}-\tilde{k}\tilde{\sigma}'\frac{\partial\phi}{\partial\tilde{z}}\right)\right]=0. \tag{2.14}$$

Okrajové podmienky majú nasledujúci tvar:

$$\begin{aligned}
&\phi(0,\tilde{t})=\phi_{\mathrm{bot}}(\mathscr{H},\Phi),\quad \phi(\tilde{l},\tilde{t})=\Phi\\
&\tilde{w}_s(0,\tilde{t})=0,\quad \tilde{w}_s(\tilde{l},\tilde{t})=\frac{\mathrm{d}\tilde{l}}{\mathrm{d}\tilde{t}},\\
&\tilde{\sigma}(0,\tilde{t})=\mathscr{H},\quad \tilde{\sigma}(\tilde{l},\tilde{t})=0,\\
&\tilde{P}(\tilde{l},\tilde{t})=\tilde{p}(\tilde{l},\tilde{t})=\mathscr{H}-\mathscr{H}_0\tilde{l},
\end{aligned}$$

kde $\phi_{\mathrm{bot}}(\mathscr{H},\Phi)\equiv\Phi^2/[\Phi+\mathscr{H}(1-\Phi)]$ a $\mathscr{H}$ označuje vonkajší tlak tekutiny vzťahovaný k elastickému modulu tuhej zložky. Vyčíslením vzťahu (2.13) pre $\tilde{z}=0$ získavame okrajovú podmienku na spodnom okraji média

$$\tilde{Q}=\tilde{k}(\phi_0)\tilde{\sigma}'(\phi_0)\frac{\partial\phi}{\partial\tilde{z}}\bigg|_{\tilde{z}=0}. \tag{2.15}$$

Podobne, vyčíslením (2.13) pre $\tilde{z}=\tilde{l}$ získavame okrajovú podmienku na hornom okraji média

$$\tilde{Q}-\frac{\mathrm{d}\tilde{l}}{\mathrm{d}\tilde{t}}=\tilde{k}(\Phi)\tilde{\sigma}'(\Phi)\frac{\partial\phi}{\partial\tilde{z}}\bigg|_{\tilde{z}=\tilde{l}}. \tag{2.16}$$

Počiatočné podmienky majú tvar:

$$\phi(\tilde{z},0)=\Phi,\quad \tilde{l}(0)=1. \tag{2.17}$$

V prvom kroku predpokladáme špecifickú formu závislosti permeability a matricového tlaku:

$$\tilde{k}=\frac{(\phi-\phi_m)^3}{(1-\phi)^2}, \tag{2.18}$$

$$\tilde{\sigma}=-\frac{e}{1-e/e_m}. \tag{2.19}$$

kde e_m označuje limitnú deformáciu, pri ktorej médium dosahuje maximálnu možnú kompresiu a ďalej už nemôže byť stlačené. Deformácii e_m zodpovedá limitná hodnota pórovitosti $\phi_m=0$. V ďalšej časti práce budeme uvažovať hodnotu $\phi_m=0$. Pre túto hodnotu pórovitosti vyplýva z rovnice (2.5) deformácia $e_m=-\Phi$. Dosadením vzťahu (2.5) spolu s hodnotou e_m do rovnice (2.19) získavame

$$\tilde{\sigma}(\phi)=\frac{\Phi}{1-\Phi}\frac{\Phi-\phi}{\phi}. \tag{2.20}$$

Dosadením (2.20) a (2.18) do advekčno–difúznej rovnice (2.14) získavame rovnicu pre špecifický tvar konštitučných vzťahov (2.18) a (2.19) v tvare

$$\frac{\partial\phi}{\partial\tilde{t}}+\tilde{Q}\frac{\partial\phi}{\partial\tilde{z}}=\frac{\Phi^2}{1-\Phi}\frac{\partial}{\partial\tilde{z}}\left(\frac{\phi}{1-\phi}\frac{\partial\phi}{\partial\tilde{z}}\right). \tag{2.21}$$

2.3 Ustálený stav

V ustálenom stave je rýchlosť tuhej zložky nulová, $\tilde{w}_s=0$. Zákon zachovania tuhej zložky média v tomto stave vyjadruje integrál

$$\int_0^{\tilde{l}}(1-\phi)\mathrm{d}\tilde{z}=1-\Phi. \tag{2.22}$$

Využitím vzťahu (2.13) v integráli (2.22) získavame výraz pre ustálený Darcyho tok

$$\tilde{Q}_s=\int_{\phi_{\mathrm{bot}}}^{\Phi}\frac{(1-\phi)\tilde{k}(\phi)\tilde{\sigma}(\phi)}{1-\Phi}\mathrm{d}\phi. \tag{2.23}$$

Priamym integrovaním rovnice (2.13) dostaneme vyjadrenie pre hĺbku média v ustálenom stave

$$\tilde{Q}_s\tilde{l}_s=\int_{\phi_{\mathrm{bot}}}^{\Phi}\tilde{k}(\phi)\tilde{\sigma}(\phi)\mathrm{d}\phi.$$

[Hewitt et al., 2016] zavádzajú tzv. efektívnu permeabilitu

$$\tilde{k}_{\mathrm{eff}}=\tilde{l}\left(\int_0^{\tilde{l}}\frac{1}{\tilde{k}}\mathrm{d}\tilde{z}\right)^{-1}$$

ako mieru odporu média v ustálenom stave. Efektívna permeabilita sa dá chápať ako priemerná permeabilita naprieč médiom, alebo ako pomer celkového toku a priemerného tlakového gradientu

$$\tilde{k}_{\mathrm{eff}}=-\frac{\tilde{Q}_s\tilde{l}_s}{\mathscr{H}}.$$

Dosadením špecifických konštitučných vzťahov v tvare (2.18) a (2.20) do (2.23) získavame explicitné vyjadrenie toku tekutiny médiom v rovnovážnom stave

$$\tilde{Q}_s=\frac{\Phi}{(1-\Phi)^2}\int_{\phi_{\mathrm{bot}}}^{\Phi}\frac{\phi^2(\Phi-\phi)}{1-\phi}\mathrm{d}\phi. \tag{2.24}$$

Prevedením integrácie v (2.24) dostávame ustálený tok

$$\tilde{Q}_s = -\frac{\Phi^2}{(1-\Phi)^2}\left[-\frac{\mathscr{H}\Phi(1-\Phi)}{\Phi+\mathscr{H}(1-\Phi)} + \ln\left(1+\frac{\mathscr{H}\Phi}{\Phi+\mathscr{H}(1-\Phi)}\right)\right].$$

Pre hĺbku média v ustálenom stave platí

$$\tilde{Q}_s\tilde{l}_s = \frac{\Phi}{1-\Phi}\int_{\phi_{\mathrm{bot}}}^{\Phi}\frac{\phi^2(\Phi-\phi)}{(1-\phi)^2}\mathrm{d}\phi. \tag{2.25}$$

Prevedením integrácie v (2.25) a predelením Q_s dostávame hĺbku média v ustálenom stave

$$\tilde{l}_s = \frac{\Phi^2}{Q_s(1-\Phi)}\left[\ln\left(1+\frac{\mathscr{H}\Phi}{\Phi+\mathscr{H}(1-\Phi)}\right) - \frac{\mathscr{H}\Phi}{(1-\Phi)(\Phi+\mathscr{H})}\right].$$

Efektívna permeabilita má v ustálenom stave tvar

$$\tilde{k}_{\mathrm{eff}} = -\frac{Q_s l_s}{\mathscr{H}}.$$

V limite veľkých tlakov $\mathscr{H}\to\infty$,

$$\tilde{Q}_s \to \frac{\Phi^2}{(1-\Phi)^2}[\ln(1-\Phi)+\Phi],$$
$$\tilde{l}_s \to \frac{\Phi\ln(1-\Phi)}{\ln(1-\Phi)+\Phi} - 1,$$
$$\tilde{k}_{\mathrm{eff}} \to 0$$

(pozri [Hewitt et al., 2016]).

3 Diskrétna formulácia

V tejto kapitole sa zaoberáme diferenciálnymi rovnicami odvodenými v kap. 2 a aplikujeme na ne diskretizáciu pomocou metódy konečných diferencií s cieľom numerického riešenia.

3.1 Transformácia priestorovej oblasti

Z formulácie úlohy vyplýva, že priestorová premenná $\tilde{z}$ je zhora ohraničená okamžitou výškou $\tilde{l}(\tilde{t})$, teda platí:

$$0 \le \tilde{z} \le \tilde{l}(t).$$

Takéto ohraničenie však nie je praktické pre numerické riešenie problému. Ak by sme totiž chceli analyzovať správanie funkcie ϕ na hornej hranici, t. j. v bode $\tilde{z} = \tilde{l}(\tilde{t})$, museli by sme najprv vypočítať hodnotu funkcie $\tilde{l}(\tilde{t})$ v danom čase. Preto pristúpime k transformácii súradníc a zavedeme novú premennú $\zeta = \zeta(\tilde{z},\tilde{t})$ definovanú v tvare

$$\zeta = \frac{\tilde{z}}{\tilde{l}(t)},$$

pre ktorú platí, že $0 \le \zeta \le 1$.

Transformáciou súradníc sa problém s voľnou hranicou odstránil, avšak za cenu zavedenia nových nelineárnych členov do riadiacich rovníc:

$$\frac{\partial\phi}{\partial\tilde{t}} + \frac{\partial\phi}{\partial\zeta}\left(\frac{\tilde{Q}}{\tilde{l}} - \frac{\zeta}{\tilde{l}}\frac{\mathrm{d}\tilde{l}}{\mathrm{d}\tilde{t}}\right) = \frac{\Phi^2}{1-\Phi}\frac{1}{\tilde{l}^2}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\frac{\phi}{1-\phi}\frac{\partial\phi}{\partial\zeta}\right), \tag{3.1}$$

$$\tilde{Q} = -\frac{1}{\tilde{l}}\frac{\Phi^2\phi_0}{(1-\Phi)(1-\phi_0)^2}\left.\frac{\partial\phi}{\partial\zeta}\right|_{\zeta=0}, \tag{3.2}$$

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{l}}{\mathrm{d}\tilde{t}} = \tilde{Q} + \frac{1}{\tilde{l}}\frac{\Phi^3}{(1-\Phi)^3}\left.\frac{\partial\phi}{\partial\zeta}\right|_{\zeta=1}. \tag{3.3}$$

Na hraniciach spĺňa funkcia ϕ podmienky:

$$\phi(0,\tilde{t}) = \phi_{\mathrm{bot}}(\mathscr{H},\Phi), \tag{3.4}$$
$$\phi(1,\tilde{t}) = \Phi. \tag{3.5}$$

Transformované počiatočné podmienky majú tvar:

$$\phi(\zeta,0) = \Phi, \qquad 0 \le \zeta \le 1, \tag{3.6}$$
$$\tilde{l}(0) = 1. \tag{3.7}$$

Získali sme bezrozmernú parciálnu diferenciálnu rovnicu pre $\phi(\zeta,\tilde{t})$ s bezrozmernými okrajovými a počiatočnými podmienkami.

Z rovnice (2.13) možno odvodiť výraz pre rýchlostné pole $\tilde{w}_s(\zeta,\tilde{t})$, ktorý následne dosadíme do rovnice (2.10) na vyjadrenie $\tilde{w}_f(\zeta,\tilde{t})$:

$$\tilde{w}_s = \tilde{Q} - \frac{1}{\tilde{l}}\frac{\Phi^2}{1-\Phi}\frac{\phi}{(1-\phi)^2}\frac{\partial\phi}{\partial\zeta}, \tag{3.8}$$

$$\tilde{w}_f = \frac{\tilde{Q}}{\phi} - \frac{1-\phi}{\phi}w_s. \tag{3.9}$$

Tlak kvapaliny v póroch a celkový termodynamický tlak vyjadríme z rovníc (2.3) a (2.4):

$$\frac{\partial\tilde{p}}{\partial\zeta} = \tilde{l}\left(\frac{(1-\phi)^2(\tilde{w}_s-\tilde{w}_f)}{\phi^2} - \mathscr{H}_0\right), \tag{3.10}$$

$$\frac{\partial\tilde{P}}{\partial\zeta} = -\tilde{l}\mathscr{H}_0. \tag{3.11}$$

3.2 Semidiskretizácia rovníc

V tejto časti diskretizujeme priestorovú premennú ζ na intervale $[0,1]$, ktorý rozdelíme na $N+1$ diskretizačných bodov ζ_i, kde $i = 0,1,\ldots,N$. Neznámu funkčnú hodnotu ϕ v bode ζ_i označíme ako $\phi_i(t)$. V druhom kroku aplikujeme metódu konečných diferencií na aproximáciu derivácií prvého a druhého rádu a odvodíme diskretizované tvary rovníc (3.1), (3.2) a (3.3). Rovnica (3.1) platí vo všetkých vnútorných bodoch intervalu $[0,1]$. V okrajových bodoch aplikujeme okrajové podmienky (3.2) a (3.3) a použijeme doprednú a dozadnú diferenčnú schému druhého rádu, čím získame:

$$\tilde{Q} = -\frac{1}{\tilde{l}}\frac{\Phi^2\phi_{\text{bot}}}{(1-\Phi)(1-\phi_{\text{bot}})^2}\frac{-3\phi_0+4\phi_1-\phi_2}{2\Delta\zeta}, \tag{3.12}$$

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{l}}{\mathrm{d}\tilde{t}} = \tilde{Q} + \frac{1}{\tilde{l}}\frac{\Phi^3}{(1-\Phi)^3}\frac{3\phi_N-4\phi_{N-1}+\phi_{N-2}}{2\Delta\zeta}. \tag{3.13}$$

Ďalej zavedieme pomocnú premennú

$$F_i \equiv \frac{\phi_i}{1-\phi_i}, \qquad i = 1,\ldots,N-1, \tag{3.14}$$

ktorú využijeme pri diskretizácii rovnice (3.1). Použitím centrovanej diferenčnej schémy druhého rádu nadobúda ľavá strana rovnice (3.1) nasledovný tvar:

$$\frac{\mathrm{d}\phi_i}{\mathrm{d}\tilde{t}} + \frac{\phi_{i+1}-\phi_{i-1}}{2\Delta\zeta}\left(\frac{\tilde{Q}}{\tilde{l}} - \frac{\zeta_i}{\tilde{l}}\frac{\mathrm{d}\tilde{l}}{\mathrm{d}\tilde{t}}\right).$$

Na pravej strane (3.1) najskôr aplikujeme Leibnizovo pravidlo na výraz v zátvorke,

$$\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\frac{\phi}{1-\phi}\right)\frac{\partial\phi}{\partial\zeta} + \frac{\phi}{1-\phi}\frac{\partial^2\phi}{\partial\zeta^2},$$

a použitím centrovanej diferencie druhého rádu spolu s rovnicou (3.14) získavame

$$\frac{F_{i+1}-F_{i-1}}{2\Delta\zeta}\frac{\phi_{i+1}-\phi_{i-1}}{2\Delta\zeta} + F_i\frac{\phi_{i+1}-2\phi_i+\phi_{i-1}}{\Delta\zeta^2}.$$

Rovnica (3.1) má diskretizovaný tvar

$$\frac{\mathrm{d}\phi_i}{\mathrm{d}\tilde{t}} + \frac{\phi_{i+1}-\phi_{i-1}}{2\Delta\zeta}\left(\frac{\tilde{Q}}{\tilde{l}} - \frac{\zeta_i}{\tilde{l}}\frac{\mathrm{d}\tilde{l}}{\mathrm{d}\tilde{t}}\right) = \frac{\Phi^2}{1-\Phi}\frac{1}{\tilde{l}^2}\left(\frac{F_{i+1}-F_{i-1}}{2\Delta\zeta}\frac{\phi_{i+1}-\phi_{i-1}}{2\Delta\zeta} + F_i\frac{\phi_{i+1}-2\phi_i+\phi_{i-1}}{\Delta\zeta^2}\right). \tag{3.15}$$

Porozita ϕ je na hraniciach určená podmienkami (3.4) a (3.5), ktoré spolu s počiatočnými podmienkami pre ϕ a l môžeme v diskretizovanej forme zapísať nasledovne:

$$\phi_0(\tilde{t}) = \phi_{\text{bot}}(\mathscr{H},\Phi), \tag{3.16}$$

$$\phi_N(\tilde{t}) = \Phi, \tag{3.17}$$

$$\phi_i(\tilde{t}=0) = \Phi, \qquad i = 0,1,\ldots,N, \tag{3.18}$$

$$\tilde{l}(\tilde{t}=0) = 1. \tag{3.19}$$

Rovnica (3.15) spolu s počiatočnými podmienkami (3.18) a (3.19) a s Dirichletovými a Neumanovými podmienkami (3.13), (3.12), (3.16) a (3.17) predstavuje semidiskretizovaný systém obyčajných diferenciálnych rovníc pre časový vývoj funkcií $\phi_i(\tilde{t})$ a $\tilde{l}(\tilde{t})$. Analogicky možno v diskretizovanej forme zapísať aj vyjadrenia (3.8) a (3.9) pre rýchlosti pevnej a kvapalnej fázy, ako aj rovnice (3.10) a (3.11) pre tlak kvapalnej fázy a celkový tlak:

$$\tilde{w}_i^s = \tilde{Q} - \frac{1}{\tilde{l}}\frac{\Phi^2}{(1-\Phi)}\frac{\phi_i}{(1-\phi_i)^2}\frac{\phi_{i+1}-\phi_{i-1}}{2\Delta\zeta}, \tag{3.20}$$

$$\tilde{w}_i^f = \frac{\tilde{Q}}{\phi_i} - \frac{1-\phi_i}{\phi_i}\tilde{w}_i^s, \tag{3.21}$$

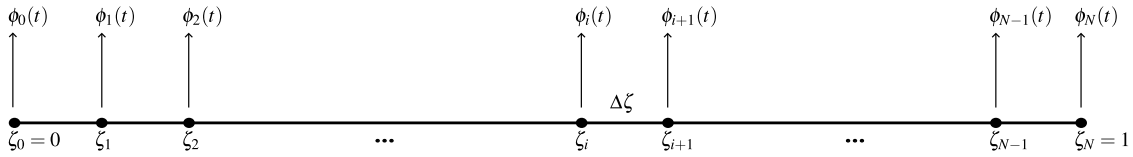
$$\frac{\tilde{p}_{i+1}-\tilde{p}_i}{\Delta\zeta} = \tilde{l}\left(\frac{(1-\phi_i)^2(\tilde{w}_i^s-\tilde{w}_i^f)}{\phi_i^2} - \mathscr{H}_0\right), \tag{3.22}$$

$$\frac{\tilde{P}_{i+1}-\tilde{P}_i}{\Delta\zeta} = -\tilde{l}\mathscr{H}_0. \tag{3.23}$$

4 Numerické výsledky

V tejto časti predstavíme numerické riešenie problému. Najskôr zreprodukujeme numerické výsledky pre tok tekutiny a hĺbku média pri vybraných hodnotách tlaku $\mathscr{H}$. Následne analyzujeme riešenie pre porozitu ϕ pri zovšeobecnenom Kozenyho–Carmanovom permeabilitnom vzťahu a na jeho základe získame závislosti rýchlostných a tlakových polí na priestorovej a časovej premennej, ζ a $\tilde{t}$.

V prvom kroku sa zameriame na asymptotické správanie toku tekutiny a hĺbky média. Na Obr. 3 a 4 je vidieť, že hodnoty toku a hĺbky deformovaného média konvergujú k ustáleným hodnotám. Rozdiely medzi numericky získanými hodnotami Q_s, l_s a analytickými výsledkami sú zobrazené na grafoch v Obr. 5. Pri Darcyho toku rastie rozdiel medzi numerickou a analytickou hodnotou so zvyšujúcou sa hodnotou tlaku $\mathscr{H}$. Tento jav môže byť spôsobený



Obr. 2: Schéma semidiskretizácie priestorovej oblasti.

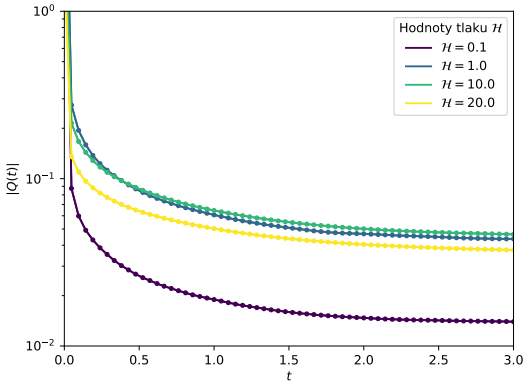
nepresnosťou numerickej metódy `solve_ivp` použitej pre integráciu časových diferenciálnych rovníc. Pri výpočte bolo zvolených 2^{10} priestorových diskretizačných bodov; zvýšenie ich počtu by mohlo viesť k presnejším výsledkom. Pre hĺbku média v ustálenom stave numerické výpočty dobre korešpondujú s asymptotickými výsledkami najmä pri dostatočne vysokých hodnotách tlaku $\mathscr{H}$.

V ďalšej analýze uvažujeme zovšeobecnený Kozenyho–Carmanov vzťah pre permeabilitu média [Henderson et al., 2010] v tvare

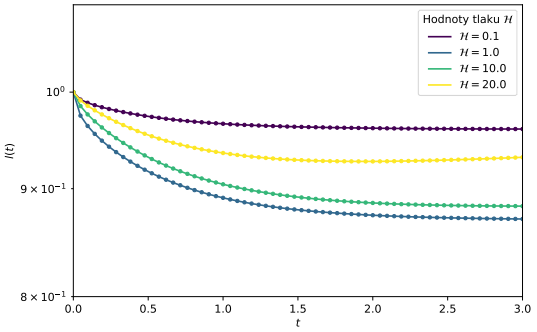
$$\tilde{k}(\phi;\alpha,\beta) = \frac{\phi^{\alpha}}{(1-\phi)^{\beta}}. \tag{4.1}$$

Navyše predpokladáme platnosť vzťahu (2.20) pre matricový tlak. Pre $\tilde{k}$ podľa (4.1) s vybranými hodnotami α a β budeme numericky riešiť rovnicu (2.14) s okrajovými podmienkami (2.15), (2.16) a počiatočnými podmienkami (2.17). Transformácia priestorovej premennej, semidiskretizácia a odvodenie rýchlostných a tlakových polí sú realizované analogicky ako v kap. 2. V nasledujúcej kapitole podrobne analyzujeme numerické výsledky pre premenné ϕ, w_f, w_s, p, P a σ ako funkcie premenných ζ a $\tilde{t}$.

Z grafov na Obr. 6 vidíme, že pri nízkych hodnotách parametra α riešenie pomerne rýchlo konverguje k ustálenému stavu. Nárast hodnoty parametra β spôsobuje, že pórovitosť ϕ dosahuje ustálený stav rýchlejšie ako pri nižších hodnotách. To korešponduje s tým, že pri nízkych hodnotách parametra α dochádza k zhutneniu materiálu na povrchu bezprostredne po začiatku toku. Naopak, pri nízkych hodnotách β prebieha zhutňovanie pevnej fázy média postupne. Charakter média pre jednotlivé hodnoty parametrov α a β ilustrujú mapy na Obr. 13. Pre malé hodnoty α a veľké hodnoty β dosahujú hodnoty permeability vysoké hodnoty. Médium je v tomto prípade priepustnejšie a dochádza k jeho rýchlejšiemu zhutňovaniu. Naopak, pri veľkých hodnotách parametra α a malých hodnotách β je permeabilita nižšia, pričom médium zhutňuje pomalšie.



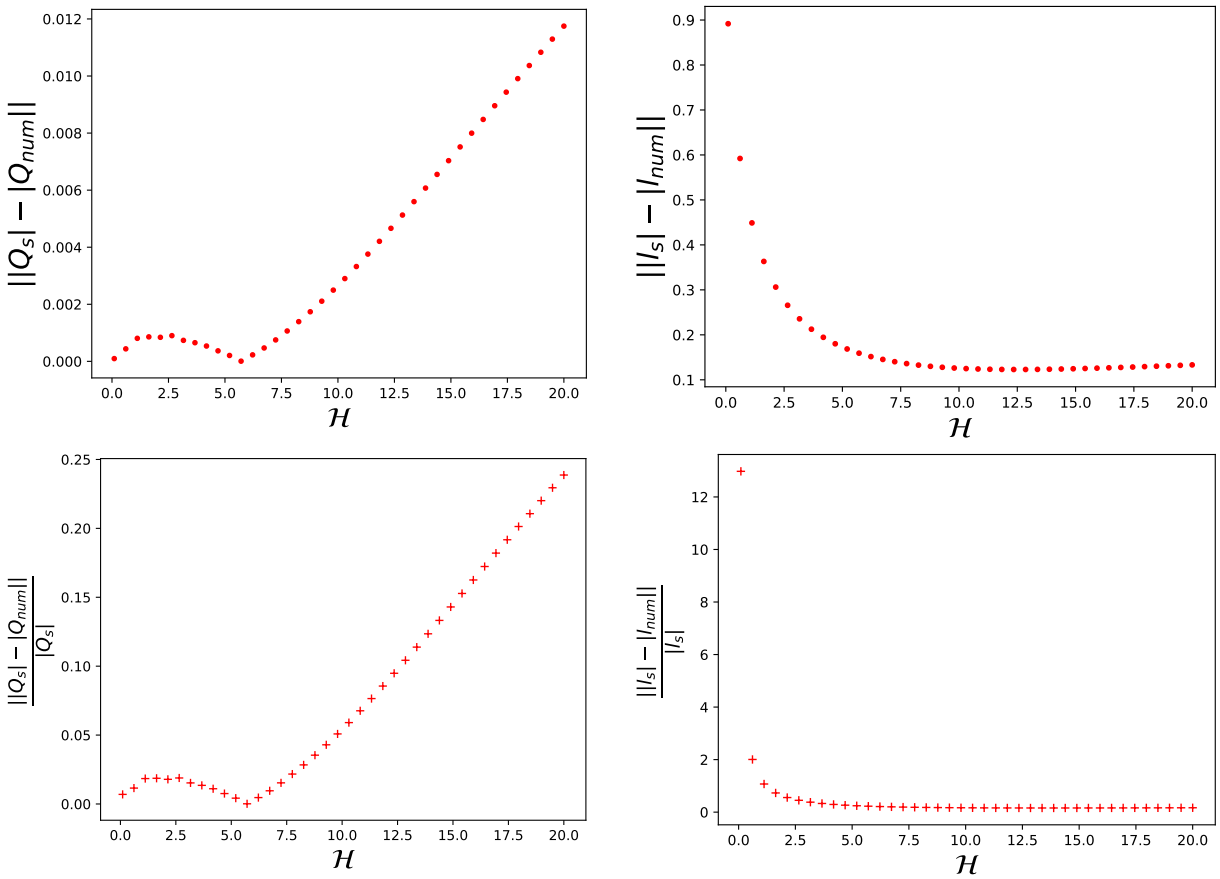
Obr. 3: Závislosť $|Q|$ od času t.



Obr. 4: Závislosť l od času t.

Grafy na Obr. 7 zobrazujú priebeh permeability $\phi(\zeta,-\tilde{t})$ v jednotlivých časových okamihoch pre rôzne hodnoty parametrov α a β. Ide o simuláciu relaxácie média. Médium začína v ustálenom kompaktnom stave a postupne relaxuje do počiatočného stavu pred zhutňovaním, teda $\phi(\zeta,0) = \Phi$. Tento jav sa nazýva hysteréza a je charakteristický pre uvažovaný dvojfázový deformovateľný systém [Hewitt et al., 2016].

Ďalej analyzujeme rýchlostné polia a tlakové

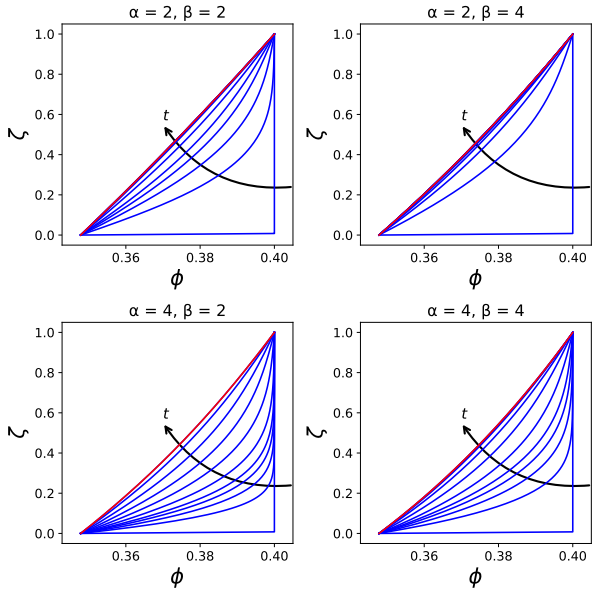


Obr. 5: Absolútne (horný riadok) a relatívne (dolný riadok) chyby Darcyho toku Q_s a hĺbky pórovitého média l_s v závislosti od parametra $\mathscr{H}$, určené pre čas $t = 3$ a referenčnú pórovitosť $\Phi = 0.4$.

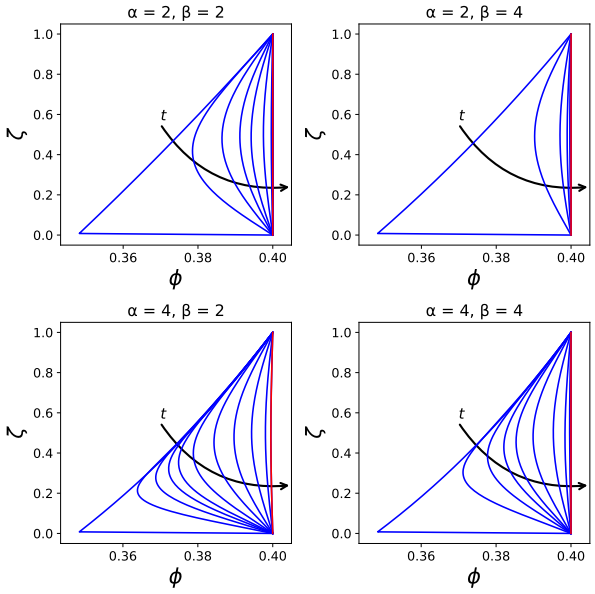
závislosti pre prípad zovšeobecneného Kozenyho–Carmanovho permeabilitného vzťahu. Na Obr. 8 sú zobrazené závislosti rýchlosti kvapaliny v póroch $w_f(\zeta,\tilde{t})$ od polohy v médiu počas zhutňovania. Pozorujeme, že pri malých hodnotách parametra α rýchlosť pomerne rýchlo konverguje k ustálenej hodnote. Naopak, pri veľkých hodnotách parametra α trvá dlhšie, kým sa rýchlosť ustáli. Pre prípad $\alpha = 4$, $\beta = 2$ sa rýchlosť v momente po odňatí mriežky začne ustaľovať tesne nad bázou média. Dôvodom je, že pórovitosť sa v tejto oblasti prakticky nemení. Naopak, pri $\alpha = 2$, $\beta = 4$ sa rýchlosť po odňatí mriežky ustaľuje až tesne pod povrchom média, pretože práve tam má funkcia pórovitosti $\phi(\zeta,\tilde{t})$ najmenší sklon. Funkcia $w_f(\zeta,\tilde{t})$ je záporná, pretože tok kvapaliny v našom geometrickom usporiadaní smeruje proti osi ζ. Pri modeli s parametrami $\alpha = 2$, $\beta = 4$ pozorujeme, že rýchlosť pri povrchu média počas zhutňovania postupne klesá.

Grafy na Obr. 9 znázorňujú priebeh rýchlosti tuhej zložky média $w_s(\zeta,\tilde{t})$ pri rôznych hodnotých parametrov α a β. Pre malé hodnoty α rýchlosť konverguje k ustálenej hodnote rýchlejšie ako pri veľkých hodnotách tohto parametra. Rýchlosť tuhej zložky je záporná, teda smeruje proti osi ζ. S narastajúcim časom konverguje k nule, čo znamená, že tuhá matrica sa prestáva deformovať a médium dosahuje ustálený stav. Z grafu na Obr. 9 je zrejmé, že v prvých časových okamihoch sa rýchlosť tuhej zložky ustaľuje smerom od bázy média. To naznačuje, že zhutňovanie média prebieha od bázy smerom k povrchu.

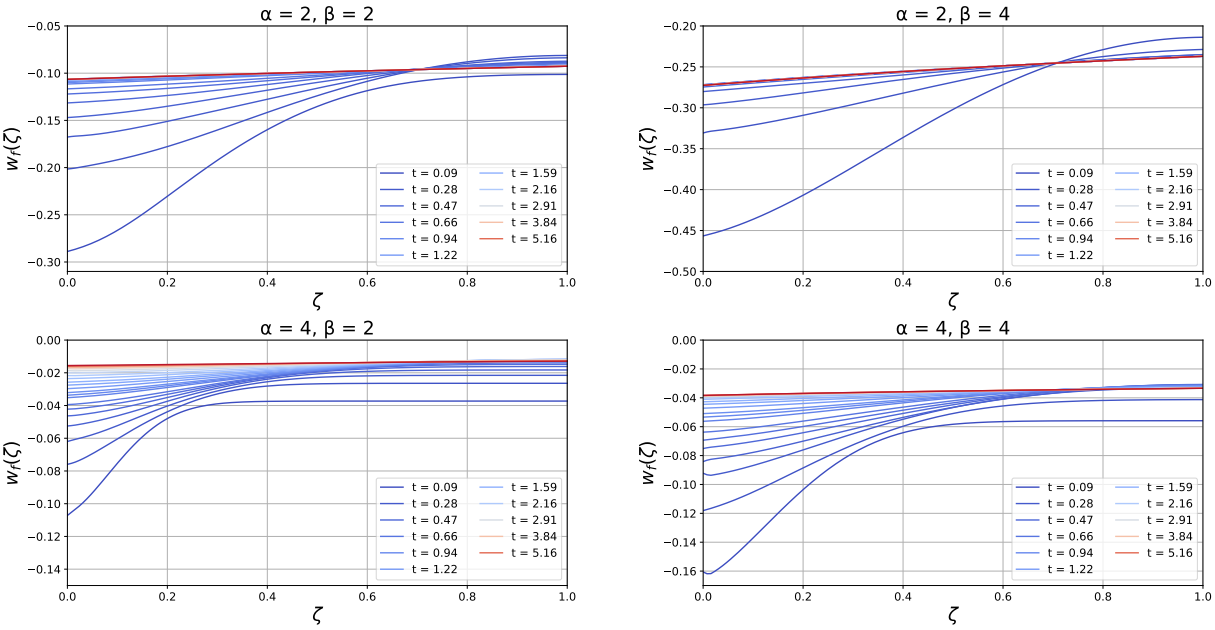
Na Obr. 10, 11 a 12 sú znázornené závislosti jednotlivých tlakov pôsobiacich na médium pre rôzne hodnoty parametrov α a β. Všetky tri tlaky konvergujú pri veľkých časoch k ustáleným hodnotám. Z grafu na Obr. 10, ktorý zobrazuje tlak kvapaliny v póroch $p(\zeta,\tilde{t})$, vidíme, že tlak rastie naprieč médiom. Krátko po odňatí mriežky je tlakový gradient kvapaliny v póroch najväčší pre parametre $\alpha = 4$ a $\beta = 2$, zatiaľ čo najmenší je pre $\alpha = 2$ a $\beta = 4$. Tento roz-



Obr. 6: Priebeh $\phi(\zeta,t)$.



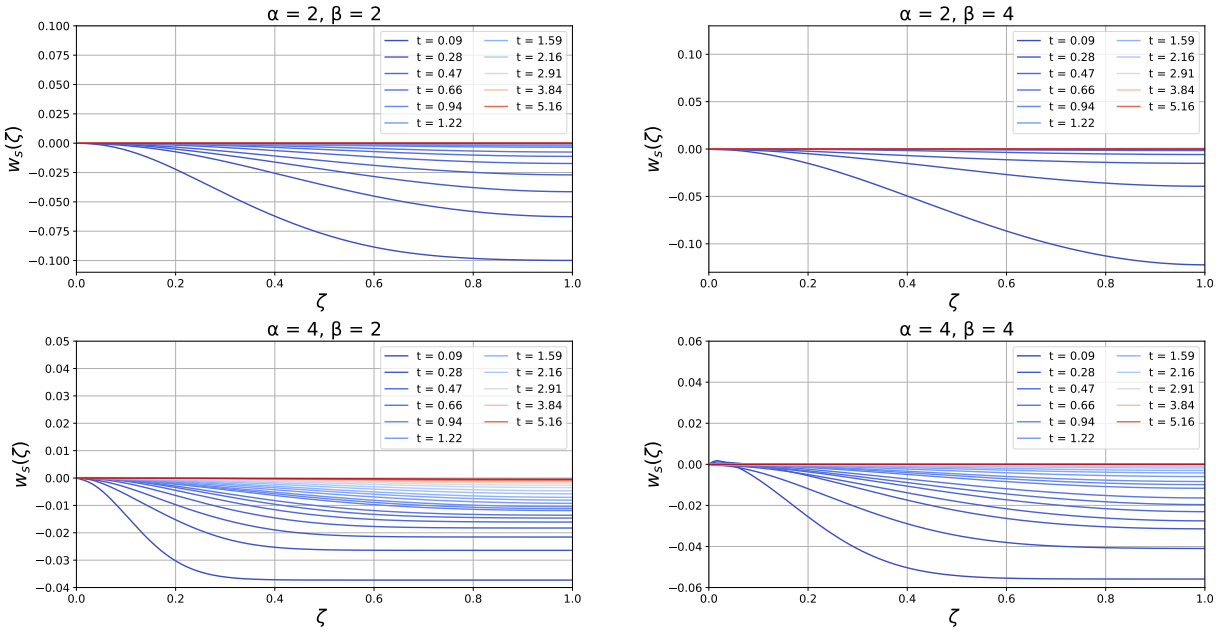
Obr. 7: Priebeh $\phi(\zeta,-t)$.



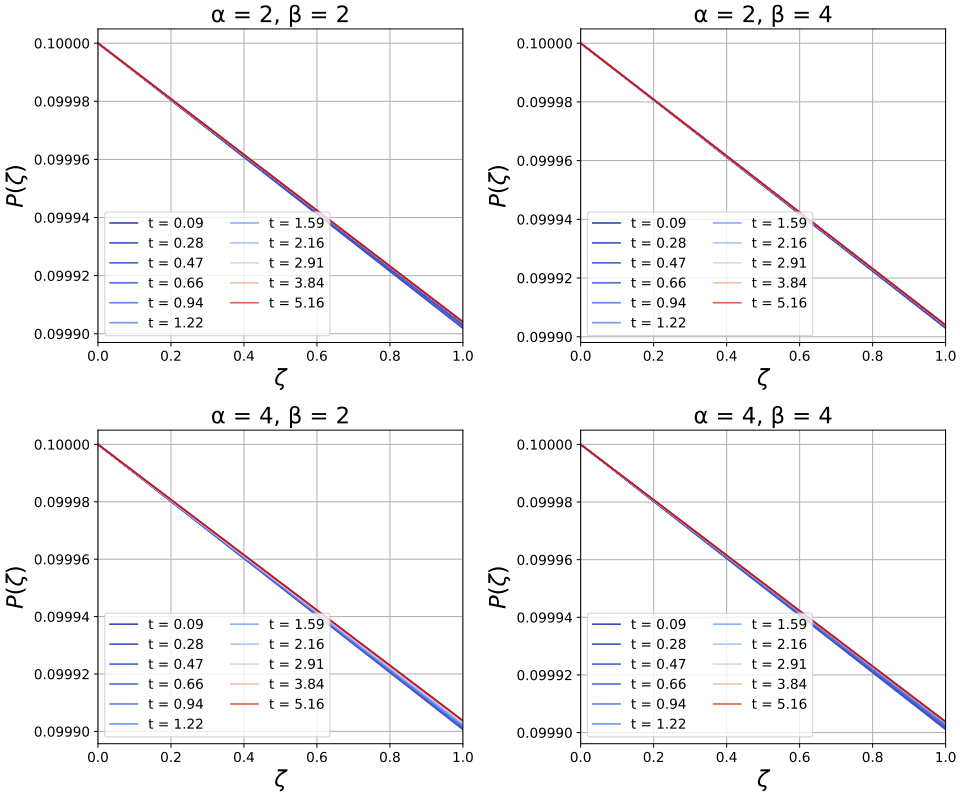
Obr. 8: Priebeh $w_f(\zeta,t)$ pre $\mathscr{H} = 0.1$.

diel je dôsledkom toho, že rozdiel rýchlostí $w_s - w_f$ je menší v prvom prípade než v druhom. Pre parametre $\alpha = 2$, $\beta = 2$ je tlakový gradient v ustálenom stave rovnomerný naprieč médiom. V ostatných prípadoch je pri báze média priestorový gradient tlaku v póroch väčší než v ostatných častiach média. To znamená, že aj v čase $t = 5.16$, keď je systém už blízko ustáleného stavu, stále dochádza k zhutňovaniu média.

Grafy na Obr. 11 zobrazujú celkový termodynamický tlak, známy aj ako Biotov alebo Terzaghiho tlak. Tento tlak vyjadruje množstvo sily pôsobiacej na prierez média. Na grafoch vidíme, že tlak P klesá s priestorovou premennou ζ. So zvyšujúcou sa hodnotou parametra β tlak P konverguje rýchlejšie k ustálenej hodnote, zatiaľ čo so zväčšujúcou sa hodnotou α konverguje pomalšie. Klesajúci charakter tlaku vy-



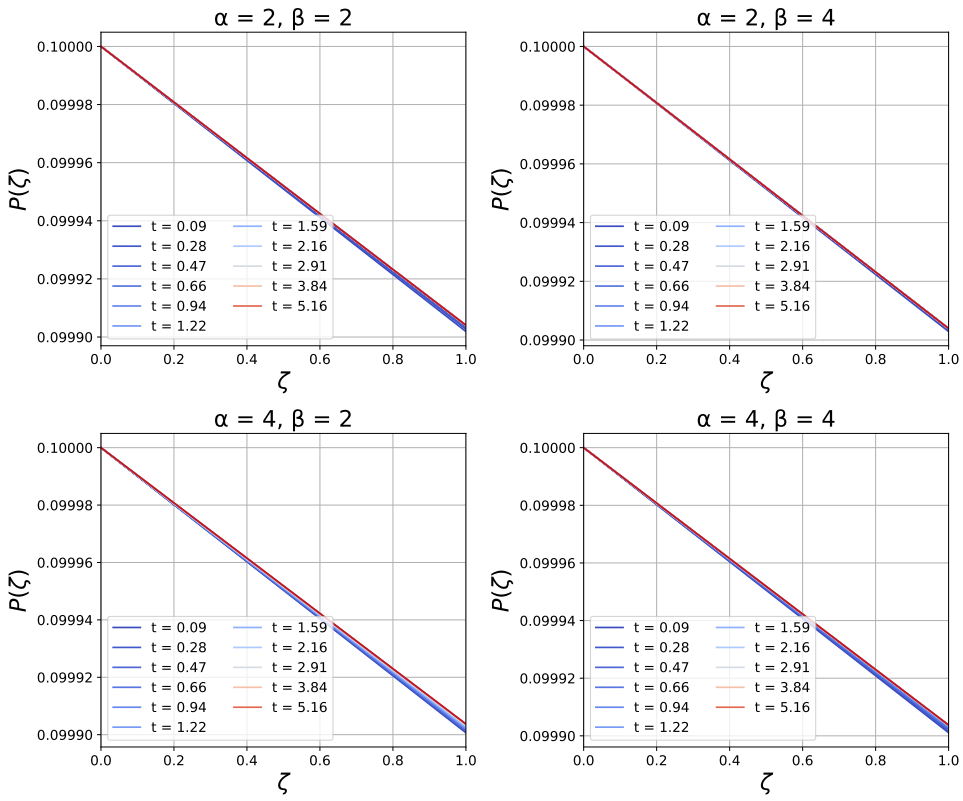
Obr. 9: Priebeh $w_s(\zeta,t)$ pre $\mathscr{H} = 0.1$.



Obr. 10: Priebeh $p(\zeta,t)$ pre $\mathscr{H} = 0.1$.

plýva z rovnice rovnováhy kontinua, čo znamená, že najväčšia sila pôsobí pri báze média a najmenšia pri jeho povrchu.

Obr. 12 zobrazuje vývoj tlaku na matricu média σ

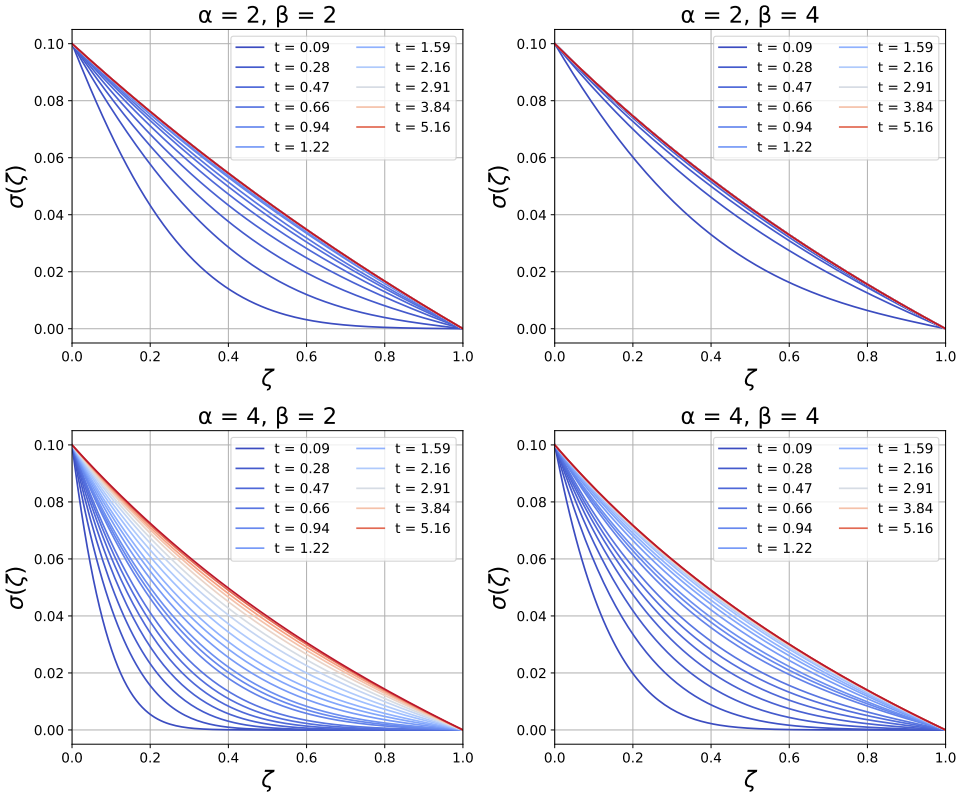


Obr. 11: Priebeh $P(\zeta,t)$ pre $\mathscr{H} = 0.1$.

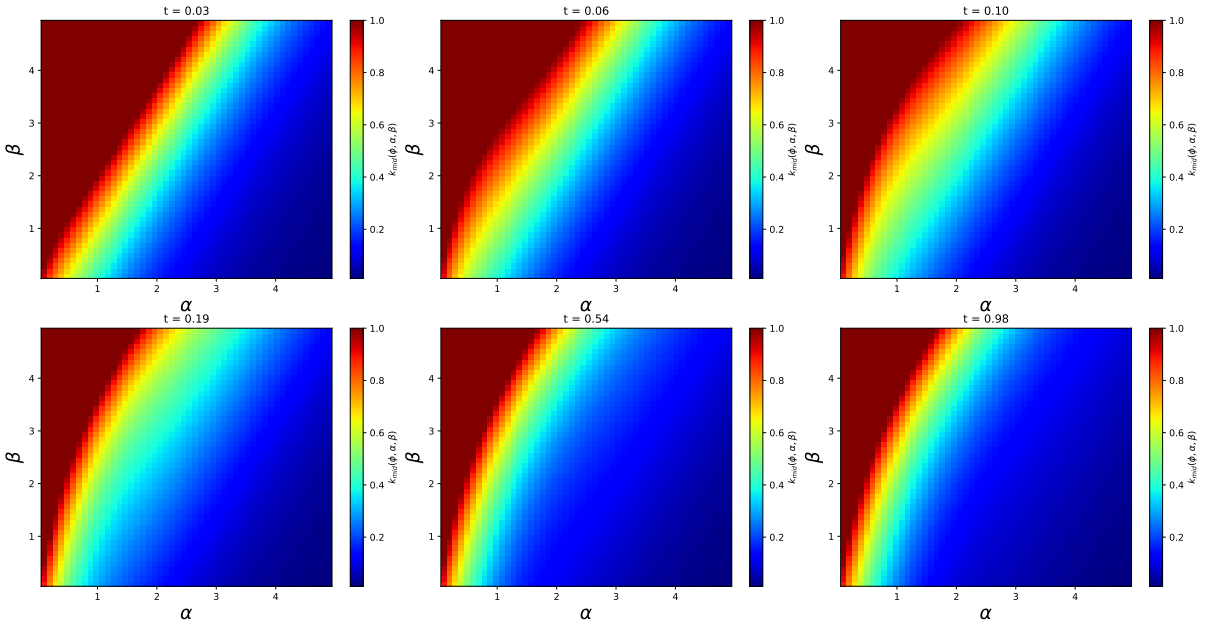
v závislosti od polohy v médiu, pričom tlak je definovaný vzťahom (2.20). Hodnoty tlaku σ naprieč médiom klesajú. Tento pokles je spôsobený nárastom pórovitosti média ϕ.

5 Záver

V tomto príspevku sme zovšeobecnili a systematicky analyzovali model toku a deformácie pórovitého média, ktorý bol predstavený v štúdii [Hewitt et al., 2016]. Zavedením bezrozmerných parametrov sme odvodili sústavu parciálnych diferenciálnych rovníc s príslušnými okrajovými podmienkami na konečnej oblasti. Následne sme aplikovali Landauovu transformáciu, ktorá umožnila prevod problému s voľnou hranicou na fixovanú oblasť. Rovnice sme diskretizovali metódou konečných diferencií v priestorovej oblasti, čím sme získali systém obyčajných diferenciálnych rovníc v čase. Numerické riešenie diskretizovaného systému sme realizovali pomocou solvera implementovaného pre zovšeobecnený Kozenyho–Carmanov permeabilitný vzťah média. Analýza výsledkov preukázala, že pre vyššie hodnoty parametra α dochádza k pomalšej konvergencii riešení k ustálenému stavu so znižujúcou sa hodnotou parametra β. Inými slovami, v prípade, že parameter β v menovateli funkcie $k(\phi;\alpha,\beta)$ prevyšuje parameter α v jej čitateli, hodnota permeability je vysoká a riešenia dosahujú ustálený stav rýchlejšie. Ďalšie podrobnosti a výsledky týkajúce sa závislosti tlakových a rýchlostných polí od bezrozmerného tlaku $\mathscr{H}$ sú prezentované v bakalárskej práci [Mikloš, 2025].



Obr. 12: Priebeh $\sigma(\zeta,t)$ pre $\mathscr{H} = 0.1$.



Obr. 13: Na mapách je znázornený priebeh permeability $k(\phi;\alpha,\beta)$ zovšeobecneného Kozeny–Carmanovho modelu vo vyznačených časových okamihoch.

Literatúra

[Henderson et al., 2010] Henderson, N., Brêttas, J. C., and Sacco, W. F. (2010). A three-parameter Kozeny–Carman generalized equation for fractal porous media. *Chem. Eng. Sci.*, 65(15):4432–4442.

[Hewitt et al., 2016] Hewitt, D. R., Nijjer, J. S., Worster, M. G., and Neufeld, J. A. (2016). Flow-induced compaction of a deformable porous medium. *Phys. Rev. E*, 93:023116.

[Mikloš, 2025] Mikloš, M. (2025). Deformácia pórovitého média vplyvom toku (bakalárska práca, v príprave).

[Webber et al., 2023] Webber, J. J., Etzold, M. A., and Worster, M. G. (2023). A linear-elastic–nonlinear-swelling theory for hydrogels. Part 2. Displacement formulation. *J. Fluid Mech.*, 960:A38.

[Webber and Worster, 2023] Webber, J. J. and Worster, M. G. (2023). A linear-elastic–nonlinear-swelling theory for hydrogels. Part 1. Modelling of super-absorbent gels. *J. Fluid Mech.*, 960:A37.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 291–301
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Patrik Mäsiar

Pravouhlé trojuholníky s pomerom odvesien takmer n

Patrik Mäsiar[1*]

Školiteľ: Martin Sleziak[2†]

[1] Katedra didaktiky matematiky, fyziky a informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2] Katedra algebry a geometrie, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt: V článku sa venujeme najmä primitívnym pravouhlým trojuholníkom s pomerom odvesien takmer $n \in \mathbb{N}$. Najprv sa zaoberáme trojuholníkmi s pomerom odvesien takmer $n = 1$, kde využijeme Pellove čísla, potom sa venujeme trojuholníkom s pomerom odvesien takmer $n = 2$, kde naopak využijeme Fibonacciho postupnosť. Následne sa zaoberáme odvodením všeobecne pre n. V ďalšej časti upustíme od primitívnosti, aby sme mohli využiť všetky členy Fibonacciho postupnosti, čo tiež odvodíme všeobecne.

Kľúčové slová: pravouhlý trojuholník, Pellove čísla, Fibonacciho postupnosť, postupnosť

Úvod

Na začiatok si potrebujeme uviesť, že sa ideme venovať riešeniam rovnosti $a^2 + b^2 = c^2$ v prirodzených číslach, ktoré voláme pytagorejské trojice. Ak by sme jednotlivé čísla vnímali ako dĺžky strán trojuholníka, ich narysovaním by sme skonštruovali pravouhlý trojuholník. V prípade, ak sú strany trojuholníka navzájom nesúdeliteľné, hovoríme o primitívnych pytagorejských trojuholníkoch. Primitívne trojuholníky môžeme považovať za bázové trojuholníky celej triedy, pretože ich násobkami vieme vygenerovať všetky ostatné pytagorejské trojice. Primitívne trojuholníky vieme rozdeliť do rôznych podmnožín určitej vlastnosti, ako napríklad tie, ktorých rozdiel medzi preponou a párnou odvesnou je 1. V tomto príspevku sa ale budeme venovať iným podmnožinám primitívnych trojuholníkov.

1 Takmer rovnoramenné trojuholníky

Jednou z takých podmnožín sú primitívne trojuholníky s rozdielom odvesien $|a - b| = 1$. Spomenieme viacero rôznych spôsobov, ako môžeme generovať takéto trojuholníky, no zameriame sa hlavne na (s, k)-parametrizáciu, pretože ju využijeme v neskorších častiach práce.

1.1 Iné spôsoby generovania

Konkrétne uvedieme spôsob, ktorý nás motivoval, aby sme sa začali venovať tejto problematike. Ďalšie spôsoby kvôli nedostatku priestoru iba spomenieme. Prvý spôsob sa nachádza v [Sierpiński, 2003, 4.6], kde je uvedený aj dôkaz. Vzťahy generujúce konkrétne strany trojuholníkov sú

$$\begin{aligned} x_n &= 3x_{n-1} + 2z_{n-1} + 1 \\ y_n &= 3x_{n-1} + 2z_{n-1} + 2 \\ z_n &= 4x_{n-1} + 3z_{n-1} + 2, \end{aligned}$$

kde x je menšia z odvesien a

$$x_1 = 3, \;\; y_1 = 4, \;\; z_1 = 5.$$

Ako vidíme, trojuholníky dostávame rekurentne. Iný spôsob je napríklad pomocou štvorcových trojuholníkových čísel v [Nyblom, 1998]. V [Chen and Peng, 1995] sa využíva úprava Pytagorovej vety využitím skutočnosti, že rozdiel medzi odvesnami je 1. Pri úpravách dôjdeme ku Pellovým číslam (pomocou nich sa racionálne aproximuje $\sqrt{2}$), ktoré sa využijú v odvodených vzťahoch. Konkrétne Pellove čísla využíva metóda v [Forget and Larkin, 1968].

1.2 Generovanie pomocou (s,k)-parametrizácie

Teraz odvodíme takmer rovnoramenné trojuholníky pomocou (s,k)-parametrizácie, ktorej sme sa venovali v bakalárskej práci a využívame ju aj v diplomovej práci.

Tvrdenie 1. *Strany pravouhlého trojuholníka, kde c je prepona, dostaneme pomocou parametrov $s,k \in \mathbb{R}^+$ a rovníc*

$$\begin{aligned} a &= s(s+2k) = 2sk + s^2, \\ b &= 2k(s+k) = 2sk + 2k^2, \\ c &= b + s^2 = a + 2k^2 = (s+k)^2 + k^2 = 2sk + s^2 + 2k^2. \end{aligned} \tag{1}$$

*masiar17@uniba.sk
†martin.sleziak@fmph.uniba.sk

Ak $s,k \in \mathbb{N}$ a platia podmienky $\mathrm{NSD}(s,k)=1$ *a parameter s prebieha všetky nepárne čísla, dostaneme primitívny pytagorejský trojuholník.*

Túto parametrizáciu podrobnejšie rozoberáme v spomínanej bakalárskej práci [Mäsiar, 2023], no iné odvodenie sa nachádza aj v [Overmars et al., 2019]. Trojuholníky vieme využitím parametrizácie usporiadať ako v tabuľke 1. Vytvorili sme aj online

	$s=1$	$s=3$	$s=5$
k \ n	1	2	3
1	(4,3,5)	(8,15,17)	(12,35,37)
2	(12,5,13)	(20,21,29)	(28,45,53)
3	(24,7,25)	(36,27,45)	(48,55,73)
4	(40,9,41)	(56,33,65)	(72,65,97)

Tabuľka 1: Generátor primitívnych trojuholníkov

generátor, ktorý nám po zadaní parametrov s a k vygeneruje niekoľko blízkych trojuholníkov. Odkaz na generátor je: `https://bit.ly/Generator_pravouhlych_trojuholnikov`.

Vieme, že pomer odvesien má byť takmer n, pričom odvesny vieme vyjadriť pomocou parametrov (1). Avšak hodnota parametrov je závislá od strán. Preto nás zaujíma, v akom pomere sú parametre s a k, čím eliminujeme vplyv konkrétnych strán trojuholníka. Zistíme si pomer parametrov, ak je pomer odvesien presne n (odvádzame to rovno všeobecne, aby sme ušetrili priestor). Chceme, aby bola „nepárna“ odvesna väčšia.

$$\begin{aligned} 2sk+s^2 = nb \Rightarrow k = \frac{nb-s^2}{2s} \\ 2sk+2k^2 = b. \end{aligned} \tag{2}$$

Dosadením vyjadreného k do druhej rovnice dostávame

$$\begin{aligned} nb-s^2+\frac{n^2b^2-2nbs^2+s^4}{2s^2} &= b \\ n^2b^2-s^4 &= 2bs^2 \\ s^4+2bs^2-n^2b^2 &= 0. \end{aligned}$$

Po položení substitúcie $t=s^2$ dostávame kvadratickú rovnicu. Jej odmocnina z diskriminantu sa rovná $\sqrt{D}=2\sqrt{n^2+1}\cdot b$. Kladné riešenie pre parameter s vychádza

$$s=\sqrt{b\left(\sqrt{n^2+1}-1\right)}.$$

Dosadíme do (2) a vyjadríme druhý parameter k

$$k=\frac{nb-b\left(\sqrt{n^2}-1\right)}{2\sqrt{b\left(\sqrt{n^2+1}-1\right)}}=\frac{b\left(n+1-\sqrt{n^2+1}\right)}{2\sqrt{b\left(\sqrt{n^2+1}-1\right)}}.$$

Teraz dáme parametre do pomeru, aby sme odstránili stranu b

$$\begin{aligned} \frac{s}{k} &= \frac{\sqrt{b\left(\sqrt{n^2+1}-1\right)}}{\frac{b\left(n+1-\sqrt{n^2+1}\right)}{2\sqrt{b\left(\sqrt{n^2+1}-1\right)}}} = \frac{2b\left(\sqrt{n^2+1}-1\right)}{b\left(n+1-\sqrt{n^2+1}\right)} \\ &= \frac{2\left(\sqrt{n^2+1}-1\right)}{(n+1)-\sqrt{n^2+1}}\cdot\frac{(n+1)+\sqrt{n^2+1}}{(n+1)+\sqrt{n^2+1}} \\ &= \frac{2\left[(n+1)\sqrt{n^2+1}+n^2+1-(n+1)-\sqrt{n^2+1}\right]}{n^2+2n+1-n^2-1} \\ &= \frac{2\left(n\sqrt{n^2+1}+n^2-n\right)}{2n} = \sqrt{n^2+1}+n-1. \end{aligned} \tag{3}$$

Dostali sme pomer parametrov, keď je „nepárna“ odvesna z (1) n-krát väčšia. Všeobecný výsledok nie je veľmi príťažlivý, no po dosadení $n=1$ dostávame $\frac{s}{k}=\sqrt{2}$. Z toho vyplýva, že aj pri takmer rovnoramenných trojuholníkoch budú parametre aproximovať $\sqrt{2}$. O tom, že môžeme využiť Pellove čísla sa presvedčíme pri rozdiele odvesien

$$\begin{aligned} |a-b| &= 1 \\ |2sk+s^2-(2sk+2k^2)| &= 1 \\ |s^2-2k^2| &= 1, \end{aligned}$$

kde dostávame Pellovu rovnicu. Môžeme sa o nej viac dozvedieť napríklad v [Burton, 2007]. Niekoľko prvých aproximácii $\sqrt{2}$.

$$\frac{1}{1},\ \frac{3}{2},\ \frac{7}{5},\ \frac{17}{12},\ \cdots \tag{4}$$

Sú to trojuholníky

1) 4, 3, 5
2) 20, 21, 29
3) 120, 119, 169
4) 696, 697, 985.

2 Primitívne trojuholníky s takmer n-násobnou dĺžkou odvesny

Teraz dosadíme niekoľko konkrétnych n do vzťahu 3, aby sme videli, ako sa správajú pomery s číslami.

2.1 Primitívne trojuholníky s takmer 2-násobnou dĺžkou odvesny

Prirodzene sa budeme venovať trojuholníkom s $n = 2$. Po vyčíslení (3) dostávame zaujímavý výsledok

$$\frac{s}{k} = \sqrt{2^2+1}+2-1 = 1+\sqrt{5} = 2\varphi.$$

Vidíme, že pre trojuholníky s dvojnásobnou odvesnou sa v pomere parametrov vyskytuje zlatý pomer φ, teda pre takmer dvojnásobnú odvesnu budú parametre aproximovať φ. Využijeme Fibonacciho postupnosť, pretože pomer po sebe idúcich členov racionálne aproximuje φ.

$$1,\ 1,\ 2,\ 3,\ 5,\ 8,\ 13,\ 21,\ 34,\ 55,\ 89,\ 144,\ 233,\ \ldots$$

Problém ale nastáva, že Fibonacciho postupnosť aproximuje φ, no nám vyšiel pomer 2φ. S tým sa vysporiadame malou úpravou

$$\frac{s}{k} = 2\varphi \doteq 2\cdot\frac{F_m}{F_{m-1}} = \frac{F_m}{\frac{F_{m-1}}{2}}. \tag{5}$$

Dostávame teda, že v menovateli bude musieť byť párny člen Fibonacciho postupnosti, ak chceme zachovať primitívnosť. A teda budú niektoré členy vynechané

$$\boxed{1,}\ \boxed{1,}\ 2,\ 3,\ \boxed{5,}\ 8,\ 13,\ \boxed{21,}\ 34,\ 55,\ \boxed{89,}\ 144,\ 233,\ \ldots \tag{6}$$

Prvé trojuholníky s takmer dvojnásobnou odvesnou majú parametre

$$\frac{3}{1},\ \frac{13}{4},\ \frac{55}{17},\ \frac{233}{72},\ \ldots \tag{7}$$

Konkrétne to sú

1) 8, 15, 17
2) 136, 273, 305
3) 2 448, 4 895, 5 473
4) 43 920, 87 841, 98 209,

kde si môžeme všimnúť rovnosť $|a-2b| = 1$.

2.2 Primitívne trojuholníky s takmer 3-násobnou dĺžkou odvesny

Po dosadení $n = 3$ do vzťahu (3) vidíme, že už nemôžeme použiť žiadnu postupnosť, ktorá by (podľa našich vedomostí) mala špecifický názov.

$$\frac{s}{k} = \sqrt{3^2+1}+3-1 = 2+\sqrt{10}$$

Trojuholníky s takmer trojnásobnou odvesnou musíme teda hľadať manuálne, a prvé pomery sú

$$\frac{5}{1},\ \frac{31}{6},\ \frac{191}{37},\ \frac{1177}{228},\ \ldots \tag{8}$$

Tie zodpovedajú trojuholníkom

1) 12, 35, 37
2) 444, 1 333, 1 405
3) 16 872, 50 615, 53 353
4) 640 680, 1 922 041, 2 026 009.

Tu si môžeme všimnúť rovnosť $|a-3b| = 1$, z čoho sa všeobecne javí

$$|a-nb| = 1. \tag{9}$$

3 Všeobecné vyjadrenie primitívnych trojuholníkov s takmer n-násobnou odvesnou

Aby sme nemuseli jednotlivé pomery pre $n \geq 3$ hľadať manuálne, v tejto časti sa vyjadríme pomery všeobecne pre n použitím rekurencie a taktiež odvodíme rovnosť pre ľubovoľný parameter.

3.1 Rekurentné odvodenie

Keď sa bližšie pozrieme na pomery (4), (7) a (8), môžeme si všimnúť, že pre parametre platí:

- pre $n = 1$

$$\begin{aligned} s_m &= 2s_{m-1}+s_{m-2} \\ k_m &= 2k_{m-1}+k_{m-2}, \end{aligned}$$

- pre $n = 2$

$$\begin{aligned} s_m &= 4s_{m-1}+s_{m-2} \\ k_m &= 4k_{m-1}+k_{m-2}, \end{aligned}$$

- pre $n = 3$

$$\begin{aligned} s_m &= 6s_{m-1}+s_{m-2} \\ k_m &= 6k_{m-1}+k_{m-2}, \end{aligned}$$

s počiatočnými podmienkami $s_1 = 2n-1$, $s_0 = 1$, $k_1 = 1$, $k_0 = 0$. Z rovností vieme navrhnúť rekurentný vzťah pre ľubovoľné n

$$\begin{aligned} s_m &= 2ns_{m-1}+s_{m-2} \\ k_m &= 2nk_{m-1}+k_{m-2}. \end{aligned} \tag{10}$$

Ak pri nasledujúcom parametri dovolíme miešanie predchádzajúcich parametrov, môžeme si všimnúť ďalší rekurentný vzťah

$$\begin{aligned} n=1 &\rightsquigarrow \frac{1}{1}, \frac{3}{2}, \frac{7}{5}, \frac{17}{12}, \cdots, \frac{s_{m-1}+2k_{m-1}}{s_{m-1}+k_{m-1}} \\ n=2 &\rightsquigarrow \frac{3}{1}, \frac{13}{4}, \frac{55}{17}, \frac{233}{72}, \cdots, \frac{3s_{m-1}+4k_{m-1}}{s_{m-1}+k_{m-1}} \\ n=3 &\rightsquigarrow \frac{5}{1}, \frac{31}{6}, \frac{191}{37}, \frac{1177}{228}, \cdots, \frac{5s_{m-1}+6k_{m-1}}{s_{m-1}+k_{m-1}}, \end{aligned} \tag{11}$$

kde sú počiatočné podmienky $s_1 = 2n-1$, $k_1 = 1$. Všeobecne pre n odvodíme

$$\begin{aligned} s_m &= (2n-1)s_{m-1} + 2nk_{m-1} = s_1 s_{m-1} + 2nk_{m-1} \\ k_m &= s_{m-1} + k_{m-1}. \end{aligned} \tag{12}$$

Pomocou rovníc pre k_m zo vzťahov (10) a (12) odvodíme tretiu rovnosť pre s_m

$$\begin{aligned} 2nk_{m-1} + k_{m-2} &= s_{m-1} + k_{m-1} \\ s_{m-1} &= (2n-1)k_{m-1} + k_{m-2} \\ &= s_1 k_{m-1} + k_{m-2} \\ s_m &= (2n-1)k_m + k_{m-1} = s_1 k_m + k_{m-1}. \end{aligned} \tag{13}$$

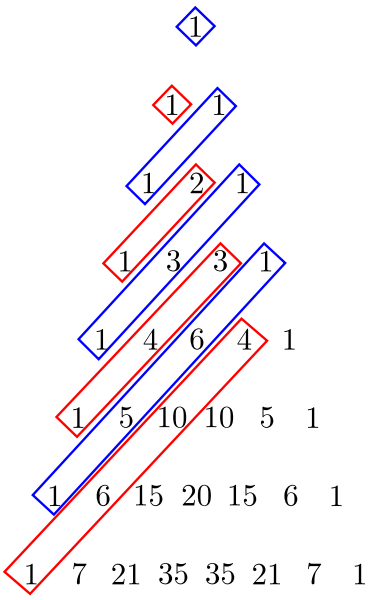
Navrhli sme viacero rekurencií (10), (12) a (13), ako dostaneme nasledujúci parameter.

3.2 Všeobecný vzťah pre parametre

Na odvodenie vzťahu vypíšeme si niekoľko prvých členov, aby si mohli všimnúť postupnosť. Začneme vzťahom pre parameter k.

$$\begin{aligned} k_1 &= 1 \\ k_2 &= 2n \\ k_3 &= (2n)^2 + 1 \\ k_4 &= (2n)^3 + 2 \cdot 2n \\ k_5 &= (2n)^4 + 3(2n)^2 + 1 \\ k_6 &= (2n)^5 + 4(2n)^3 + 3 \cdot 2n \end{aligned}$$

Môžeme si všimnúť, že koeficienty pred $2n$ idú po diagonálach v Pascalovom trojuholníku ako na obrázku 1, ktorých súčet nám dáva Fibonacciho postupnosť. Exponenty pri jednotlivých členoch $2n$ zas znižujú svoju hodnotu o 2, pričom vedúci člen má exponent $m-1$, kde m označuje poradie trojuholníka s daným násobkom odvesny. S týmito poznatkami vieme



Obr. 1: Pascalov trojuholník s vyznačenými koeficientmi

odvodiť rovnicu pre ľubovoľný parameter k

$$\begin{aligned} k_m &= \binom{m-1}{0}(2n)^{m-1} + \binom{m-2}{1}(2n)^{m-3} + \ldots + \\ &\quad + \binom{m-1-v}{v}(2n)^{m-1-2v} \\ &= \sum_{i=0}^{v} \binom{m-1-i}{i}(2n)^{m-1-2i}, \end{aligned} \tag{14}$$

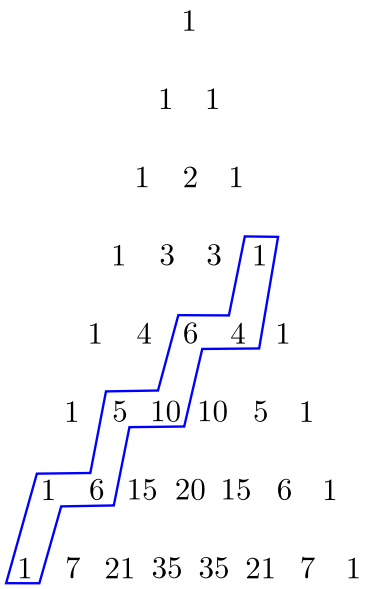
kde $v \in \mathbb{N}_0$ a

$$v = \frac{m-1}{2} \quad \vee \quad v = \frac{m-2}{2}.$$

Pre parameter s majú prvé členy rozvoj

$$\begin{aligned} s_1 &= 2n-1 \\ s_2 &= 2ns_1 + 1 \\ s_3 &= (2n)^2 s_1 + 2n + s_1 \\ s_4 &= (2n)^3 s_1 + (2n)^2 + 2 \cdot 2ns_1 + 1 \\ s_5 &= (2n)^4 s_1 + (2n)^3 + 3(2n)^2 s_1 + 2 \cdot 2n + s_1 \\ s_6 &= (2n)^5 s_1 + (2n)^4 + 4(2n)^3 s_1 + 3(2n)^2 + 3 \cdot 2ns_1 + 1. \end{aligned}$$

Môžeme si všimnúť, že s_1 sa vyskytuje pri každom druhom člene, čo naznačuje, že by mohlo ísť o súčet dvoch radov – jeden vynásobený parametrom a druhý bez, čo by mohlo vychádzať z rovnosti (13). Pri takto roztriedenom súčte dostaneme rovnaký princíp, ako



Obr. 2: Pascalov trojuholník s vyznačenými koeficientmi pre s_8

sme odvodili pre k v (14)

$$s_m = s_1 \sum_{i=0}^{v} \binom{m-1-i}{i} (2n)^{m-1-2i} + \\ + \sum_{i=0}^{v} \binom{m-2-i}{i} (2n)^{m-2-2i}. \tag{15}$$

Rovnica (15) platí pre $m \geq 2$. Pre $m = 1$ by sme museli druhý súčet radu ignorovať. Pre parameter s koeficienty v Pascalovom trojuholníku vyzerajú ako na obrázku 2.

Poznámka 2. *Na všeobecné poradie člena sme používali menej zvyčajné označenie m. Nebolo to z dôvodu, že sme označenie n začali používať skôr, ale z dôvodu, že n má pre nás väčší zmysel používať pri násobku odvesny trojuholníka, pretože súčasne označuje stĺpec v generátore 1, kde sa vždy v prvom riadku vyskytuje prvý trojuholník s požadovaným násobkom odvesny.*

3.3 Existencia riešení rekurencie

Ukážeme si dva spôsoby ako môžeme ukázať, že pomocou rekurencie (10) budeme skutočne dostávať riešenia $|a - nb| = 1$.

3.3.1 Pomocou koreňov charakteristickej rovnice

Rekurenciu (10) vieme prepísať na charakteristickú rovnicu

$$x^2 - 2nx - 1 = 0, \tag{16}$$

čo môžeme všeobecne nájsť napríklad v [Cull et al., 2005, Theorem 2.3.1] aj s dôkazom. Rovnosť (16) má korene α a β

$$\alpha = n + \sqrt{n^2+1}, \qquad \beta = n - \sqrt{n^2+1}.$$

Po jednoduchých matematických operáciach dostávame

$$\alpha + \beta = 2n, \qquad \alpha - \beta = 2\sqrt{n^2+1}, \qquad \alpha\beta = -1. \tag{17}$$

Vieme, že sa s_m aj k_m určite dajú vyjadriť ako lineárna kombinácia postupností α^m, β^m, teda v tvare

$$s_m = c_1\alpha^m + c_2\beta^m,$$
$$k_m = d_1\alpha^m + d_2\beta^m.$$

Z počiatočných podmienok potrebujeme zistiť, ako vyzerajú $c_{1,2}$ a $d_{1,2}$. Pre $m = 0$ a $m = 1$ dostávame všeobecne

$$x_1 + x_2 = a, \qquad \alpha x_1 + \beta x_2 = b.$$

(Označenia a, b nesúvisia so stranami trojuholníka.) Vyjadríme $x_{1,2}$.

$$x_1 = \frac{b - a\beta}{\alpha - \beta}, \qquad x_2 = \frac{a\alpha - b}{\alpha - \beta}$$

Počiatočné podmienky (a, b) pre našu postupnosť parametrov (10) máme $s_1 = 2n-1$, $s_0 = 1$, $k_1 = 1$, $k_0 = 0$, odkiaľ dostávame

$$c_1 = \frac{(2n-1)-\beta}{2\sqrt{n^2+1}} = \frac{\alpha - 1}{2\sqrt{n^2+1}} = \frac{n-1+\sqrt{n^2+1}}{2\sqrt{n^2+1}},$$
$$c_2 = \frac{\alpha-(2n-1)}{2\sqrt{n^2+1}} = -\frac{\beta-1}{2\sqrt{n^2+1}} = -\frac{n-1-\sqrt{n^2+1}}{2\sqrt{n^2+1}},$$
$$d_1 = \frac{1}{2\sqrt{n^2+1}},$$
$$d_2 = -\frac{1}{2\sqrt{n^2+1}}.$$

Pre postupnosti jednotlivých parametrov máme vyjadrenie

$$s_m = \frac{(\alpha-1)\alpha^m - (\beta-1)\beta^m}{2\sqrt{n^2+1}}, \\ k_m = \frac{\alpha^m - \beta^m}{2\sqrt{n^2+1}}. \tag{18}$$

Poznámka 3. *Z* (18) *si môžeme všimnúť, že platí*

$$s_m = k_{m+1} - k_m. \tag{19}$$

Keďže chceme rozdiel strán trojuholníka $a - nb$, parametricky dostávame vyjadrenie

$$2(1-n)sk + s^2 - 2nk^2.$$

Teraz dosadíme vyjadrenie parametrov (18)

$$2(1-n)\cdot\frac{(\alpha-1)\alpha^m-(\beta-1)\beta^m}{2\sqrt{n^2+1}}\cdot\frac{\alpha^m-\beta^m}{2\sqrt{n^2+1}}+$$
$$+\left(\frac{(\alpha-1)\alpha^m-(\beta-1)\beta^m}{2\sqrt{n^2+1}}\right)^2-2n\cdot\left(\frac{\alpha^m-\beta^m}{2\sqrt{n^2+1}}\right)^2.$$

Po úprave zistíme, že ostane len násobok $\alpha^m\beta^m$, čo ďalej upravíme pomocou (17)

$$\frac{2(n^2+1)\alpha^m\beta^m}{2(n^2+1)} = (-1)^m.$$

Takto sme ukázali, že rekurenciou dostávame riešenia $|a-nb| = 1$.

3.3.2 Pomocou matíc

K požadovanému výsledku sa vieme dostať aj iným spôsobom využitím (10) a (19)

$$\begin{aligned}
&2(1-n)s_mk_m + s_m^2 - 2nk_m^2 = \\
&= 2s_mk_m + s_m^2 - 2n(s_mk_m + k_m^2) \\
&= s_m(2k_m + s_m) - 2n(s_m + k_m)k_m \\
&= (k_{m+1} - k_m)(k_{m+1} + k_m) - 2nk_{m+1}k_m \\
&= (k_{m+1} - k_m)(k_{m+1} + k_m) - (k_{m+2} - k_m)k_m \\
&= k_{m+1}^2 - k_m^2 - k_{m+2}k_m + k_m^2 \\
&= k_{m+1}^2 - k_{m+2}k_m.
\end{aligned} \tag{20}$$

Dostali sme rovnicu, ktorá nám na prvý pohľad nepomohla, ale jej význam čoskoro ukážeme. Rekurenciu (10) si vieme napísať pomocou matíc

$$\begin{pmatrix} k_m \\ k_{m-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2n & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} k_{m-1} \\ k_{m-2} \end{pmatrix},$$

respektíve

$$\begin{pmatrix} k_m \\ k_{m-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2n & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^m\begin{pmatrix} k_1 \\ k_0 \end{pmatrix}.$$

Takto podobne dostaneme aj

$$\begin{pmatrix} k_{m+1} & k_m \\ k_m & k_{m-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2n & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^m\begin{pmatrix} k_1 & k_0 \\ k_0 & k_{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2n & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^m,$$

pre $k_1 = 1$, $k_0 = 0$ a $k_{-1} = 1$ (k_{-1} dostávame z rekurencie (10)). Keď zoberieme determinant matíc, dostávame

$$k_{m+1}k_{m-1} - k_m^2 = (-1)^m,$$

čo môžeme dosadiť do (20), čím získame rovnaké riešenie ako pomocou charakteristických rovníc.

4 Pravouhlé trojuholníky s pomerom odvesien takmer *n*, ak čiastočne povolíme násobky

To, prečo chceme čiastočne povoliť násobky, je z dôvodu, že by sme radi využili všetkých členov Fibonacciho postupnosti, a nie len jej časť (6). Taktiež ale chceme, aby boli parametre celé čísla, čo by sme rovnosťou (5) nedosiahli. Skúsime sa preto pozrieť na trojuholníky, ktoré majú väčšiu „párnu“ odvesnu odvesnu (na rozdiel od (2)). Aby sme nemuseli veľa počítať ako (2), využijeme poznámku 4.

Poznámka 4 ([Mäsiar, 2023, Poznámka 2.10])**.** *Z rovníc* (1)*, keď* $s,k \in \mathbb{R}^+$*, vyplýva, že trojuholník so stranami a, b, c je generovaný práve dvomi dvojicami parametrov* s_1*,* k_1 *a* s_2*,* k_2 *takých, že pre ne platí vzťah:*

$$s_2 = \sqrt{2}\cdot k_1$$
$$k_2 = \frac{\sqrt{2}}{2}\cdot s_1.$$

Po „výmene“ parametrov sa zmení len usporiadanie strán $(a,b,c) \to (b,a,c)$*. Pre každú usporiadanú trojicu strán sú ale parametre určené jednoznačne.*

4.1 Trojuholníky s takmer dvojnásobnou odvesnou použitím celej Fibonacciho postupnosti

Využitím poznámky 4 a pomeru (5) dostávame druhý pomer parametrov

$$2\varphi = \frac{s_1}{k_1} = \frac{\frac{2}{\sqrt{2}}\cdot k_2}{\frac{1}{\sqrt{2}}\cdot s_2} = 2\cdot\frac{k_2}{s_2}$$
$$\varphi = \frac{k_2}{s_2}.$$

Pre konzistentnosť ponecháme parameter s v čitateli, čím získame rovnosť

$$\frac{s_2}{k_2} = \frac{1}{\varphi}.$$

Tento pomer nám umožňuje využiť Fibonacciho postupnosť aj s vynechanými členmi

$$\frac{1}{1}, \frac{1}{2}, \boxed{\frac{2}{3}}, \frac{3}{5}, \frac{5}{8}, \boxed{\frac{8}{13}}, \frac{13}{21}, \frac{21}{34}, \boxed{\frac{34}{55}}, \frac{55}{89}, \cdots, \tag{21}$$

kde vyznačené pomery nepatria primitívnemu trojuholníku. K pomerom prislúchajú trojuholníky

1) 4, 3, 5
2) 12, 5, 13
3) 30, 16, 34
4) 80, 39, 89
5) 208, 105, 233
6) 546, 272, 610.

Môžeme si všimnúť, že odvesny sú takmer dvojnásobné, ale rozdiel medzi nimi je vždy

$$|2a-b| = 2,$$

čo je odlišné s čisto primitívnymi trojuholníkmi (9), kde bola väčšia vždy odvesna a a rozdiel bol 1. V tomto prípade sa javí, že by mohlo platiť

$$|na-b| = n. \tag{22}$$

4.2 Postupnosť parametrov pre $n > 2$

Prirodzene, nastáva otázka, ako je to s väčšími násobkami odvesien. Pre pomer parametrov podľa poznámky 4 tentokrát platí

$$\begin{gathered}\sqrt{n^2+1}+n-1 = \frac{s_1}{k_1} = \frac{\frac{2}{\sqrt{2}}\cdot k_2}{\frac{1}{\sqrt{2}}\cdot s_2} = 2\cdot\frac{k_2}{s_2} \\ \frac{s_2}{k_2} = \frac{2}{\sqrt{n^2+1}+n-1}.\end{gathered} \tag{23}$$

Avšak opäť nepoznáme také postupnosti, čiže sa musíme uchýliť k manuálnemu hľadaniu pomerov. To nás ale privedie ku ďalším problémom.

$$n=3 \rightsquigarrow \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \boxed{\frac{s_3}{k_3}}, \frac{5}{13}, \frac{7}{18}, \boxed{\frac{s_6}{k_6}}, \frac{31}{80}, \cdots$$

$$n=4 \rightsquigarrow \frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \boxed{\frac{14}{2}}, \frac{7}{25}, \frac{9}{32}, \boxed{\frac{114}{16}}, \frac{57}{203}, \cdots$$

$$n=5 \rightsquigarrow \frac{1}{4}, \frac{1}{5}, \boxed{\frac{s_3}{k_3}}, \frac{9}{41}, \frac{11}{50}, \boxed{\frac{s_6}{k_6}}, \frac{91}{414}, \cdots$$

Problémy sú:

1. našli sme trojuholníky, pre ktoré platí n-násobok odvesny mínus druhá odvesna sa rovná n, no väčšia odvesna je „nepárna“ (teda platí $|a-nb| = n$ čo nie je v súlade s (22), ktoré platí pre ostatné);

2. nevieme pre všetky trojuholníky nájsť vhodný (racionálny) pomer;

3. aj keď sme našli vhodný (racionálny) pomer, vôbec nie je vyhovujúci pre postupnosť (pre $n = 4$ je $s_3 > s_4 \wedge k_3 < k_2$).

Čo môžeme urobiť s problémami $1-3$? V uvedených pomeroch sme vedeli racionálne vyčísliť tie pre $n = 4$. Našťastie, zvýraznené zlomky sú 4-násobkom trojuholníkov s rozdielom odvesien 1, ktoré sme všeobecne odvodili v časti 3. Čiže prvý zvýraznený zlomok je násobok prvého s rozdielom 1, druhý zvýraznený je násobok druhého s rozdielom 1 a tak ďalej. Tieto násobky dostaneme tak, že obidva parametre vynásobíme $\sqrt{n}$. Týmto máme vysvetlené, prečo sme pre $n = 3$ a pre $n = 5$ nevedeli nájsť racionálne pomery, no pre $n = 4$ sa nám to podarilo. Avšak teraz nám robí problém $n = 2$, keďže by sme mu tiež nemali vedieť prideliť racionálny zlomok, no predsa sa nám to podarilo a so zachovaním aproximácie. Pozrieme sa preto, aké pomery parametrov sme dostali (aj s iracionálnymi parametrami), a následne sa z nich pokúsime urobiť racionálne.

$$n=2 \rightsquigarrow \frac{1}{1}, \frac{1}{2}, \boxed{\frac{3\sqrt{2}}{1\sqrt{2}}}, \frac{3}{5}, \frac{5}{8}, \boxed{\frac{13\sqrt{2}}{4\sqrt{2}}}, \frac{13}{21}, \cdots$$

$$n=3 \rightsquigarrow \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \boxed{\frac{5\sqrt{3}}{1\sqrt{3}}}, \frac{5}{13}, \frac{7}{18}, \boxed{\frac{31\sqrt{3}}{6\sqrt{3}}}, \frac{31}{80}, \cdots$$

$$n=4 \rightsquigarrow \frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \boxed{\frac{7\sqrt{4}}{1\sqrt{4}}}, \frac{7}{25}, \frac{9}{32}, \boxed{\frac{57\sqrt{4}}{8\sqrt{4}}}, \frac{57}{203}, \cdots$$

$$n=5 \rightsquigarrow \frac{1}{4}, \frac{1}{5}, \boxed{\frac{9\sqrt{5}}{1\sqrt{5}}}, \frac{9}{41}, \frac{11}{50}, \boxed{\frac{91\sqrt{5}}{10\sqrt{5}}}, \frac{91}{414}, \cdots$$

Keď sa pozrieme, aké dĺžky strán (dosadením do (1)) dostávame pri obidvoch možnostiach parametrov pre $n = 2$, zistíme, že sú rovnaké, až na výmenu odvesien (v odmocninovom tvare je väčšia „nepárna“ odvesna, pričom v racionálnom je väčšia „párna“ odvesna). Práve racionálny tvar potrebujeme a vieme sa

ku nemu dostať pomocou zmeny parametrov 4

$$\frac{3\sqrt{2}}{1\sqrt{2}} = \frac{s_1}{k_1} = \frac{\frac{2}{\sqrt{2}} \cdot k_2}{\frac{1}{\sqrt{2}} \cdot s_2} = 2 \cdot \frac{k_2}{s_2}$$
$$\frac{s_2}{k_2} = \frac{2}{3}.$$

Vidíme, že sme pre prvý pomer dostali rovnaké hodnoty ako v (21), čo naznačuje, že by sme to mohli aplikovať aj na ostatné n.

$$\begin{aligned}
n=2 &\rightsquigarrow \frac{1}{1}, \frac{1}{2}, \boxed{\frac{2}{3}}, \frac{3}{5}, \frac{5}{8}, \boxed{\frac{8}{13}}, \frac{13}{21}, \cdots \\
n=3 &\rightsquigarrow \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \boxed{\frac{2}{5}}, \frac{5}{13}, \frac{7}{18}, \boxed{\frac{12}{31}}, \frac{31}{80}, \cdots \\
n=4 &\rightsquigarrow \frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \boxed{\frac{2}{7}}, \frac{7}{25}, \frac{9}{32}, \boxed{\frac{16}{57}}, \frac{57}{203}, \cdots \\
n=5 &\rightsquigarrow \frac{1}{4}, \frac{1}{5}, \boxed{\frac{2}{9}}, \frac{9}{41}, \frac{11}{50}, \boxed{\frac{20}{91}}, \frac{91}{414}, \cdots
\end{aligned} \tag{24}$$

Problém s postupnosťou sme vyriešili, no pribudla nová. Táto pozostáva z toho, že zmenou parametrov sme pre $n > 2$ zmenili celý trojuholník, a rozdiel medzi odvesnami je $|na - b| = 2$. Teraz vidíme dôvod, prečo sme pri $n = 2$ na začiatku tejto časti nepozorovali nijakú anomáliu – pretože v obidvoch pomeroch dostávame rozdiel 2.

Je škoda, že nemôžeme pracovať so stranami s rozdielom n, no racionálne pomery nám aspoň umožňujú predpovedať nasledujúce členy rekurentne. Doposiaľ sme vedeli získať pomery pre nasledujúce n, no len pre prvých 7 členov (napríklad, ak by sme chceli 5. člena pre $n = 6$, vieme ľahko zistiť, že to bude $\frac{13}{72}$, pretože vidíme, že čitateľ rastie s diferenciou 2 a k diferencií menovateľa sa vždy pripisuje 4, čiže teraz nasleduje pričítať 22 k piatemu členovi z $n = 5$). Odteraz už dokážeme zistiť aj 8. člena bez manuálneho hľadania.

4.3 Rekurentné vyjadrenie postupností

Podľa manuálne vyhľadaných pomerov si môžeme všimnúť, že prvý a druhý člen sú nezávisle dané a vyzerajú

$$\frac{s_1}{k_1} = \frac{1}{n-1}, \quad \frac{s_2}{k_2} = \frac{1}{n}.$$

Tretí člen získame ako súčet predchádzajúcich dvoch čitateľov a menovateľov

$$\frac{s_3}{k_3} = \frac{s_1 + s_2}{k_1 + k_2}.$$

Pre $n = 2$ by sme súčtom predošlých dvoch mohli pokračovať, čo je vlastne spôsob generovania Fibonacciho postupnosti, no všeobecne to pre všetky n neplatí. Pre štvrtý člen platí vzťah

$$\frac{s_4}{k_4} = \frac{s_2 + (n-1)s_3}{\frac{n}{2} \cdot s_3 + (n-1)k_3} = \frac{k_1 + k_2}{k_2 + (n-1)k_3}.$$

Piaty a šiesty člen vieme opäť odvodiť pomocou súčtu prechádzajúcich dvoch členov. Problém nastáva so siedmym členom, takže sa javí, že pre členy s indexom $m = 3r+1; r \in \mathbb{N}$ platí iný vzťah

$$\begin{aligned}
s_{3r+1} &= k_{3r-2} + k_{3r-1} = s_{3r-1} + (n-1)s_{3r} \\
k_{3r+1} &= \frac{n}{2} \cdot s_{3r} + (n-1)k_{3r} = k_{3r-1} + (n-1)k_{3r}.
\end{aligned} \tag{25}$$

Keď si všimneme, že $s_{3r+1} = k_{3r}$, môžeme pre k_{3r+1} ešte odvodiť

$$k_{3r+1} = (n-1)k_{3r-2} + nk_{3r-1}.$$

Pre ostatné platí

$$\begin{aligned}
s_m &= s_{m-2} + s_{m-1} \\
k_m &= k_{m-2} + k_{m-1},
\end{aligned} \tag{26}$$

kde sú počiatočné podmienky kde $s_1 = 1, s_2 = 1, k_1 = n-1$ a $k_2 = n$.

Poznámka 5. *Ak $n = 2$, potom v* (25) *dostávame, že aj členy s indexom $m = 3r+1$ dostaneme ako súčet predchádzajúcich dvoch členov, čo odkazuje na Fibonacciho postupnosť.*

4.4 Všeobecné vyjadrenie postupnosti

Na všeobecné vyjadrenie si potrebujeme postupnosť rozdeliť na 3 podpostupnosti, pretože členy nemajú rovnaký rozvoj. Jednotlivé parametre budeme označovať ľavým aj pravým spodným indexom, kde pravý ostáva označovať poradie člena v postupnosti a ľavý bude označovať poradie člena v podpostupnosti. Poradie člena podpostupnosti dostaneme ako hornú celú časť čísla, keď poradie v postupnosti vydelíme trojkou. Vydelením taktiež zistíme, do ktorej podpostupnosti člen patrí.

Príklad 1. *Chceme označiť 8-teho člena postupnosti.*

Najprv zistíme, v ktorej je podpostupnosti, teda $8 : 3 = 3$ *zv.* 2*, a následne zoberieme hornú celú časť po delení, teda , teda* $\lceil 8 : 3 \rceil = 3$*. Čiže ôsmy člen postupnosti je tretí člen druhej podpostupnosti. Parametre by sme teda označili* ${}_3s_8$ *a* ${}_3k_8$.

Opäť vypíšeme niekoľko prvých členov, aby sme mohli pracovať s konkrétnymi číslami. Začneme parametrom k.

$$
\begin{aligned}
{}_1k_1 &= n-1\\
{}_1k_2 &= n\\
{}_1k_3 &= 2n-1\\
{}_2k_4 &= 2n(n-1)+1\\
{}_2k_5 &= 2n\cdot n\\
{}_2k_6 &= 2n(2n-1)+1\\
{}_3k_7 &= (2n)^2(n-1)+2n+(n-1)\\
{}_3k_8 &= (2n)^2n+n\\
{}_3k_9 &= (2n)^2(2n-1)+2n+(2n-1)
\end{aligned}
$$

Môžeme si všimnúť, že vo všetkých podpostupnostiach dostaneme nasledujúci člen vynásobením aktuálneho člena podpostupnosti číslom $2n$ a pričítaním predchádzajúceho člena v rovnakej podpostupnosti, teda

$${}_{r+1}k = 2n\cdot {}_rk + {}_{r-1}k,$$

kde $r\in\mathbb{N}$ a nultý člen pre každú podpostupnosť je

$${}_0k = \begin{cases} 1 \text{ pre prvú,}\\ 0 \text{ pre druhú,}\\ 1 \text{ pre tretiu.}\end{cases}$$

Všeobecné odvodenie je podobné ako v časti 3, kde sme odvodili rovnosti (14) a (15).
Pre prvú podpostupnosť platí vzťah

$$
\begin{aligned}
{}_rk_{3r-2} = (n-1)\sum_{i=0}^{v}\binom{r-1-i}{i}(2n)^{r-1-2i} +\\
+\sum_{i=0}^{v}\binom{r-2-i}{i}(2n)^{r-2-2i},
\end{aligned}
$$

kde

$$v = \frac{r-1}{2} \quad\vee\quad v = \frac{r-2}{2}.$$

Druhej podpostupnosti zas prislúcha vzťah

$${}_rk_{3r-1} = n\sum_{i=0}^{v}\binom{r-1-i}{i}(2n)^{r-1-2i}.$$

a nakoniec pre tretiu podpostupnosť platí vzťah

$$
\begin{aligned}
{}_rk_{3r} = (2n-1)\sum_{i=0}^{v}\binom{r-1-i}{i}(2n)^{r-1-2i} +\\
+\sum_{i=0}^{v}\binom{r-2-i}{i}(2n)^{r-2-2i}.
\end{aligned}
$$

Rovnice platia pre $r\geq 2$. Pre $r=1$ musíme v prípade prvej a tretej podpostupnosti urobiť malú korekciu, a to ignorovať druhý rad v rovnici, pretože by sme dostali záporné kombinačné číslo.
Teraz odvodíme parameter s.

$$
\begin{aligned}
{}_1s_1 &= 1\\
{}_1s_2 &= 1\\
{}_1s_3 &= 2\\
{}_2s_4 &= 2n-1\\
{}_2s_5 &= 2n+1\\
{}_2s_6 &= 2n\cdot 2\\
{}_3s_7 &= (2n)^2-2n+1\\
{}_3s_8 &= (2n)^2+2n+1\\
{}_3s_9 &= (2n)^2\cdot 2+2
\end{aligned}
$$

Rovnako aj tu si môžeme všimnúť, že vo všetkých podpostupnostiach násobíme aktuálny člen podpostupnosti číslom $2n$ a pripočítame predchádzajúci člen podpostupnosti, teda

$${}_{r+1}s = 2n\cdot {}_rs + {}_{r-1}s,$$

kde $r\in\mathbb{N}$ a nultý člen pre každú podpostupnosť je

$${}_0s = \begin{cases} -1 \text{ pre prvú,}\\ 1 \text{ pre druhú,}\\ 0 \text{ pre tretiu.}\end{cases}$$

Taktiež aj pre parameter s dostávame podobné odvodenie pomocou radov.
Pre prvú podpostupnosť platí rovnosť

$$
\begin{aligned}
{}_rs_{3r-2} = \sum_{i=0}^{v}\binom{r-1-i}{i}(2n)^{r-1-2i} -\\
-\sum_{i=0}^{v}\binom{r-2-i}{i}(2n)^{r-2-2i}.
\end{aligned}
$$

kde v je opäť

$$v = \frac{r-1}{2} \quad\vee\quad v = \frac{r-2}{2}.$$

Druhá podpostupnosť je rovnaká až na znamienko

$$
\begin{aligned}
{}_rs_{3r-1} = \sum_{i=0}^{v}\binom{r-1-i}{i}(2n)^{r-1-2i} +\\
+\sum_{i=0}^{v}\binom{r-2-i}{i}(2n)^{r-2-2i}.
\end{aligned}
$$

Tretia podpostupnosť vyzerá

$$_{r}s_{3r} = 2 \cdot \sum_{i=0}^{v} \binom{r-1-i}{i} (2n)^{r-1-2i}.$$

Aj pre parameter s platia rovnosti pre $r \geq 2$ a pre $r = 1$ by sme museli urobiť v prípade prvej a druhej podpostupnosti korekciu v podobe ignorovania druhého radu.

Neuvádzali sme postupnosť pre $n = 1$, pretože by mohla byť zavádzajúca, keďže sa tam opakujú členy. Taktiež by bol problém s prvým členom, pretože by vychádzala v menovateli 0.

Existenciu riešení všetkých troch podpostupností je možné ukázať analogickým spôsobom ako v časti 3.3.1 s rozdielom, že teraz pracujeme s $na - b$.

5 Postupnosť parametrov pomocou reťazových zlomkov

Pomocou reťazových zlomkov dokážeme získať racionálne aproximácie iracionálnych čísel, no práve preto musí byť reťazový zlomok nekonečný. Pre naše účely budeme využívať jednoduchý reťazový zlomok, ktorý má tvar

$$a_0 + \cfrac{1}{a_1 + \cfrac{1}{a_2 + \cfrac{1}{a_3 + \ddots}}},$$

kde sú $a_i \in \mathbb{Z}$, pričom jediné záporné môže byť len a_0. Reťazové zlomky vieme skrátene zapisovať (podľa [Burton, 2007])

$$[a_0; a_1, a_2, a_3 \ \ldots].$$

Vo vzťahoch (3) a (23) dostávame iracionálne pomery, ktoré platia pre úplné násobky odvesien. Iracionálne pomery ale vieme racionálne aproximovať.

V prípade (3) sa nám vyskytuje iracionálne $\sqrt{n^2+1}$, kde $n \in \mathbb{N}$, v čitateli, a práve odmocniny takéhoto tvaru majú celkom jednoduchý periodický rozvoj $[n; \overline{2n}]$. Keď k rozvoju odmocniny pričítame $n-1$ z (3), dostávame vzťah pre aproximáciu

$$\frac{s_m}{k_m} = [2n-1; \overline{2n}]. \tag{27}$$

Keď si zlomok vyčíslime pre konkrétne n, dostávame rovnaké hodnoty ako v (11). Môžeme si všimnúť, že v (10) dostávame rekurentné odvodenie , kde $m-1$-vého člena násobíme $2n$ a pričítame $m-2$-hého člena. Práve $2n$ pochádza z rozvoju reťazového zlomku (27).

V prípade (23) to je trochu zložitejšie, pretože sa nám nachádza $\sqrt{n^2+1}$ v menovateli, no väčší problém robí 2 v čitateli. Napriek tomu ale aproximácia pomocou reťazových zlomkov obsahuje celkom jednoduchú periódu

$$\frac{s_m}{k_m} = [0; \overline{n-1, 1, 1}]. \tag{28}$$

Rovnako aj v tomto prípade dostávame po vyčíslení tie isté pomery, ako v (24). Zaujímavé je, že pomocou reťazových zlomkov dostávame rovnaké „problematické“ členy tretej podpostupnosti, teda že rozdiel medzi odvesnami je $|na - b| = 2$. Taktiež vďaka reťazovým zlomkom vidíme, prečo je postupnosť pre $n = 1$ problematická. Vidíme, že v rozvoji dostávame pravidelne zlomky s 0 v menovateli. Aj v tomto prípade dokáže vysvetliť dva rôzne rekurentné vzťahy (25) a (26), závislé od poradia člena, reťazovými zlomkami, kde jednotlivé násobky členov odkazujú na rozvoj reťazového zlomku (28).

Dôvod, prečo sme trojuholníky hľadali manuálne a nepoužili sme reťazové zlomky je taký, že sme si ich využitie uvedomili až neskôr. Manuálne hľadanie ale nepovažujeme za bezvýznamné, pretože sme mohli vysvetliť problematickú podpostupnosť.

Poďakovanie

Na tomto mieste by som sa chcel veľmi poďakovať svojmu školiteľovi RNDr. Martinovi Sleziakovi, PhD. za jeho čas, ochotu, odbornú pomoc a cenné rady, ktoré mi pomohli pri vypracovávaní tejto práce.

Literatúra

[Burton, 2007] Burton, D. M. (2007). *Elementary Number Theory*. McGraw-Hill, New York, 6th edition.

[Chen and Peng, 1995] Chen, C. C. and Peng, T. A. (1995). Almost-Isosceles Right-Angled Triangles. *Australian Journal of Combinatorics*, 11:263–267. [online], [cit. 2025-31-03]. Dostupné na: `http://ajc.maths.uq.edu.au/pdf/11/ajc-v11-p263.pdf`.

[Cull et al., 2005] Cull, P., Flahive, M., and Robson, R. (2005). *Difference Equations: From Rabbits to Chaos*. Springer, New York. [online], [cit. 2025-31-03]. Dostupné na: `https://link.springer.com/book/10.1007/0-387-27645-9`.

[Forget and Larkin, 1968] Forget, T. W. and Larkin, T. A. (1968). Pythagorean Triads of the Form x, x+1, z Described by Recurrence Sequences. *The Fibonacci Quarterly*, 6(3):94–104. [online], [cit. 2025-31-03]. Dostupné na: https://www.fq.math.ca/6-3.html.

[Mäsiar, 2023] Mäsiar, P. (2023). Pytagorovské trojice a ich parametrizácie. Bakalárska práca, FMFI UK.

[Nyblom, 1998] Nyblom, M. A. (1998). A Note on the Set of Almost-Isosceles Right-Angled Triangles. *The Fibonacci Quarterly*, 36(4):319–322. [online], [cit. 2025-31-03]. Dostupné na: https://www.fq.math.ca/36-4.html.

[Overmars et al., 2019] Overmars, A., Ntogramatzidis, L., and Venkatraman, S. (2019). A new approach to generate all Pythagorean triples. *AIMS Mathematics*, 4(2):242–253. [online], [cit. 2025-31-03]. Dostupné na: https://doi.org/10.3934/math.2019.2.242.

[Sierpiński, 2003] Sierpiński, W. (2003). *Pythagorean Triangles*. Dover, New York.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 302–312
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Andrej Špitalský

Effects of Diffusion on Territory Formation in Wolf Populations

Andrej Špitalský*

Supervisor: Richard Kollár†

Department of Applied Mathematics and Statistics, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstract: Territoriality is a commonly observed behavior in many animal species. One of the most well-known examples is wolf (Canis lupus) packs, which are able to divide a shared habitat into patches of near-exclusive use, ensuring safety and prey availability. Scent marking is the primary mechanism used to maintain territorial boundaries, but its dynamic effects make this behavior difficult to quantify and explain through field studies alone. We develop a stochastic model in which wolves are represented as random walkers with a time-dependent bias toward either the territorial boundary or their respective dens. Territory formation and defense are driven by reactive scent marking, which decays and diffuses over time. A high concentration of foreign scent shifts a wolf's movement bias away from the boundary, as direct confrontation is typically avoided. Our model shows that territories are inherently unstable, undergoing continuous fluctuations and shifts at the borders, which is an outcome consistent with field observations. We examine the role of scent diffusion, its effect on border movement, and the emergence of a no-use buffer zone. Our results are compared with those from previous studies of territorial random walker models involving constant-intensity scent marking and no diffusion.

1 Introduction to the Biology of Wolves

Most wolves spend their lives in a social structure called a pack [Range and Marshall-Pescini, 2022]. It usually consists of a mating pair (male and female), also known as an alpha pair, and their offspring from previous years. Newly formed packs tend to carve out their territories, defined as any area defended by its inhabitants [Noble, 1939]. In the case of wolves, territories are established mainly to provide a safe area for the pack to live in and for raising pups, as well as a sufficient supply of prey to sustain the whole pack [Range and Marshall-Pescini, 2022].

*spitalsky3@uniba.sk
†richard.kollar@fmph.uniba.sk

No evidence suggests that territories are constant throughout seasons and years [Mech and Boitani, 2003]. Rather, the data suggest that active defense is required mainly at the outer ring. In addition, territories tend to protrude into one another to some degree. Evidence of overlapping scent marks [Peters and Mech, 1978] and short movements [Mech and Boitani, 2003] in these protruding areas has been found. These regions are commonly referred to as buffer zones and tend to be usually avoided mainly from a survival perspective. As theorized by L. D. Mech, this phenomenon may result in higher expected prey densities in these regions due to limited wolf movement, which may, in contrast, increase the presence of wolves if the prey is scarce inside the territory [Mech, 1977].

Since confrontation with another wolf is life-threatening, wolves tend to resort mainly to scent marking as their primary territory defense mechanism [Mech and Boitani, 2003]. When a foreign wolf mark is detected, it signals to the receiver that they have entered an area with a significantly higher risk of encountering an unfamiliar wolf, consequently encouraging their return. Scent marks also have the advantage of lasting up to three weeks, so the wolf's presence is unnecessary to declare ownership of an area. Observations suggest that marks are only left by the alpha pair, mainly by the alpha male [Peters and Mech, 1978]. Marks can be observed on frequently traveled roads and junctions used during hunts and at the edge of the territory, where their frequency is usually higher. Additionally, detecting a foreign mark triggers a significant increase in the marking frequency, resulting in a so-called olfactory bowl (Figure 1).

Each year in spring, pups are born, usually to the alpha pair [Mech and Boitani, 2003]. Shortly before, the alpha female settles in the birthing den, which becomes the center of activity for the pack until late autumn. The mother may actively use multiple den sites, typically not too far from each other, relocating pups between them as needed. The father contributes to the care primarily by feeding the mother. Later, the whole pack also contributes by feeding and watching

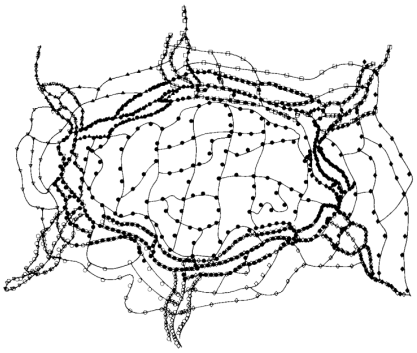


Figure 1: Visualization of the observed olfactory bowl phenomenon. Scent marks from the central pack are shown as filled circles, while other distinct symbols represent marks from other packs. Frequently traveled routes are depicted as solid lines [Peters and Mech, 1978].

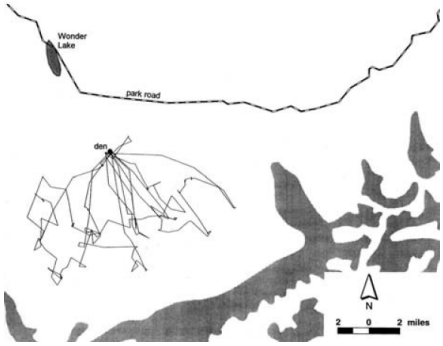


Figure 2: Hunting routes of a male wolf radiating from its den [Mech et al., 2015].

over the pups. Typical behavior related to the den's location includes suppressed scent marking by the alpha male within a certain radius, suggesting that the den should remain hidden from other animals living in the area [Sidorovich and Rotenko, 2019].

The denning period dramatically affects how the pack behaves and moves within the territory [Range and Marshall-Pescini, 2022]. The members tend to leave the den in search of prey periodically, and after a successful hunt or a certain amount of time, they return to feed or tend to the pups [Mech et al., 2015], as shown in Figure 2. After the litter matures enough to join the pack during hunting, returning to the den is no longer necessary, and the movement of the whole pack becomes nomadic throughout the territory [Mech and Boitani, 2003].

2 Model Design

There are two most common approaches for modeling territorial animals: either using a system of partial differential equations [White et al., 1996, Lewis and Moorcroft, 2001] or agent-based models, where animals are treated as modified random walkers [Potts et al., 2012, Giuggioli et al., 2011]. The former is generally more suitable for precisely quantifying expected behaviors based on analytical solutions, while the latter is superior in capturing the stochasticity present in any animal's behavior.

Our aim is to capture wolves' key spatial and temporal behaviors during the denning period. We chose to develop a discrete one-dimensional stochastic model to observe the development of territorial structures and whether their behavior stabilizes in time. Our model focuses on movement patterns characterized by staying near the den and moving throughout the territory in search of food and for territory maintenance, defending the territory through scent marking, and consequentially avoiding direct confrontation with foreign wolves through olfactory signals.

2.1 Assumptions

The behavior of wolves is too complex to be fully captured by a mathematical model. Therefore, we work with a few assumptions and simplifications based on the observed results summarized in Section 1.

We assume that only the alpha male is responsible for scent marking, the primary form of territory defense, which agrees with observed results. Since our focus is on territory formation, our model includes only the alpha male's movement, as we assume the rest of the pack does not directly contribute to this process. His movement is regularly drawn toward the boundary, justified by higher expected prey density and territory maintenance. Additionally, we assume a homogeneous environment. Therefore, we do not consider, for example, hard-to-reach terrain in the model.

In nature, scent marking does not occur continuously but is mainly triggered by specific events [Peters and Mech, 1978]. However, for simplicity, we assume marking happens at every discrete time step with varying deposited amounts. In our model, the presence of foreign pheromones will always shift

the movement bias away from the territory of the other wolf. Lastly, for simplicity, we assume that the den location remains constant.

Wolves often follow established trails and routes, so their movement is better described as occurring along a network of paths rather than freely across a two-dimensional space. This reduces the environment to a collection of one-dimensional network connected at intersections. We assume that in a homogeneous environment, paths located at the same distance from the den, the central point of the territory in our model, differ primarily in the intensity of scent markings deposited along them. If a territory is entirely surrounded by other foreign territories, we can expect these scent intensities to be relatively uniform at the borders.

Our one-dimensional model is thus intended to represent and capture mainly the dynamics at a short segment of territory border between two neighboring wolf packs. To capture the dynamics in this region, we model the movement of two distinct wolves (called, for simplicity, left and right), each representing the alpha male of its pack and being responsible for scent marking. These wolves periodically move toward the shared boundary during so called active phase, and then return to their respective dens, where they remain within a small radius during the inactive phase. This alternating pattern is supported by observations from Theuerkauf et al., who reported that wolves tend to alternate between short periods of activity and inactivity [Theuerkauf et al., 2003].

2.2 Scent Marking

As was stated in Section 1, scent marking is the driving factor of territorial behavior in wolf populations. We use a reaction-diffusion equation with $x' \in [0, \chi]$ (measured in $\widetilde{\mathrm{m}}$, where $\widetilde{\mathrm{m}} = 100\mathrm{m}$) and $t' \geq 0$ (measured in $\tilde{\mathrm{s}}$, where $\tilde{\mathrm{s}} = 50\mathrm{s}$) as a foundation. This choice of units enhances the biological interpretability of the parameters selected for the simulations in Section 3.2.

The function $f'(x',t')$ (measured in $\mathrm{g}\cdot\widetilde{\mathrm{m}}^{-1}$) represents a concentration of scent marks of one wolf on location x' at time t' (we use prime notation so that the later nondimensional notation is more comprehensible). To represent wolf's marking, point scent source function $s'(x',t')$ (measured in $\mathrm{g}\cdot\widetilde{\mathrm{m}}^{-1}\cdot\tilde{\mathrm{s}}^{-1}$) is added:

$$\frac{\partial}{\partial t'} f'(x',t') = D\frac{\partial^2}{\partial x'^2} f'(x',t') - \lambda f'(x',t') + s'(x',t') \tag{1}$$

$D[\widetilde{\mathrm{m}}^2\cdot\tilde{\mathrm{s}}^{-1}]$ is the dimensional diffusion coefficient, and $\lambda\,[\tilde{\mathrm{s}}^{-1}]$ is the decay coefficient. We transform this equation into a nondimensional form using the following substitutions:

$$\begin{aligned} t' &= \tau t, \\ x' &= \chi x, \\ f'(x',t') &= \xi f(x,t), \\ s'(x',t') &= \upsilon s(x,t), \end{aligned} \tag{2}$$

where $\tau\,[\tilde{\mathrm{s}}]$, $\chi\,[\widetilde{\mathrm{m}}]$, $\xi\,\left[\mathrm{g}\cdot\widetilde{\mathrm{m}}^{-1}\right]$ and $\upsilon\,\left[\mathrm{g}\cdot\widetilde{\mathrm{m}}^{-1}\cdot\tilde{\mathrm{s}}^{-1}\right]$ are dimensional characteristic scales. By putting $\tau := \frac{1}{\lambda}$ and $\xi := \upsilon\tau$, we can express equation 1 in dimensionless form as follows:

$$\frac{\partial}{\partial t} f(x,t) = \frac{D\tau}{\chi^2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x,t) - f(x,t) + s(x,t) \tag{3}$$

As a result of this transformation, we obtain a dimensionless spatial domain $x \in [0,1]$ and an unbounded dimensionless time variable $t \geq 0$, where the scent mark decay is scaled to occur at an exponential rate of 1.

As we want to work in discrete space and time, we apply the finite difference method. We define:

$$x_m := m\cdot\Delta x,\ m \in \{0,\ldots,M\} \qquad \Delta x = \frac{1}{M} \tag{4}$$

$$t_n := n\cdot\Delta t,\ n \in \mathbb{N}_0 \tag{5}$$

Equation 3 may then be expressed in the following form:

$$\begin{aligned} f(x_m,t_{n+1}) =: f_{m,n+1} &= f_{m,n} + \Delta t\left[\frac{D\tau}{\chi^2(\Delta x)^2}\left(f_{m+1,n} - 2f_{m,n} + f_{m-1,n}\right) - f_{m,n} + s(x_m,t_n)\right] \\ &= (1-\Delta t) f_{m,n} + \frac{D\tau\Delta t}{\chi^2(\Delta x)^2}\left(f_{m+1,n} - 2f_{m,n} + f_{m-1,n}\right) + \Delta t\ s(x_m,t_n) \end{aligned} \tag{6}$$

Lastly, we extend the definition of 6 by setting:

$$f_{-1,n} = f_{M+1,n} = 0 \qquad \forall n \in \mathbb{N}_0 \tag{7}$$
$$f_{m,0} = 0 \qquad \forall m \in \{0,\dots,M\} \tag{8}$$

For convenience of notation, we introduce the parameter $d := \frac{D\tau\Delta t}{\chi^2(\Delta x)^2}$. Furthermore, in the following sections, we use x and t in place of the x_m and t_n. We also note that the scent marking function of the second wolf, $g_{m,n}$, follows the same update rule as in equation 6, but with a different point scent source function $z(x,t)$, specific to the second wolf.

2.3 Movement

The movement is modeled as a random walk on the discrete spatial domain $x \in \{0,\Delta x,\dots,1-\Delta x,1\} =: R$, with a time-dependent bias in either the left or right direction.

We now focus on the left wolf, with the symmetric behavior of the right wolf addressed at the end of the section. Each step of the wolf is a random variable $S(t)$, and we define $P[S(t) = \Delta x] =: p(t)$ and $P[S(t) = -\Delta x] = 1 - p(t)$. The location of the wolf at time $t+\Delta t$ is therefore given by

$$X(t+\Delta t) = X(t) + S(t) = X(0) + \sum_{k=0}^{t} S(k), \tag{9}$$

where $X(0) \in R$ denotes the wolf's initial position, which also corresponds to its den. The degree of olfactory interaction with the other wolf is represented by the term $I(t) = \Phi(g(X(t),t))$, where Φ is an increasing transformation mapping the foreign scent marking function to the interval $[0,1]$.

In the bias function $p(t)$, we incorporate a signed distance using an odd, non-decreasing function $\Psi : \mathbb{R} \to [-1,1]$. Additionally, the wolf's tendency to move toward the border of its territory is modeled by a function $\rho : \mathbb{N}_0 \to [0,1]$, where higher values indicate a stronger preference.

We now define the bias function $p(t)$ as a combination of active and inactive components, weighted by a time-dependent function $\omega : \mathbb{N}_0 \to [0,1]$:

$$\begin{aligned} p(t) &= p^{(\text{active})}(t)\omega(t) + p^{(\text{inactive})}(t)(1-\omega(t)) \\ &= \left[\frac{1}{2}(1+\rho(t)-I(t))\right]\omega(t) + \left[\frac{1}{2}\left(1-\frac{1}{2}\Psi(X(t)-X(0))-\frac{1}{2}I(t)\right)\right](1-\omega(t)) \end{aligned} \tag{10}$$

Since the primary purpose of the active phase of a wolf's movement is to explore its territory in search of prey and defend its boundary, the bias in the random walk during this phase is directed away from the den. However, as the wolf must eventually return to its den at the end of the exploration (active) phase, this bias is reversed over time. This is captured by the introduced function $\rho(t)$. Additionally, interaction avoidance influences the active phase. The overall bias to move farther from the den toward foreign territory decreases as the interaction level $I(t)$ increases, effectively shifting the movement away from the source of interaction.

The inactive phase of movement is modeled as a modification of a mean-reversion process. Unlike a simple random walk, it includes an attraction force that increases the probability of stepping toward the den $X(0)$ the farther the wolf is from it. This is modeled by the term $\Psi(X(t)-X(0))$. As in the active phase, the wolf must respond to high interaction levels. This response is again modeled by including a term that increases the bias away from the source of interaction.

Since we assume that movement occurs within a confined region, we modify the behavior of $p(t)$ at the boundaries:

$$p(t) = \begin{cases} 1 & \text{if } X(t) = 0 \\ 0 & \text{if } X(t) = 1 \end{cases} \tag{11}$$

The movement of the right wolf, whose position at time t is denoted by $Y(t)$, is governed by a symmetrical process, taking into account that potential sources of interaction (the other wolf and its territory) are located to the left of its den:

$$q(t) = \left[\frac{1}{2}\left(1-\rho(t)+J(t)\right)\right]\omega(t) + \left[\frac{1}{2}\left(1-\frac{1}{2}\Psi(Y(t)-Y(0))+\frac{1}{2}J(t)\right)\right]\left(1-\omega(t)\right) \tag{12}$$

$$J(t) = \Phi(f(Y(t),t)) \tag{13}$$

3 Results

3.1 Central Place Forager Model

We will compare our results to the findings of Potts et al., who also modeled central place foragers as random walkers [Potts et al., 2012]. The animals have a probability $p > \frac{1}{2}$ of a step toward their central place (den in our case) and probability $1-p$ of stepping away. At each location the animal visits, it leaves a scent mark that lasts T_{AS}, the active scent time. If a location contains a foreign scent mark, the probability of a wolf stepping there is 0. The area around the animal's central place without any foreign marks is its territory; territories next to each other form a border.

The behavior of borders in their model corresponds to the biological behavior observed by field studies. Despite territories being stable in the long term, the border fluctuates and never reaches a steady state. However, its mean square displacement (MSD), defined as $\left\langle (x_b - \langle x_b \rangle)^2 \right\rangle$ (x_b is the border location, $\langle \dots \rangle$ is an average over all simulations), saturates in time. Figure 3 illustrates the relationship between the MSD value and the model parameters. The higher values of dimensionless normalized active scent time $Z_1 = \frac{T_{AS}}{T_{D1}}$, where T_{D1} is wolf's diffusive time, results in smaller MSD. Similarly, stronger dimensionless attraction towards den α yields more minor border fluctuations.

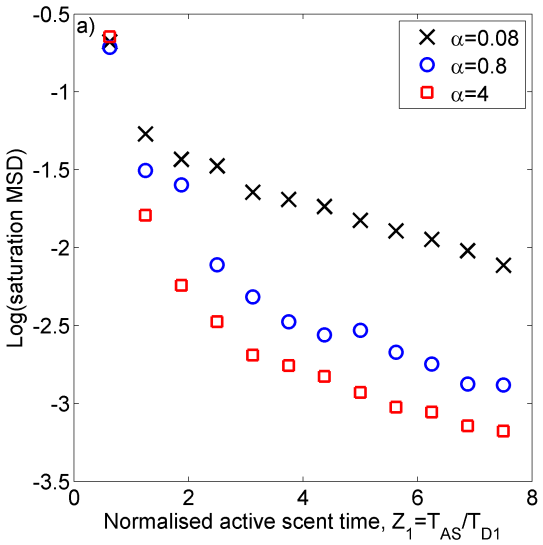


Figure 3: Relationship between saturated MSD and model parameters [Potts et al., 2012]. Dimensionless normalized active scent time Z_1 on the horizontal axis represents the ratio of scent mark persistence and expected time for an animal to move throughout its territory. Colored symbols display multiple values of dimensionless den attraction α.

3.2 Simulations

To observe the behavior of our model, we implemented it in Python. The choice of model parameters is summarized in Table 1. As a movement weighing function, we use the triangle wave function with period T, which means that the active movement component has a higher weight for exactly half of the period, and the transition between the active and inactive components is gradual. Values of the scent source functions $s(x,t)$ and $z(x,t)$ are 0 everywhere except the locations of the wolves, where they increase with distance from the den and intensity of perception of the other wolf, which agrees with observed biological traits [Peters and Mech, 1978]. The hyperbolic tangent function was chosen for the interaction intensity transformation Φ, to model how the wolf reacts to foreign pheromones. This ensures that a negligible amount of foreign pheromones at the wolf's location has a small impact on the wolf's movement probabilities. As the concentration of foreign pheromones increases beyond a certain threshold, the wolf's response becomes saturated, meaning that further increases in pheromone concentration no longer significantly affect the movement probabilities. To configure simulations, we vary the following three values:

- diffusion coefficient $d \in [0.05, 0.45]$; $\Delta d = 0.05$,
- period $T \in [0.125, 0.5]$ of the weighing function $\omega(t)$; $\Delta T = 0.0625$,
- distance of the dens $Y(0) - X(0) =: L \in [0.2, 0.8]$; $\Delta L = 0.075$.

Notation	Description	Values set in simulations
Δx, Δt	spatial and temporal discretization	$\Delta x = \frac{1}{200}$, $M = 200$, $\chi = 200$, $\Delta t = \frac{1}{1000}$
$X(t), Y(t) \in R$	locations of the wolves at time t	
$X(0), Y(0) \in R$	locations of the dens	$Y(0) - X(0) =: L \in \{0.2, \ldots, 0.8\}$, symmetric around 0.5
λ	decay coefficient $\left[\tilde{s}^{-1}\right]$	$\lambda = 10^{-3}$, $\tau = 10^3$
d	dimensionless diffusion coefficient	$d \in \{0.05, \ldots, 0.45\}$
$\omega : \mathbb{N}_0 \to [0,1]$	triangle wave weighing function of the movement components	$\omega(t) = 2\left\lvert \frac{t}{T} - \left\lfloor \frac{t}{T} + \frac{1}{2} \right\rfloor \right\rvert$, $T \in \{0.125, \ldots, 0.5\}$
$\rho : \mathbb{N}_0 \to [0,1]$	preference for movement toward the border at time t	$\rho(t) = \omega(t)$
$\Psi : \mathbb{R} \to [-1,1]$	signed normalized distance, strictly increasing, odd	$\Psi(x) = \tanh(\chi x)$
$f, g : R \times \mathbb{N}_0 \to \mathbb{R}_0^+$	concentrations of scents of wolves at time t at location x	
$s, z : R \times \mathbb{N}_0 \to \mathbb{R}_0^+$	amount of scent deposited by wolves at time t on location x	$s(x,t) = \delta_{X(t),x} \cdot (0.1 \tanh(\chi \lvert X(t) - X(0) \rvert) + I(t))$, similarly $z(x,t)$
$I(t), J(t) \in [0,1]$	olfactory perception intensities of foreign wolf at time t	
$\Phi : \mathbb{R}_0^+ \to [0,1]$	non-decreasing function that transforms scent marking function of the other wolf at the wolf's location to $I(t)$ or $J(t)$	$\Phi(x) = \tanh(x)$

Table 1: Summary of notation used in model designs, its description, and values chosen for simulations.

This results in 567 different simulation configurations. Each configuration was run 100 independent times, and each run consisted of 50000 time steps (of length Δt).

For each simulation, we record the mean border location and the buffer zone width for every period of length T, as defined by the movement weighing function $\omega(t)$. We define border location at time t as a mean of locations where the scent functions of both wolves are equal and are non-zero. We use linear spline interpolation since f and g are defined at discrete locations. Buffer zone width for a time period is $\max(0, Y_{0.05} - X_{0.95})$, where X_k and Y_k are k-quantiles of locations of wolves during the observed time period T. These values represent the location beyond which only 5% of the time is spent, effectively defining a zone where wolves are rarely present.

3.3 Saturation of Border Mean Square Displacement

Saturation of the border MSD is also present in our model. We consider the saturation reached if the average absolute numerical derivative of MSD in time in the last 10% of the simulation is smaller than $2.5 \cdot 10^{-4}$. Only 10 of the 567 simulation configurations did not saturate by this criterion. This result shows that the introduction of more complex mechanisms to the territorial system, such as diffusion, decay, and movement with time-dependent bias, mostly does not result in an unconstrained movement of the border location but rather in a movement within a stable radius around its expected location.

A comparison of the development of MSD in time of ten saturated simulations and all ten unsaturated simulations is given in Figure 4. We can see that saturation is achieved early, with slight deviations later. On the other hand, most of the unsaturated simulations oscillate around a particular value most of the time, but with fluctuations much too large to pass the saturation criterion mentioned earlier. If we had evaluated saturation from the derivative of the rolling average of MSD in time with window size 10, all simulations would have been considered saturated.

If we look at the parameters of the unsaturated configurations, only the two largest den distances L and only the two smallest periods T are present. Diffusion coefficient d ranges between 0.1 and 0.45. These values suggest that when the dens are too far apart, and the wolves make shorter and more frequent outings, there might not be enough interaction between them to develop a stable bordering region, or their time spent along the boundary is too short to establish lasting scent signal in the area.

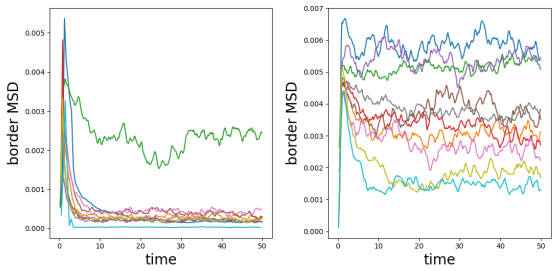


Figure 4: Development of mean square displacement of border location in time. On the left are ten simulations where MSD is saturated by our criterion; on the right are all ten unsaturated simulations. Colors are used only to distinguish between different simulation configurations.

MSD and Model Parameters

We can also study the behavior of the saturation MSD value based on the model parameters. We include the ten unsaturated simulations in the visualizations since they constitute only 1.8% of all configurations. Relationship with T and L can be seen on Figure 5 for $d = 0.1$ (upper) and $d = 0.4$ (lower). For smaller diffusion and small values of T (shorter and more frequent outings), we see that the border displacement increases the further away the dens are. This suggests that for short active phases, the interaction near the border is less impactful the further away the dens are, resulting in higher border location swings. However, for higher values of T (longer and less frequent outings), the MSD seems to level off for a sufficient distance of dens. One of the possible explanations for the occurrence of this behavior may be that the length of the active phase is sufficient to properly defend the territorial border. The proximity of the dens limits the border movement. However, once they are sufficiently distant, wolves can expand their territories and still be able to establish lasting scent marks to defend their increased range.

Increasing the diffusion coefficient results in a valley formed around $L = 0.3$ across all values of T, whilst for higher values, the behavior is similar to the smaller diffusion. This phenomenon is further depicted in Figure 6 for all diffusion values at $T = 0.187$ and $T = 0.437$ (simulated values are connected with cubic splines for clarity). For more considerable den distances, the behavior differentiates only in shifts up or down for higher d. With smaller values of L, increasing diffusion forms a local minimum, which is

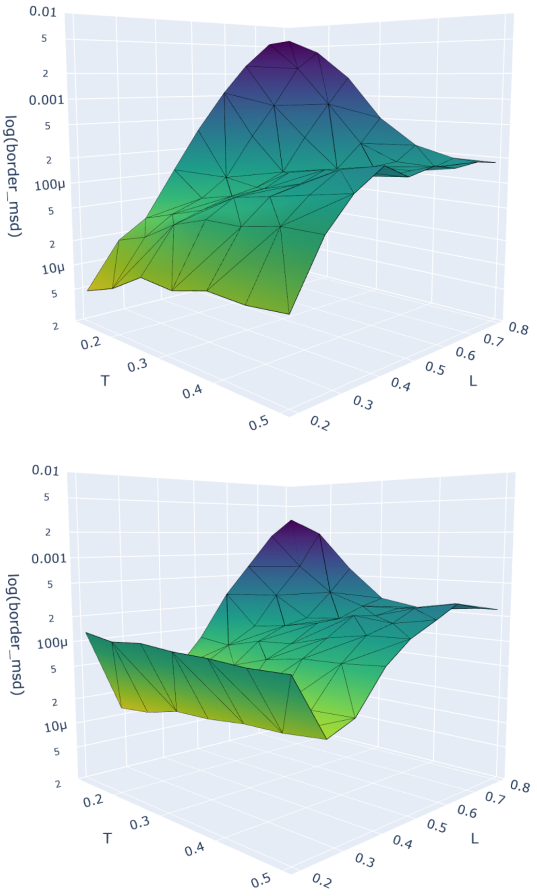


Figure 5: Simulated relationship between log-transformed border MSD, T and L for $d = 0.1$ in the upper plot, $d = 0.4$ in the lower plot. Simulated values are the vertices of the black mesh; color gradient is used to distinguish different log(border_msd) values.

not present for $d < 0.2$. We can, therefore, hypothesize that the quicker spread of information destabilizes territorial systems where two dens are too close to each other, leading to more significant fluctuations in the boundary location.

MSD and Dimensionless Fractions

To better understand the behavior of stochastic models, it is common to analyze their dynamics in terms of dimensionless coefficients, as these quantities highlight fundamental relationships between parameters and enable generalization across systems of different scales. The first coefficient we studied is defined as $\beta_1 := \frac{d}{kL^2}$, which corresponds to a

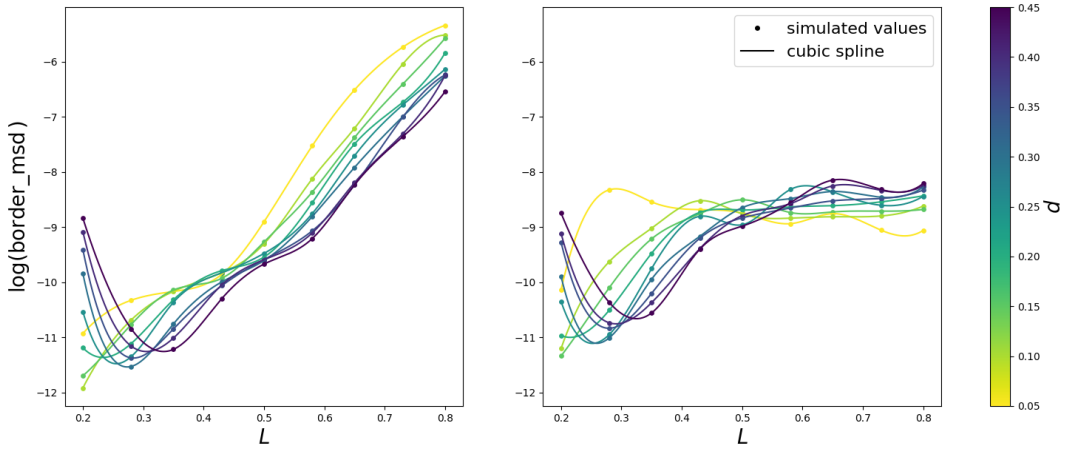


Figure 6: Relationship of log(border_msd) and L for $T = 0.187$ (left) and $T = 0.437$ (right). Different diffusion coefficient values d are plotted with different colors from 0.05 (yellow) to 0.45 (purple). Simulated values (dots) are connected with cubic splines for clarity.

scaled version of the common dimensional expression $\frac{D}{\lambda l^2} \cdot \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$, where l is a length scale (in our case, $l = L\chi$). The coefficient $k = \tau\lambda$ represents the dimensionless decay rate appearing in equation 3, and in our setting it is equal to 1. Another commonly studied dimensionless coefficient is $\frac{\tilde{t}D}{l^2}$, where $\tilde{t} = T\tau$ denotes a dimensional time scale. After multiplying by $\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$, this becomes $\beta_2 := \frac{Td}{L^2}$.

The β_1 coefficient group does not include the period of the wolf's movement T, so we can characterize β_1 as a measure of a global mark presence relative to the region. The greater the diffusion, the quicker the spread of information. Increasing the decay coefficient value would result in faster information loss, and distance between the dens scales down the relative area of effect of a scent mark.

Group β_2 measures the relative dispersion of scent information between movement cycles. A longer active movement phase allows the scent particles to cover greater distances between two visits to the bordering region, as does a greater diffusion coefficient. Distant dens have a similar effect as in β_1. Introducing coefficient $\gamma = \frac{1}{T}$ allows us to divide simulations into groups to distinguish border behavior based on the wolf's movement cycle length. Higher values of γ indicate more frequent returns to the den, similar to an extent to the den attraction α in the model described in Section 3.1.

Figure 7 shows the relationship between log-transformed border MSD and coefficients β_1 and β_2 for different values of γ (we include best fit 5-th order polynomial for clarity of the visualization). We can see that the behavior is not monotonous in either β_1 or β_2. Instead, a certain minimum is present in each group. This may intuitively follow from the impact of diffusion on scent marks. Lower values cause the marks to remain localized with high concentrations, whereas high values result in individual marks being present in wider areas but with lower overall intensity. Each of the extrema may cause the border to be less stable. If the scent signal is present only in small areas, its effect on the wolf's movement is localized only to them. Therefore, the concentration of scent marks is mainly driven by the movement's stochastic nature, which may result in the formation of a less stable border. On the other hand, the low intensity of pheromones of both wolves on a broader radius around the bordering region may cause the border not to be well defined and to be easily displaceable by introducing a new intense scent mark. Additionally, the effect of a small concentration of scent signal on the wolf's step probabilities is more negligible and may, as a result, be often ignored in the movement, further destabilizing the boundary.

We, therefore, hypothesize that for a relatively stable border to form, diffusion needs to be sufficiently big to ensure that the impact of the scent marks is not localized to a small radius around them but not too great to diminish the scent intensity in the bordering region quickly. This allows wolves to prop-

erly defend their sides of the boundary, which can last when they are not actively maintained. We can see these stable modes as the minima in Figure 7 (the shift in their location in the right plot occurs because the groups are inversely proportional to T, whereas the horizontal axis is directly proportional to T).

Outside of the extreme values of β_1, it generally holds that with higher γ, that is, shorter and more frequent active phases, MSD seems to achieve lower values. Longer active movement phases imply more time is spent maintaining the territorial boundaries, which increases the pressure to push its location away from the respective wolf's den. Prolonged movement in this area can result in the border location being moved along with the stochastic wolf's movements, inherently reducing its stability.

Our model does not provide an intuitive way to portray similar relationships as in Figure 3. The key difference is the absence of progressive decay and diffusive spread of the scent marks. We can argue that the latter missing attribute corresponds to $d = 0$, while the former can be simulated in our model with varying λ values. The active scent time T_{AS} would correspond to the time needed for the scent mark to decay sufficiently so that its effect is negligible. Our simulations do not account for this scenario, so we plan to investigate this relationship in future work.

3.4 Buffer Zone Width

Work by Potts et al. showed that buffer zones appeared for specific values of den attraction and border diffusion constant. In our model, we observe the emergence of this behavior as well. We defined the width of this region as a difference of quantiles that cut off 5% of the locations the wolf visited during a period toward the den of the other wolf. We showcase in Figure 8 the widths of the buffer zone at the end of the simulations for different T and L parameters and $d = 0.1$ for the left subfigure and $d = 0.4$ for the right subfigure. The former presents that the width of the buffer zone decreases only slightly with increasing T, and the change with L is minor except for the small values of T. With increased diffusion, the width decrease with T is much steeper everywhere except for the small values of L.

To further quantify the relative change of buffer zone width, with respect to slightly changing one of the three parameters, we evaluate the following function for every configuration of parameters ($\mathrm{bw}(\cdot,\cdot,\cdot)$ represents the width of the buffer zone at the end of the simulation for three particular parameter values):

$$\begin{pmatrix} L \\ T \\ d \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \frac{\mathrm{bw}(L+\Delta L,T,d)-\mathrm{bw}(L,T,d)}{\mathrm{bw}(L,T,d)} \\ \frac{\mathrm{bw}(L,T+\Delta T,d)-\mathrm{bw}(L,T,d)}{\mathrm{bw}(L,T,d)} \\ \frac{\mathrm{bw}(L,T,d+\Delta d)-\mathrm{bw}(L,T,d)}{\mathrm{bw}(L,T,d)} \end{pmatrix} \tag{14}$$

The relative change with respect to the parameter mean was $\frac{\Delta T}{\bar{T}} = 0.2$, $\frac{\Delta L}{\bar{L}} = 0.15$, and $\frac{\Delta d}{\bar{d}} = 0.2$.

The plot of the function 14 is shown in Figure 9. For the lower values of d, the relative change in buffer width is most significant upon increasing the diffusion coefficient. However, as d increases, the change in T seems to have the dominant effect.

The impact of the diffusion on the buffer zone width follows intuitively from its nature as it is responsible for spreading information around the region. With greater diffusion, scent marks will have a larger area of effect beyond their immediate location and affect the movement of the other wolf closer to his den. From the behavior portrayed in Figure 9, we can hypothesize that once the diffusion is sufficient enough to carry the information through the region effectively, the width of the no-use zone is mainly affected by the wolf's movement period. With a more extended period, the wolf can move further from its den, for example, if a foreign scent signal around him decays enough.

4 Conclusion

Our work aimed to study the non-trivial effects of diffusion in wolves' territorial systems. We developed a model that incorporates their key biological traits, such as diffusion, mark decay, and movement with intention instead of a pure random walk. Our numerical simulations and visualizations illustrate that the model aligns with expected and intuitively understood behaviors. We showcased that the location of territorial boundaries is inherently unstable, yet it exhibits a saturated mean square displacement. Furthermore, we observed its varying behaviors under different model parameters, for which we provided explanations. The width of the buffer zone was also studied, showcasing its expected change upon variation of conditions.

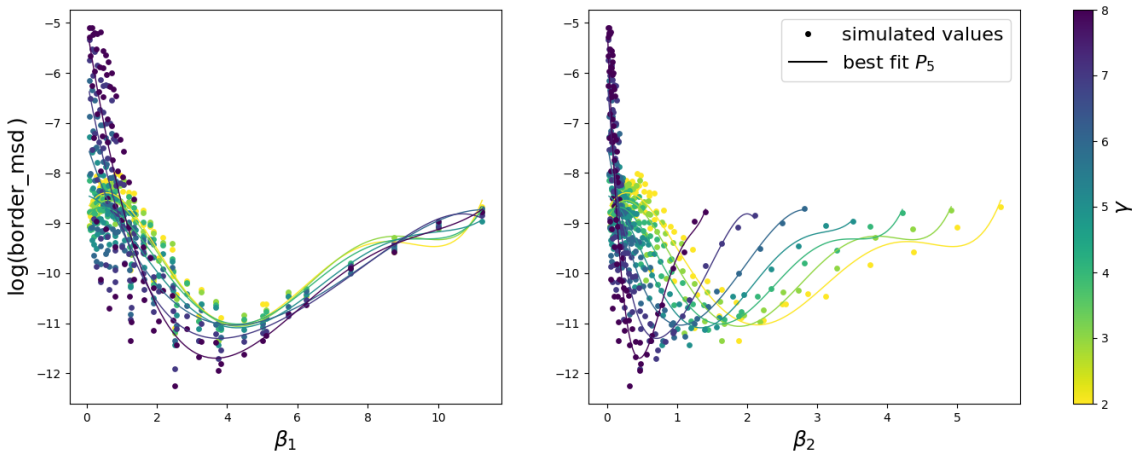


Figure 7: Relationship between log(border_msd) and $\beta_1 = \frac{d}{kL^2}$ (left), log(border_msd) and $\beta_2 = \frac{Td}{L^2}$ (right). Each dot corresponds to one simulation configuration, its corresponding β_1 or β_2 value on the horizontal axis, and the logarithm of the saturated MSD value on the vertical. Color is assigned by the value of γ from lowest (yellow) to highest (purple). The best fit 5-th degree polynomial for each γ group is plotted for clarity.

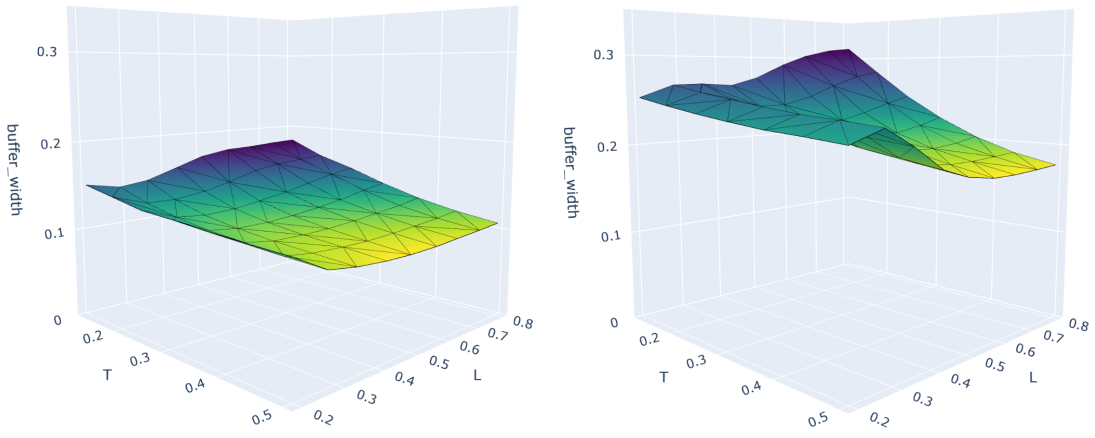


Figure 8: Simulated relationship between buffer zone width, T and L for $d = 0.1$ (left) and $d = 0.4$ (right). Simulated values are the vertices of the black mesh, and a color gradient is used to distinguish different values of buffer zone width.

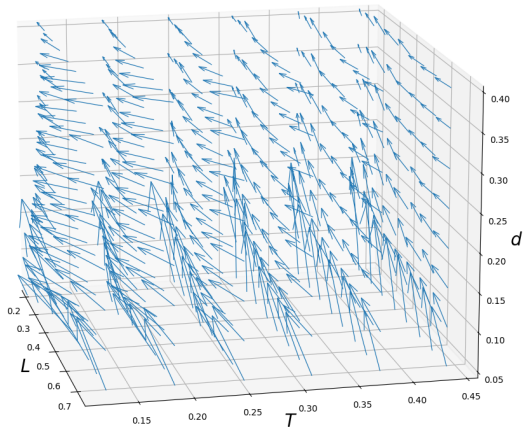


Figure 9: Visualization of function 14 for all simulation configurations.

This work serves as a foundation for future analysis of our model's dynamics. The observed characteristics require a rigorous approach for us to quantify the effects of different model components exactly and make proper conclusions. We may also look into validating our model on empirical data to appropriately evaluate its applicability in biological studies.

Acknowledgments

I want to thank my supervisor, doc. Mgr. Richard Kollár, PhD., for his expert guidance, many inspiring lectures, and ideas that shaped this work. I also thank my family for their unwavering support and encouragement. Lastly, my sincere appreciation goes to my girlfriend, Michaela Leinwatherová, for her willingness to listen to my monologues on wolves and maths and for her comments that helped me overcome numerous challenges.

References

[Giuggioli et al., 2011] Giuggioli, L., Potts, J. R., and Harris, S. (2011). Animal interactions and the emergence of territoriality. *PLoS computational biology*, 7(3):e1002008.

[Lewis and Moorcroft, 2001] Lewis, M. A. and Moorcroft, P. (2001). Ess analysis of mechanistic models for territoriality: the value of scent marks in spatial resource partitioning. *Journal of Theoretical Biology*, 210(4):449–461.

[Mech, 1977] Mech, L. D. (1977). Wolf-pack buffer zones as prey reservoirs. *Science*, 198(4314):320–321.

[Mech and Boitani, 2003] Mech, L. D. and Boitani, L. (2003). *Wolves: Behavior, Ecology, and Conservation*. University of Chicago Press.

[Mech et al., 2015] Mech, L. D., Smith, D. W., and MacNulty, D. R. (2015). *Wolves on the hunt: the behavior of wolves hunting wild prey*. University of Chicago Press.

[Noble, 1939] Noble, G. K. (1939). The role of dominance in the social life of birds. *The Auk*, pages 263–273.

[Peters and Mech, 1978] Peters, R. P. and Mech, L. D. (1978). Scent-marking in wolves. In *Wolf and Man*, pages 133–147. Elsevier.

[Potts et al., 2012] Potts, J. R., Harris, S., and Giuggioli, L. (2012). Territorial dynamics and stable home range formation for central place foragers. *PLoS One*, 7(3):e34033.

[Range and Marshall-Pescini, 2022] Range, F. and Marshall-Pescini, S. (2022). The socio-ecology of wolves. *Wolves and Dogs: between Myth and Science*, pages 47–82.

[Sidorovich and Rotenko, 2019] Sidorovich, V. and Rotenko, I. (2019). *Reproduction biology in grey wolves Canis lupus in Belarus: Common beliefs versus reality*. CHATYRY CHVERCI.

[Theuerkauf et al., 2003] Theuerkauf, J., Jedrzejewski, W., Schmidt, K., Okarma, H., Ruczynski, I., Sniezko, S., and Gula, R. (2003). Daily patterns and duration of wolf activity in the białowieza forest, poland. *Journal of Mammalogy*, 84(1):243–253.

[White et al., 1996] White, K. A. J., Lewis, M. A., and Murray, J. D. (1996). A model for wolf-pack territory formation and maintenance. *Journal of Theoretical Biology*, 178(1):29–43.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 313–324
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Zuzana Kováčová

Specificity of the Methodology for Detecting Anomalies in Athletes' Biological Passports Used in Anti-Doping Testing

Zuzana Kováčová[1*]

Supervisor: Richard Kollár[2†]

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

Abstract: The Athlete Biological Passport (ABP) is a tool frequently used for the long-term monitoring of athletes' blood physiological parameters, aimed at detecting deviations that may indicate doping. Built on Bayesian statistics, this approach enables the continuous refinement of each athlete's reference values by integrating successive measurements. Despite its broad application as an anti-doping measure across various sports, the detailed methodology and proprietary software behind its implementation remain undisclosed. In endurance sports, concerns have emerged regarding the model's apparent low specificity, which often leads to lengthy and complicated arbitration processes.

In this work, we review the principles of Bayesian statistics and demonstrate their application within the framework of the Biological Passport. We replicate the implementation of the model and present a comprehensive analysis based on systematic numerical testing. Additionally, we propose replacing the lognormal distribution with an inverse gamma distribution, enabling explicit analytical computation and overcoming the reliance on stochastic simulations. The final section critically examines the limitations of the model, particularly in cases involving athletes with exceptional physiological profiles that are not properly characterized by the model or in situations where the number of available tests is low.

Keywords: Athlete Biological Passport (ABP), Doping, Bayesian Inference, Adaptive Modeling

1 Introduction

The primary conflict in anti-doping efforts lies in balancing the objectives of identifying as many doping cases as possible while minimizing false positives. Early testing methods relied on population-wide thresholds, which failed to account for individual variability. This approach often missed dopers whose physiological markers were near the population mean while wrongly accusing athletes with naturally extreme values.

To address these challenges, the ABP was officially introduced by the World Anti-Doping Agency (WADA) in 2009 [WADA, 2023]. Instead of directly detecting banned substances, it monitors changes in athletes' physiological markers over time to identify patterns that may indicate doping. However, establishing reliable reference ranges for each athlete has posed a significant challenge, leading to the adoption of Bayesian statistical methods.

The final ABP model was based on the work "A Forensic Approach to the Interpretation of Blood Doping Markers" [Sottas et al., 2008]. This model emerged from a long-term effort to develop a statistical framework for anti-doping that could reliably assess blood parameters and detect doping. This innovative approach built upon earlier advancements, including Malcovati's 2003 concept of individual reference values [Malcovati et al., 2003], Sottas' 2006 naive Bayes classifier [Sottas et al., 2006], and Sharpe et al.'s 2006 third-generation (3G) model, which used individual historical values to reduce variability among athletes [Sharpe et al., 2006]. By integrating Bayesian methods, the ABP overcame the limitations of population-based approaches, enabling the creation of personalized baselines that reduce variability and improve the accuracy of anomaly detection related to doping.

Despite its widespread use, the ABP has faced criticism, particularly regarding its ability to fully account for factors that could legally alter blood parameters, such as training adaptations, metabolic demands, or biological factors like hypoxia and genetic mutations [Mahendru et al., 2020, Sanchis-Gomar et al., 2011, Banfi, 2011]. These factors complicate the interpretation of results and may lead to false positives. However, these concerns remain inadequately addressed in scientific research, leaving gaps in understanding and applying the model in certain scenarios.

*kovacova566@uniba.sk
†richard.kollar@fmph.uniba.sk

2 Theoretical Background

Bayesian statistics offers a distinct approach compared to classical (frequentist) statistics. The primary difference between these two frameworks lies in how they interpret probability and model uncertainty.

The frequentist approach interprets probability as the long-run frequency of an event occurring. In this framework, probability represents the proportion of times an event would occur if an experiment were repeated infinitely. Data are variable, while the parameters are fixed, unknown constants. The goal is to create procedures with long-term guarantees that are well-suited for analyses requiring long-term reliability.

In contrast, Bayesian statistics offers a more subjective way of thinking. It interprets probability as a subjective measure of belief that can be updated as new evidence becomes available. In Bayesian inference, parameters are treated as random variables. Instead of being fixed values, these parameters have their own probability distributions, which represent uncertainty about their true values. Initial beliefs about a parameter's value form a prior distribution. When new data are observed, Bayes' theorem combines the prior with the new evidence to compute the posterior distribution. This process is known as Bayesian updating and the result is a posterior distribution, from which we can derive point estimates or credible intervals that quantify uncertainty about the parameter's value.

2.1 Bayesian Inference

Bayesian inference is a statistical methodology that updates our beliefs about unknown parameters based on new data. It is fundamentally grounded in **Bayes' Theorem**, which calculates the probability of a parameter θ after observing data X:

$$P(\theta|X) = \frac{P(X|\theta)P(\theta)}{P(X)}$$

- $P(\theta|X)$: The **posterior** probability, representing the updated belief about θ after observing data X.
- $P(X|\theta)$: The **likelihood**, which measures how well θ explains the observed data X.
- $P(\theta)$: The **prior** probability, reflecting beliefs about θ before observing X.
- $P(X)$: The **marginal likelihood**, a normalizing constant ensuring that the posterior is a valid probability distribution.

The posterior is often expressed as:

$$P(\theta|X) \propto P(X|\theta)P(\theta)$$

This is possible because the normalizing constant $P(X)$, which ensures the posterior integrates to 1, is independent of θ and does not influence the inference process.

Bayesian inference facilitates both point estimation and the construction of **credible intervals**, which provide a range of likely values for the parameter. Additionally, it supports the development of **predictive distributions**:

- **Prior Predictive**: Predicts future outcomes before seeing data, based solely on prior beliefs.
- **Posterior Predictive**: Predicts outcomes after incorporating observed data into the posterior.

2.2 Priors

Priors in Bayesian analysis reflect our beliefs before data are observed. They can be objective (minimal influence), informative (strong prior knowledge), or weakly informative (a balance of prior knowledge and flexibility). As the volume of data increases, the influence of the prior diminishes, and the data become the dominant factor in the analysis.

3 WADA Bayesian Model for Blood Doping Detection

As previously discussed, the model is based on the study by Sottas et al. (2008) [Sottas et al., 2008] and uses Bayesian statistics to detect anomalies in blood parameters. The goal is to estimate the probability of a new test result, represented as $P(x_n|x_1,\ldots,x_{n-1},I)$, where x_n is the new result, $x_1,\ldots,x_{n-1}$ represent previous measurements of the same athlete, and I incorporates prior knowledge informed by external factors. These past measurements establish a baseline for each athlete, forming a personalized profile. This profile is continuously updated as new test data become available. By employing Bayesian hierarchical modeling, the model accounts for both intra-athlete variability and broader population-level trends, improving the accuracy of anomaly detection.

3.1 Model Structure

In this work, we use a Bayesian model designed for modeling hemoglobin (HGB) levels, where hemoglobin values are expressed in units of grams per liter (g/L). The model is structured into two main levels:

- **Level-1 (Within-Subject Model):** This level describes the probability density of hemoglobin levels for a specific athlete, modeled using a normal distribution:

$$x|\mu,\sigma \sim N(\mu,\sigma^2)$$

- **Level-2 (Between-Subject Model):** This level represents the prior distribution of parameters μ and σ, which account for variability across different athletes. These priors are modeled as:

$$\mu|\mu_0,\tau \sim N(\mu_0,\tau^2)$$
$$\sigma|\phi,\varphi \sim \text{LogNormal}(\phi,\varphi^2)$$

The prior values for the four parameters were estimated based on previous studies. Specifically, the mean μ_0 was derived from Sharpe et al.'s study [Sharpe et al., 2002], which calculated blood parameter values considering six external factors: gender, ethnic origin, altitude, age, sport discipline, and FBC (type of laboratory test). All these values are summarized in the appendix of Sharpe et al.'s study.

The other three parameters, the within-subject variance τ and the parameters for the log-normal distribution of the standard deviation (ϕ, φ) for hemoglobin, were obtained from the analysis of 595 control samples from 101 athletes, performed by Sottas' team. The resulting estimates were $\hat{\tau} = 7.6$, $\hat{\phi} = 1.7$ and $\hat{\varphi} = 0.1$.

By using these priors based on existing knowledge, the hierarchical model incorporates structured assumptions about the parameters. This aligns with the concept of informative priors, which guide the inference process based on prior information rather than assuming neutrality. It ensures that each athlete has an individualized reference range for blood parameters, considering both population ranges and the six mentioned external factors.

3.2 Iterative Learning and Anomaly Detection

After each new test result, the model updates the estimates of the athlete's blood parameters. This iterative process enhances the model's ability to detect doping over time, while also reducing the likelihood of false positives caused by natural physiological variations. As more data become available, the model becomes increasingly accurate.

To make decisions rule for new data, it is essential to compute the posterior predictive distribution. Each new test result is evaluated using a decision rule that applies a predefined threshold, set to the 99.9th percentile in this case. If an athlete's test result exceeds this threshold, it is flagged as potentially abnormal. This flag could trigger further investigation or lead to the athlete's exclusion from competition.

3.3 Implementation

The normal and lognormal distributions are not conjugate, meaning that there is no closed-form expression for the posterior distribution. For this purpose, several techniques have been developed that use simulation or numerical methods to approximate the posterior distribution. In this work, we used the PyMC library to apply Monte Carlo Markov Chain (MCMC) techniques for approximating posterior predictive distributions.

We implemented a Bayesian hierarchical model using the PyMC library in Python to replicate findings from the original study by Sottas et al. [Sottas et al., 2008]. The study provided an example that analyzed longitudinal hemoglobin data and thresholds for a 31-year-old female Caucasian endurance athlete living at low altitude. The prior for μ_0 was determined using data from a table in Sharpe et al.'s study [Sharpe et al., 2002], with a value set to 137. To ensure reproducibility, we initialized the model with a seed value of 42 and selected a large sample size of 10,000 to enhance precision.

Figure 2 shows the results of our replication, which closely align with the original study (Figure 1) and exhibit nearly identical predictive interval thresholds. Minor differences can be attributed to rounding, as the study reported only integer values, as well as the inherent variability of sampling-based methods. The exact results are also influenced by the choice of hyperparameters, sampling methods, and sample size, highlighting the non-deterministic nature of sampling-based approaches.

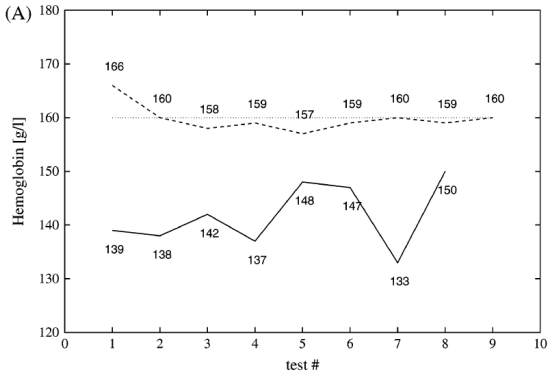


Figure 1: Predictive interval thresholds for hemoglobin levels as reported in the original study by Sottas et al. [Sottas et al., 2008].

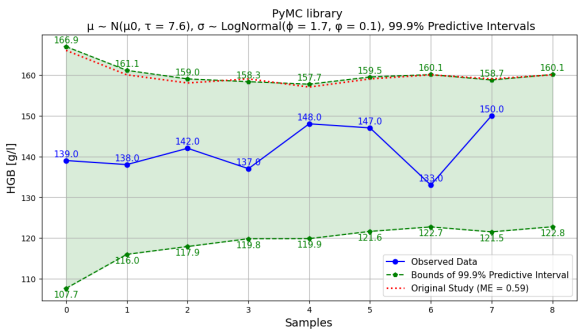


Figure 2: Predictive interval thresholds for hemoglobin levels generated using PyMC library.

4 Model Adjustment

As discussed earlier, the lognormal distribution presents challenges in Bayesian inference because it does not belong to the same family of distributions as the normal distribution. While the lognormal distribution is highly useful for modeling scenarios where values are strictly positive, its complex algebraic form makes it difficult to work with. One key issue is that it requires sampling methods, which can be computationally expensive and impractical, particularly when applying the model on large datasets.

To overcome these limitations, we considered two alternative approaches that enable direct computation of posterior distributions, eliminating the need for numerical sampling. These approaches not only reduce computational complexity but also enhance the interpretability of results.

1. **Simplifying the model** by removing lognormal distribution and treating the parameter σ as a fixed value.
2. **Replacing the lognormal distribution** with an inverse gamma distribution, which is conjugate to the normal distribution and allows for more efficient computations and analytical solution.

4.1 Simplifying the Model

The idea behind simplifying the model comes from the observation that the lognormal prior distribution for the standard deviation parameter (σ) is relatively narrow and constant across all athletes. Therefore, we decided to treat σ as a fixed value. Specifically, σ was assigned a value corresponding to the mean of the original lognormal distribution, which is 5.501.

After applying this simplified model to a representative athlete from the study, the predictive intervals closely matched the original model. The differences between the two approaches were minimal, typically within ± 1 unit. Below, we outline the process for deriving the posterior distribution and the resulting equations used in the computations.

4.1.1 Derivation and Equations

The hierarchical model is defined as follows:

$$X \sim N(\mu, \sigma^2),$$

$$\mu \sim N(\mu_0, \tau_0^2 = 7.6^2),$$

$$\sigma = 5.501 = \text{mean of LogNormal}(\phi = 1.7, \varphi^2 = 0.1^2).$$

The derivation begins with the fundamental Bayesian formula:

$$P(\mu|X) \propto P(X|\mu)P(\mu),$$

which can be expressed as:

$$P(\mu|X) \propto \left(2\pi\sigma^2\right)^{-n/2} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2\right) \cdot \left(2\pi\tau_0^2\right)^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{(\mu-\mu_0)^2}{\tau_0^2}\right).$$

Posterior Distribution

After substituting and simplifying, we obtain an expression that can be factorized into two probability density functions of the form $g(x)h(\mu|x)$. Specifically, the conditional probability $h(\mu|x)$, is the posterior distribution for μ, which follows a normal distribution with mean μ_n and variance τ_n^2. The posterior

distribution is given by:

$$\mu|x \sim N(\mu_n, \tau_n^2),$$

where:

$$\mu_n = \left(\frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{\tau_0^2}\right)^{-1} \cdot \left(\frac{n}{\sigma^2}\bar{x} + \frac{1}{\tau_0^2}\mu_0\right),$$

$$\tau_n^2 = \left(\frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{\tau_0^2}\right)^{-1}.$$

Posterior Predictive Distribution

The posterior predictive distribution is derived from the probability $h(x)$. After simplifying the equation, the posterior predictive distribution of the single future observation, x_{new}, follows a Normal distribution with mean μ_n and standard deviation $\sqrt{\sigma^2 + \tau_n^2}$:

$$x_{\text{new}} \sim N\left(\mu_n, \sigma^2 + \tau_n^2\right).$$

Prior Predictive Distribution

A similar process applies to derive the prior predictive distribution. However, instead of μ_n and τ_n^2, we use μ_0 and τ_0^2, respectively.

4.2 Replacing the Lognormal Distribution

The second approach involves replacing the lognormal distribution with an inverse gamma distribution for the parameter σ. The inverse gamma distribution is commonly used in Bayesian hierarchical models due to its conjugacy with the normal distribution, which allows for an analytical expression of the posterior distribution.

The main question was whether the lognormal distribution could be adequately approximated by the inverse gamma distribution. To test the approximation, we tuned the inverse gamma parameters to match the mean and variance of the lognormal distribution Lognorm($\phi = 1.7, \varphi = 0.1$), which has a mean of 5.501 and variance of 0.3 (Fig. 3). The results showed that the quality of the fit depends on the range of values represented by the distributions. Therefore, we focused on a nearby range of means (4.5–6.5) and variances (0.1–0.5). The total variation distance (TVD) metric was below the acceptable threshold, and also the Kolmogorov-Smirnov (KS) test showed no significant differences.

Furthermore, we derived all necessary distributions for the hierarchical model in detail. After implementing the model, we found only minor differences in the predictive intervals. These findings confirm that the inverse gamma distribution is a suitable substitute for the lognormal distribution in this context.

The **hierarchical model** is defined as:

$$X \sim N(\mu, \sigma^2),$$

$$\mu \sim N(\mu_0, \tau_0^2),$$

$$\sigma^2 \sim \text{Inv-Gamma}(\alpha_0 = \frac{k}{2}, \beta_0 = \frac{k\sigma_0^2}{2}).$$

Posterior distribution for μ (conditional on σ^2):

$$\mu \mid \sigma^2, \mathbf{x} \sim N(\mu_n, \tau_n^2),$$

$$\mu_n = \left(\frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{\tau_0^2}\right)^{-1} \cdot \left(\frac{n}{\sigma^2}\bar{x} + \frac{1}{\tau_0^2}\mu_0\right),$$

$$\tau_n^2 = \frac{\sigma^2}{n+v} = \left(\frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{\tau_0^2}\right)^{-1}, \quad \tau_0^2 = \frac{\sigma^2}{v}.$$

Posterior distribution for σ^2:

$$\sigma^2 \mid \mathbf{x} \sim \text{Inv-Gamma}\left(\alpha = \frac{n+k}{2}, \beta = \frac{1}{2}(n+k)\sigma_n^2\right),$$

$$\sigma_n^2 = \frac{1}{n+k}\left\{(\mathbf{x} - \mu_0\mathbf{1})^\top \left[I + \frac{1}{v}\mathbf{1}\mathbf{1}^\top\right]^{-1} (\mathbf{x} - \mu_0\mathbf{1}) + k\sigma_0^2\right\}.$$

Prior predictive distribution for x:

$$x_{\text{new}} \sim t_k\left(\mu_0, \sigma_0^2\left(1 + \frac{1}{v}\right)\right).$$

Posterior distribution for μ:

$$\mu \mid \mathbf{x} \sim t_{n+k}\left(\mu_n, \frac{\sigma_n^2}{n+v}\right).$$

Posterior predictive distribution for x:

$$x_{\text{new}} \mid \mathbf{x} \sim t_{n+k}\left(\mu_n, \sigma_n^2\left(1 + \frac{1}{n+v}\right)\right).$$

The detailed derivations of both models are provided in the appendix. Since expressing the entire distribution is more complex and harder to interpret, accounting for both the estimation of the mean and the variance, we present the results of the model testing using a simplified version of the hierarchical structure where σ is fixed. Although incorporating a flexible σ would be more realistic, the main results were very similar to those of the more complex model. At this stage, this approach is sufficient to capture the main behavior of the model. In future work, we will focus more on the detailed implementation of the full model with flexible σ.

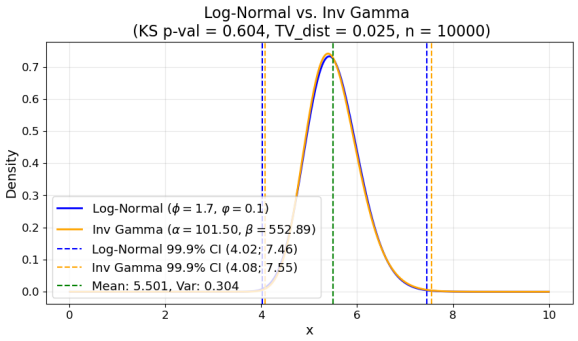


Figure 3: Evaluating the quality of fit between the Lognormal and Inverse Gamma distributions with a mean of 5.501 and a variance of 0.3.

5 Testing

The goal of testing was to systematically verify the specificity and reliability of the Bayesian hierarchical model used in anti-doping protocols. The focus was to determine whether the model provides consistent and fair results for all athletes, including those on the edges of prior reference ranges and those with a limited number of tests.

5.1 Dataset Preparation

To systematically evaluate the specificity and reliability of the Bayesian hierarchical model, we created synthetic datasets representing a wide range of athletes' blood parameters.

The dataset simulates hemoglobin levels based on the priors defined in the original study and uses a simplified version of the model:

- The hemoglobin levels for each athlete follow a normal distribution with parameters μ and σ.
- The mean μ is modeled as a normal distribution with parameters μ_0 and $\tau_0^2 = 7.6^2$. The value of μ_0 (mean) is adjusted for each athlete based on a set of six population-specific factors.
- The standard deviation, σ, is considered fixed at 5.501.

To generate the dataset, we first calculated the values of μ_0 for all possible combinations of population-specific factors, taken from the study by Sharpe et al. [Sharpe et al., 2002]. Based on these computed values of μ_0, which ranged from 124 to 168, we grouped athletes into 11 categories using values of $\mu_0 = \mu_{\text{group}}$ in intervals of size 5 (120, 125, ..., 170). Each group served as the basis for simulating athletes with similar expected hemoglobin levels.

For each group, we systematically simulated synthetic athletes. Each athlete was assigned an individual mean hemoglobin level, μ_{athlete}, which was computed as the group mean μ_{group} plus a random offset. This offset, ε, was drawn from a normal distribution with a mean of zero and a variance τ^2. Thus, the individual mean for each athlete was expressed as:

$$\mu_{\text{athlete}} = \mu_{\text{group}} + \varepsilon, \quad \text{where } \varepsilon \sim N(0, \tau^2).$$

The term $\varepsilon \sim N(0, \tau^2)$ ensures that each athlete has a unique μ_{athlete}, while still reflecting values typical for their category. The testing process must describe a realistic situation where we estimate μ_{group} for each athlete, but we do not know the true values of μ_{athlete}. If we used $\mu_{\text{athlete}} = \mu_{\text{group}}$, our results would be biased, because the model would immediately know the exact distribution from which the data come from.

To improve consistency and facilitate systematic analysis, μ_{athlete} values were not generated purely at random from from $N(\mu_{\text{group}}, \tau^2)$. Instead, they were systematically selected based on a predefined set of percentiles, corresponding to multiples of the standard deviation (τ) from the mean, ranging from -4τ to 4τ. Due to the symmetry of the normal distribution, athletes were grouped such that those in the p-th percentile were paired with those in the $(100-p)$-th percentile.

Once the individual mean values (μ_{athlete}) were determined, we generated hemoglobin test results for each athlete. These values were drawn from a normal distribution with the athlete-specific mean, μ_{athlete}, and a fixed standard deviation of $\sigma = 5.501$.

In summary, for each group mean, μ_{group}, in the range from 120 to 170 (with a step size of 5), we divided the normal distribution $N(\mu_{\text{group}}, \tau = 7.6)$ into 5 percentile groups, based on the distance from the mean $\{0\tau, 1\tau, 2\tau, 3\tau, 4\tau\}$. Using the values at these percentiles as μ_{athlete}, we generated 2000 athletes per percentile group. To maintain balance across the groups, athletes corresponding to negative offsets ($-k\tau$) were paired with those from positive offsets ($k\tau$), with 1000 athletes generated for each. For the unpaired group at 0τ, 2000 athletes were generated. Finally, for each athlete, 20 hemoglobin test samples were drawn from the normal distribution $N(\mu_{\text{athlete}}, \sigma = 5.501)$.

5.2 Model Evaluation

To evaluate the Bayesian hierarchical model, we applied it to infer the predictive distributions for each synthetic athlete. For each athlete, the model iteratively updated the predictive distribution as new test samples were introduced. For each test sample, the model calculated the 99.9% credible interval of the predictive distribution and verified whether the observed test result fell within this interval.

The 99.9% credible interval is derived from the posterior predictive distribution. It represents the range within which 99.9% of future observations are expected to fall. The formula for the 99.9% credible interval is:

$$\mathrm{CI}_{0.999} = \mu_n \pm z_{0.999}\sqrt{\sigma^2 + \tau_n^2}$$

The same steps apply for the prior predictive distribution, but using μ_0 and τ_0^2 instead of μ_n and τ_n^2, respectively.

5.3 Key Parameters Dictionary

Here, we explain the established key terms used in data generation and subsequent testing to enhance clarity.

- $\mu_{\mathbf{group}}$: This value is assigned to each athlete based on six external factors. It is the initial estimate of the true value of μ_0 for each athlete and reflects the group-level expectation. It serves as the starting point (prior) for the model.
- $\mu_{\mathbf{athlete}}$: This is the true, individual value of μ_0 for each athlete. Each athlete has a unique value for μ_{athlete}, which we use when generating data. However, during model testing, this value is treated as unknown, and the model aims to infer it based on the observed data.
- **Percentile Group**: This represents the deviation of the individual athlete's initial estimate of μ_0 (μ_{group}) from his real value (μ_{athlete}). The k-th percentile group corresponds to a deviation of size $k \times \tau$, where τ represents the variability between athletes.
- **Test ID**: Represents the order of tests for a given athlete. A Test ID = n means that $n-1$ samples were used for the prediction of the athlete's data.
- **Outlier Count**: Number of samples outside the predictive interval - flagged as abnormal.

6 Results

To evaluate the reliability of the model across different athlete groups categorized by specific criteria, we used several types of visualization. In particular, we aimed to test the model's behavior for the following groups of athletes:

1. With blood parameters in extreme percentiles of the population distribution.
2. When using a limited number of test results for inference.

6.1 Specificity Across Percentile Groups

The first analysis focuses on evaluating the impact of prior estimates on the model's performance.

From Figure 4, we observe a significantly higher number of outliers detected among athletes in the extreme percentile groups. The highest false-positive rate occurs when the athlete's true μ_{athlete} lies in the tails of the distribution $N(\mu_{\text{group}}, \tau^2)$. The highest value of false-positive rate, exceeding 2.5%, belongs to athletes with a prior mean μ_0 deviating by 4τ from the expected mean.

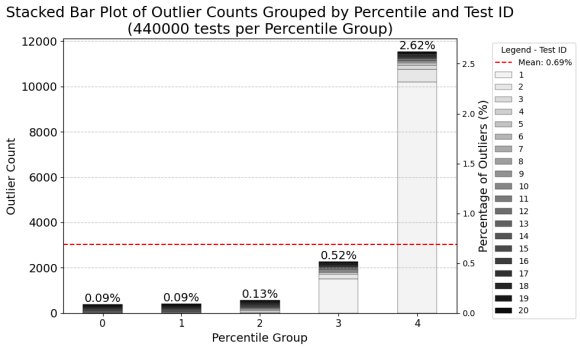


Figure 4: Distribution of outlier counts by percentile group and categorized by test ID.

This observation suggests that the model's reliability decreases when the prior μ_0 is inaccurately specified. The relationship between the prior μ_0 and the number of outliers follows an exponential trend within the $0-4\tau$ range of percentile groups. As the deviation between the expected prior μ_0 and the true μ increases, the number of outliers increases exponentially, as shown in Figure 5.

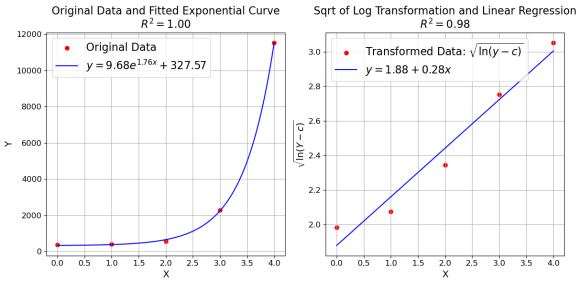


Figure 5: Exponential and linear regressions for the relationship between the prior μ_0 and outlier counts.

The fitted exponential function for this relationship yielded the parameters $a = 9.68$, $b = 1.76$, and $c = 325.57$. To linearize the data, we applied a square-root transformation to the logarithm. A linear regression on the transformed data produced an intercept of 1.88 and a slope of 0.28, with an R^2 value of 0.96 and a correlation coefficient of $r = 0.98$.

6.2 Specificity Across Test ID

Inaccuracy in estimating μ_0 is not the only factor influencing the false-positive rate. Figure 4 reveals that the distribution of errors across test IDs (represented by the colors in the bars) is not uniform among the percentile groups. To explore this further, we examined a detailed breakdown by test ID in Figure 6.

The following trends were observed:

- **Test 1:** Errors occur primarily in percentile groups 2, 3, and 4, affecting athletes with an inaccurate initial estimate of μ_0. Group 4 exhibits the highest error rate (46.35%), with its size exceeding the combined sizes of groups 2 and 3 by more than 6.5 times.
- **Test 2:** Errors were also observed in groups 0 and 1, while the prominence of errors in group 4 dropped to 2.47%, which still remains significant.
- **Tests 3–6:** The false-positive rate in groups 3 and 4 becomes less dominant, gradually aligning with other groups.
- **Tests 10, 15, 20:** False-positive rates stabilize across all percentile groups, with prior estimates μ_0 no longer having a significant impact. The model became equally reliable for all athletes.

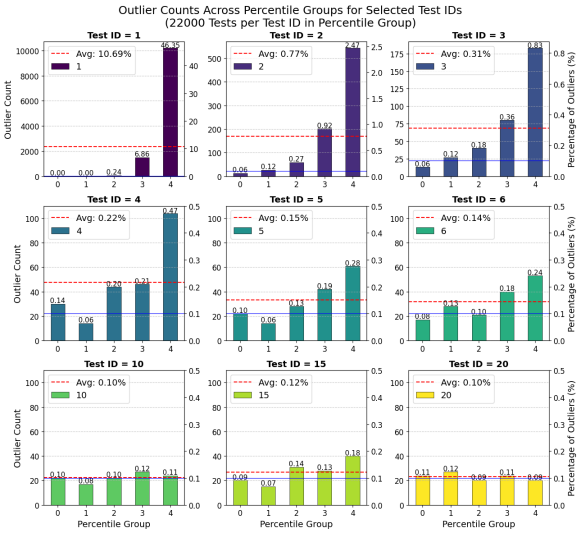


Figure 6: Outlier counts and percentages for different percentile groups across selected test IDs.

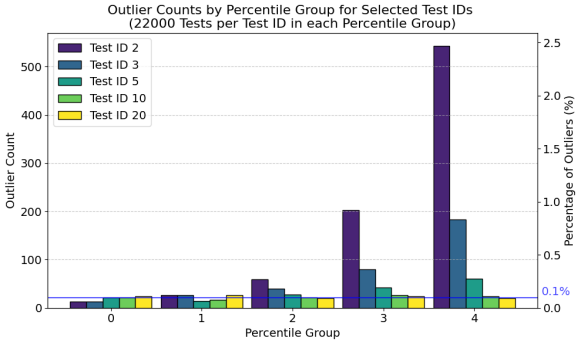


Figure 7: Clustered false-positive rates for percentile groups over time.

These trends are more clearly visualized in the clustered plot in Figure 7. Test ID 1 was excluded from this graph to avoid skewing the results due to extreme values. As shown, the false-positive rate converges across groups as the number of tests increases, indicating that the influence of inaccurate prior estimates diminishes over time.

These observations lead us to address another critical question: **At which test does the model become equally reliable across all groups?** In other words, **when does the influence of the initial inaccurate estimate diminish?**

To investigate this, we revisualized the data to more effectively demonstrate the influence of the test

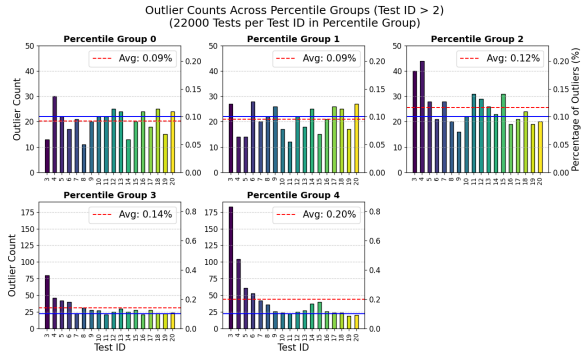


Figure 8: False-positive rate across percentile groups over time. To enhance readability, only data from Test ID > 2 are displayed.

ID on each percentile group, as shown in Figure 8. Due to extreme values, the error rates for Test IDs 1 and 2 across percentiles are more clearly depicted in Figure 6.

- For **Percentile Group 4**, the false-positive rate is initially high, peaking at 46.3% in Test 1. This is followed by a sharp decline to 2.5% in Test 2. Subsequently, the error rate decreases gradually and stabilizes at approximately 0.1% after the 8th test.
- In **Percentile Group 3**, the false-positive rate starts at 6.9% for Test 1, then drops significantly to 0.9% in Test 2. It continues to decrease, reaching approximately 0.1% by the 6th test.
- For **Percentile Group 2**, the false-positive rate is relatively low, beginning at 0.24% for Test 1. Between Tests 2 and 4, the error rates fluctuate slightly, reaching values 0.27%, 0.18%, 0.2%. After Test 5, the error rate stabilizes consistently at approximately 0.1%.
- In **Percentile Group 1**, the false-positive rate is zero for Test 1. There are no notable deviations thereafter, with average false-positive rate 0.09%.
- Finally, in **Percentile Group 0**, the false-positive rate is zero for the first two tests. For subsequent tests, the false-positive rate stabilizes around the average value of 0.09%.

As in the previous case, we approximated the error behavior as a function of test ID for each percentile group. The false-positive rate decreases exponentially with the increasing number of tests. Figure 9 shows that this trend holds for groups 2, 3, and 4, with groups 3 and 4 exhibiting a significant drop between the first and second tests. For these groups the curve exponentially approaches a value of 0.1%. For groups 0 and 1, there is no exponential trend; the values fluctuate around a stable false-positive rate of 0.1%.

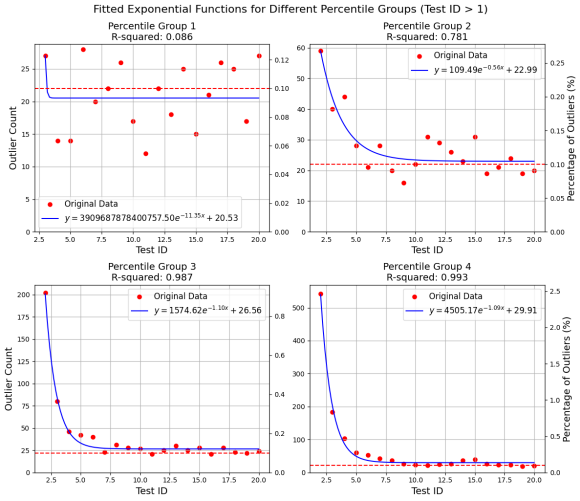


Figure 9: Exponential decrease in error rates observed in percentile groups 2, 3, and 4. For percentile groups 0 and 1, values remain stable around 0.1%.

6.3 Abnormal Sample Detection Example

To illustrate the model's adaptation process, we present examples of flagged abnormal samples. It highlights the challenges of early predictions when priors significantly differ from the true distribution.

Figure 10 shows the case of an athlete with a true mean of $\mu_{\text{athlete}} = 155.2$ (red line) and an initial prior mean set to $\mu_0 = 140$ (purple solid line). The second measurement is flagged as abnormal due to a combination of two factors: the lower prior mean, which shifted the predictive interval downward, and the first measurement being close to the extreme edge of the athlete's true distribution, which caused the predictive interval to narrow quickly (green dashed line). It is important to note that if a later measurement had the same value, it would be correctly evaluated within the predictive interval.

A similar situation is shown in Figure 11, where the first measurement is located outside the predic-

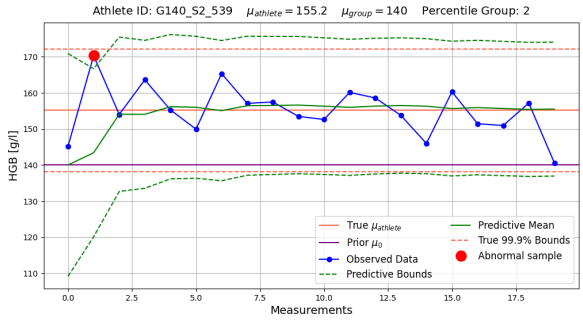


Figure 10: Second measurement flagged as abnormal due to underestimated prior mean and the first measurement's extreme value.

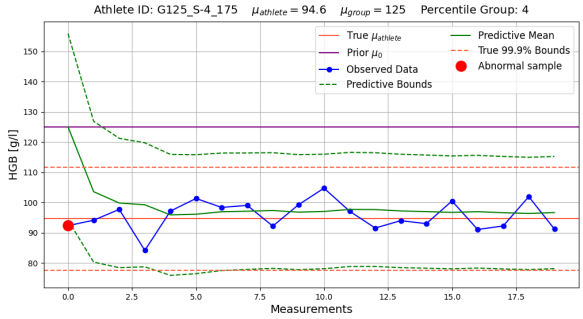


Figure 11: First measurement flagged as abnormal due to an inaccurate estimation of the athlete's mean.

tive interval. As in the previous case, the prior mean ($\mu_0 = 125$) was significantly higher than the athlete's true value ($\mu_{\text{athlete}} = 94.6$). Over time, the model adapts to reflect the true distribution of the athlete. Subsequent measurements with similar values are no longer flagged as outliers.

6.4 Analysis of Model Behavior

The observed results are consistent with the expected behavior of the posterior mean μ_n and variance τ_n^2, both of which are strongly influenced by the number of observations n.

The posterior predictive distribution of x is a multivariate normal with mean μ_n and covariance matrix $\sigma^2 I + \tau_0^2 \mathbf{1}\mathbf{1}^\top$. A single observation, x_{new}, follows a Normal distribution with prior mean μ_n and variance $\sigma^2 + \tau_n^2$.

$$x_{\text{new}} \mid \sigma^2 \sim N\left(\mu_n, \sigma^2 + \tau_n^2\right)$$

The formulas for the posterior mean μ_n and variance τ_n^2 are as follows:

$$\mu_n = \left(\frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{\tau_0^2}\right)^{-1} \cdot \left(\frac{n}{\sigma^2}\bar{x} + \frac{1}{\tau_0^2}\mu_0\right),$$

$$\tau_n^2 = \left(\frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{\tau_0^2}\right)^{-1}.$$

Small n:

- **Mean** (μ_n): When n is small, the term $\frac{1}{\tau_0^2}$, representing the influence of the prior mean μ_0, dominates because $\frac{n}{\sigma^2}$ is small. Consequently, the posterior mean μ_n is heavily biased towards μ_0, as the observed data ($\bar{x}$) have limited effect.
- **Variance** ($\sigma^2 + \tau_n^2$): For small n, $\tau_n^2 \approx \tau_0^2$, posterior variance remains high reflecting a high level of uncertainty from the prior. Combined with σ^2, it results in a wide predictive interval.

Large n:

- **Mean** (μ_n): As n increases, the term $\frac{n}{\sigma^2}$ becomes dominant, leading to $\mu_n \approx \bar{x}$. In this case, the posterior mean is primarily determined by the data, and the influence of the prior diminishes.
- **Variance** ($\sigma^2 + \tau_n^2$): Our uncertainty about a new sample x_{new} depends on both the uncertainty about the data mean τ_n^2 and the data variability σ^2. As $n \to \infty$, uncertainty about the population mean μ decreases ($\tau_n^2 \approx 0$), but sampling variability σ^2 persists. Consequently, the predictive interval narrows, providing more precise predictions.

As n grows, it becomes evident that the model shifts from relying on the prior to being more influenced by the data. This highlights the importance of having sufficient data for accurate modeling.

7 Discussion

Although the visualization is simple, the results clearly highlight two key findings.

1. The model demonstrates high reliability when the initial parameters of the athletes are accurately estimated.

2. Conversely, when these initial estimates are inaccurate, the false-positive rate during the initial tests becomes unacceptably high.

We found that the model systematically fails when only a small number of tests are performed, especially if the mean parameter is not properly assigned to the appropriate group based on six key factors. It is important to note that these groups are constructed using population data. However, athletes for whom these methods are designed often fall at the edges of reference values. As more data are gathered, the model's performance improves and stabilizes. Under stable conditions, when sufficient data from an athlete are collected, the model achieves a false positive rate of approximately 0.1%, corresponding to a 99.9% confidence level. In practical terms, this means that one test out of 1,000 may be misclassified and require additional evidence to confirm the athlete's innocence.

One key challenge is that the model cannot account for external factors that might significantly alter an athlete's physiological parameters. In practice, this limitation is addressed by interpreting samples along with a questionnaire completed by athletes before each sample collection. The questionnaire helps identify whether external factors could have caused the observed changes. However, our work does not address whether these interpretations are fully accurate or account for differences in how athletes respond to external factors.

Another significant issue arises from the assumption that an athlete's parameter distribution remains constant over time. The model relies on a prior distribution established at the outset based on six key factors. This prior retains some weight throughout the testing process. Although its influence decreases as more data are collected, it may not fully reflect dynamic changes in the athlete's parameters. A potential improvement would involve periodically updating the prior using observed data or evolving factors.

Based on the identified weaknesses, we suggest the following recommendations for future applications:

1. A more individualized approach to athletes: This would enable more accurate initial parameter estimation and periodic updates to reflect changes over time.

2. Careful interpretation of early test results: It is crucial to verify whether the athlete has been classified correctly. If not, the false-positivity rate is extremely high.

3. Acknowledgment of the model's inherent limitations: It is a statistical tool that will always exhibit some level of false-positive rate.

4. Replacing the log-normal distribution: The log-normal prior makes it difficult to express results analytically, leading to computational inefficiency and reduced interpretability. We propose two potential alternatives:

    - Simplifying the model by treating the distribution parameter (sigma) as fixed.
    - Replacing the lognormal prior with an inverse gamma distribution, which offers greater numerical stability while preserving a certain degree of uncertainty for σ.

Despite these challenges, the model currently represents the best available option, as no superior alternative is known at this time.

To sum up, our work demonstrates that the model can be systematically tested even without real-world data and publicly available software. Finally, it is crucial to acknowledge the need for further evidence, scientific debate, and transparent communication. This includes a detailed publicly available technical document to prevent misunderstandings and promote transparency in the methodology and results.

Acknowledgments

I would like to thank my supervisor, Richard Kollár, for his valuable advice, support, and expert guidance. I am also grateful to the professors at the university who provided me with a solid foundation in theoretical concepts and taught me how to critically approach academic topics. Finally, I want to thank my fellow students for their support during my studies.

References

[Banfi, 2011] Banfi, G. (2011). Limits and pitfalls of athlete's biological passport. *Clin Chem Lab Med*, 49(9):1417–21. Epub 2011 May 28, PMID: 21619475.

[Mahendru et al., 2020] Mahendru, D., Kumaravel, J., Mahalmani, V., and Medhi, B. (2020). Athlete biological passport: Need and challenges. *Indian J Orthop*, 54(3):264–270. PMID: 32399144, PMCID: PMC7205923.

[Malcovati et al., 2003] Malcovati, L., Pascutto, C., and Cazzola, M. (2003). Hematologic passport for athletes competing in endurance sports: a feasibility study. *Haematologica*, 88(5):570–81. PMID: 12745277.

[Robinson et al., 2007] Robinson, N., Sottas, P., Mangin, P., and Saugy, M. (2007). Bayesian detection of abnormal hematological values to introduce a no-start rule for heterogeneous populations of athletes. *Haematologica*, 92(8):1143–1144.

[Sanchis-Gomar et al., 2011] Sanchis-Gomar, F., Martinez-Bello, V., Gomez-Cabrera, M., and Viña, J. (2011). Current limitations of the athlete's biological passport use in sports. *Clin Chem Lab Med*, 49(9):1413–5. Epub 2011 May 28, PMID: 21619474.

[Sharpe et al., 2006] Sharpe, K., Ashenden, M., and Schumacher, Y. (2006). A third generation approach to detect erythropoietin abuse in athletes. *Haematologica*, 91(3):356–63. Epub 2006 Feb 17, PMID: 16503554.

[Sharpe et al., 2002] Sharpe, K., Hopkins, W., Emslie, K., Howe, C., Trout, G., and Kazlauskas, R. (2002). Development of reference ranges in elite athletes for markers of altered erythropoiesis. *Haematologica*, 87:1248–1257.

[Sottas et al., 2006] Sottas, P., Robinson, N., Giraud, S., Taroni, F., Kamber, M., Mangin, P., and Saugy, M. (2006). Statistical classification of abnormal blood profiles in athletes. *The International Journal of Biostatistics*, 2(1).

[Sottas et al., 2008] Sottas, P., Robinson, N., Saugy, M., and Niggli, O. (2008). A forensic approach to the interpretation of blood doping markers. *Law, Probability and Risk*, 7(3):191–210.

[WADA, 2023] WADA (2023). Athlete biological passport: Guidelines for version 9.0. Accessed: 2024-10-02.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 325–330
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Jan Gottweis, Jozef Rajník

Optimalizácia algoritmu pre testovanie kritickosti snarkov

Ján Gottweis* Jozef Rajník‡†

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

Abstrakt: Snark je 3-regulárny graf, ktorý nie je hranovo 3-farbený. Snark je kritický, ak po odstránení ľubovoľnej dvojice susedných vrcholov sa stane hranovo 3-zafarbiteľným. Doterajšie algoritmy testujú kritickosť priamočiaro – postupne odstraňujú každú dvojicu susedných vrcholov a testujú zafarbiteľnosť výsledného grafu.

V tejto práci predstavujeme efektívnejší algoritmus, ktorý v mnohých prípadoch redukuje počet potrebných testov zafarbiteľnosti. Náš prístup využíva informácie z jedného testu zafarbiteľnosti na výpočet zafarbiteľnosti pre mierne odlišný vstupný graf, čím redukuje redundantné výpočty.

Kľúčovým prvkom je transformácia farbenia pomocou vhodne zvolených cyklov, čo umožňuje efektívne odhadnúť kritické dvojice vrcholov bez nutnosti explicitného testovania všetkých dvojíc. Navrhovaný algoritmus tak výrazne zrýchľuje testovanie kritickosti snarkov, nakoľko pre väčšinu testovaných kritických snarkov znížil počet volaní testu zafarbiteľnosti na 1. Taktiež otvára zaujímavé teoretické otázky, ktoré môžu prispieť k výskumu kritických snarkov.

Kľúčové slová: kubické grafy, hranové farbenie, kritické snarky

Úvod

V teórii grafov sa ukázal veľký význam kubických[1] grafov, pretože veľké množstvo otvorených problémov minulého storočia pre všeobecné grafy, je redukovateľných na kubické grafy. Ak sa pozrieme napríklad na Tutteho hypotézu o nikde-nulovom 5-toku [Tutte, 1954], či už Szekeresovu [Szekeres, 1973] a Seymourovu [Seymour, 1979] hypotézu o dvojitom pokrytí cyklami, ukáže sa, že ak overíme ich platnosť pre kubické grafy, vyplynie z toho aj ich platnosť pre všeobecné grafy. Keďže však tieto hypotézy triviálne platia pre kubické hranovo 3-zafarbiteľné grafy, ukazuje sa veľmi dôležitý výskum kubických grafov, ktoré nie sú hranovo 3-zafarbiteľné. Takéto grafy nazývame *snarky*.

My sa špeciálne budeme venovať *kritickým* snarkom, teda snarkom, ktoré sa po odstránení ľubovoľnej dvojice susedných vrcholov stanú zafarbiteľnými. Kritické snarky sú teda istým zmyslom hraničným prípadom medzi 3-zafarbiteľnými kubickými grafmi a snarkami a taktiež základom pre konštrukciu zvyšných snarkov. [Mazák et al., 2021]

Doterajší prístup k overovaniu kritickosti snarkov pozostával z postupného odstraňovania každej dvojice susedných vrcholov a hľadanie farbenia pre zyšok grafu. Tento prístup, aj keď postačujúci pre menšie snarky, je veľmi neefektívny, pretože veľa krát hľadá farbenie na skoro tom istom vstupnom grafe.

V tomto článku sa zaoberáme prístupmi, ktoré umožnia čo najviac využívať informácie o farbení, ktoré sme pre graf bez nejakej dvojice vrcholov zistili, na hľadanie farbenia pre graf, ktorý získame odstránením nejakej inej dvojice vrcholov bez toho, aby sme museli odznova hľadať farbenie aj pre momentálne nezmenenú časť grafu.

1 Základné pojmy a prvé prístupy

Už poznáme čo sú kritické snarky, avšak nám sa pri práci s touto problematikou oplatí zadefinovať si aj pojem kritickej hrany. Hranu budeme označovať za *kritickú*, ak po odstránení vrcholov s ňou incidentných sa graf stane 3-zafarbiteľným.

Cielom našej práce je pre vstupný graf nájsť ľubovoľnú nekritickú hranu, alebo o všetkých hranách určiť, že sú kritické, volaním čo najmenšieho počtu testov zafarbiteľnosti, teda algoritmov na hľadanie farbenia.

1.1 Naivný priamočiary prístup

Všetky prístupy, ktoré spomenieme sa budú odrážať od nasledovného, ktorý postupne pre každú hranu overí či je kritická novým behom algoritmu pre hľadanie farbenia.

*gottweis2@uniba.sk
†jozef.rajnik@fmph.uniba.sk
‡Školiteľ

[1] 3-regulárnych

Algoritmus 1 Naivný priamočiary algoritmus

```
1: function SOLVE(u, v)        ▷ túto funkciu budeme upravovať v ďalších optimalizáciach
2:     solved(u, v) = True
3: end function
4: function CHECKCRITICAL(G)
5:     for edge(u, v) ∈ G do
6:         if solved(u, v) then
7:             continue;
8:         end if
9:         c = colouring of G − {u, v}
10:        if ¬exists c then
11:            return not critical
12:        end if
13:        SOLVE(u, v)
14:    end for
15:    return critical
16: end function
```

1.2 Päťuholíková veta

Prvá drobná optimalizácia, ktorá veľmi zvýši efektivitu prístupu pre grafy s obvodom 5 je už dokázaná Kászonyiho veta o päťuholníkoch a kritických grafoch.

Veta 1. *Nech G je snark a k kružnica dĺžky 5. Potom ak jedna hrana tejto kružnice je kritická, sú všetky hrany kružnice kritické. [Kászonyi, 1973]*

Ak teda počas vykonávania naivného prístupu nájdeme nejakú kritickú hranu, môžeme postupne prehľadať všetky päťuholníky, ktoré ju obsahujú a prehlásiť aj zvyšné hrany na nich za kritické.

Algoritmus 2 Päťuholníková optimalizácia

```
1: function SOLVE(u, v)
2:     if solved(u, v) then
3:         return;
4:     end if
5:     solved(u, v) = True
6:     for cycle in cycles of length 5 containing u, v do
7:         for edge(x, y) ∈ cycle do
8:             SOLVE(x, y)
9:         end for
10:    end for
11: end function
```

2 Farbenie ako cirkulácia

Ďalšie prístupy, ktorým sa budeme venovať v tejto práci sú založené na nasledovnej myšlienke.

Hranové 3-farbenia grafu môžeme interpretovať ako nikde-nulovú[2] cirkuláciu v $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$. V tomto poli môžeme zabudnúť na orientáciu hrán. Cirkulácia potom bude ohodnotenie hrán také, že pre každý vrchol platí, že súčet na hranách s ním incidentných je rovný 0. Ak farby reprezentujeme binárnymi hodnotami, je ľahké vidieť, že vrchol kubického grafu, ktorého incidentné hrany majú len hodnoty z 1, 2 alebo 3, má súčet týchto hodnôt rovný nule práve vtedy obsahuje každú z nich raz. Ide teda o hranové farbenie. Problém testovania 3-zafarbiteľnosti je teda ekvivalentný problému hľadania nikde-nulovej cirkulácie v grafe.

Pre potreby tejto práce budeme pracovať aj s grafmi, ktoré môžu mať hrany s len jedným koncovým vrcholom. Takéto hrany sú dôležité kvôli cirkuláciam, pretože odstránenie vrcholu, ktoré by viedlo aj k odstráneniu jeho susedných hrán, by znamenalo porušenie cirkulácie, pokial by hrany nemali hodnotu 0. My však dovolíme, aby po odstránení zostali hrany aj s jedným koncovým vrcholom, čo cirkuláciu nepokazí. Môžeme si všimnúť, že cirkulácia v takomto grafe sa bude dať rovnakým spôsobom previesť na hranové farbenie.

2.1 Pridanie nulových hrán

Tento prístup nám umožňuje pracovať s grafmi obsahujúcimi aj hrany farby 0. Ukážeme, že hrana je kritická práve vtedy, ak existuje v grafe cirkulácia, ktorá má hodnotu 0 práve na tejto hrane. Tieto myšlienky sa objavujú aj v iných článkoch, napr.: [Mačajová and Škoviera, 2021]. Preformulujeme ich však pre naše potreby.

Lema 1. *Nech c je cirkulácia v snarku G a nech hrana e má ako jediná hodnotu* 0*, potom hrana e je kritická.*

Dôkaz. Označme vrcholy s ktorými je hrana e incidentná u, v. Po odstránení vrcholov u, v z grafu zostáva graf, ktorý má nikde-nulovú cirkuláciu bez nulovych hrán[3], teda je to 3-zafarbiteľný kubický graf. □

[2] cirkulácia bez nulových hrán

[3] hrany incidenté s u, v iné ako e v grafe zostávajú len s jedným koncovým vrcholom

Lema 2. *Nech G je snark a hrana e grafu G je kritická, potom existuje cirkulácia c, ktorá má hodnotu 0 práve na hrane e.*

Dôkaz. Označme vrcholy s ktorými je hrana e incidentná u, v. Z kritickosti hrany e vieme, že existuje 3-farbenie grafu $G - \{u,v\}$[4], teda aj cirkulácia bez nulových hodnôt, označme ju c'. Skonštruujeme cirkuláciu c pre graf G. Pre všetky hrany f z G rôzne od e bude $c(f) = c'(f)$. Označme hrany rôzne od e, s ktorými sú vrcholy u, v incidentné postupne u_1, u_2 a v_1, v_2. Hrany u_1, u_2, v_1, v_2 tvoria rez grafu G preto ak existuje cirkulácia c, súčet ich hodnôt v nej musí byť 0. [Blanuša, 1946] [Descartes, 1948]

Ukážeme, že $c(u_1) = c(u_2)$. Sporom. Predpokladajme, že $c(u_1) \neq c(u_2)$. Keďže však súčet $c(u_1) \oplus c(u_2) \oplus c(v_1) \oplus c(v_2) = 0$, musí platiť $\{c(u_1), c(u_2)\} = \{c(v_1), c(v_2)\}$. Potom existuje hodnota $x = c(u_1) \oplus c(u_2)$, ktorá nie je 0. Ak teraz ohodnotíme hranu e hodnotou x, dostávame cirkuláciu v G bez použitia nulovej hrany, čo vieme interpretovať ako hranové 3-farbenie v G. Spor.

Vieme teda že $c(u_1) = c(u_2)$, teda aj $c(v_1) = c(v_2)$ a vieme aj vytvoriť cirkuláciu c, ktorá musí mať $c(e) = 0$. □

Veta 2. *Hrana e snarku G je kritická práve vtedy, keď existuje cirkulácia s hodnotou 0 práve na hrane e.*

Dôkaz. Lema 1 a Lema 2 dokazujú obe implikácie. □

2.2 Kempeho cykly

Definícia 1. *Nech c je hranové farbenie v grafe G, a, b sú dve rôzne farby a e je hrana tohoto grafu taká že c(e)=a. Potom Kempeho reťaz je maximálny súvislý podgraf obsahujúci hranu e, a ktorého hrany sú farieb a alebo b.*

Kempeho cykly budeme používať len v grafoch, ktoré obsahujú všetky hrany s oboma koncovými vrcholmi. Potom si môžeme všimnúť, že v kubických 3-zafarbených grafoch je Kempeho reťaz cyklus. Na zvýraznenie tejto skutočnosti budeme hovoriť o *Kempeho cykloch*. My však nemáme 3-zafarbené grafy, pretože v našej cirkulácií môžeme mať aj jednu hranu s hodnotou 0. Pozrime sa však na to, ako sa budú správať Kempeho reťaze obsahujúce jeden z vrcholov incidentných s nulovou hranou.

[4]hrany incidenté s u, v iné ako e opäť v grafe zostávajú len s jedným koncovým vrcholom

Lema 3. *Nech G je snark a c cirkulácia s hodnotou 0 práve na hrane e=(u, v). Označme farbu hrán iných od e, s ktorými je u incidentný a. Nech b je farba rôzna od a. Potom Kempeho reťaz farieb a, b obsahujúca vrchol u, bude cyklus.*

Dôkaz. Nech reťaz skončila v nejakom vrchole $w \neq u$ Máme 2 možnosti.

(1) $w \neq v$

(2) $w = v$

(1) Sporom. Do w sme vošli hranou jednej z farieb a, b, a keďže aj vo vrchole w platí, že súčet hodnôt hrán incidentných s ním je 0, musí byť incidentný aj s hranou druhej z týchto farieb, teda ešte môžme reťaz pokračovať. Spor.

(2) Sporom. Pozrime sa na cyklus tvorený touto reťazou a hranou e. Ak by sme ku každej hrane na tomto cykle pripočítali hodnotu $a \oplus b$ stále by sme mali cirkuláciu, keďže ku každému vrcholu na cykle sme 2 krát prirátali tú istú hodnotu, čo je v $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ rovné 0. Navyše by sme sa zbavili hodnoty 0 na hrane e, pričom by nikde inde hodnota 0 nevznikla, čím sme dostali hranové farbenie grafu G. Spor. □

2.3 Kempeho prepnutia

V dôkaze Lema 3 (2) sme využili techniku veľmi podobnú *Kempeho prepnutiam*. Skúsme túto techniku zovšeobecniť.

Kempeho prepnutie je v teorií grafov vymenenie farieb na Kempeho reťazi. Je ľahké si všimnúť, že po Kempeho prepnutí bude ofarbenie hrán stále farbením v grafe.

My zovšeobecníme túto myšlienku aj na cykly, ktoré obsahujú viac farieb. Interpretujme si opäť farbenie ako cirkuláciu v $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$. Potom Kempeho prepnutie na cykle pozostávajúcom z hrán farieb a, b je zhodné s pričítaním hodnoty $a \oplus b$ ku všetkým hodnotám na hranách cyklu.

Všimnime si však, že po pripočítaní ľubovoľnej hodnoty ku všetkým hranám cyklu sa nepokazí požiadavka na nulový súčet hrán incidentných s ľubovoľným vrcolom v grafe[5].

Kempeho prepnutia teda zovšeobecníme na pripočítanie ľubovoľnej hodnoty ku všetkým hranám na nejakom cykle. Zovšeobecnené Kempeho prepnutia sa budeme snažiť použiť na presúvanie informácie o kritickosti hrán.

[5]viď Lema 3 (2)

3 Uplatnenie Kempeho prepnutí

Nech hrana e je kritická a a, b, c, sú navzájom rôzne farby a sú rôzne od 0. Z Lema 2 vieme, že existuje cirkulácia, ktorá má hodnotu 0 práve na hrane e. Ak nájdeme cyklus ktorý obsahuje hranu e a okrem nej hrany farieb a, b a práve jednu hranu farby c, označme ju f, a spravíme na ňom Kempeho prepnutie s hodnotou c, dostávame cirkuláciu, kde hrana e má farbu c a hrana f má farbu 0, teda z Lema 1 vieme, že aj hrana f je kritická.

Definícia 2. *Zaujímavý cyklus v cirkulácií c je cyklus s práve jednou hranou hodnoty 0, pre ktorý existuje farba a rôzna od 0 taká, že obsahuje práve jednu hranu tejto farby.*

3.1 Hľadanie zaujímavých cyklov

Vytvoríme teraz algoritmický prístup k hľadaniu zaujímavých cyklov. Opäť rozšírime funkciu solve z 1, ktorá dostane hranu o ktorej sme zistili že je kritická, a farbenie zvyšných hrán, ktoré sme zistili popri kontrole kritickosti. Chceli by sme nájsť čo najviac zaujímavých cyklov a teda aj ďalších hrán, ktoré budú kritické.

Nech hrana e spájajúca vrcholy u, v je kritická, potom existuje cirkulácia c, ktorá má hodnotu 0 práve pre hranu e.

Nech hrany iné od e incidentné s vrcholmy u, v sú postupne u_1, u_2, v_1, v_2. Sú 2 možnosti:

(1) $c(u_1) \neq c(v_1)$

(2) $c(u_1) = c(v_1)$

V prípade (1) môžeme hľadať z vrchola u Kempeho reťaz k_1 s farbami $c(u_1), c(v_1)$. Z Lema 3 vieme, že táto reťaz bude cyklus. Rovnako nájdeme aj Kempeho reťaz k_2 z vrcholu v. Nech u', v' sú postupne vrcholy z cyklov k_1, k_2. Ak existuje hrana $u'v'$, musí byť nenulovej farby rôznej od $c(u_1)$ aj $c(v_1)$. Teda bude spolu s hranou e a časťami vyššie uvedených cyklov tvoriť zaujímavý cyklus.

V prípade (2) si môžeme vybrať ľubovoľnú nenulovú farbu b' rôznu od $c(u_1)$ a nájsť Kempeho cykly z vrcholov u, v s farbami $c(u_1)$, b'. Potom môžeme podobne ako v predošlej možnosti nájsť hrany, ktoré spájajú tieto cykly. Tieto hrany budú kritické.

Algoritmus 3 Implementácia prístupu 3.1

```
1:  function KEMPECYCLE(u, a, b)
2:      return kempecycle from vertex u of colors
        a, b
3:  end function
4:  function SWITCH(k, a)
5:      adds a to all edges on cycle k
6:  end function
7:  function SOLVE(u, v)
8:      if solved(u, v) then
9:          return
10:     end if
11:     solved(u, v) = True
12:     a, b = colors of edges incident with u, v
13:     if a ≠ b then
14:         k_u = KEMPECYCLE(u, a, b)
15:         k_v = KEMPECYCLE(v, a, b)
16:         for (x, y) ∈ edges do
17:             if x ∈ k_u ∧ y ∈ k_v then
18:                 u → x = path u...x on k_u
19:                 y → v = path y...v on k_v
20:                 c = color other than a, b
21:                 SWITCH(u → xy → vu, c)
22:                 SOLVE(x, y)
23:                 SWITCH(u → xy → vu, c)
24:             end if
25:         end for
26:     else
27:         for b' ∈ {1,2,3} ∧ b' ≠ a do
28:             k_u = KEMPECYCLE(u, a, b')
29:             k_v = KEMPECYCLE(v, a, b')
30:             for (x, y) ∈ edges do
31:                 if x ∈ k_u ∧ y ∈ k_v then
32:                     u → x = path u...x on k_u
33:                     y → v = path y...v on k_v
34:                     c = color other than a, b'
35:                     SWITCH(u → xy → vu, c)
36:                     SOLVE(x, y)
37:                     SWITCH(u → xy → vu, c)
38:                 end if
39:             end for
40:         end for
41:     end if
42: end function
```

4 Optimalizácie

Počas testovania sme si zaznamenali možné optimalizácie tohoto postupu, keďže pre niektoré grafy a cirkulácie s jednou nulovou hranou nenájde všetky hrany, ktoré vieme postupnosťou Kempeho prepnutí previesť na nulové.

4.1 Päťuholníky

Do algoritmu môžeme explicitne dodať aj optimalizáciu z Algoritmus 2, keďže sa nám nepodarilo dokázať ani vyvrátiť, že náš postup pre každú hranu na cykle dĺžky 5 pre ktorú zistí, že je kritická, označí aj zvyšné hrany z tohoto cyklu za kritické.

Táto zmena môže zvýšiť efektivitu postupu pre snarky s obvodom 5.

4.2 Kempeho prepnutie pre viac možností

Značné zlepšenia sme zaznamenali, aj ak v odseku 3.1 v možnosti (1) namiesto hľadania Kempeho reťazí s farbami $c(u_1) \neq c(v_1)$, nájdeme Kempeho cyklus ktorý obsahuje vrchol a má farby $c(u_1), c(v_1)$ a aplikujeme na neho Kempeho prepnutie s hodnotou $c(u_1) \oplus c(v_1)$. Tak sa dostaneme do stavu z možnosti (2), kde si už môžeme vybrať postupne každú z dvoch zvyšných farieb a hľadať spojenia cyklov pre ne.

Intuitívne sa dostávame do možnosti kde máme väčší výber, takže si určite nepohoršíme, a vpraxi môže táto optimalizácia až zniekoľkonásobiť efektivitu pre veľké grafy.

4.3 Test zafarbiteľnosti

Napriek tomu, že zmyslom projektu nie je testovať zafarbiteľnosť grafu, je to jeho nevyhnutnou súčasťou. Rozhodli sme sa použiť SAT-solvery, ktoré sú verejne dostupné, špeciálne zChaff. [Moskewicz et al., 2001] Takto vieme aj pre veľké grafy v priebehu pár sekúnd nájsť farbenie, čo pre lepšie algoritmy, ako napríklad Algoritmus 4 vedie k behu len pár sekúnd aj pre snarky o veľkosti 300 - 400 vrcholov.

4.4 Testovacie dáta

Algoritmy popísané v tomto článku sme testovali na veľkom množstve grafov hlavne vo veľkosti 30 - 40 vrcholov. Pre tieto grafy dostatočne rýchlo vieme zistiť zafarbiteľnosť a teda aj kontrolovať korektnosť implementácie. Okrem toho sme efektívnejšie prístupy testovali aj na snarkoch o veľkosti 300 - 400 vrcholov, ktoré tiež vyriešili v priebehu sekúnd.

Algoritmus 4 Implementácia prístupu 4.2

```
1:  function SOLVE(u, v)
2:      if solved(u, v) then
3:          return
4:      end if
5:      solved(u, v) = True
6:      a, b = colors of edges incident with u, v
7:      if a ≠ b then
8:          k_v = KEMPECYCLE(v, a, b)
9:          SWITCH(k_v, a ⊕ b)
10:     end if
11:     for b' ∈ {1,2,3} ∧ b' ≠ a do
12:         k_u = KEMPECYCLE(u, a, b')
13:         k_v = KEMPECYCLE(v, a, b')
14:         for (x, y) ∈ edges do
15:             if x ∈ k_u ∧ y ∈ k_v then
16:                 u → x = path u...x on k_u
17:                 y → v = path y...v on k_v
18:                 c = color other than a, b'
19:                 SWITCH(u → xy → vu, c)
20:                 SOLVE(x, y)
21:                 SWITCH(u → xy → vu, c)
22:             end if
23:         end for
24:     end for
25:     if a ≠ b then
26:         k_v = KEMPECYCLE(v, a, b)
27:         SWITCH(k_v, a ⊕ b)
28:     end if
29: end function
```

5 Výsledky

Všetky zlepšenia udávame len pre kritické snarky, nakoľko v praxi pre nekritické aj základný algoritmus na prvých pár behov vyskúšal aspoň jednu nekritickú hranu a tým pádom nebolo možné dostatočne porovnávať efektivitu.

S optimalizačným algoritmom Algoritmus 3 sme zaznamenali až 31-násobné zlepšenie oproti základnému algoritmu.

Optimalizácia z Algoritmus 4 si pre menšie snarky s počtom vrcholov približne 40 vystačí väčšinou s jedným behom algoritmu na hľadanie farbenia, čo však oproti Algoritmus 3 nedáva veľké percentuálne

zlepšenie. Na veľkých snarkoch s počtom vrcholov 300 - 400 sme však zaznamenali ešte približne 8 násobné zlepšenie, pričom v priemere boli potrebné 2 až 3 behy algoritmu pre hľadanie farbenia.

Tabuľka 1: Počet behov algoritmov pre hľadanie farbenia, pre rôzne prístupy a veľkosti snarkov

Veľkosť	Petersen	≤ 26	≤ 36	≤ 400
Počet snarkov	1	100	500	5
Algoritmus 1	15	3831	27000	2604
Algoritmus 2	1	1378	17375	2604
Algoritmus 3	1	123	879	82
Algoritmus 4	1	100	512	12

Záver

Výsledky tejto práce otvárajú nové otázky ako napríklad, ktoré snarky potrebujú viac ako jeden test zafarbiteľnosti a prípadné skúmanie ich vlastností.

Našli sme aj ďalšie metódy, ktoré pre niektoré grafy a cirkulácie s práve jednou nulovou hranou môžu nájsť väčšie množstvo hrán, ktoré sa dajú pomocou Kempeho prepnutí prepnúť na nulové, ktoré sú však zložitejšie na implementáciu a časovú zložitosť.

Poďakovanie

Ďakujem Jozefovi Rajníkovi za za jeho čas, ochotu, odbornú pomoc a rady, ktoré mi pomohli pri vypracovávaní tejto práce.

Literatúra

[Blanuša, 1946] Blanuša, D. (1946). Problem četiriju boja. *Glasnik Mat. Fiz. Astr. Ser. II*, 1:31–42.

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

[Kászonyi, 1973] Kászonyi, L. (1973). On the structure of coloring graphs. *Ann. Univ. Sci. Budapest Eötvös Sect. Math.*, 16:25–36.

[Mazák et al., 2021] Mazák, J., Rajník, J., and Škoviera, M. (2021). Morphology of small snarks. *arXiv preprint arXiv:2112.04335*.

[Mačajová and Škoviera, 2021] Mačajová, E. and Škoviera, M. (2021). Critical and flow-critical snarks coincide. *Discussiones Mathematicae Graph Theory*, 41:503–511.

[Moskewicz et al., 2001] Moskewicz, M. W., Madigan, C. F., Zhao, Y., Zhang, L., and Malik, S. (2001). Chaff: Engineering an efficient sat solver. In *Proceedings of the 38th Annual Design Automation Conference (DAC)*, pages 530–535. ACM.

[Seymour, 1979] Seymour, P. D. (1979). Sums of circuits. In Bondy, J. A. and Murty, U. R. S., editors, *Graph Theory and Related Topics*. Academic Press, New York.

[Szekeres, 1973] Szekeres, G. (1973). Polyhedral decomposition of cubic graphs. *Bulletin of the Australian Mathematical Society*, 8:367–387.

[Tutte, 1954] Tutte, W. T. (1954). A contribution to the theory of chromatic polynomials. *Canadian Journal of Mathematics*, 6:80–91.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 331
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Štefánia Glevitzká, Robert Jajcay

Cubic girth-regular graphs of girth 6

Štefánia Glevitzká* Robert Jajcay†‡

Department of Algebra and Geometry, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

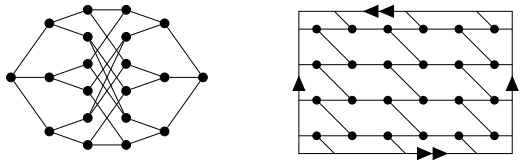
Given a graph Γ, the *girth* of Γ is the length of a shortest cycle in Γ and *girth cycles* are the shortest cycles in Γ. For each edge e of Γ, let $\varepsilon(e)$ denote the number of girth cycles containing the edge e. For each vertex v of degree k in Γ, let $\{e_1, e_2, \ldots, e_k\}$ be the set of edges incident with v, ordered in such a way that $\varepsilon(e_1) \leq \varepsilon(e_2) \leq \ldots \leq \varepsilon(e_k)$. Then the k–tuple $(\varepsilon(e_1), \varepsilon(e_2), \ldots, \varepsilon(e_k))$ is said to be the *signature of* v. If Γ is regular and all vertices of Γ are of the same signature, we say that Γ is *girth-regular*. The shared signature of vertices is then called the *signature of* Γ.

The concept of girth-regularity was introduced in [Potočnik and Vidali, 2019] motivated by the observation that in multiple areas of research of vertex-transitive graphs, the vertex-transitivity was not used to its full strength. Recall that a graph Γ is *vertex-transitive* if for every pair u and v of vertices of Γ there exists an automorphism of Γ that maps u to v. As automorphisms preserve adjacency, they preserve also many other graph-theoretical properties such as the degree of a vertex and its signature. Thus every vertex-transitive graph is necessarily girth-regular.

Besides the introduction of girth-regularity, several necessary conditions on signatures of cubic girth-regular graphs were proved in [Potočnik and Vidali, 2019], together with a classification of all cubic girth-regular graphs of girth at most 5. Consequently, the same authors classified all cubic vertex-transitive graphs of girth 6 in [Potočnik and Vidali, 2022], with respect to the signatures that are attained. Notably, many parts of the proof of the second classification rely on girth-regularity alone and do not specifically require full vertex-transitivity. This suggested to us the possibility to extend their results to the wider class of girth-regular graphs.

Our work was motivated mainly by the question whether the list of attainable signatures expands if we consider all cubic girth-regular graphs of girth 6, not just vertex-transitive ones. Together with Potočnik and Lekse, we were able to prove negative answer to this question. In particular, we showed that there are only nine signatures attainable by cubic girth-regular graphs of girth 6, namely $(8,8,8)$, $(6,6,6)$, $(4,5,5)$, $(3,4,5)$, $(4,4,4)$, $(2,3,3)$, $(2,2,2)$, $(1,1,2)$ and $(0,1,1)$, all of which are known to be realizable via vertex-transitive graphs. In addition, we succeeded at classifying all girth-regular graphs of girth 6 for each of the above signatures as follows.

The girth-regular graphs of signatures $(2,2,2)$, $(1,1,2)$ and $(0,1,1)$ have already been classified in [Potočnik and Vidali, 2019] for any general girth g. It was also known that the only cubic girth-regular graph of signature $(8,8,8)$ is the (3.8)-cage, the Heawood graph. For the rest of the signatures, only the complete lists of vertex-transitive graphs were known. In our joint work, we were able to fill this gap. We showed that all graphs with signatures $(6,6,6)$, $(4,5,5)$ or $(3,4,5)$ are vertex-transitive. Beside two previously known vertex-transitive graphs, there is only one girth-regular graph attaining signature $(4,4,4)$, which is not vertex-transitive and is illustrated in Figure 1a. On the other hand, there is an infinite family of non-vertex-transitive girth-regular graphs of signature $(2,3,3)$, all of them of the structure shown in Figure 1b.



(a) (b)

Figure 1: Girth-regular graphs of girth 6

Acknowledgments

Both authors are supported by grant VEGA 1/0437/23, and the second author is also supported by grants APVV-23-0076 and SK-AT-23-0019.

References

[Potočnik and Vidali, 2019] Potočnik, P. and Vidali, J. (2019). Girth-regular graphs. *Ars Mathematica Contemporanea*, 17(2):349–368.

[Potočnik and Vidali, 2022] Potočnik, P. and Vidali, J. (2022). Cubic vertex-transitive graphs of girth six. *Discrete Math.*, 345(3).

*stefania.glevitzka@fmph.uniba.sk
†robert.jajcay@fmph.uniba.sk
‡Supervisor

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 332
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Makuochukwu Felix Oguagbaka, Robert Lukoťka

Covering defects of cubic graphs

Makuochukwu Felix Oguagbaka[1*] Robert Lukoťka[1‡]

[1] Katedra informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Every cubic graph can have its edges properly colored with 3 or 4 colors [Vizing, 1964]. Those that require 3 colors are known as *3-edge-colorable cubic graphs*, while those that require 4 colors are called *snarks*. Snarks that are cyclically 4-edge-connected and has girth at least 5 are said to be *nontrivial*. The *girth* of a graph is the length of its shortest cycle, and according to [Tutte, 1960], a graph G is said to be *cyclically k-edge-connected* if it contains no set S of fewer than k edges such that $G - S$ contains at least two cycle-containing components. As a consequence of Vizing's theorem, every cubic graph G can have its edges covered by four matchings, known as a *matching cover* of G. If the four matchings are perfect, we call the collection a *perfect matching cover* of G. Cubic graphs that admit a perfect matching cover are said to be *coverable*, this consists of all 3-edge-colorable cubic graphs and some snarks; otherwise, they are said to be *noncoverable*. Noncoverable cubic graphs are key to resolving many famous conjectures in graph theory, including the Berge conjecture and the 5-cycle double cover conjecture.

Covering defects of a cubic graph G are invariants that help us to investigate how far noncoverable cubic graphs are from being coverable. The *defect of a matching* of G is defined as half of the number of vertices it leaves uncovered, and the *defect of a matching cover* of G is sum of the defects of the matchings it contains. In our previous work [Oguagbaka and Lukoťka, 2024], we defined two covering defects of G. The first is the *four matching defect* of G, denoted by $d_M(G)$, defined as the minimum defect over all matching covers of G. The second is the *four perfect matching defect* of G, $d_{PM}(G)$, defined as the smallest number of edges whose removal results in a subgraph of G that admits a perfect matching cover. In this talk, we establish the following relationship between the two invariants.

Theorem 1. *Let G be a bridgeless cubic graph. Then* $d_M(G) \leq d_{PM}(G)$.

The idea of the proof of the above theorem is based on the following observations for a matching M and a path $v_0v_1 \dots v_n$ of G: If v_0v_1 and v_2v_3 are in M, one can remove both edges and add v_1v_2; if v_1v_2 is in M and v_0 is not covered by M, one can remove v_1v_2 and add v_0v_1; and if v_i and v_{i+1} are not covered by M, one can add v_iv_{i+1}.

In the above theorem, equality is achieved if G is the Petersen graph or coverable. Besides, in [Oguagbaka and Lukoťka, 2024], we constructed an infinite family of nontrivial noncoverable snarks with equality attained between the two invariants, and we asked whether there exists cubic graphs for which the invariants differ. In this talk, we provide a positive answer to this question by demonstrating that the infinite family of nontrivial snarks, denoted by $G^{\#}$ and constructed from cubic graphs G as described in [Škoviera and Varša, 2022], satisfies $d_{PM}(G^{\#}) \geq 2d_M(G^{\#})$.

A notable feature of the proof of this result is that it involves the flow resistance of the base graph G. The *flow resistance* of a cubic graph G is the minimum number of zeros over all 4-flows on G.

References

[Oguagbaka and Lukoťka, 2024] Oguagbaka, M. F. and Lukoťka, R. (2024). Cubic graphs that are far from being coverable by four perfect matchings. *Proceedings of the Student Scientific Conference*, pages 352–363.

[Škoviera and Varša, 2022] Škoviera, M. and Varša, P. (2022). Np-completeness of perfect matching index of cubic graphs. In *39th International Symposium on Theoretical Aspects of Computer Science (STACS 2022)*, pages 56–1. Schloss Dagstuhl–Leibniz-Zentrum für Informatik.

[Tutte, 1960] Tutte, W. (1960). A non-hamiltonian planar graph. *Acta Mathematica Academiae Scientiarum Hungarica*, 11:371–375.

[Vizing, 1964] Vizing, V. G. (1964). On an estimate of the chromatic class of a p-graph. *Diskret analiz*, 3:25–30.

*felix.oguagbaka@fmph.uniba.sk
†lukotka@dcs.fmph.uniba.sk
‡Supervisor

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 333–342
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Damian Harenčák

Decentralized privacy-preserving federated learning for 3D scan processing

Damian Harenčák*

Supervisor: Lukáš Gajdošech[1†]

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

Abstract: Collaborative training of a machine learning model comes with a risk of sharing sensitive or private data. Federated learning (FL) offers a decentralized way of collectively training a single global model (typically neural network) without the need of sharing clients data, by sharing only the updated parameters from each clients local model. A central server is then used to aggregate parameters from all clients and redistribute the aggregated model back to the the clients. Studies have shown that even in this scenario, private data can be reconstructed only using information about model parameters. Current efforts of mitigating this are mainly focused on reducing privacy risks on the server side with the assumption that other clients will not act maliciously. In this work, we analyzed the effectiveness of reconstruction methods in environments typical for 3D scan processing, as well as various techniques for enhancing privacy of the client's data with respect to both the server and other clients. We approach this problem from different angles, for example, cryptographic encryptions with homomorphic properties, gradient compression, differential privacy, or network structure. We also implemented a proof of concept on hardware used in 3D scanners and simulated FL process in a setup with one server and two clients.

Keywords: federated learning, gradient inversion, data privacy, data reconstruction, neural network

1 Introduction

Rapid advancement in machine learning has raised significant concerns about data privacy, security, and regulatory compliance. Traditional centralized machine learning approaches typically require aggregating sensitive data from multiple sources into a single central server, which often leads to potential vulnerabilities and privacy breaches. One such example of where would this be crucial is private car companies that want to utilize ML models in context of automated segmentation of car parts to further improve whole automation process. Sometimes this data might be sensitive for competitive reasons, therefore its hard to collaborate with 3rd parties or other car companies to accelerate this improvement.

A common strategy to avoid transferring raw data to the server while still enabling the collaborative training of a shared model involves sending only the updated model parameters, which are then aggregated to refine the overall model. This decentralized training paradigm is known as federated learning. Although only gradients or parameter updates are transfered—thereby preventing direct access to clients' sensitive data—this approach does not guarantee complete privacy. Studies have demonstrated that, under certain conditions, it is possible to reconstruct the original data when an adversary gains access to the model structure, previous parameter states, and the updates ones. This vulnerability has consequently raised considerable concerns regarding the privacy and security of federated learning systems.

1.1 Federated learning

Federated learning (FL) [McMahan et al., 2023] is a collaborative training approach where multiple participants, also called clients, jointly train a single, shared global model—in this work a convolutional neural network (CNN)[O'Shea and Nash, 2015]—without sharing their raw training data. Instead, clients transmit model updates (e.g., parameters or gradients) to a central server, which aggregates these updates to improve the global model. This method is designed to operate in environments where the data across clients is not independent and identically distributed (non-IID), meaning that the local data on each client may not fully represent the overall population distribution.

In FL, a key part is the formulation of the global objective function that the collaborative training pro-

*harencak3@uniba.sk
†lukas.gajdosech@fmph.uniba.sk

cess seeks to optimize. Since the raw data never leaves the local devices, the model must be trained by combining the information from individual local datasets. This is achieved by defining the global objective function as an average of the local objective functions, such as:

$$\min_{w \in \mathbb{R}} f(w) \quad \text{where} \quad f(w) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} f_i(w)$$

where n is total number of local nodes, w represents parameters of the global model (e.g. weights and biases in CNN) and f_i is the local objective function at the i-th node. In a machine learning context, we typically set $f_i(w) = l(x_i, y_i; w)$, representing the loss incurred when predicting the sample (x_i, y_i) with model parameters w.

1.1.1 Federated averaging algorithm

McMahan et al. [McMahan et al., 2023] have proposed algorithm called Federated averaging (FedAvg), consisting of several steps and describing the entire FL training process:

1. **Initialization** - The process starts by initializing the global model parameters. These parameters can be set randomly or initialized using a pre-trained model that has demonstrated satisfactory performance.

2. **Selection of clients** - Next, a subset of clients is chosen from the available pool. This selection can be performed randomly or according to predefined set of standards.

3. **Local training** - Each selected client receives a copy of the global model parameters and proceeds to update its local model. The model is then trained using the client's local data, with the training process potentially involving an arbitrary number of iterations/epochs.

4. **Aggregation** - Upon completing local training, each client sends its updated model parameters back to the central server. The server aggregates these updates by computing a weighted average of the parameters using the formula:

$$w_{i+1} = \sum_{k=1}^{N} \frac{n_k}{m_i} w_{i+1}^k$$

where N is the size of the client subset, n_k represents the number of data points used by k-th client, $m_i = \sum_{k=1}^{N} n_k$ is the total number of data points, and w_{i+1}^k are the local parameters updated by the k-th client.

5. **Repeat** - The steps 2 to 5 are repeated until the global model achieves the desired level of convergence.

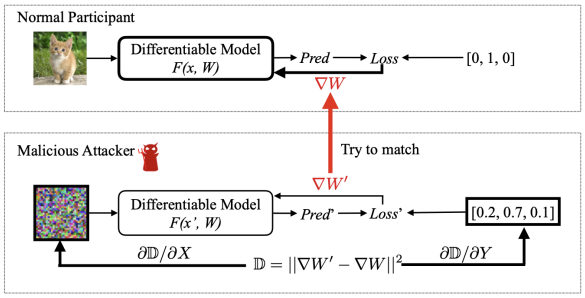


Figure 1: An outline of the DLG algorithm. Normal participant calculates ∇W after local training. A malicious attacker updates dummy input and dummy label to minimize distance between gradients [Zhu et al., 2019]

1.2 Privacy challenges

Even when only gradients or updated model parameters are shared, there is still a risk that the original data can be reconstructed. Ligeng Zhu et al. [Zhu et al., 2019] highlight the vulnerabilities in traditional gradient-sharing mechanisms by demonstrating "Deep Leakage from Gradients" (DLG). The study empirically validates that training data can be reverse-engineered from shared gradients, raising significant privacy concerns.

Figure 1 illustrates the DLG attack, which formulates the training process as an optimization problem. In a typical FL scenario, each client (referred to as a "normal participant") trains a model locally and computes its gradient ∇W. A malicious attacker—potentially the central server—then acquires this gradient. Given access to the same model and the original parameters W, the attacker initializes dummy input and dummy label. Through iterative optimization, these dummy variables are updated to minimize the distance between the real gradient ∇W and the dummy gradient $\nabla W\prime$, effectively reconstructing the original data.

Figure 2 shows the results of this optimization process. The attacker is able to recover the original training data in as few as 500 iterations, highlighting the

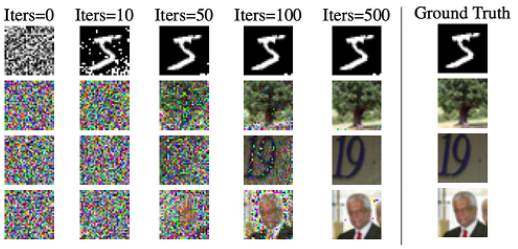


Figure 2: Results of the DLG algorithm after optimization using L-BFGS optimizer with learning rate 1 and max iterations 20 [Zhu et al., 2019]

severity of this privacy risk in FL environment.

Note that unless all clients mutually trust one another, every client can potentially act as malicious attacker and try to recover original data from others. The assumption of a lack of trust among clients is integral to this work.

Authors of DLG highlight some protective mechanisms that can be used to make the reconstriction harder. Gradient compression [Lin et al., 2020], where we prune values small in absolute terms, is suggested as an effective technique. Other methods include differential privacy (adding noise to the gradients), larger batch sizes or various encryption schemes.

2 Server-side privacy

In FL, a common method for mitigating the risk of gradient leakage from a central server is the application of specialized encryption schemes[Jiang et al., 2023], called homomorphic encryption, which facilitate secure aggregation of gradients. Homomorphic encryption allows arithmetic operations to be performed directly on encrypted data. Formally, if E denotes the encryption function and D the decryption function, the property can be stated as follows:

$$D\big(E(p_1)+E(p_2)\big) = p_1+p_2,$$

where p_1 and p_2 are plaintext inputs. This property ensures that the sum of encrypted values after decryption equals the sum of the original plaintexts. By enabling the addition of ciphertexts without requiring decryption, homomorphic encryption allows gradients to be encrypted prior to transmission. The server can then aggregate these encrypted gradients, and only the aggregated result is decrypted once sent back to clients.

The Paillier[Paillier, 1999] and CKKS[Cheon et al., 2017] encryption schemes are among the most widely used. This work focuses on their key attributes and distinctions:

2.1 Paillier encryption

- encrypts each scalar individually. In the context of FL, this means that if you want to secure an entire gradient vector, you must encrypt each element one by one. This adds additional overhead
- is designed for exact arithmetic operations over integers. It ensures that operations such as addition are performed precisely, which is crucial when exact results are necessary
- security primarily depends on the bit size of the key[1], where larger key size enhances security but increases computational cost and the size of ciphertexts. Recommended size for practical purposes is 2048bits at minimum. Smaller sizes are nowadays considered not secure enough.
- is additively homomorphic. This means it supports addition of two ciphertexts, as well as multiplication by a plaintext constant. It does not support multiplication of two ciphertexts.

2.2 CKKS encryption

- supports the encryption of an entire vector in a single ciphertext through a process known as packing. This allows us to perform operations on many numbers simultaneously which can lead to significant overhead improvements
- is based on approximate arithmetic on real or complex numbers and operates within polynomial rings of algebraic integers, that provide a space for encoding and computing on vectors. Instead of exact computation, it trades off a small amount of precision for greater efficiency and the ability to handle floating-point operations. Each operation on encrypted vector adds small noise to the result, which can possibly accumulate to a significant precision error.

[1]This is the bit size of modulus n, computed as product of two large primes, used when creating public-private key par

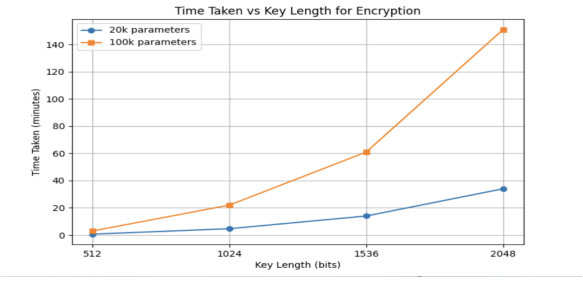


Figure 3: A graph showing time needed for different key lengths and parameter count in Paillier encryption

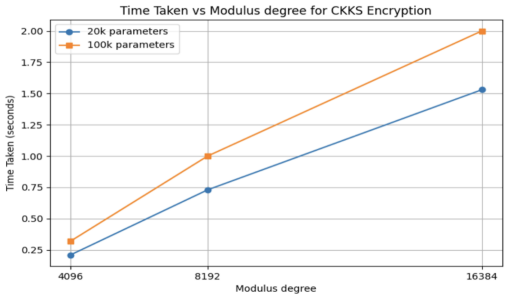


Figure 4: A graph showing time needed for different polynomial degree and parameter count for CKKS encryption

- involves several parameters:
  - polynomial degree - degree of polynomial that defines the ring. Higher degrees generally increase security but also the computational load.
  - ciphertext modulus - a larger modulus can support more complex computations before noise accumulates significantly but may reduce performance.
  - scaling factor: a constant used to convert plaintext numbers into integer representation before encryption, and then to recover approximate results after computations. It helps manage precision and control noise during operations
- is fully homomorphic. This means it supports both ciphertext addition and multiplication

2.3 Bits of security

A common way to measure security of an encryption scheme is called bits of security. n bits of security means an attacker would need to perform 2^n operations to break the cipher. Recommended way is to set encryption in such a way that it offers at least 128 bits of security.

2.4 Experiments

We will be using two python libraries for these encryptions. For Paillier, we will use phe library, and for CKKS we will use TenSeal library. A MacBook M3 Pro was used as hardware for these experiments.

In figure3 we can see the impractical overhead of Paillier encryption. Since 2048 bit key length corresponds to approximately 128 bits of security which is the minimum standard for practical uses, along with the fact that much larger networks are used in practice, this encryption seems highly impractical.

Polynomial degree	Max modulus size
4096	109
8192	218
16384	438

Table 1: Maximum modulus bit count for different polynomial degrees so the encryption is considered secure (128 bits of security)

For CKKS, TenSeal offers a table of CKKS paramater values that are equivalent to 128 bits of security, as shown in table1. In our setup, for each polynomial degree we adjust the modulus so that its equivalent to approximately 128 bits of security.

In figure4, we can observe the drastic improvement on encryption times for different polynomial degrees. Note that y axis is in seconds, while figure 3 has y axis in minutes. Although parameters are adjusted to maintain 128 bits of security, higher polynomial degree allows us to increase modulus, which in turn allows us to perform more computations before noise accumulation is significant. Further experiments on noise impact of specific parameter combinations are planned, as well as retesting current ones on edge devices used in 3D scanners.

3 Client-side privacy

Encrypted gradients solve the privacy threat from the central server. However, other clients receive and decipher gradients to update their local model. Assum-

ing they saved the last parameter state, any one of them can act maliciously and try to reconstruct other clients' data. This is inevitable as long as clients have access to the full model locally, therefore, other methods of increasing privacy are necessary.

3.1 Gradient compression

Let $G \in \mathbb{R}^{\ltimes} = (g_1, g_2, \ldots, g_n)$ be a vector that represents the flattened gradient obtained from traing a neural network model. Let $C(G, \varepsilon)$ be a compression function where ε a small constant. We define C as following:

$$C(G,\varepsilon) = (g'_1, g'_2, \ldots, g'_n) \text{ where } g'_i = \begin{cases} g_i & \text{if } |g_i| > \varepsilon \\ 0 & \text{else} \end{cases}$$

Since G is dependent on specific network structure and training samples, we will instead use a prune ratio P as that is more representative and united across different environments:

$$P(C(G,\varepsilon)) = \frac{\sum_{|g_i|<\varepsilon} 1}{n}$$

3.2 Noising gradients

Adding a noise to gradients after training can help obscure individual contributions. In our work, we consider two types of noise:

- Gaussian noise: It is generated according to normal distribution denoted as $N(\mu, \delta^2)$, where μ is the mean and δ^2 is variance
- Laplacian noise: It is generated according to Laplace distribution which we denote as Lap(μ, b) where μ is the location and b is the scale parameter. Distribution can be seen in appendix A, figure 13

3.3 Experiments

To evaluate the efficiency of data reconstruction and mitigation methods discussed previously, we conducted experiments using the DLG algorithm.

3.3.1 Classification network

In this experiment, we employed a simple convolutional neural network (CNN) designed for image classification. The network was implemented using the PyTorch framework and consists of four layers.

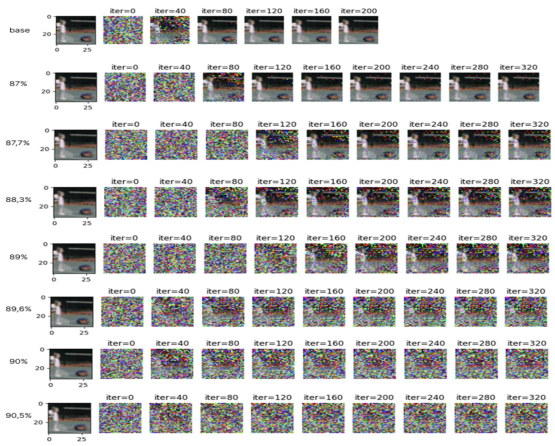


Figure 5: Reconstruction process for different prune ratios in gradient compression

Specifically, the first three layers are convolutional layers, each with a kernel size of 5 and utilizing a sigmoid activation function. The final layer is a fully connected layer, which employs a softmax activation function to classify input data into 100 distinct classes. The experimental data included input images and corresponding labels from the CIFAR-100 dataset. All input images had dimensions of 32x32 pixels with three color channels (red, green, blue). The network parameters were initialized randomly from a normal distribution without any prior training. We used the cross-entropy loss function as a metric of error. For the optimization component of the DLG algorithm, we utilized the L-BFGS optimizer configured with a learning rate of 1 and max iterations set to 20. Within the DLG procedure, the optimization objective is to minimize the sum of squared differences between the actual gradient and the reconstructed (dummy) gradient.

In figure5, we can see the result of reconstruction for different prune ratios using gradient compression. The base row did not have any compression. Up to 87% prune ratio, compression had no effect and pixel-perfect reconstruction was made. The optimisation process gradually worsens as prune ratio goes to 90,5%, where the result becomes a random noise. We notice that this is inconsistent with original DLG authors[x], specifically, their conclusion was "maximum tolerance of sparsity is around 20%. When pruning ratio is larger, the recovered images are no longer visually recognizable and thus gradient compression successfully prevents the leakage". This

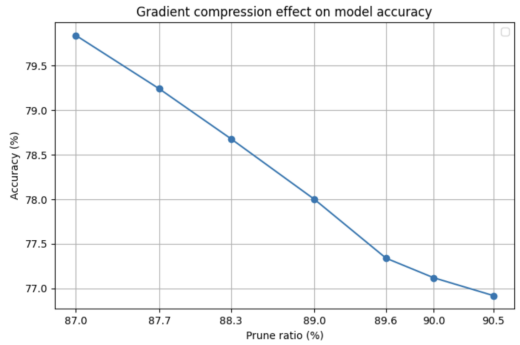


Figure 6: Enter Caption

might be caused by wrong implementation from our side. Further investigation is planned.

Additionaly, we implemented a locally simulated FL system using CKKS encryption with 4 clients, and performed one FL iteration for different prune ratios to see the negative effect on the accuracy of the model after aggregation round. This is displayed in Figure 7. Up to 87% prune ratio, the model accuracy was't visibly affected. After that, accuracy went down linearly with the increased ratio. Overall, accuracy had a relative drop of 3.75% in return for achieving relatively good resistance against image reconstruction.

We plan to expand on this evaluation (in bachelor thesis) using gradient noising method along with different network structures.

3.3.2 Segmentation network

A similar experiment was conducted using a simplified U-Net segmentation network, implemented in Python with the TensorFlow library. The detailed architecture of this network is illustrated in Appendix A, Figure 12.

For input data, we used a custom image with dimensions of 30x30 pixels and 4 channels, created by stacking the normal and depth maps obtained via a 3D scanner. The label consists of a single-channel binary mask of identical dimensions, where pixel values of ones and zeros represent the segmentation regions.

The network was initialized with random parameters obtained from a normal distribution. The loss function used for network training was binary cross entropy.

In the DLG algorithm, the objective was defined as the minimization of the sum of cosine similarities

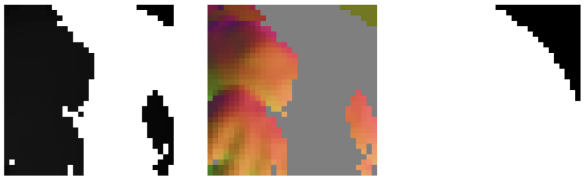


Figure 7: Ground truth sample for simplified U-net. Depth mask is on the left, normal map in the middle and mask on the right

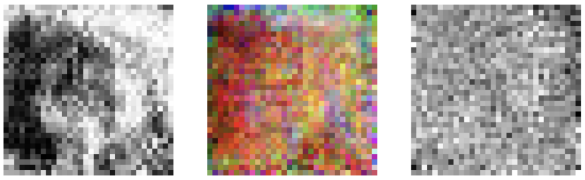


Figure 8: Reconstruction process result after 1200 iterations with dummy mask. Depth mask is on the left, normal map in the middle and mask on the right

between the real and dummy gradients. Optimization was performed using the Adam optimizer. Additionaly, a penalty was introduced to force input and label to stay in $(0,1)$ interval.

The ground truth is displayed in figure 8. The input itself consists of depth map (left) and normal map(middle) stacked together. The real mask is displayed on the right. Figure 9 displays best result after 1200 iterations. As it can be seen, the optimisation failed to converge. Nor gradient compression or noising was used in this process.

This process was repeated for several different inputs with different hyperparameter combinations and with up to 10 000 iterations with no luck. The displayed result is visually one of the closest results we've got. We think there might be two main reasons for this:

1. The label - in comparison with Cifar-100 classification network, where label was a vector of length 100, here the label is a whole image of size 30x30 (900). Number of combinations with input map and label is very large. As mentioned above, letting it run up to 10 000 iterations did not help. In fact, the optimisation tends to diverge when running longer.

2. The nature of input and the network - gradient obtained from training the network using ground truth in some way represents correlation between $(normal + depth)$ map and mask. There

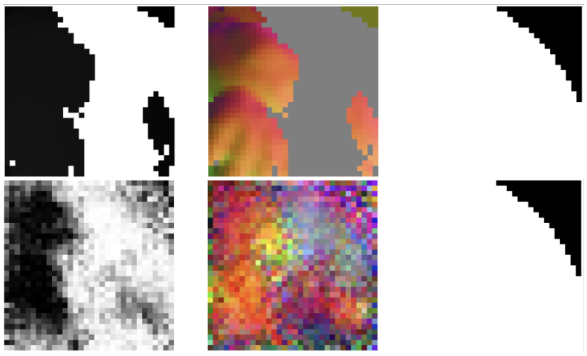


Figure 9: Ground truth (up) and reconstruction process result (down) after 1200 iterations with dummy mask. Depth mask is on the left, normal map in the middle and mask on the right

may be many versions of the input where similiar gradient information is obtained while visually being different from ground truth. At the same time, there can be many different versions of the input that share the same mask. This can cause large number of local minima and cause trouble for the optimisation to converge.

To further elaborate the first point, figure 10 displays the result of DLG algorithm when real mask is given and only input is optimised. While this is still not pixel perfect as in case of classification, it is visually improved result from the previous try.

We plan to expand these experiments by further modifying of the optimisation algorithm.

4 Alternative FL structures

The fact that each client has access to the updated model narrows the field of usable methods for mitigation of data reconstruction. We decided to attack this problem from different angle - structure of FL system and network itself. In this chapter we discuss the potential usage of special types of structures for extended privacy guarantees.

4.1 Split learning

Split learning[Khan et al., 2023] can be thought of as a generalized version of FL. In traditional FL, we place the point of communication after the last layer, where only gradients are sent. However, in a layered network structure, we can place this point in earlier layers. Figure 11 shows one such structure for inference purposes. Output maps from max pooling layer are sent to the server, where they pass through the final fully-connected layer. Results are sent back to the client, which uses softmax and gets final output.

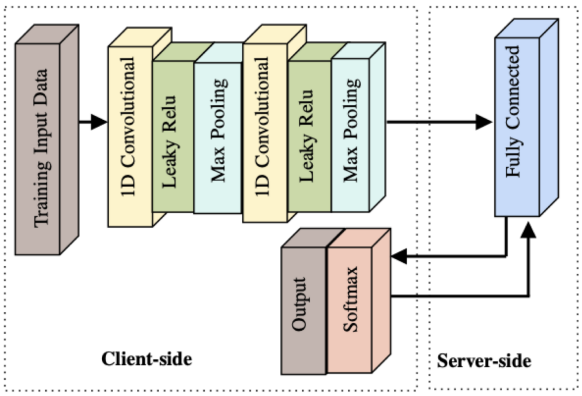


Figure 10: Split learning configuration for inference in a classification network. Point of connection is before the last fully-connected layer

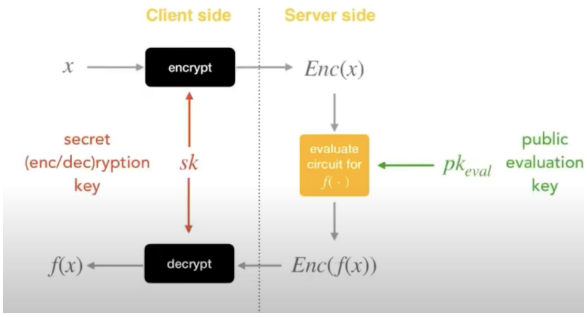


Figure 11: A concept structure of a fully encrypted model

With CKKS encryption, data can be sent and be manipulated on the server in encrypted form. Clients won't have access to the parameters from the fully-connected layer, but they will have private keys for encryption used on the server.

For training, however, backpropagation algorithm would need to be split between server and the clients, or server would need to have access to clients' layers, which could be enough for server to perform attack similiar to DLG. Further investigation is needed.

4.2 Fully encrypted models

An extreme version of split learning would be when we put the connection point at the beginning - fully encrypted models[Montero et al., 2024]. The clients'

data gets encrypted using CKKS, sent to the server where server would perform all operations in encrypted form.

In figure 12 we show an example of this structure. Client encrypts the data using private key and sends it to the server. Server performs predefined functions on given encrypted data and sends encrypted result back to client.

Such system could have intense overhead because of encrypted operations. Since CKKS supports addition and multiplication, all non-linear functions would need to be converted, by polynomial approximations for example. On the other side, such system can possibly provide privacy guarantees that are equivalent to those of the encryption itself.

Acknowledgments

We thank the Skeletex Research s.r.o. for lending us necessary hardware, NVIDIA Jetson TX2, used in specialized 3D scanners for testing.

References

[Cheon et al., 2017] Cheon, J. H., Kim, A., Kim, M., and Song, Y. (2017). Homomorphic encryption for arithmetic of approximate numbers. In Takagi, T. and Peyrin, T., editors, *Advances in Cryptology – ASIACRYPT 2017*, pages 409–437, Cham. Springer International Publishing.

[Jia et al., 2023] Jia, H., Cai, D., Yang, J., Qian, W., Wang, C., Li, X., and Yang, S. (2023). Efficient and privacy-preserving image classification using homomorphic encryption and chunk-based convolutional neural network. *Journal of Cloud Computing*, 12(1):175.

[Jiang et al., 2023] Jiang, C., Xu, C., Cao, C., and Chen, K. (2023). Gain: Decentralized privacy-preserving federated learning. *Journal of Information Security and Applications*, 78:103615.

[Khan et al., 2023] Khan, T., Nguyen, K., Michalas, A., and Bakas, A. (2023). Love or hate? share or split? privacy-preserving training using split learning and homomorphic encryption.

[Lin et al., 2020] Lin, Y., Han, S., Mao, H., Wang, Y., and Dally, W. J. (2020). Deep gradient compression: Reducing the communication bandwidth for distributed training.

[McMahan et al., 2023] McMahan, H. B., Moore, E., Ramage, D., Hampson, S., and y Arcas, B. A. (2023). Communication-efficient learning of deep networks from decentralized data.

[Montero et al., 2024] Montero, L., Frery, J., Kherfallah, C., Bredehoft, R., and Stoian, A. (2024). Neural network training on encrypted data with tfhe.

[O'Shea and Nash, 2015] O'Shea, K. and Nash, R. (2015). An introduction to convolutional neural networks.

[Paillier, 1999] Paillier, P. (1999). Public-key cryptosystems based on composite degree residuosity classes. In Stern, J., editor, *Advances in Cryptology — EUROCRYPT '99*, pages 223–238, Berlin, Heidelberg. Springer Berlin Heidelberg.

[Zhu et al., 2019] Zhu, L., Liu, Z., and Han, S. (2019). Deep leakage from gradients. In Wallach, H., Larochelle, H., Beygelzimer, A., d'Alché-Buc, F., Fox, E., and Garnett, R., editors, *Advances in Neural Information Processing Systems*, volume 32. Curran Associates, Inc.

A Additional figures

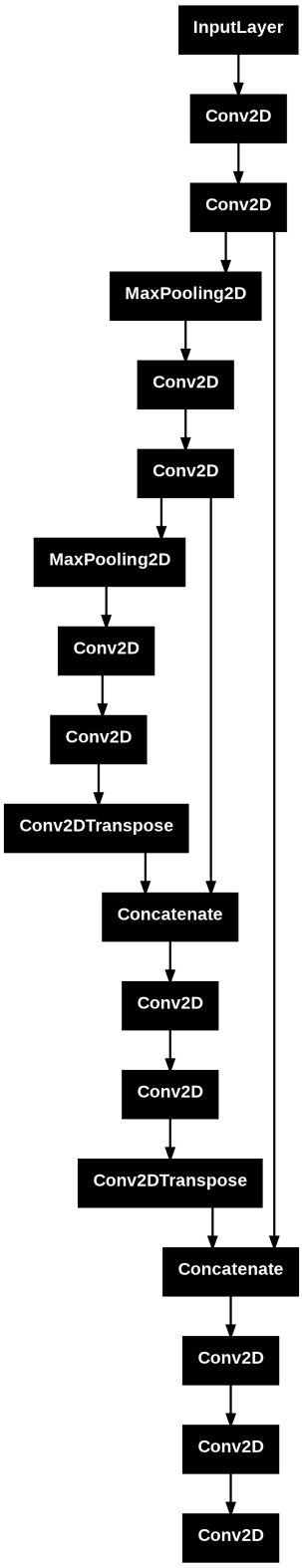


Figure 12: Simplified U-net structure. Each convolutional layer use LeakyRelu as activation function except the last one, which uses sigmoid

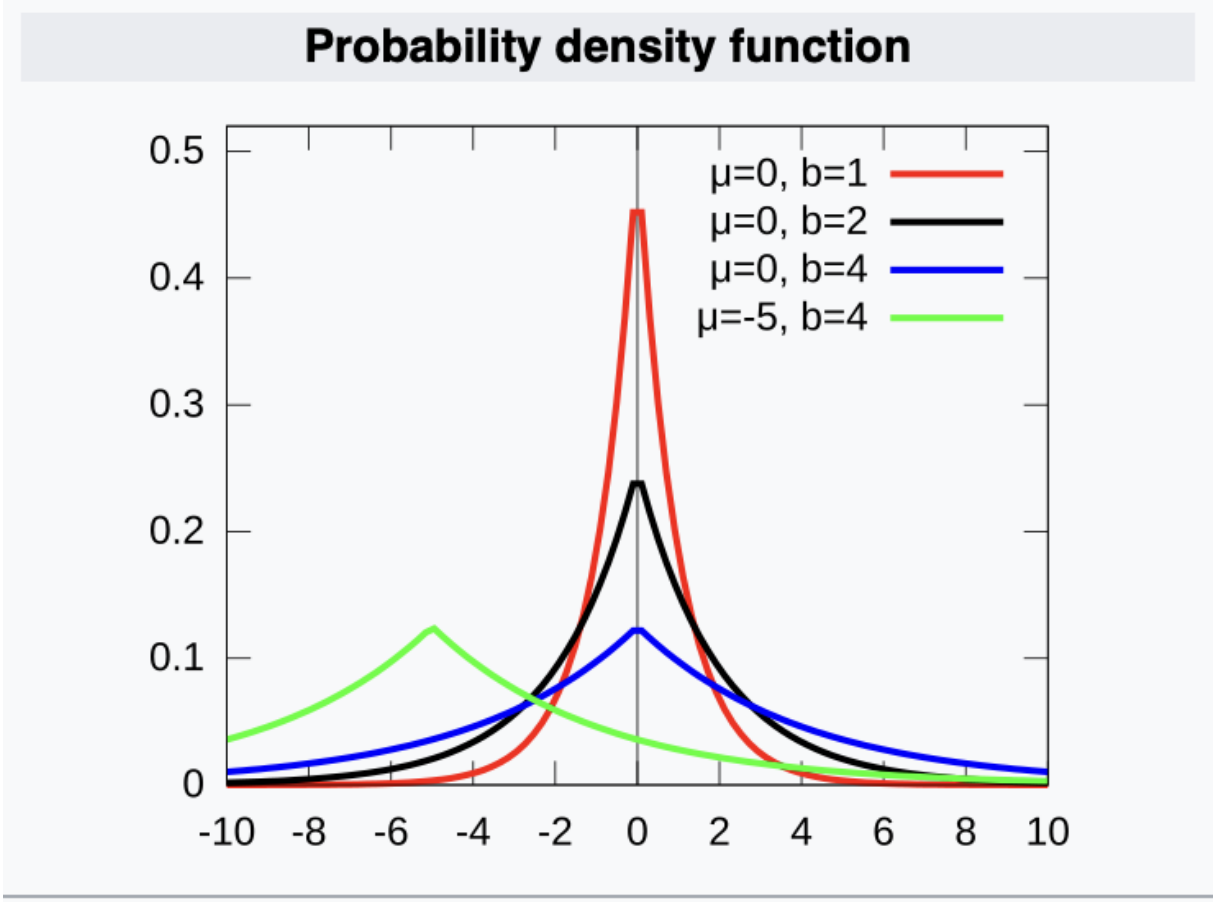


Figure 13: Laplace distribution for different μ and b values [**?**]

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 343–352
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Tomáš Barančok, Andrej Ferko

Evaluating Fast Scene Description for Automated Industrial Waste Sorting Using MPEG-7 Descriptors

Tomáš Barančok[1*] Andrej Ferko[1†‡]

[1] Katedra informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2] Katedra algebry a geometrie, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstract: As global waste production increases each year, efficient recycling is essential to reducing environmental pollution. Despite advancements in automation, waste sorting still largely depends on manual labour. While neural network-based methods have performed well on datasets, many of them simplify real-world conditions by excluding backgrounds, limiting their practical applicability. Some models and datasets address these issues with promising results.

This study investigates the effectiveness of non-neural network approaches for automated waste sorting, focusing on MPEG-7 visual descriptors. Specifically, we assess whether MPEG-7 descriptors can serve as a viable alternative for classifying waste images and improving sorting efficiency. Our workflow in this study is shown on MPEG-7, a multimedia content description standard, facilitates image categorization and rapid image matching, making it potentially viable for real-time applications. For efficiency of our experiment, we utilized an existing dataset of 3,000 waste images with material categorization metadata. We computed MPEG-7 visual descriptors for each image to evaluate their effectiveness in sorting new images. Since standard MPEG-7 computations are complex and slow, we explored methods to optimize performance. These included reducing image resolution, as high-resolution images are unnecessary for descriptor-based classification, and segmenting images that contained entire conveyor belts rather than individual waste items. Additionally, given the large metadata volume generated, we examined whether shortening certain descriptor outputs could maintain classification accuracy. Ultimately, this research evaluates whether MPEG-7 descriptors provide a practical and computationally efficient alternative to neural networks for automated waste sorting.

Keywords: waste sorting, MPEG-7, waste detection, recyclable trash sorting, data analysis

*barancok5@uniba.sk
†Andrej.Ferko@fmph.uniba.sk
‡Školiteľ

1 Introduction

Urbanization and growing living standards have led to a huge increase in the quantity and type of waste in recent years [Tang et al., 2022], placing a great deal of strain on resource use, environmental safety, and economical recycling. Although they too participate in the sorting process, people living in cities are the primary producers of household waste. Recycling is a useful tactic to re-purpose waste, reduce waste generation, and promote sustainable development [Yang et al., 2018]. Sorting garbage by hand requires a lot of time and work. Waste recycling and automated sorting have consequently emerged as urgent problems requiring immediate attention. Recycling and waste sorting devices usually require deriving models beforehand, which can be computationally expensive. Unfortunately, it is not feasible to equip every device with a high-performance graphics processing unit (GPU), which results in unnecessary hardware-related expenses. Cloud deployment may liberate models from local computing, however this greatly depends on the speed of one's internet connection. Generally speaking, lightweight models are smaller and faster than large models, although they are marginally less accurate. However, deploying lightweight models locally could be a smart move for recycling and waste sorting machinery. After AlexNet won the ImageNet image classification competition in 2012 [Krizhevsky et al., 2012], image classification capabilities CNNs took off, leading to the development of several models with better performance, including VGG [Simonyan and Zisserman, 2014], GoogleNet [Szegedy et al., 2015], and ResNet [He et al., 2016]. Currently available works utilize this approach, but on small and more specific datasets, where they train neural networks to sort images of different types of waste.

Feng et al. [Feng et al., 2022] optimized Efficient-

Net [Tan and Le, 2019] for waste sorting, creating GECM-EfficientNet, a lightweight model based on EfficientNetB0. Tests on self-made and TrashNet datasets achieved 94% accuracy with a 146 ms inference time. Despite its practicality, it recognizes only 18 waste types, requiring dataset expansion. Semi-supervised learning aids classification, but the model cannot currently process mixed waste.

Lin et al. [Lin et al., 2024] developed a dataset, TrashIVL, with five categories of recyclable waste and introduced the integrated parallel attention module (IPAM) to enhance CNN sorting accuracy. TrashIVL was created by refining publicly available images, allowing for further division into twelve fine-grained recycling subcategories. IPAM, a parallel channel-spatial attention system, helps CNNs reduce background interference by adaptively adjusting feature significance. Integrated into ResNeXt50 [Xie et al., 2017], their model achieved 97.42% accuracy on TrashIVL-5 and 94.08% on TrashIVL-12, proving its efficiency in waste sorting.

The issue of plastic sorting requires attention, as various plastic types are often discarded together despite needing separation. Özkan et al. [Özkan et al., 2015] addressed this by capturing images of plastic bottles and applying pre-processing steps, such as extracting the plastic portion from the background. They utilized morphological image operations, including enhancement, segmentation, edge detection, noise reduction, and hole elimination, to minimize the influence of bottle color and labels on CNN learning. Feature vectors were constructed using common subspace and statistical feature extraction techniques alongside pixel-wise intensity values. Given their prevalence, only three plastic types were considered. The decision mechanism employed a simple setup with a camera and uniform backlighting, using five feature extraction techniques to reduce dimensionality and capture key patterns. A majority voting approach determined classification, with Support Vector Machines (SVM) chosen for their reliability in classification tasks. This method enables real-time classification with high accuracy automatically categorizing around 90% of plastic bottles. It distinguishes PET from non-PET plastics with 96% accuracy and classifies non-PET plastics (PP or HDPE) with 92% precision.

(Fig. 1) Contrary to usual neural network based approaches we decided to explore a more algorithmic approach. The aim of this paper is to determine the speed and accuracy of utilization of MPEG-7 descriptors in industrial waste sorting. For these experiments we used an already existing TrashNet dataset. This dataset is open-source, has images of acceptable quality and it is already divided into distinguished categories.

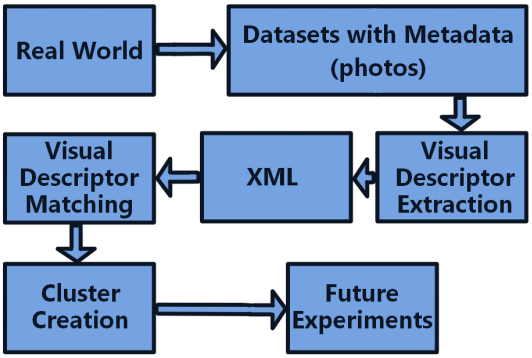


Figure 1: Workflow of the study

2 Material and Methods

2.1 MPEG-7

The Moving Picture Experts Group (MPEG) was established in 1988 to develop digital audiovisual compression standards, transforming content production, distribution, and consumption. Initially, three compression algorithms were introduced: MPEG-1, MPEG-2, and MPEG-4. MPEG-1 and MPEG-2 enabled efficient digital compression, facilitating digital TV and CD-based video storage, while MPEG-4 optimized media delivery for the Internet and mobile devices [Manjunath et al., 2002]. Of particular interest to us is MPEG-7, launched in 1997 [JTC1, 1997]. Unlike its predecessors, MPEG-7 is not a compression standard but a multimedia content description framework designed for content discovery and navigation. It defines descriptors categorized into two main groups: Visual (Color, Shape, Texture, and Motion) and Audio. Additional features include Multimedia Description Schemes for integrated metadata, an XML-based Description Definition Language, binary and textual representations for various applications, and open-source Reference Software. Unlike industry-specific metadata systems, MPEG-7 offers a universal, adaptable

framework ensuring interoperability across media platforms. The historical evolution culminates in MPEG-21 [JTC1, 2004], which aims to establish an open foundation for multimedia applications, centered around Digital Items and user interactions.
For our application, the most relevant descriptors are Color, Shape, and Texture. Below we briefly introduce the 8 descriptors we will use in our experiments, following Manjunath et al. [Manjunath et al., 2002]
MPEG-7 visual descriptors capture key image characteristics for efficient content retrieval. The Dominant Color Descriptor (DCD) identifies the most important colors in an image, providing a compact and accurate representation for searching and browsing image databases. Unlike fixed-color histograms, it selects multiple dominant colors dynamically. The Scalable Color Descriptor (SCD) compresses an image's color distribution using a Haar transform in the HSV color space, enabling flexible adaptation to different levels of detail. Similarly, the Color Structure Descriptor (CSD) enhances traditional histograms by incorporating local spatial color structure, making it sensitive to specific image elements. The Color Layout Descriptor (CLD) efficiently represents spatial color distribution, enabling fast image retrieval with minimal storage and processing needs. For texture analysis, the Homogeneous Texture Descriptor (HTD) measures texture patterns across 30 frequency channels, inspired by how the human visual system perceives textures. The Edge Histogram Descriptor (EHD) captures the spatial distribution of edges by dividing an image into sub-regions and categorizing edges into five directional types, aiding in similarity-based searches. For shape analysis, the Region-Based Shape Descriptor (RSD) examines both the boundary and internal pixels of a 2D object, using Angular Radial Transformation (ART)[Kim and Kim, 1999] for a robust and compact representation. For the purposes of this paper an object or a graphic object is a subset $S \subset \mathbb{R}^m$ together with a function $f : S \subset \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$. The dimension of S is called dimension of the graphics object, in this case it would be two [Velho and Carvalho, 2002]. Meanwhile, the Contour-Based Shape Descriptor (CSD) relies on Curvature Scale-Space (CSS) representation to effectively describe objects based on their contours, ensuring resilience to deformations and perspective changes.

2.2 Dataset

A crucial aspect of training a model or testing its efficiency is the availability of a well-structured dataset with proper image categorization. Numerous datasets exist, many of which are hosted on platforms like Kaggle [Kaggle, 2010]. We required a dataset with consistent backdrop and easily identifiable items for our study, so the extracted descriptors would be free of any anomalies.
One such dataset is TrashNet [Mindy and Gary, 2016], which classifies waste into six broad categories: Paper, Glass, Plastic, Metal, Cardboard, and Trash (other waste). These broad classifications allow for easier learning and sorting by models. The dataset consists of over 2,400 hand-collected images, with each category containing between 400 and 500 photos. However, a significant limitation is that all items are photographed against a white background, which may reduce the model's efficiency in real-world scenarios. To mitigate this issue, the dataset creators implemented data augmentation techniques. A similar project, AutoTrash, presented at the 2016 TechCrunch Disrupt Hackathon [Mittal et al., 2016], also focuses on automatic waste sorting. It utilizes a Raspberry Pi module and camera to distinguish between recyclable and compostable waste.

2.3 Descriptor extraction and descriptor matching

The core tools for descriptor extraction, matching, and analysis in our implementation, under the name Gripsort1, are VDE (Visual Descriptor Extraction) and VDM (Visual Descriptor Matching) [Spyrou et al., 2009]. These applications extract and match MPEG-7 visual descriptors from images, allowing for low-level visual characterization based on provided images and regions of interest. When two descriptions are compared, a distance measure is computed. Both tools feature a simple command-line interface and operate efficiently, most extractions take only milliseconds, at worst a few seconds with very high resolution images. MPEG-7 offers multiple ways to define regions for descriptor extraction, including global extraction (from the entire image), binary masks (for specific regions), region maps (for segmentation-based extraction), and bounding boxes (defined by coordinates). The extracted descriptors

characterize key image features:

1. Color Descriptors: Dominant Color captures main colors and their distribution, Color Structure combines global and local color information, Color Layout provides a compact, resolution-independent representation, and Scalable Color applies a Haar transform to a color histogram.

2. Texture Descriptors: Homogeneous Texture quantifies texture patterns, while Edge Histogram captures the spatial distribution of edges.

3. Shape Descriptors: Region-Based Shape describes objects by analyzing both contour and internal pixels, while Contour-Based Shape captures key contour features using a Curvature Scale-Space (CSS) representation.

VDE extracts descriptors from various image formats and outputs metadata in plain text or XML. The XML file is structured into eight main tags, one for each descriptor. Each descriptor is described by several values within its 'sub-tags'. Together the eight descriptors have between 717 and 737 values (this due to the Dominant Color descriptor containing information about three to eight dominant colors). Two of these files are then comparable between each other on each descriptor. This comparison (matching) is done by VDM. VDM computes distances (values usually between 0 and 1000) between descriptors from the XML files based on MPEG-7-defined metrics, enabling efficient image comparison.

3 Results

The matching process between two images is based on comparing their extracted eight descriptors. In the TrashNet dataset, the extraction of all eight descriptors takes, in best case, 0.3 seconds and the matching of two images takes, in best case, 0.03 seconds. Depending on how many descriptors fall below a set distance threshold (for the tests mention in this paper, the threshold was 100), a grade is assigned:

1. Perfect Match (7+ matches)

2. Good Match (6 matches)

3. Match (5 matches)

4. Questionable (4 matches)

5. No Match (3 or fewer matches)

This threshold was chosen as a result of testing and sufficed for these experiments. For our purposes no further change was needed.
To evaluate the effectiveness of descriptor matching, we tested images from the TrashNet dataset, a waste classification dataset divided into six categories: Cardboard, Glass, Metal, Paper, Plastic, and Trash. Each category contains around 400 images, and for our tests, we selected a few representative images from every category except Trash.

Cardboard
We first tested a close-up image of a cardboard texture, which covered the entire frame. The results were promising, with 31 Perfect Matches (only two incorrect) and 107 Good Matches (13 incorrect), resulting in an accuracy of 89.13%. However, a more specific test, a photo of an open cardboard box, performed poorly, yielding just one Perfect Match, no Good Matches, and 84 Matches, of which only 16 were correct.

Glass
For glass, we tested a wine bottle and an empty jam jar. The wine bottle had 15 Perfect Matches (with 7 incorrect) and 39 Good Matches, but only 16 were correct, giving an overall accuracy of 44%. In contrast, the jam jar performed much better, achieving 76 Perfect Matches (only 8 incorrect) and 48 Good Matches (with 20 incorrect), leading to an accuracy of 77.42%.

Metal
We selected two metal objects: an aluminum can and a crumpled piece of aluminum foil. The aluminum foil had 3 Perfect Matches (all correct), 3 Good Matches (all correct), and 23 Matches, but only 9 of these were accurate, suggesting that its irregular texture posed challenges. The aluminum can had 1 Perfect Match (correct) and 23 Good Matches, with just 4 incorrect, indicating better recognition compared to the foil.

Paper
For the paper category, we tested a paper envelope, which performed significantly better than the open cardboard box. It achieved 45 Perfect Matches (with

9 incorrect) and 62 Good Matches, which were split evenly between correct and incorrect, leading to an overall accuracy of 62.62%.

Plastic

Finally, we tested a specific water bottle with a blue label and green cap. The results were 23 Perfect Matches (all correct) and 72 Good Matches, with about half being correct, resulting in accuracy of 60%.

The results indicate that simpler and more distinguishable objects tend to match more effectively. General textures, like cardboard surfaces or jam jars, perform well, while irregular or complex structures, such as crumpled foil or open boxes, result in lower accuracy. Additionally, requiring fewer descriptor matches increases the number of results but reduces accuracy.

The chart (Fig.2) contains only Perfect and Good Matches as Matches contain a lot of false positives and in practice wouldn't be usable. Questionable and No Match categories were not mentioned as we were interested in how many images were correctly assigned as similar and not how many were correctly assigned as different.

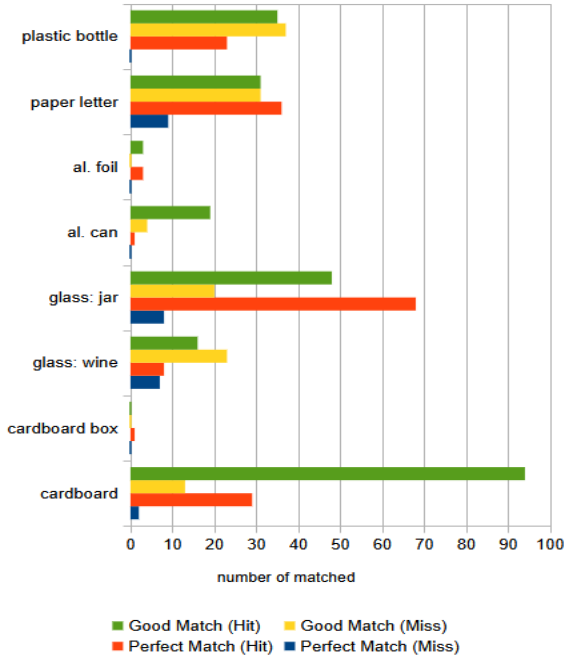


Figure 2: Evaluation of image similarity

Moreover, we aimed to create simple clusters of perfectly similar items within the datasets, excluding the Trash category, as it was not relevant for this analysis. A perfectly similar image is one that matches closely (the distance is lower that a certain threshold) with another image across all descriptors, similar to the "perfect matches" previously discussed. These clusters were formed to reduce the overall number of images in the dataset, ultimately speeding up any subsequent matching processes. For illustrative purposes of this paper and due to simplicity no already known methodology was used. Some clusters overlap, as images within one cluster can form their own sub-clusters. However, we did not consider these recursive clusters and only treated the initial image of each cluster as the cluster leader. For each category the creation of clusters took on average 1 hour and 30 minutes.

Below, we present few notable clusters from the five categories, each named after the file name of its cluster leader. Notable cluster is a cluster of size at least 4.

Cardboard

We chose two notable clusters from this category. Cardborad1 (Fig.3) which is the most common full cardboard texture similar to the one tests above and Cardboard133 (Fig.4) which is a torn piece of cardboard against a white background.



Figure 3: Cluster Cardboard1.

Cardboard overall has pretty bland clusters as any big clusters are similar to Cardboard1 in their nature. Any distinguished cardboard, like purple or red shoe boxes did not seem to match well and created only cluster of size 1. The 403 images in the Cardboard

category were reduced to 241 clusters reducing the dataset size by 40.2%.



Figure 4: Cluster Cardboard133.

Glass

From this category we chose three notable clusters. Glass2 (Fig.5) is a small glass cup, Glass25 (Fig.6) is an empty jam jar and Glass104 (Fig.7) is an empty beer bottle. Even if the clusters in the Glass category were more versatile, the 501 images were reduced to 357 cluster, reducing the size by 28.74%.



Figure 5: Cluster Glass2.



Figure 6: Cluster Glass25.



Figure 7: Cluster Glass104.

Metal

The clusters within this category were much smaller compared to Cardboard and Glass but we chose three notable clusters. Metal3 (Fig.8) is an aluminium can, Metal17 (Fig.9) is a metal lid and Metal39 is a different can. Overall grouping in metal was quite disappointing, 410 images were reduced to only 364 clusters reducing the size by 11.22%. This shows that metallic objects are inadequate for perfect matching.

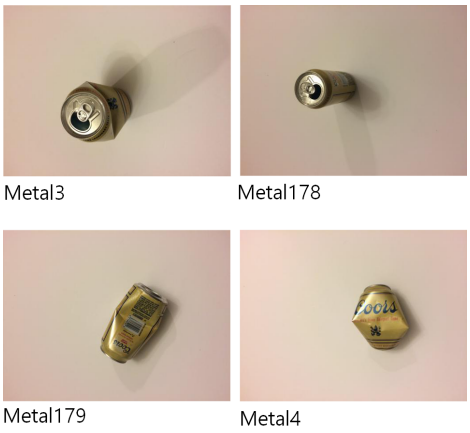


Figure 8: Cluster Metal3.

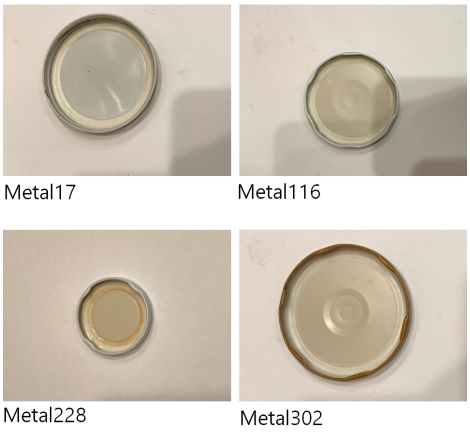


Figure 9: Cluster Metal17.

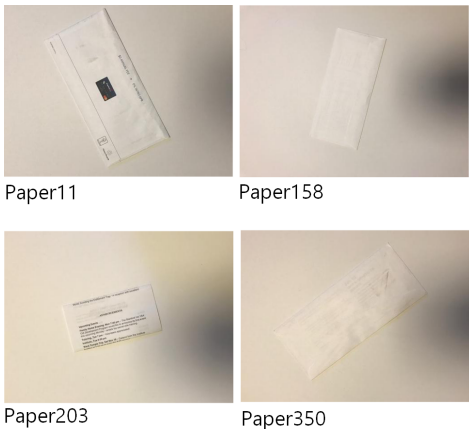


Figure 10: Cluster Paper11.

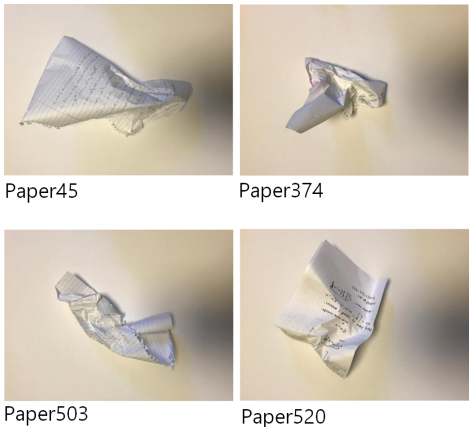


Figure 11: Cluster Paper45.

Paper

We had high hopes for this category, but this category contains many multicolored pieces of newspaper making it almost impossible to create perfect matches between them. Nevertheless we chose two notable clusters from this category. Paper11 (Fig.10) is an envelope and Paper45 (Fig.11) is a piece of torn paper. This category in the largest with 594 images and these were reduced to 469 clusters, reducing the size by 21.04%.

Plastic

In our opinion this category had the most interesting clusters and unlike glass, colored plastic bottles managed to create some decent clusters. We chose three notable clusters within this category. Plastic14 (Fig.12) is the signature bottle mention before, with blue label and green lid. Plastic18 (Fig.13) is a plastic food box and Plastic171 (Fig.14) is a green bottle. The 482 images were reduced to 328 clusters, reducing the size by 31.95%. Plastic achieved the second best reduction out the five categories.



Figure 12: Cluster Plastic14.

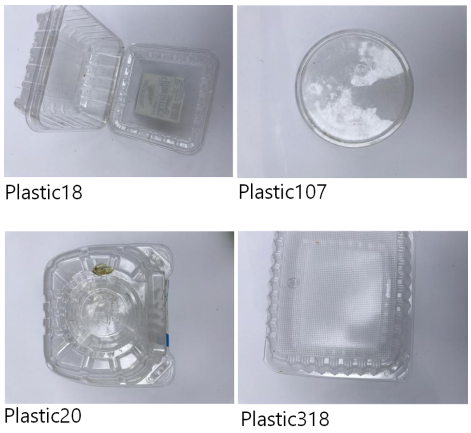


Figure 13: Cluster Plastic18.



Figure 14: Cluster Plastic171.

This demonstrates how perfect matchings can be helpful in clustering datasets in some situations. Surprisingly, though, some of the pictures we expected to match did not match.

4 Discussion and further work

In our evaluation we used the Trashnet dataset[Mindy and Gary, 2016]. This dataset is widely used and has a well-structured categorization but suffers from unrealistic backgrounds. There are many different datasets we explored during the preparation phase of creating our work. Drinking Waste Classification (DWC) [Serezhkin, 2020] is less adaptable because it is more specialized and only works with drink containers. Waste Pictures [Qie, 2020] introduces needless specificity and ill-defined categories in an attempt at a very precise classification. By adding categories for e-waste and medical waste, two topics that are becoming more and more important in today's recycling initiatives, TrashBox [Kumsetty et al., 2022] expands on TrashNet. A wider range of trash categories are available in datasets such as Garbage Dataset [Kunwar, 2024] and TACO [Proença and Simões, 2020a], the latter of which include hierarchical classification and contextual data from the actual world. Despite its smaller size, AquaTrash [Panwar et al., 2020] is more dependable since it directly solves the problems with annotation quality in TACO and TrashNet. In contrast, TrashIVL [Lin et al., 2024] is one of the most useful datasets for real-world waste sorting applications since it features real-life background photos.

In the end, the particular application will determine which dataset is used. Garbage Dataset or TrashNet may be adequate if broad classification is required. TACO and TrashIVL offer improved granularity and practical applicability for more accurate garbage classification. AquaTrash guarantees greater annotation reliability, whereas TrashBox is especially helpful when handling medical or electronic garbage. Therefore, balancing aspects like category diversity, annotation quality, real-world applicability, and computational needs are necessary to choose the best dataset.

In a work [Barančok, 2025], that further built on this foundation, we devised a method, using the metadata we created, for matching foreign images of waste. These foreign data/images were already provided by EDICO a.s. [Sicak, 2025]. This work provided a classification method that did not use machine

learning as well as methods the utilized machine learning directly on the MPEG-7 descriptors. There we compared our approaches to the numerous previous works done on the TrashNet dataset, and also showed some real time viability of our proposed approach.

5 Conclusion

The evaluation of the image matching process, based on the comparison of extracted descriptors, yielded insightful results when tested with the TrashNet dataset. Images from five categories—Cardboard, Glass, Metal, Paper, and Plastic were analyzed, excluding Trash, and the accuracy of the matching process varied across categories. The matching method, which relies on eight descriptors and a distance threshold, assigned grades to image pairs based on how many descriptors matched. The tests revealed that simpler and more distinguishable objects tended to yield higher accuracy, while complex or irregular objects had lower matching accuracy. For example, general textures like a cardboard surface or a jam jar performed well, while irregular items like crumpled foil or an open cardboard box showed poor results. The accuracy of the matching process also decreased as fewer descriptor matches were required, leading to more results but reduced precision. In the Cardboard category, the close-up image of a cardboard texture achieved 89.13% accuracy, while the open cardboard box performed poorly with only 16 correct matches out of 84. The Glass category showed mixed results; the wine bottle had an accuracy of 44%, while the jam jar achieved 77.42%. The Metal category presented challenges, especially with aluminum foil, where only 3 perfect matches were found, while the aluminum can showed better results. The Paper category, due to the presence of multicolored newspaper images, had a moderate accuracy of 62.62%. Lastly, the Plastic category, which featured a water bottle, achieved an accuracy of 60%. Furthermore, we explored clustering based on the perfect matchings, aiming to reduce the dataset size and speed up future matching processes. The clustering process was effective in reducing dataset sizes, with the Cardboard category seeing a reduction of 40.2%, the Glass category 28.74%, the Metal category 11.22%, the Paper category 21.04%, and the Plastic category 31.95%. While clustering showed promising results, particularly in categories with distinguishable objects like plastic bottles, the clustering was less successful in categories with more complex or multicolored items, such as paper. In conclusion, the results demonstrate that perfect matchings can be highly useful in clustering datasets, especially for categories with relatively uniform or distinguishable items. However, challenges arise in categories with complex textures or multicolored objects, highlighting the need for further refinement in the matching and clustering algorithms. Unexpectedly, some images that were anticipated to match did not, suggesting potential areas for improvement in the descriptor-based matching system.

The computation of MPEG-7 descriptors does not require a hight end CPU nor a GPU. Due to these light hardware requirements the MPEG-7 descriptors pose, they could be used in places with big hardware limitations. The image datasets for working with these descriptors do not need to be large, but diverse, containing more different images. The downside of these descriptors is that they are sensitive to inconsistencies in background color, clutter of other waste and other noise.

Acknowledgment

We would like to thank EDICO a.s. for creating a motive for the creation of this paper as well as providing metadata and images for further research.

I (Tomáš Barančok) would also like to personally thank my mother for teaching me how to properly structure a research paper.

References

[Barančok, 2025] Barančok, T. (2025). Analyzing fast scene description for industrial waste sorting (bachelor thesis). Comenius University in Bratislava, Faculty of Mathematics, Physics and Informatics.

[Feng et al., 2022] Feng, Z., Yang, J., Chen, L., Chen, Z., and Li, L. (2022). An intelligent waste-sorting and recycling device based on improved efficientnet. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 19(23).

[He et al., 2016] He, K., Zhang, X., Ren, S., and Sun, J. (2016). Deep residual learning for image recognition. In *2016 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, pages 770–778.

[JTC1, 1997] JTC1, I. (1997). Iso/iec 15938, mpeg-7 multimedia content description standard. Technical report, Moving Picture Experts Group. Available

in https://mpeg.chiariglione.org/standards/mpeg-7.html.

[JTC1, 2004] JTC1, I. (2004). Iso/iec tr 21000, information technology — multimedia framework (mpeg-21). Technical report, Moving Picture Experts Group. Available in https://mpeg.chiariglione.org/standards/mpeg-21.html.

[Kaggle, 2010] Kaggle (2010). Available in https://www.kaggle.com/.

[Kim and Kim, 1999] Kim, W. Y. and Kim, Y. S. (1999). A new region-based shape descriptor. Technical report, Moving Picture Experts Group.

[Krizhevsky et al., 2012] Krizhevsky, A., Sutskever, I., and Hinton, G. E. (2012). Imagenet classification with deep convolutional neural networks. In *Proceedings of the 25th International Conference on Neural Information Processing Systems - Volume 1*, page 1097–1105. Curran Associates Inc.

[Kumsetty et al., 2022] Kumsetty, N. V., Nekkare, A. B., Kamath, S., and Anand, K. M. (2022). Trashbox: Trash detection and classification using quantum transfer learning. In *2022 31st Conference of Open Innovations Association (FRUCT)*, pages 125–130. IEEE.

[Kunwar, 2024] Kunwar, S. (2024). Garbage dataset. Available in https://www.kaggle.com/datasets/sumn2u/garbage-classification-v2.

[Lin et al., 2024] Lin, H., Zhang, X., Yu, J., Xiang, J., and Shen, H. (2024). Deep recyclable trash sorting using integrated parallel attention. *Sensors*, 24(19):6434.

[Manjunath et al., 2002] Manjunath, B. S., Salembier, P., and Sikora, T. (2002). *Introduction to MPEG-7: Multimedia Content Description Interface*. John Wiley & Sons, Inc.

[Mindy and Gary, 2016] Mindy, Y. and Gary, T. (2016). Classification of trash for recyclability status. Technical report, Stanford University.

[Mittal et al., 2016] Mittal, G., Yagnik, K. B., Garg, M., and Krishnan, N. C. (2016). Spotgarbage: smartphone app to detect garbage using deep learning. In *Proceedings of the 2016 ACM International Joint Conference on Pervasive and Ubiquitous Computing*, page 940–945. Association for Computing Machinery.

[Panwar et al., 2020] Panwar, H., Gupta, P., Siddiqui, M. K., Morales-Menendez, R., Bhardwaj, P., Sharma, S., and Sarker, I. H. (2020). Aquavision: Automating the detection of waste in water bodies using deep transfer learning. *Case Studies in Chemical and Environmental Engineering*, 2:100026.

[Proença and Simões, 2020a] Proença, P. F. and Simões, P. (2020a). Taco: Trash annotations in context for litter detection. Available in https://arxiv.org/abs/2003.06975.

[Proença and Simões, 2020b] Proença, P. F. and Simões, P. (2020b). Taco web tool. Available in http://tacodataset.org/annotate.

[Qie, 2020] Qie, T. F. (2020). waste_pictures. Available in https://www.kaggle.com/datasets/wangziang/waste-pictures.

[Serezhkin, 2020] Serezhkin, A. (2020). Drinking waste classification. Available in https://www.kaggle.com/datasets/arkadiyhacks/drinking-waste-classification/data.

[Sicak, 2025] Sicak, R. (2025). Dataset-3000. EDICO SK 2025.

[Simonyan and Zisserman, 2014] Simonyan, K. and Zisserman, A. (2014). Very deep convolutional networks for large-scale image recognition. *CoRR*, abs/1409.1556.

[Spyrou et al., 2009] Spyrou, E., Tolias, G., Mylonas, P., and Avrithis, Y. (2009). Concept detection and keyframe extraction using a visual thesaurus. *Multimedia Tools and Applications*, 41(3):337–373.

[Szegedy et al., 2015] Szegedy, C., Wei, L., Yangqing, J., Sermanet, P., Reed, S., Anguelov, D., Erhan, D., Vanhoucke, V., and Rabinovich, A. (2015). Going deeper with convolutions. In *2015 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, pages 1–9.

[Tan and Le, 2019] Tan, M. and Le, Q. (2019). EfficientNet: Rethinking model scaling for convolutional neural networks. In *Proceedings of the 36th International Conference on Machine Learning*, pages 6105–6114. PMLR.

[Tang et al., 2022] Tang, D., Shi, L., Huang, X., Zhao, Z., Zhou, B., and Bethel, B. J. (2022). Influencing factors on the household-waste-classification behavior of urban residents: A case study in shanghai. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 19(11):6528.

[Velho and Carvalho, 2002] Velho, L. and Carvalho, P. C. P. (2002). Mathematical optimization in graphics and vision. Course Notes – SIGGRAPH 2002.

[Xie et al., 2017] Xie, S., Girshick, R., Dollár, P., Tu, Z., and He, K. (2017). Aggregated residual transformations for deep neural networks. In *2017 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, pages 5987–5995.

[Yang et al., 2018] Yang, Q., .Fu, L., Liu, X., and Cheng, M. (2018). Evaluating the efficiency of municipal solid waste management in china. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 15(11):2448.

[Özkan et al., 2015] Özkan, K., Ergin, S., Işık, Ş., and Işıklı, İ. (2015). A new classification scheme of plastic wastes based upon recycling labels. *Waste Management*, 35:29–35.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 353–359
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Matej Mok, Viktor Kocur

Detecting 3D Line Segments for Pose Estimation

Matej Mok[1*] Viktor Kocur[2†‡]

[1] Katedra informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2] Katedra aplikovanej informatiky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstract: The problem of detecting 2D line segments in RGB images is well-studied, with numerous solutions based on analytical computations or deep learning. In contrast, the detection of 3D line segments has not been paid much attention. In our work, we explore the possibility of extending an existing 2D line segment detection model for use in 3D. Specifically, we selected the LETR (LinE segment TRansformers) model, which we modified and trained to detect prominent line segments in an existing dataset containing 3D scans of bins. With simple postprocessing, the detected 3D line segments can be used to estimate the bin poses. The results show that this method achieves significantly better accuracy than previous state of the art (mean translation error 3.4 cm vs 6.7 cm and mean rotation error 0.164 rad vs 0.431 rad). This suggests that the proposed 3D line segment detector is well-suited for practical applications. In the future, we intend to extend our work for general-purpose 3D line segment detection in RGB images and point cloud data.

Keywords: 3D line segment detection, pose estimation

1 Introduction

The problem of detecting 2D line segments in RGB images has been extensively studied, with many solutions based on analytical computations [Grompone von Gioi et al., 2010] or deep learning [Pautrat et al., 2023]. In contrast, detecting 3D line segments from structured point clouds is less developed. Our work explores extending an existing 2D line segment detection model LeTR [Xu et al., 2021] for 3D line segment detection.

3D line segment detection is a general task with many potential applications. In this paper we evaluate the proposed detector in the context of 6DoF pose estimation [Hodan et al., 2024]. To train and evaluate our model we use a dataset of 3D scans of bins, which also contains their annotated poses [Gajdošech et al., 2022].

Our results show that the proposed 3D line segment detection network paired with a simple postprocessing procedure results in significantly better accuracy of the estimated bin poses than the baseline method which directly estimates pose using a convolutional neural network [Gajdošech et al., 2022]. With these results, we show the viability of the proposed method in a practical application. We intend to expand on these results in the future by training a more generalized 3D line segment detector and evaluating it on a variety of downstream tasks.

2 Related Work

2.1 2D Line Segment Detection

Accurate detection of line segments plays a crucial role in various computer vision and robotics applications, particularly in 3D scene reconstruction, PL-SLAM [Pumarola et al., 2017], and pose estimation.

To estimate 2D line segments traditional methods such as the Hough Transform [Duda and Hart, 1972] are widely used for detecting global line structures by voting in a parameterized space. The Line Segment Detector (LSD) [Grompone von Gioi et al., 2010] improves upon this by efficiently detecting local segments without requiring prior edge linking. More recent learning-based approaches, such as DeepLSD [Pautrat et al., 2023], leverage deep neural networks to enhance robustness to varying conditions, learning structured representations for accurate segment detection. Transformer-based methods like LeTR [Xu et al., 2021] further advance the field by modeling long-range dependencies and achieving superior detection in complex scenes.

2.2 3D Line Segment Detection

Several methods for 3D line segment detection leverage multiple-view geometry with known camera positions, which can be automatically reconstructed. By identifying the endpoints of the same

*mok2@uniba.sk
†viktor.kocur@fmph.uniba.sk
‡Supervisor

line segment across multiple views, 2D line segments can be back-projected into 3D using triangulation [Liu et al., 2023, Chen and Wang, 2011].

For point cloud data an analytical method was developed in [Xiaohu et al., 2019]. To estimate 3D line segments the input point cloud is segmented into parts that lie close to detected planes. Points are then projected onto their corresponding plane and 2D line detection is performed on projected points. Then 2D line segments are backprojected to 3D.

A related task to 3D line segment detection is wireframe detection, which, in addition to detecting individual line segments with two endpoints, also identifies junction points where multiple line segments meet. In [Liu et al., 2021] the authors propose a method for wireframe detection on point cloud. In [Zhou et al., 2019b] only a single RGB is used to estimate wireframes of objects with orthogonal structure.

2.3 6DoF Pose Estimation

The task of 6-degree-of-freedom (6DoF) pose estimation involves accurately determining an object's position and orientation in space using data from RGB cameras or 3D scanners. This is crucial for robotics and automation. The problem has been extensively studied [Hodan et al., 2024], with numerous analytical and learning-based approaches available. In this paper, we focus on the specific problem of bin pose estimation from 3D camera scans. This problem was addressed in [Gajdošech et al., 2022], where the authors have introduced their own manually annotated dataset of 3D scans of bins. Alongside the dataset, the authors also propose a simple baseline deep convolutional neural network which was shown to achieve better results than other 6DoF pose estimation methods. In this paper, we use the bin pose estimation dataset for both training and evaluation and the proposed method as a baseline.

One common challenge in 6DoF pose estimation is the representation of pose. There are various ways to parametrize an object's pose, commonly a combination of a translation vector and a rotation matrix is used. However, in learning-based methods, challenges can arise, such as symmetric objects having multiple valid rotations, leading to unstable training. Additionally, rotation representation is not continuous, which can make the training of neural networks difficult [Zhou et al., 2019a]. To address these issues, pose estimation can instead rely on the prediction of simpler geometric entities [Hodan et al., 2020]. In our approach, we also avoid these issues by not estimating the rotation directly, but by using 3D line segments.

3 Bin Pose Estimation by 3D Line Segment Detection

In this section we present an overview of our method for 3D line segment detection and its application for the task of 6DoF bin pose estimation.

3.1 3D Line Segment Estimation Network

To detect 3D line segments we modify a 2D line segment detection network LeTR [Xu et al., 2021]. LeTR follows a simple architecture based on the DeTR object detector [Carion et al., 2020]. A deep convolutional backbone extracts features, producing two outputs: fine features from an earlier layer and coarse features from the final layer. These features, serialized and enriched with positional encoding, pass through a transformer architecture. The output is used to predict the class (no line, line) and segment endpoints.

To adapt this model for 3D, we modify the final stage, enabling the feed-forward network to predict six values corresponding to the two 3D endpoints. Additionally, we remove the sigmoid activation. To successfully train LeTR on smaller datasets, it is essential to use the pre-trained weights from the DeTR model.

To train our model, we follow the training procedure proposed in the original LeTR paper. It consists of three stages. In the first stage, only a part of the network is trained using the backbone and one transformer to predict line segments from extracted coarse features. In the second stage, the output of the first transformer is passed to a second transformer along with a fine feature sequence to produce the final prediction. During this stage, the weights trained in the first stage remain frozen. The third stage trains the network by using the focal loss [Lin et al., 2017] which helps improve classification for difficult samples.

The loss function is computed following the approach in [Xu et al., 2021]. The network generates a fixed maximum number of predictions, which are

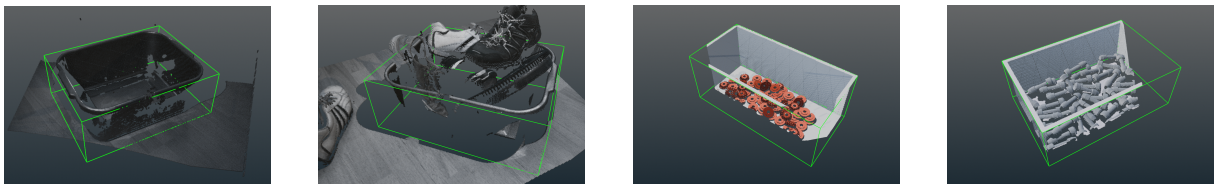


Figure 1: Samples from the used dataset of 3D scans of bins [Gajdošech et al., 2022]. Green lines show the positions of the annotated bins. The two images on the left are real scans. The two on the right are synthetically generated scans.

then matched with ground-truth annotations using bipartite matching, optimized based on the matching loss. For classification, a binary cross-entropy loss is applied, while the L1 loss is used to measure the difference between the matched predicted and annotated endpoints. Since the L1 loss operates on points of any dimension, it can be used when extending the network to predict 3D line segments.

3.2 Training Data

For training and evaluation, we use a dataset of 3D scans of bins [Gajdošech et al., 2022]. The dataset contains high resolution (2064×1544) 3D scans of bins in various environments, including cluttered scenes or scans where part of the bin is outside the capture frame. The real bin scans consist of a grayscale intensity map, a depth map, a normal map and a precomputed structured point cloud. In addition to real 3D scans, the dataset contains synthetically made samples, with RGB images, depth maps, normal maps and precomputed structured point clouds. For each sample, annotation contains information about the ground truth rotation and translation contained within a 4×4 transformation matrix. Additionally, each sample is annotated with type of bin and for each type a simple CAD model is available, allowing computation of the aligned bounding box of the bin. The training set of the dataset contains 1269 samples (572 real and 697 synthetic) while the test set contains 49 samples (23 real and 26 synthetic). Example 3D scans are shown in Fig. 1.

To train our model, we augmented the dataset by adding four line segment annotations to the top of each bin based on the provided bin pose annotations. During training, we used an 80/20 split for validation.

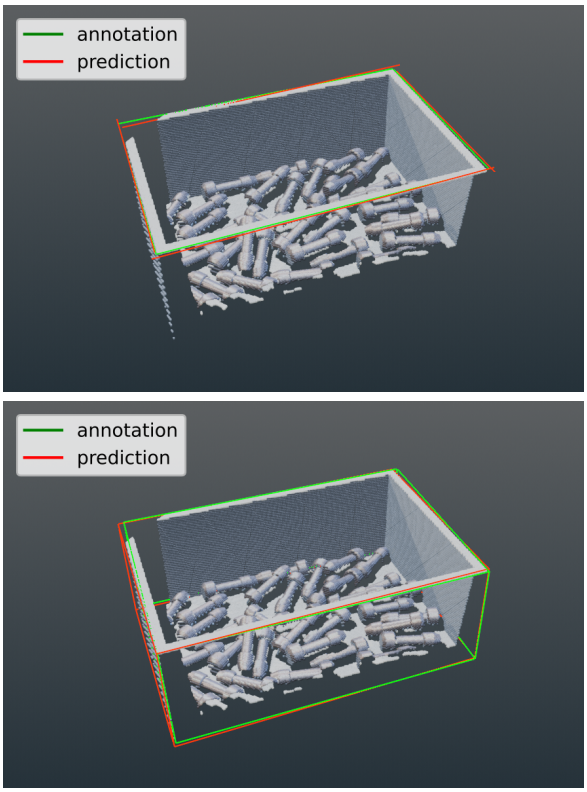


Figure 2: **Top**: 3D line segments detected by our method and the annotated line segments. **Bottom**: Estimated pose based on the predicted line segments compared with the prediction.

3.3 Bin Pose Estimation

To estimate the 3D pose from the predicted line segments, we select the four segments with the highest confidence scores. Let E be a matrix whose rows contain the eight endpoints p_i of these selected segments centered by their centroid $p_c = \frac{1}{8}\sum_{i=1}^{8} p_i$:

$$E = \begin{bmatrix} \vec{p}_1 - \vec{p}_c \\ \vdots \\ \vec{p}_8 - \vec{p}_c \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{8\times 3}. \quad (1)$$

To determine the bin's orientation, we fit a plane to the endpoints of the selected line segments using Singular Value Decomposition (SVD) of $E = U\Sigma V^T$. The normal vector of the best-fitting plane is given by the right singular vector corresponding to the smallest singular value (last column of V). Since we assume the bin's top face is oriented upwards, we ensure that the normal vector $\vec{n}$ points in the positive direction on the z axis. If necessary, we flip its direction.

Additionally, the two longest predicted segments provide two direction vectors, denoted as $\vec{d_1}$ and $\vec{d_2}$. We use them to estimate the bin's direction vector $\vec{d}$ along its longer sides by computing their mean while ensuring they do not oppose each other. To do this we flip one of the vectors if their dot product is less than 0:

$$\vec{d} = \begin{cases} \frac{\vec{d_1}+\vec{d_2}}{2} & \text{if } \vec{d_1} \cdot \vec{d_2} \geq 0 \\ \frac{\vec{d_1}-\vec{d_2}}{2} & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{2}$$

To obtain the rotation matrix, we perform Gram-Schmidt orthogonalization process on vectors $\vec{n}$ and $\vec{d}$ thus obtaining the columns $(\vec{r_x}, \vec{r_y}, \vec{r_z})$ of the rotation matrix:

$$\vec{r_z} = \frac{\vec{n}}{||\vec{n}||}, \tag{3}$$

$$\hat{\vec{r}}_x = \vec{d} - \left(\vec{r_z} \cdot \vec{d}\right) \vec{r_z}, \tag{4}$$

$$\vec{r_x} = \frac{\hat{\vec{r}}_x}{||\hat{\vec{r}}_x||}, \tag{5}$$

$$\vec{r_y} = \vec{r_z} \times \vec{r_x}. \tag{6}$$

To estimate the translation, we could compute the centroid of the endpoints and move in the direction towards the bin's bottom by a bin-specific amount d_{bin}. However, in some cases, the line segment predictor outputs multiple segments close together, which may result in missing segments on other sides of the bin. As a consequence, the computed center of endpoints may be shifted. To improve predictions in such situations, we process the set of line endpoints by iteratively merging the closest points together (replacing them with their mean) until only four points remain, which we denote as $\vec{q_i}$ for $i \in \{1,2,3,4\}$. Then we get our predicted translation $\vec{t}$ vector by using the estimated normal vector pointing upwards $\vec{r_z}$:

$$\vec{t} = \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{4} \vec{q_i} - d_{bin}\vec{r_z}, \tag{7}$$

where d_{bin} is the height of the bin, which is available from the bin model. An example of the estimated bin pose is shown in Figure 2.

4 Evaluation

In this section we provide an evaluation of our method for the task of 6DoF bin pose estimation.

4.1 Metrics

For evaluation, we use the mean translation error ($\overline{e_{TE}}$) and the mean rotation error ($\overline{e_{RE}}$) as defined in [Gajdošech et al., 2022]. To calculate the translation error (e_{TE}) we use the Euclidean distance between the predicted and ground truth translation. For rotation error (e_{RE}) we compute the angular distance between the predicted (R) and ground truth rotation matrix ($\hat{R}$) in radians using the following formula:

$$e_{RE}(\hat{R}, R) = \arccos\left(\frac{\mathrm{Tr}(\hat{R}R^{-1}) - 1}{2}\right). \tag{8}$$

4.2 Training

As described in Section 3.1, we train our models in three stages, using ResNet-50 [He et al., 2016] as the backbone in all cases.

- Stage 1: The model is trained for 450 epochs with an initial learning rate of 10^{-4}, which is reduced by a factor of 10 every 200 epochs.
- Stage 2: Training continues for additional 100 epochs, maintaining the same initial learning rate and applying a learning rate drop by a factor of 10 every 30 epochs.
- Stage 3: The final stage consists of 20 epochs with a fixed learning rate of 10^{-5}.

Before training, we normalize our dataset to ensure that the sample channels have zero mean and unit variance. For each training run, we use early stopping by selecting the models with the best results on the validation set. To compare the models in terms of both the accuracy of translation and rotation,, we use a joint metric defined as $10 \cdot \overline{e_{RE}} + \overline{e_{TE}}$.

Stage	Queries	$\overline{e_{TE}}$	$\overline{e_{RE}}$
2	4	**2.092**	0.337
2	8	2.215	**0.335**
2	16	2.167	0.338
2	32	2.281	0.403
2	64	2.303	0.373
3	4	**2.124**	0.336
3	8	2.205	**0.334**
3	16	2.166	**0.334**
3	32	2.303	0.414
3	64	2.293	0.365

Table 1: Effect of the number of queries output by the network on validation pose estimation accuracy.

Stage	$c_{\max}$	$\overline{e_{TE}}$	$\overline{e_{RE}}$
2	0.0	2.167	0.338
2	0.3	2.057	**0.328**
2	0.4	2.123	0.330
2	0.6	**1.958**	0.350
2	0.8	1.978	0.351
3	0.0	2.166	0.334
3	0.3	**2.000**	**0.330**
3	0.4	2.135	0.331
3	0.6	2.015	0.350
3	0.8	2.066	0.352

Table 2: Effect of different settings of the maximum cutout area ($c_{\max}$) on the validation pose estimation accuracy with query hyperparameter set to 16. Setting $c_{\max} = 0$ disables cutout augmentation.

4.3 Ablation Study

To find the best hyperparameter settings, we use the validation set. We performed hyperparameter search for the number of queries and cutout augmentation [DeVries and Taylor, 2017].

Queries. The number of queries determines how many predictions the model generates and was found in the original paper to influence the precision of its predictions. We evaluated several networks with different numbers of queries. The results are presented in Table 1 and show that predicting only 4 line segments leads to the best performance.

Augmentation. We also evaluate the effects of cutout augmentation [DeVries and Taylor, 2017] on pose accuracy. Cutout augmentation removes points within a randomly selected rectangular region in the structured point cloud. We set the probability of applying cutout $c_p = 0.5$, the minimum cutout area $c_{\min} = 0.2$, and evaluate the effects of setting the maximum cutout area $c_{\max}$. The results are presented in Table 2 for the setting of 16 queries. The results show that using cutout augmentation is beneficial and the specific hyperparameters are not as important as different values lead to similar results. Based on the validation results, we select the hyperparameter $c_{\max} = 0.3$.

Model	$\overline{e_{TE}}$	$\overline{e_{RE}}$
Baseline	6.685	0.431
LeTR 3D stage 2 (ours)	3.478	0.165
LeTR 3D stage 3 (ours)	**3.422**	**0.164**

Table 3: Results of the proposed bin pose estimation method by 3D line segment detection on the test set of the dataset of 3D scans of bins [Gajdošech et al., 2022]. We compare our method against the baseline convolutional network published along with the dataset.

4.4 Results

Based on the validation results, we train a final model using 4 queries with cutout set at $c_{\max} = 0.3$. We compare our results obtained for stage 2 and 3 to the baseline model, which directly outputs the rotation and translation [Gajdošech et al., 2022]. We note that when reporting the results for the baselines, the authors have also used validation samples in the final evaluation. Since we use the validation set for a hyperparameter search, we evaluated the models provided by the authors of the baseline method only on the official test set, yielding different results from their paper. The mean metrics are reported in Table 3. We also evaluate the results by comparing their cumulative error distributions in Figure 4.4. The results show that our method achieves significantly better accuracy than the baseline for both stage 2 and stage 3 models in terms of both translation and rotation. This shows the benefits of using the proposed 3D line segment detection network as a means of estimating bin poses from 3D scans.

Conclusion

In this paper, we have presented a method for 3D line segment detection in structured point clouds and its

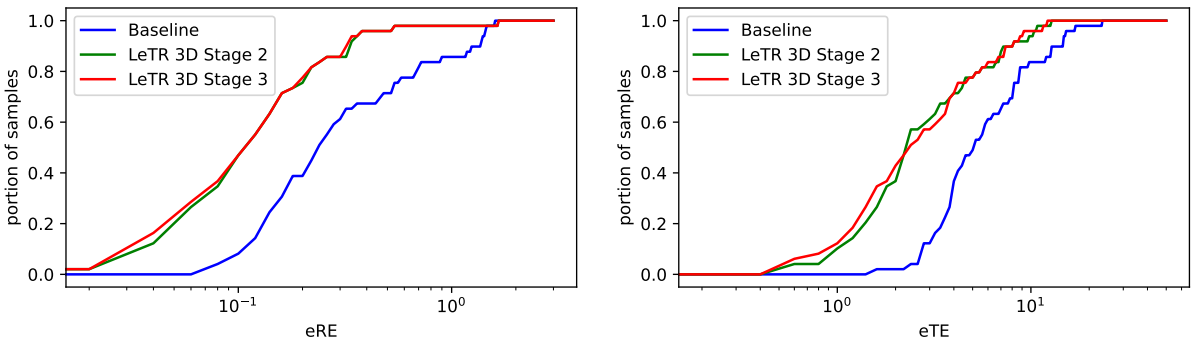


Figure 3: The graph shows the proportion of samples from the test set (y-axis) for which the error is below a given threshold (x-axis) for e_{RE} (left) and e_{TE} (right). Our method based on 3D line segment detection has better accuracy for both rotation and translation when compared to the baseline [Gajdošech et al., 2022].

application for the task of 6DoF bin pose estimation. We have evaluated our method on a dataset of 3D scans of bins. Our method achieves better results than the baseline, showing its viability for practical use.

In future work, we plan to develop larger RGB and RGB-D datasets to train more general 3D line segment detectors. To achieve this, we aim to extract line segments from existing multi-view datasets using existing analytical methods and use the estimated 3D line segments to train a single-view model. Additionally, we intend to explore the application of 3D line segment detection for various downstream tasks.

5 Acknowledgment

We would like to thank Lukáš Gajdošech for providing us with the results for the baseline model.

References

[Carion et al., 2020] Carion, N., Massa, F., Synnaeve, G., Usunier, N., Kirillov, A., and Zagoruyko, S. (2020). End-to-end object detection with transformers. In *European conference on computer vision*, pages 213–229. Springer.

[Chen and Wang, 2011] Chen, T. and Wang, Q. (2011). 3d line segment detection for unorganized point clouds from multi-view stereo. In Kimmel, R., Klette, R., and Sugimoto, A., editors, *Computer Vision – ACCV 2010*, pages 400–411, Berlin, Heidelberg. Springer Berlin Heidelberg.

[DeVries and Taylor, 2017] DeVries, T. and Taylor, G. W. (2017). Improved regularization of convolutional neural networks with cutout. *arXiv preprint arXiv:1708.04552*.

[Duda and Hart, 1972] Duda, R. O. and Hart, P. E. (1972). Use of the hough transformation to detect lines and curves in pictures. *Communications of the ACM*, 15(1):11–15.

[Engel et al., 2014] Engel, J., Schöps, T., and Cremers, D. (2014). Lsd-slam: Large-scale direct monocular slam. In *European conference on computer vision*, pages 834–849. Springer.

[Gajdošech et al., 2022] Gajdošech, L., Kocur, V., Stuchlík, M., Hudec, L., and Madaras, M. (2022). Towards deep learning-based 6d bin pose estimation in 3d scans. In *VISAPP*, pages 545–552. Scitepress.

[Grompone von Gioi et al., 2010] Grompone von Gioi, R., Jakubowicz, J., Morel, J.-M., and Randall, G. (2010). Lsd: A fast line segment detector with a false detection control. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 32(4):722–732.

[He et al., 2016] He, K., Zhang, X., Ren, S., and Sun, J. (2016). Deep residual learning for image recognition. In *2016 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, pages 770–778.

[Hodan et al., 2020] Hodan, T., Barath, D., and Matas, J. (2020). Epos: Estimating 6d pose of objects with symmetries. In *Proceedings of the IEEE/CVF conference on computer vision and pattern recognition*, pages 11703–11712.

[Hodan et al., 2024] Hodan, T., Sundermeyer, M., Labbe, Y., Nguyen, V. N., Wang, G., Brachmann, E., Drost, B., Lepetit, V., Rother, C., and Matas, J. (2024). Bop challenge 2023 on detection segmentation and pose estimation of seen and unseen rigid objects. In *Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*, pages 5610–5619.

[Lin et al., 2017] Lin, T.-Y., Goyal, P., Girshick, R., He, K., and Dollár, P. (2017). Focal loss for dense object detection. In *Proceedings of the IEEE international conference on computer vision*, pages 2980–2988.

[Liu et al., 2023] Liu, S., Yu, Y., Pautrat, R., Pollefeys,

M., and Larsson, V. (2023). 3d line mapping revisited. In *Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*.

[Liu et al., 2021] Liu, Y., D'Aronco, S., Schindler, K., and Wegner, J. D. (2021). Pc2wf: 3d wireframe reconstruction from raw point clouds. *arXiv preprint arXiv:2103.02766*.

[Pautrat et al., 2023] Pautrat, R., Barath, D., Larsson, V., Oswald, M. R., and Pollefeys, M. (2023). Deeplsd: Line segment detection and refinement with deep image gradients. In *Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*.

[Pumarola et al., 2017] Pumarola, A., Vakhitov, A., Agudo, A., Sanfeliu, A., and Moreno-Noguer, F. (2017). Pl-slam: Real-time monocular visual slam with points and lines. In *2017 IEEE International Conference on Robotics and Automation (ICRA)*, pages 4503–4508.

[Xiaohu et al., 2019] Xiaohu, L., Yahui, L., and Kai, L. (2019). Fast 3d line segment detection from unorganized point cloud. *arXiv preprint arXiv:1901.02532*.

[Xu et al., 2021] Xu, Y., Xu, W., Cheung, D., and Tu, Z. (2021). Line segment detection using transformers without edges. In *CVPR*, pages 4257–4266.

[Zhou et al., 2019a] Zhou, Y., Barnes, C., Lu, J., Yang, J., and Li, H. (2019a). On the continuity of rotation representations in neural networks. In *Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*, pages 5745–5753.

[Zhou et al., 2019b] Zhou, Y., Qi, H., Zhai, Y., Sun, Q., Chen, Z., Wei, L.-Y., and Ma, Y. (2019b). Learning to reconstruct 3d manhattan wireframes from a single image. In *Proceedings of the IEEE/CVF international conference on computer vision*, pages 7698–7707.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 360
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Daniel Kyselica, Marek Šuppa, Roman Ďurikovič

RoBo6: Standardized MMT Light Curve Dataset for Rocket Body Classification

Daniel Kyselica[1*] Marek Šuppa[1†] Roman Ďurikovič[1‡]

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

Abstract

Space debris presents a critical challenge for sustainable space missions, necessitating reliable identification methods. This paper introduces RoBo6, a standardized dataset for rocket body classification based on light curves derived from the Mini Mega Tortora (MMT) database. Including six rocket body classes (CZ-3B, Atlas 5 Centaur, Falcon 9, H-2A, Ariane 5, and Delta 4) with 5,676 training and 1,404 test samples, RoBo6 addresses data inconsistencies through resampling, normalization, and filtering techniques. Our evaluation of various machine learning models demonstrated Astroconformer's superior performance, establishing a common benchmark for future comparisons.

1 Introduction

After 60+ years of space utilization with over 6,000 missions, space debris has become a serious threat to future missions. Each object reflects light, creating a unique light curve signature shaped by its physical properties. While machine learning can help identify hazardous objects more efficiently than traditional methods, existing solutions aren't directly comparable due to inconsistencies in data preparation and evaluation methods. RoBo6 aims to provide a standardized benchmark dataset for consistent advancement in the field.

2 Dataset Creation

The dataset is derived from the Russian Mini Mega Tortora (MMT) database[1], which contained 14,888 objects and 502,815 light curves as of August 2024. The raw data exhibits several challenges: large observation gaps, limited observations per rotational period, and low signal-to-noise ratio. Our preprocessing addressed these issues through **Gap-Based Splitting** (dividing light curves based on the length and gaps in the measurements), **Frequency Rescaling** (rescaling to 10,000 points using 10 Hz sampling frequency), **Quality Filtering** (removing samples with insufficient number of measurements), and **Normalization** (using standard mean and standard deviation normalization).

3 Evaluation Strategy and Results

The dataset is split by track ID to ensure all samples from the same light curve remain in the same set, with stratified splitting maintaining consistent class distributions. We chose the F1 macro score as our primary evaluation metric to address class imbalance issues. We evaluated five model architectures, with Astroconformer be the best performing model as shown in Table 1, achieving 72.5% accuracy and 0.684 F1 score, despite being originally designed for stellar light curves.

Table 1: Models performance comparison.

Model	Accuracy	F1 Score
ALLWORTH[2]	0.559 ± 0.044	0.478 ± 0.038
RESNET[3]	0.694 ± 0.023	0.600 ± 0.034
FURFARO[4]	0.628 ± 0.009	0.552 ± 0.013
YAO[5]	0.672 ± 0.017	0.604 ± 0.023
ASTROCONFORMER[6]	$\mathbf{0.725} \pm 0.011$	$\mathbf{0.684} \pm 0.015$

4 Conclusion

RoBo6 provides a standardized benchmark for rocket body classification that enables fair model comparison and facilitates advances in space object identification. The dataset is publicly available on Hugging Face `https://huggingface.co/datasets/kyselica/RoBo6`.

*daniel.kyselica@fmph.uniba.sk
†marek.suppa@fmph.uniba.sk
‡roman.durikovic@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 361
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Roman Jančich, Marcel Makovník

Hybrid mesh denoising

Roman Jančich[1*] Marcel Makovník[1†]

Department of Algebra and Geometry, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstract: Noise in polygon meshes distorts vertex positions or normals. Noise reduction techniques include smoothing techniques, which eliminate noise and smooth the structure, and optimization techniques, which optimize the mesh and restore lost features. We propose a new hybrid method by combining both. Firstly, a smoothing method which uses anisotropic diffusion. This method uses partial differential equations to remove noise. For example, by using Perona-Malik diffusivity function (see [Maiseli, 2023]) which is a weighted function that exponentially descent with distance from original point A_i due to gradient magnitude. Here, we compute the new vertices using

$$\tilde{A}_i = A_i + s_i \vec{g}_i. \quad (1)$$

where s_i represents adaptive time step, that ensures numerical stability and $\vec{g}_i$ denotes the gradient of the Perona-Malik function, calculated as weighted average of differences between A_i and its neighboring vertices. Next step is optimization which consists of quadrics correction and moving least squares (MLS). The quadrics correction projects the computed displacement of each vertex $\tilde{A}_i$ onto the tangent plane using quadric matrix $\mathbf{Q}_i$ that minimizes the energy function. The matrix is calculated as

$$\mathbf{Q}_i = \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} \mathbf{w}_{ij} (\tilde{A}_j - \tilde{A}_i)(\tilde{A}_j - \tilde{A}_i)^\top + 0.1\, \vec{n}_i \vec{n}_i^\top, \quad (2)$$

where $\mathbf{w}_{ij}$ is Perona-Malik weight function, $\mathcal{N}(i)$ denotes the set of vertices in the local neighborhood of A_i and $\vec{n}_i$ is the normal vector used to penalize displacements in the normal direction. For the MLS step a correction function reconstructs a smooth surface by fitting a polynomial that minimizes distance errors by local weighted centroid, using the Perona-Malik function. The final correction projected to tangent plane is given by

$$\hat{A} = \tilde{A}_i + \beta\, \vec{c}_i^{\,\mathrm{Q}} + (1-\beta)\, \vec{c}_i^{\,\mathrm{MLS}}, \quad \beta \in [0,1], \quad (3)$$

here $\vec{c}_i^{\,\mathrm{MLS}}$ and $\vec{c}_i^{\,\mathrm{Q}}$ are the MLS and quadrics correction vectors, respectively.

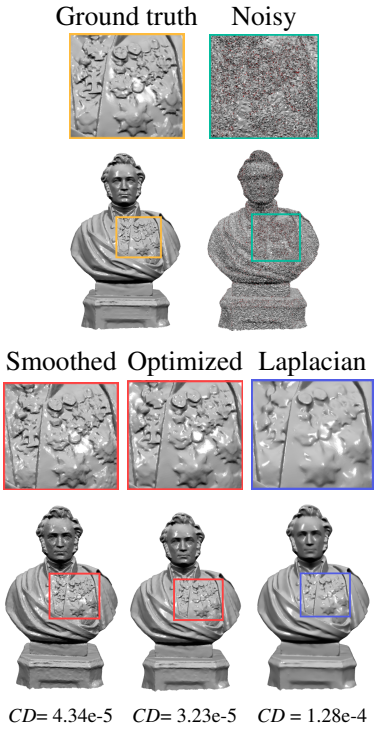


Figure 1: Comparison of the ground truth (yellow) with the results of our hybrid method (red) and Laplacian smoothing (blue) applied to the same noisy input (green).

We evaluate our method by measuring the normalized chamfer distance *CD* between iterations, using the noisy mesh as the reference. As shown in Figure 1 our hybrid method, significantly reduced noise while preserving details. Where lower *CD* indicates effective noise reduction. Compared to our approach, traditional Laplacian smoothing establishes more slowly, resulting in higher *CD* indicating more aggressive smoothing. Hence, by combining adaptive diffusion and optimization, our method achieves a precise noise reduction process, while also maintaining details.

References

[Maiseli, 2023] Maiseli, B. (2023). Nonlinear anisotropic diffusion methods for image denoising problems: Challenges and future research opportunities. *Array*, 17:100265.

*jancich1@uniba.sk
†marcel.makovnik@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 362
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Erik Božík, Marek Šuppa

Slovak Speech Corpora for Open-Source Automatic Speech Recognition

Erik Božík[1], Marek Šuppa[2]

Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, Comenius University

Introduction

Our work focuses on advancing Automatic Speech Recognition (ASR) for the Slovak language. Modern ASR systems rely heavily on the quality and size of training data, and Slovak, as a low-resource language, often suffers from limited performance. State-of-the-art models frequently underperform on Slovak or do not support it at all. For instance, OpenAI's Whisper model illustrates this gap - languages with thousands of training hours tend to achieve low error rates, while Slovak, with only 90 hours of training data, lags behind [1]. While dataset size and quality isn't the only factor affecting ASR performance, it is one of the few we can directly improve.

The Dataset

One promising source for acquiring a large ASR dataset is the National Council of Slovakia. Like many other countries, Slovakia provides official transcripts for all parliamentary sessions. Although these transcripts are not originally designed for ASR purposes, they show potential to be processed accordingly. Transforming them into a usable format for ASR training, however, is not a straightforward task.

The collection of audio recordings alone required approximately one week of continuous web scraping. In addition, all available transcripts in the form of Microsoft Word documents were downloaded. Due to its format, we had to develop a series of complex parsing heuristics and algorithms to convert them into a semi-structured `JSON` format.

We collected **1258 audio recordings** from the National Council's MediaPortál website, of which **1136 were successfully matched** to transcripts, totaling **4096 hours**. The portal appears to have been established near the end of the fourth election term (2010). As a result, the dataset covers **all forenoon hearings from 2011–2024**, with **partial coverage of 2010 and 2025**.

Each transcript was segmented by speaker, though none of the sources included reliable word or utterance level timestamps. Notably, a single transcript often includes both forenoon and afternoon sessions, while **only the forenoon audio was scraped**. This results in **partially unmatched transcripts** and necessitates further processing (e.g., alignment and filtering) for effective ASR model training. Audio recording durations range from **2 minutes 24 seconds** to **24 hours 53 minutes** (mostly silence), with an **average of 3 hours 36 minutes**.

Due to early live stream starts and non-speech intervals, recordings include segments in which there is no speech. To estimate actual speech content, we applied **pyannote's voice activity detection** (VAD) (via WhisperX) to **997 randomly sampled recordings** [2] [3]. Results consistently showed **85–86% speech**, suggesting the dataset contains roughly **3500 hours of spoken content.**

Benchmark

We evaluated our dataset using top-performing ASR systems, focusing on speech recognition. Although some ASR models have been trained or fine-tuned for Slovak, they often fail to provide a complete end-to-end solution, so we had to exclude them from our evaluation.

Our test set consisted of **5 randomly sampled** recordings, totaling approximately **13 hours and 20 minutes (11 hours and 16 minutes of speech after VAD)**. These recordings were from 2011 (2), 2012 (1), 2013 (1), and 2015 (1).

For the evaluation, we used all publicly available versions of OpenAI's Whisper, excluding only the Turbo version, and included its fine-tuned Slovak version [1] [4]. We computed Word Error Rate (WER) by comparing ASR outputs to our human-labeled transcripts. The results are as follows:

Model	Word Error Rate
openai/whisper-**large-v3**	12.9 %
openai/whisper-**medium**	21.7 %
openai/whisper-**small**	36.1 %
mikr/whisper-**small-sk-cv11**	42.5 %
openai/whisper-**tiny**	77.3 %

The evaluated texts underwent normalization, including lowercasing, punctuation removal, Unicode standardization and collapsing multiple spaces into single ones. Number formatting could not be standardized, as numerical expressions varied widely - sometimes written as digits, other times as words (slovak offers numerous morphological forms of a written number). Our benchmark extended prior evaluations by the original model authors, aligning with their published results. Given the dataset's scale, it presents a strong opportunity to improve current models or enable more efficient, smaller systems tailored for Slovak.

References

[1] Alec Radford, Jong Wook Kim, Tao Xu, Greg Brockman, Christine McLeavey, and Ilya Sutskever. *Robust Speech Recognition via Large-Scale Weak Supervision.*

[2] Hervé Bredin, Ruiqing Yin, Juan Manuel Coria, Gregory Gelly, Pavel Korshunov, Marvin Lavechin, Diego Fustes, Hadrien Titeux, Wassim Bouaziz, and Marie-Philippe Gill. *pyannote.audio: Neural Building Blocks for Speaker Diarization.*

[3] Max Bain, Jaesung Huh, Tengda Han, and Andrew Zisserman. *WhisperX: Time-Accurate Speech Transcription of Long-Form Audio.*

[4] mikr. *Whisper Small Slovak.* Available at: `https://huggingface.co/mikr/whisper-small-sk-cv11`.

[1] Author: `bozik20@fmph.uniba.sk`
[2] Supervisor: `marek.suppa@fmph.uniba.sk`

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 363
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Martin Halaj, Martin Madaras

3D Human Avatar Generation with Dimensional Fidelity

Martin Halaj[1*] Martin Madaras[1†‡]

Department of Applied Informatics, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

The need for highly realistic digital human avatars has grown significantly across various fields, including gaming, virtual and augmented reality, fashion, and healthcare. Achieving a faithful, lifelike virtual representation of a person necessitates accurately capturing and translating anthropometric measurements from the real body into the digital model.

Our method for generating human body models relies on anthropometric measurements. Our tool can process up to 16 different body measurements as input to derive shape parameters, which are then used to construct the human model. To generate training data for this task, we measure each body mesh that we previously generated using a tool for the automatic estimation of body measurements [Škorvánková. et al., 2022]. This tool outputs 16 anthropometric measurements of different body parts. We explored various approaches for determining shape parameters.

A similar approach was previously applied in the Virtual Caliper [Pujades et al., 2019]. However, unlike our tool, it only incorporates up to five input measurements and requires more computational resources. Another implementation of this methodology is Meshcapade Me [1], which achieves higher accuracy but is a commercial paid service.

To support our research, we developed a dataset containing images of human figures in a standing position. This dataset includes front and side images, both with and without backgrounds, along with 3D joint locations and corresponding avatar meshes. We generated this dataset for 120,000 avatars, resulting in nearly 1 million files. The SURREACT framework [Varol et al., 2021] was adapted to facilitate dataset creation.

This dataset is intended to supplement real-world datasets, which are often limited in size due to factors such as the difficulty of capturing a diverse range of individuals and privacy concerns. Our work aims to enhance these datasets with synthetic data, enabling the training of convolutional neural networks (CNNs) for extracting anthropometric measurements from images.



Figure 1: Example of clothed avatars.

Figure 1 presents avatars wearing shirts and pants, generated using our tool.

In conclusion, our proposed framework facilitates automatic mesh generation based on anthropometric inputs and provides valuable training data for CNNs specialized in extracting body measurements from images.

Keywords: Human Body, Synthetic Data, Reconstruction

References

[Pujades et al., 2019] Pujades, S., Mohler, B., Thaler, A., Tesch, J., Mahmood, N., Hesse, N., Bülthoff, H. H., and Black, M. J. (2019). The virtual caliper: Rapid creation of metrically accurate avatars from 3d measurements. *IEEE transactions on visualization and computer graphics*, 25(5):1887–1897.

[Varol et al., 2021] Varol, G., Laptev, I., Schmid, C., and Zisserman, A. (2021). Synthetic humans for action recognition from unseen viewpoints. In *IJCV*.

[Škorvánková. et al., 2022] Škorvánková., D., Riečický., A., and Madaras., M. (2022). Automatic estimation of anthropometric human body measurements. In *Proceedings of the 17th International Joint Conference on Computer Vision, Imaging and Computer Graphics Theory and Applications (VISIGRAPP 2022) - Volume 4: VISAPP*, pages 537–544. INSTICC, SciTePress.

*halaj21@uniba.sk
†martin.madaras@fmph.uniba.sk
‡Supervisor
[1]https://me.meshcapade.com/

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 364
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Carlos Andres Pizarroso Troncoso

Evaluating the significance of outdoor advertising utilizing Computer Vision

Carlos Andres Pizarroso Troncoso[1*†]

Supervisor: Zuzana Berger Haladová[1‡]

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

Roadside billboards play a significant role in outdoor advertising, but they may also contribute to driver distraction, increasing the probabilities of accidents. Understanding how drivers visually interact with billboards is essential for evaluating their potential impact on road safety. This study introduces a fully automated framework for billboard detection and driver gaze classification, utilizing eye-tracking data.

While previous research has investigated billboard detection [Morera et al., 2020] and gaze tracking [Vicente et al., 2015], many approaches still depend on eye-tracking data for validation. A key challenge remains in finding a relation between billboard visibility and gaze duration without relying in manual annotations or specialized eye-tracking hardware. To solve this, we employ deep learning models trained on an expanded BillboardLamac dataset, combining object detection and classification tasks. A prior study introduced the BillboardLamac dataset [Černeková et al., 2023], which contains gaze-tracking videos and annotated billboard appearances. It utilized object detection models with tracking techniques to assess billboard significance based on gaze duration. Our work extends this by automating the process and incorporating spatial coordinate information into the classification model to enhance accuracy and generalization.

Our method consists of a two-stage deep learning pipeline. The first stage involved training a YOLO-based object detection model on 9,700 high-resolution images from the Mapillary Vistas dataset, followed by fine-tuning on 1,213 BillboardLamac images, achieving a test accuracy of 94%. In the second stage, frames from gaze-tracking videos were extracted, with billboards labeled alongside their bounding boxes. Initial classification experiments using a YOLO11-based model yielded an 83% test accuracy.

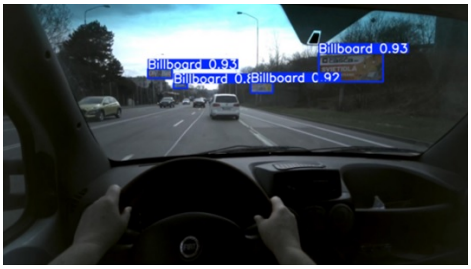


Figure 1: Billboard detection example using our trained model.

To improve classification performance further, we are integrating spatial coordinate features through masking techniques. This method introduces a fourth image channel encoding billboard spatial relevance via an attention map, requiring modifications to the YOLO classification model's input layer. Future experiments will assess the effectiveness of this approach. If successful, we will combine the improved classification model with detection to develop a fully automated system for analyzing billboard significance in driver attention studies.

Keywords: Road Safety and Advertising, Billboard Detection, Gaze Classification, Deep Learning

References

[Morera et al., 2020] Morera, , Sánchez, , Moreno, A. B., Sappa, D., and Vélez, J. F. (2020). Ssd vs. yolo for detection of outdoor urban advertising panels under multiple variabilities. *Sensors*, 20(16).

[Vicente et al., 2015] Vicente, F., Huang, Z., Xiong, X., De la Torre, F., Zhang, W., and Levi, D. (2015). Driver gaze tracking and eyes off the road detection system. *IEEE Transactions on Intelligent Transportation Systems*, 16(4):2014–2027.

[Černeková et al., 2023] Černeková, Z., Haladová, Z. B., Špirka, J., and Kocur, V. (2023). Evaluating the significance of outdoor advertising from driver's perspective using computer vision. In *2023 World Symposium on Digital Intelligence for Systems and Machines (DISA)*, page 53–58. IEEE.

*troncoso1@uniba.sk
†Supervisor
‡zuzana.bergerhaladova@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 365–369
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Sebastian Brezina

On the gauge groups of the teleparallel equivalents of General Relativity

Sebastian Brezina*

Supervisor: Martin Krššák†

Department of Theoretical Physics, Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, Comenius University in Bratislava, Mlynská dolina, 842 48

Abstract: The teleparallel equivalents of General Relativity are gravitational theories based on teleparallel geometry that remain dynamically equivalent to General Relativity. Since General Relativity is a classical gauge gravitational theory of diffeomorphisms, a natural question arises: does the same hold for its teleparallel counterparts? This work explores the gauge structure of these theories, showing that their gauge groups correspond to certain unspecified subgroups of the diffeomorphism group. These subgroups may be trivial and vary depending on the specific physical situation, as they rely on the symmetries of the corresponding linear connections.

Keywords: Teleparallel equivalents of General Relativity, classical gauge gravitational theories, teleparallel connections, the canonical 1-form, gauge groups

Introduction

Experiments demonstrate that General Relativity is the most successful gravitational theory ever constructed. It is based on (pseudo)Riemannian geometry, where one works with a metric tensor and the Levi-Civita connection. In this theory, gravity is interpreted as a manifestation of the curvature of the Levi-Civita connection. The experimental success of General Relativity can motivate one to study other gravitational theories that are dynamically fully equivalent to General Relativity but use different geometry[1] for describing the same physics. The teleparallel equivalents of General Relativity are exactly such theories. They are based on teleparallel geometry in which the curvature of a linear connection vanishes, but the torsion and non-metricity do not.

It belongs to folklore that General Relativity is a classical gauge theory of diffeomorphisms since the gauge symmetries[2] of its action are (infinitesimal) diffeomorphisms. Motivated by the previous fact and the importance of gauge theories in theoretical physics, one might ask the question of whether the teleparallel equivalents of General Relativity can also be interpreted as classical gauge theories, and if so, then what are their gauge groups?

This work uses a geometric approach to examine the gauge structure of the teleparallel equivalents of General Relativity. We closely follow Trautman's approach to classical gauge theories[3] [Trautman, 1979, Trautman, 1980, Trautman, 1982]. Furthermore, this work can be understood as an extension of the recent work [Brezina, Boffo, and Krššák, 2025], where only the gauge structure of the Teleparallel Equivalent of General Relativity was examined. Here, the gauge structures of the General and Symmetric Teleparallel Equivalents of General Relativity are also examined.

The paper is organized in the following way: Part 1 shows the relation between General Relativity and its teleparallel equivalents, and provides all needed information about these theories; Part 2 summarizes[4] Trautman's approach to classical gauge gravitational theories in the language of principal bundles, and Part 3 analyzes the gauge groups of the teleparallel equivalents of General Relativity. We follow the notation of [Fecko, 2006], where all needed mathematical definitions and theorems can be found. Throughout the text, we assume that spacetime M is modeled as a smooth 4-dimensional orientable manifold and is endowed with a metric tensor g of the signature $(1,3)$.

*brezina19@fmph.uniba.sk

†martin.krssak@fmph.uniba.sk

[1] The presence of linear connection ∇ on Riemannian manifold (M,g) gives rise to three tensor fields that characterize it: the curvature R, the torsion T, and the non-metricity ∇g tensors.

[2] A gauge symmetry is a variational symmetry that is linearly parametrized by the set of arbitrary (smooth) functions of spacetime and their derivatives [Noether, 1918].

[3] Another alternative is the approach of Sardanashvily [Sardanashvily, 2002, Sardanashvily, 2011].

[4] For a more detailed summary of his research, including the gauge theories of the Yang-Mills type over Minkowski space, see chapter 2 of [Brezina, 2025].

1 The teleparallel equivalents of General Relativity

1.1 Decomposition of a linear connection

The *Christoffel symbols* (of the second kind) $\Gamma^i_{jk}(x)$ of the structure (M,g,∇) can always be uniquely decomposed as

$$\Gamma^i_{jk} = \mathring{\Gamma}^i_{jk} + K^i_{jk} + L^i_{jk}, \tag{1}$$

where $\mathring{\Gamma}$ denotes the Christoffel symbols of the *Levi-Civita connection* (which is the linear connection uniquely determined by conditions $T = \nabla g = 0$)

$$\mathring{\Gamma}^i_{jk} = \frac{1}{2} g^{il} \left(g_{lj,k} + g_{lk,j} - g_{jk,l} \right), \tag{2}$$

K and L are the *contortion* and *disformation* tensors

$$\begin{aligned} K^i_{jk} &:= -\frac{1}{2} \left(T^i{}_{jk} + T_{jk}{}^i + T_{kj}{}^i \right), \\ L^i_{jk} &:= -\frac{1}{2} g^{il} \left(g_{lj;k} + g_{lk;j} - g_{jk;l} \right), \end{aligned} \tag{3}$$

where ; denotes the covariant gradient of ∇.

From (1) follows that the *scalar curvature* $\mathbb{R} := R^{ij}{}_{ij}$ of the linear connection ∇ decomposes as

$$\mathbb{R} = \mathring{\mathbb{R}} + \mathbb{T} + \mathbb{Q} + \mathbb{M} + \mathbb{B}, \tag{4}$$

where $\mathring{\mathbb{R}}$ is the scalar curvature of the Levi-Civita connection, $\mathbb{T}$ is the *torsion scalar*

$$\mathbb{T} := \frac{1}{4} T_{ijk} T^{ijk} + \frac{1}{2} T_{ijk} T^{jik} - T^{ik}_{\ \ i} T^j_{\ kj}, \tag{5}$$

$\mathbb{Q}$ is the *non-metricity scalar*

$$\begin{aligned} \mathbb{Q} := \frac{1}{4} (\nabla g)_{ijk} (\nabla g)^{ijk} - \frac{1}{2} (\nabla g)_{kij} (\nabla g)^{ijk} \\ - \frac{1}{4} (\nabla g)^{i\,k}_{\ i} (\nabla g)^j{}_{jk} + \frac{1}{2} (\nabla g)^i{}_{ik} (\nabla g)^{k\,j}_{\ \ j}, \end{aligned} \tag{6}$$

$\mathbb{M}$ denotes the mixed terms given as

$$\mathbb{M} := (\nabla g)_{ijk} T^{jki} + (\nabla g)^{ki}_{\ \ i} T^j_{\ kj} - (\nabla g)^i_{\ ik} T^{jk}_{\ \ j}, \tag{7}$$

and $\mathbb{B}$ denotes terms with divergence w.r.t. ∇_{LC}

$$\mathbb{B} := \left(2T^{ik}_{\ \ i} + (\nabla g)^{i\,k}_{\ i} - (\nabla g)^{ki}_{\ \ i} \right)_{;k}. \tag{8}$$

1.2 General Relativity and its teleparallel equivalents

General Relativity is geometrically described by (M,g,∇_{LC}) and its matter-free action reads

$$S_{GR}[g,\nabla_{LC}] := -\frac{1}{16\pi} \int \mathring{\mathbb{R}}\ \omega_g, \tag{9}$$

where ω_g is the metric volume form.

The *teleparallel connection* ∇_T is a linear connection with vanishing curvature, i.e., it is defined by the condition $R = 0$. As a consequence of this definition, the scalar curvature of the teleparallel connection vanishes identically, and the relation (4) gives $\mathring{\mathbb{R}} = -\mathbb{T} - \mathbb{Q} - \mathbb{M} - \mathbb{B}$. This allows one to rewrite the action (9) as

$$S_{GR}[g,\nabla_T] = \frac{1}{16\pi} \int (\mathbb{T} + \mathbb{Q} + \mathbb{M} + \mathbb{B})\ \omega_g. \tag{10}$$

The covariant gradient in the term (8) is given w.r.t. the Levi-Civita connection. Therefore, $\mathbb{B}$ is a *boundary term*. This means that $\mathbb{B}$ does not contribute to the derivation of the field equations, and the whole dynamics is encoded in the term $\mathbb{T} + \mathbb{Q} + \mathbb{M}$.

The *General Teleparallel Equivalent of General Relativity* (GTEGR) [Beltrán Jiménez et al., 2020] is based on teleparallel geometry (M,g,∇_T) and its action is given as

$$S_{GTEGR}[g,\nabla_T] := \frac{1}{16\pi} \int (\mathbb{T} + \mathbb{Q} + \mathbb{M})\ \omega_g. \tag{11}$$

In addition, teleparallel geometry can be further restricted to its metric ($\nabla g = 0$) or symmetric ($T = 0$) subclasses. Then we obtain another two gravitational theories.

The *Metric Teleparallel Equivalent of General Relativity*, usually called the *Teleparallel Equivalent of General Relativity* (TEGR) [Einstein, 1929], is based on metric teleparallel geometry (M,g,∇_{mT}) and its action reads

$$S_{TEGR}[g,\nabla_{mT}] := \frac{1}{16\pi} \int \mathbb{T}\ \omega_g. \tag{12}$$

The *Symmetric Teleparallel Equivalent of General Relativity* (STEGR) [Nester and Yo, 1999] is based on symmetric teleparallel geometry (M,g,∇_{sT}) and its action reads

$$S_{STEGR}[g,\nabla_{sT}] := \frac{1}{16\pi} \int \mathbb{Q}\ \omega_g. \tag{13}$$

The actions (9), (11), (12), and (13) yield the same field equations - *Einstein's field equations* - rewritten

in the appropriate geometric language of each theory. This implies that at the level of field equations, these four theories are fully dynamically equivalent, i.e., they give the same predictions. The solution of Einstein's field equations is only the metric tensor g (or equivalently, all orthonormal frame fields corresponding to g), therefore, the teleparallel ∇_T, metric teleparallel ∇_{mT}, and symmetric teleparallel ∇_{sT} connections are not determined by the field equations of these theories. Thus, the teleparallel equivalents of General Relativity do not determine their torsion and non-metricity tensors, and no physical entities couple to them in contrast to *Einstein-Cartan theory*, where spin couples to torsion[5]. This means that torsion and non-metricity of the teleparallel equivalents of General Relativity are just mathematical tools used for rewriting GR's geometry. Therefore, in these four theories, gravity is understood as a manifestation of the curvature of the Levi-Civita part of the used linear connection, since the field equations determine it.

2 Classical gauge gravitational theories

We use Trautman's definition of a classical gauge theory [Trautman, 1982]:

2.1 Definition of a classical gauge theory. *A classical gauge theory is any physical theory which includes among its dynamical variables a connection on principal G-bundle over spacetime M.*

Let us have a principal G-bundle $\pi : P \to M$. A diffeomorphism $u : P \to P$ is an *automorphism* of the principal G-bundle if there is a diffeomorphism $v : M \to M$ such that $\pi \circ u = v \circ \pi$ and u satisfies $u \circ R_g = R_g \circ u$ for all $g \in G$. Automorphisms of P constitute an infinite-dim. group Aut P. An automorphism u is called *vertical* if $v = id_M$. Vertical automorphisms constitute an infinite-dim. group $\mathrm{Aut}_0\, P \subset \mathrm{Aut}\, P$.

In any physical theory, there can occur elements that are not subject to the equations of motion of this theory but are rather given from "outside", such as external forces or the Minkowski metric tensor in Special Relativity. These elements are called *absolute elements*. The presence of absolute elements in a classical gauge theory naturally motivates the following definitions of gauge groups [Trautman, 1980]

[5]For more details about the Einstein-Cartan theory see [Trautman, 2006].

2.2 Definition of the gauge group. *The gauge group $\mathscr{G}$ of a classical gauge theory containing absolute elements consists of all automorphisms of P that preserve them.*

The elements of $\mathscr{G}$ are called *gauge transformations*. By restricting to the vertical gauge transformations, one obtains the so-called *pure gauge transformations*, i.e., the elements of the *pure gauge group*.

2.3 Definition of the pure gauge group. *The pure gauge group $\mathscr{G}_0$ is given as $\mathscr{G}_0 := \mathscr{G} \cap Aut_0\, P$.*

Classical gauge gravitational theories are based on a dynamical metric tensor[6] g and a dynamical linear connection $\hat{\omega}$. Hence, they are geometrically described by the structure (M, g, ∇). This implies that in the formalism of principal bundles, we work[7] with the *frame bundle LM* endowed with a $gl(4,\mathbb{R})$-valued linear connection[8] ω. The frame bundle LM is soldered to the base manifold M. This soldering gives rise to the so-called *canonical* 1-*form* θ, defined as

$$\langle \theta^a_e, w \rangle := \langle e^a, \pi_* w \rangle, \qquad w \in T_e LM. \tag{14}$$

The canonical 1-form θ is canonically determined by the choice of the base manifold M and not by the field equations. Therefore, it has to be treated as an absolute element of classical gauge gravitational theories. In this case, the gauge group is given as

$$\mathscr{G} = \{\forall\, u \in \mathrm{Aut}\, LM;\ u^* \theta = \theta\}. \tag{15}$$

It was shown in [Trautman, 1979] that $\mathscr{G}$ is isomorphic to Diff M group, and the pure gauge group $\mathscr{G}_0$ reduces to a trivial group, i.e. $\mathscr{G}_0 = \{id_{LM}\}$.

According to Definition 2.1, General Relativity is a classical gauge gravitational theory with the structure group $SO(1,3)$ and the gauge group Diff M.

3 Gauge structure of the teleparallel equivalents of General Relativity

As noted at the end of section 1.2, in GTEGR, TEGR, and STEGR, the used linear connections -

[6]The metric tensor g plays the role of a *classical Higgs field* in classical gauge gravitational theories. It spontaneously breaks the full $GL(4,\mathbb{R})$ symmetry to the *Lorentz symmetry* $SO(1,3)$, as required by the Strong Equivalence Principle.

[7]Equivalently, one can also work with the affine bundle AM endowed with a $ga(4,\mathbb{R})$-valued affine connection, for more details see chapter 3.3 of [Kobayashi and Nomizu, 1963].

[8]To clarify the notation, by hat over omega we denote the linear connection 1-form on M. It is related to ω on LM through the pullback by a local section σ of LM as $\hat{\omega} = \sigma^* \omega$.

more specifically, the teleparallel connection $\hat{\omega}_T$ in GTEGR, the metric teleparallel connection $\hat{\omega}_{mT}$ in TEGR, and the symmetric teleparallel connection $\hat{\omega}_{sT}$ in STEGR - are not determined by the field equations of these theories, since Einstein's field equations determine only the metric tensor g or equivalently the OM bundle corresponding to this metric tensor. This means that all these connections are non-dynamical. Thus, according to Definition 2.1, these gravitational theories cannot be understood as classical gauge gravitational theories in Trautman's sense. Let us therefore analyze the possibility of relaxing the requirement of a dynamical connection in Definition 2.1 while not modifying Definitions 2.2, and 2.3.

To determine the gauge structure of some classical gauge theory, one must, among other things, determine its structure group G, gauge group $\mathscr{G}$, and pure gauge group $\mathscr{G}_0$.

Let us first start with the structure group G. Since in the teleparallel equivalents of General Relativity one works with Riemannian manifolds endowed with linear connections (M,g,∇), the principal G-bundle describing these theories is the frame bundle[9], whose structure group is $GL(4,\mathbb{R})$.

To determine the gauge group $\mathscr{G}$ and the pure gauge group $\mathscr{G}_0$, we have to specify the absolute elements of the underlying theories. In all three cases, the canonical 1-form θ is an absolute element by default, since it is determined by the choice of the base manifold M and not by the field equations. The connections of these theories are not determined by the field equations either; therefore, they should be treated as absolute elements. Thus, in each theory, the absolute elements are

1. $\{\theta,\omega_T\}$ in GTEGR,
2. $\{\theta,\omega_{mT}\}$ in TEGR,
3. $\{\theta,\omega_{sT}\}$ in STEGR.

Then the gauge groups of these theories are determined by the following conditions:

$$\begin{aligned} \mathscr{G}_{GTEGR}: &\quad u^*\theta=\theta, \quad u^*\omega_T=\omega_T,\\ \mathscr{G}_{TEGR}: &\quad u^*\theta=\theta, \quad u^*\omega_{mT}=\omega_{mT},\\ \mathscr{G}_{STEGR}: &\quad u^*\theta=\theta, \quad u^*\omega_{sT}=\omega_{sT}. \end{aligned} \tag{16}$$

The condition for the preservation of θ by a gauge transformation u implies that the pure gauge group is trivial and (for now) selects the gauge group to be Diff M in all three cases (15). The condition for the preservation of linear connections further restricts the Diff M group to some subgroups depending on the symmetries of the used linear connections. Thus we have obtained

$$\begin{aligned} \mathscr{G}_{GTEGR} &\subset \text{Diff } M,\\ \mathscr{G}_{TEGR} &\subset \text{Diff } M,\\ \mathscr{G}_{STEGR} &\subset \text{Diff } M, \end{aligned} \tag{17}$$

while in General Relativity we have $\mathscr{G}_{GR}=\text{Diff } M$.

The result (17) faces several potential problems:

1. Einstein's field equations do not determine the teleparallel ω_T, metric teleparallel ω_{mT}, and symmetric teleparallel ω_{sT} connections. This means that one cannot even calculate the gauge transformations u for each theory, i.e. one cannot determine the gauge groups, which in principle, could be trivial - then these theories would not be interesting gauge gravitational theories at all.
2. The gauge groups (17) depend on the symmetries of the used linear connections (16). These symmetries could generally depend on the choice of physical situations[10], which are described by different solutions of Einstein's field equations, i.e. by different metric tensors.

For example, if the Levi-Civita connection in General Relativity is treated as an absolute element, then the gauge group $\mathscr{G}_{GR}$ depends on the symmetries of ω_{LC}. Different physical situations are described by different metric tensors to which different ω_{LC} corresponds. Therefore, $\mathscr{G}_{GR}$ is not given uniquely since u preserving ω_{LC} differ for different connections. In the case of GTEGR, the teleparallel connection $\hat{\omega}_T$ decomposes as (1)

$$(\hat{\omega}_T)^a_b=(\hat{\omega}_{LC})^a_b+K^a_{bc}e^c+L^a_{bc}e^c, \tag{18}$$

where the Levi-Civita part $\hat{\omega}_{LC}$ differs for different metric tensors, while the contortion K and the disformation L parts are not determined by the field equations and could also depend on a physical situation.

We do not consider this potential dependence of the gauge group on the choice of a physical situation

[9] Or equivalently the affine bundle, whose structure group is $GA(4,\mathbb{R})$, endowed with an affine connection, see Note 7.

[10] For a given spacetime M, different physical situations are described by different choices of the Hilbert energy-momentum tensors entering Einstein's field equations.

to be a meaningful result since gauge transformations are supposed to be universal within a given gauge theory - they transform between mathematically equivalent configurations for a given physical situation. In the teleparallel equivalents of General Relativity, the gauge transformations could depend on the symmetries of the linear connection assigned to the physical situation - they may not be given uniquely.

Conclusion

In part 3, we analyzed the gauge structure of the teleparallel equivalents of General Relativity 1.2. This analysis is based on Trautman's work on classical gauge gravitational theories 2.

In the teleparallel equivalents of General Relativity, the linear connections are non-dynamical, i.e. are not determined by their field equations. Trautman's definition of a classical gauge theory 2.1, according to which the connection is required to be dynamical, automatically implies that these theories cannot be considered classical gauge gravitational theories.

This motivated us to also analyze the possibility of relaxing the requirement of dynamical connection in Trautman's definition while not modifying the definitions of gauge groups 2.2 and 2.3. The analysis has shown that the gauge groups of the teleparallel equivalents of General Relativity are given as some undetermined subgroups of Diff M. This might seem like a promising outcome; however, one must realize that it faces potential problems:

1. The gauge groups could be trivial, and one cannot tell whether this is the case since the linear connections, on which they depend, are not determined by these theories.

2. The gauge groups could generally depend on the studied physical situation, i.e. they are not given uniquely, and then gauge transformations would not be universal, as are in any gauge theory.

If any of the identified potential issues are valid, we conclude that even if we relax the requirement for dynamical connection in Trautman's definition, the teleparallel equivalents of General Relativity still cannot be meaningfully interpreted as gauge gravitational theories within the established definitions of gauge groups.

Acknowledgments

I would like to thank Martin Krššák and Eugenia Boffo for their valuable feedback on this paper and all the discussions related to this and our previous work.

References

[Beltrán Jiménez et al., 2020] Beltrán Jiménez, J., Heisenberg, L., Iosifidis, D., Jiménez-Cano, A., and Koivisto, T. S. (2020). General teleparallel quadratic gravity. *Phys. Lett. B*, 805:135422.

[Brezina, 2025] Brezina, S. (2025). Teleparallel gravities as classical gauge theories. Master's thesis, Comenius University in Bratislava.

[Brezina, Boffo, and Krššák, 2025] Brezina, Boffo, and Krššák (2025). Teleparallel gravity from the principal bundle viewpoint. *To appear*.

[Einstein, 1929] Einstein, A. (1929). Einheitliche Feldtheorie und Hamiltonsches Prinzip. *Sitzber. Preuss. Akad. Wiss.*, 18:156–159.

[Fecko, 2006] Fecko, M. (2006). *Differential geometry and Lie groups for physicists*. Cambridge University Press.

[Kobayashi and Nomizu, 1963] Kobayashi, S. and Nomizu, K. (1963). *Foundations of Differential Geometry, Volume 1*. Interscience Publishers.

[Nester and Yo, 1999] Nester, J. M. and Yo, H.-J. (1999). Symmetric teleparallel general relativity. *Chin. J. Phys.*, 37:113.

[Noether, 1918] Noether, E. (1918). Invariante Variationsprobleme. *Gott. Nachr.*, 1918:235–257.

[Sardanashvily, 2002] Sardanashvily, G. (2002). On the geometric foundation of classical gauge gravitation theory.

[Sardanashvily, 2011] Sardanashvily, G. (2011). Classical gauge gravitation theory. *Int. J. Geom. Meth. Mod. Phys.*, 8:1869–1895.

[Trautman, 1979] Trautman, A. (1979). On Gauge Transformations and Symmetries. *Bull. Acad. Polon. Sci. (Phys. Astron.)*, 27:7–13.

[Trautman, 1980] Trautman, A. (1980). On groups of gauge transformations. *Lecture Notes in Phys. Springer*, 129:114–120.

[Trautman, 1982] Trautman, A. (1982). Yang-Mills Theory and Gravitation: a Comparison. *Lect. Notes Math. Springer.*, 926:179–189.

[Trautman, 2006] Trautman, A. (2006). Einstein-Cartan theory. *Encyclopedia of Mathematical Physics*.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 370–379
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Katarína Magdolenová

Bootstrap method in matrix models

Katarína Magdolenová[1*]

Supervisor: Samuel Kováčik[2†]

[1] FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2] Katedra teoretickej fyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Abstract: Finding the probability density of eigenvalues of Hermitian $N \times N$ matrices plays a crucial role in matrix models. This can be achieved through various approaches. Depending on the complexity of the models, analytical solutions often become highly challenging or even impossible, making simulation methods, such as Hybrid Monte Carlo (HMC), indispensable. We focus on the limit of large matrices, where $N \to \infty$. For large N, simulation methods encounter significant challenges, which is why we explore an alternative approach that could, in some cases, circumvent these issues. In this regime, the Bootstrap method could be a practical approach, allowing us to generate moments through specific recurrence relations and system conditions, which can then approximate the desired probability density. We illustrate this method on the Wigner semicircle distribution and a model with a quartic potential, for which we have successfully mapped the phase diagram. All results are in good agreement with the theoretical expectations, confirming the validity and effectiveness of the proposed approach.

Keywords: bootstrap method, simple matrix models

1 Introduction

In working with matrix models, determining the probability density of the eigenvalues of Hermitian matrices is crucial. There are various approaches, each depending on the specific matrix model being studied. We will explore some of these methods in more detail in Fig. 1.

At times, we can analytically calculate the probability density $\rho(\lambda)$ directly from the given action S (solid line). However, there are situations where this process is challenging or impossible. In such cases, numerical methods come into play, such as the Hybrid (Hamiltonian) Monte Carlo (HMC), which allows us to compute integrals over a multidimensional configuration space. This method draws inspiration from molecular dynamics, where the system evolves over time according to forces acting on it, enabling the generation of the probability density of eigenvalues for random $N \times N$ matrices (dotted line).

A problem arises when we require the matrices to N approach infinity. In this case, the Bootstrap method (BM) provides an efficient alternative for obtaining the probability densities without extensive simulations. While both bootstrap methods and matrix models are well-established, their combined application to generate moments and corresponding probability densities has not been fully explored. This paper aims to fill this gap by investigating this approach in detail in specific simple matrix models, using the bootstrap method to find a suitable recurrence relation that allows us to generate the moments m'_n corresponding to the distribution $\rho(\lambda)$(dashed line).

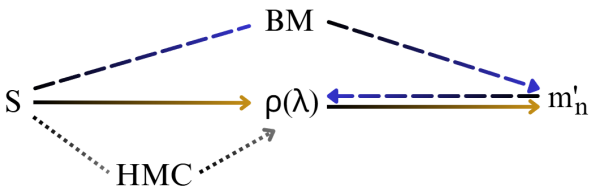


Figure 1: Schematic diagram of the possible ways to derive $\rho(\lambda)$ from the knowledge of the action S.

After obtaining the moments using BM, we need to apply an approximation method to construct the probability density from them. To this end, we use the method for approximating the desired distribution and explore how the choice of the initial function affects the quality of the approximation. We apply the bootstrap method to the harmonic oscillator [Aikawa et al., 2022] and extend it to matrix models, including the Wigner semicircular distribution and a model with a quartic potential, for which we generate the phase diagram.

*magdolenova14@uniba.sk
†samuel.kovacik@gmail.com

2 Constructing and Estimating Probability Distributions from Moments

Later, it will become apparent that once we can obtain the moments for $\rho(\lambda)$, we can use the approximation method described in the article [Tekel and Cohen, 2012] to construct the probability distribution. In the following lines, we will summarize the essential points that we will need later. In general, a probability density function can be expressed as:

$$P(x) = \sqrt{w(x)} \sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n(x); \tag{1}$$

where $w(x)$ is a weighting function appears in the orthogonality condition of the polynomials, and the coefficients c_n are given by:

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{N_n}} \langle L_n(x) \rangle. \tag{2}$$

Here, $u_n(x)$ represents a complete set of functions, with orthogonal polynomials $L_n(x)$ defined as:

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{N_n}} \sqrt{w(x)} L_n(x). \tag{3}$$

By plugging these definitions into the initial expression, we obtain a representation of the probability distribution:

$$P(x) = w(x) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{N_n} \langle L_n(x) \rangle L_n(x). \tag{4}$$

A fundamental aspect of this method is the ability to relate two probability distributions through their moments. The moments are defined as:

$$m_j = \int x^j w(x)\, dx. \tag{5}$$

Using these moments, we follow the approach described in aforementioned reference to construct the polynomials $K_n(x)$, given by:

$$K_n(x) = \begin{vmatrix} m_0 & m_1 & m_2 & \cdots & m_n \\ m_1 & m_2 & m_3 & \cdots & m_{n+1} \\ m_2 & m_3 & m_4 & \cdots & m_{n+2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{n-1} & m_n & m_{n+1} & \cdots & m_{2n-1} \\ 1 & x & x^2 & \cdots & x^n \end{vmatrix}; \tag{6}$$

where orthogonality is ensured by the condition:

$$\int w(x) K_n^*(x) K_m(x)\, dx = N_n \delta_{nm}, \tag{7}$$

with the normalization factor N_n given by:

$$N_n = \begin{vmatrix} m_0 & m_1 \cdots & m_{n-1} \\ m_1 & m_2 \cdots & m_n \\ m_2 & m_3 \cdots & m_{n+1} \\ \vdots & \vdots \ddots & \vdots \\ m_{n-1} & m_n \cdots & m_{2n-2} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} m_0 & m_1 & \cdots & m_n \\ m_1 & m_2 & \cdots & m_{n+1} \\ m_2 & m_3 & \cdots & m_{n+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{n-1} & m_n & \cdots & m_{2n-1} \\ m_n & m_{n+1} \cdots & & m_{2n} \end{vmatrix}. \tag{8}$$

By choosing the weighting function as $w(x) = P(x)$ and normalizing such that $m_0 = 1$, the moments m_n correspond directly to $P(x)$.

Now, let $P'(x)$ be a target probability distribution with known moments m'_n. Using equation (4), we express $P'(x)$ as:

$$P'(x) = P(x) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{N_n} \langle K_n(x) \rangle' K_n(x), \tag{9}$$

where $\langle K_n(x) \rangle'$ is given by:

$$\langle K_n(x) \rangle' = \int K_n(x) P'(x)\, dx. \tag{10}$$

According to the article, this expression takes the following matrix form:

$$\langle K_n(x) \rangle' = \begin{vmatrix} 1 & m_1 & m_2 & \cdots & m_n \\ m_1 & m_2 & m_3 & \cdots & m_{n+1} \\ m_2 & m_3 & m_4 & \cdots & m_{n+2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{n-1} & m_n & m_{n+1} & \cdots & m_{2n-1} \\ 1 & m'_1 & m'_2 & \cdots & m'_n \end{vmatrix}, \tag{11}$$

where $m'_n = \int x^n P'(x)\, dx$ and $m_n = \int x^n P(x)\, dx$.

Finally, using these results, the target probability distribution $P'_M(x)$ is approximated according to the aforementioned reference, establishing a connection between the initial distribution and moments m_n and the transformed moments m'_n via:

$$P'_M(x) = P(x) \sum_{n=0}^{M} \frac{1}{N_n} \langle K_n(x) \rangle' K_n(x). \tag{12}$$

This formulation allows us to systematically reconstruct the probability distribution from its moments while maintaining accuracy through controlled approximations. The closer the initial distribution $P(x)$ is to the approximated distribution $P'_M(x)$, the fewer terms are needed in the expansion. Where both distributions are identical, only the first term remains nonzero, as all subsequent terms vanish.

2.1 Example

In this section, we introduce several probability distributions that closely resemble those analyzed later in the paper. Our goal is to demonstrate how the accuracy of the approximation to a given function depends on the choice of the parameter M in equation (12). The parameter M determines the number of terms included in the sum, with a larger M generally leading to a better approximation, though at the cost of increased computational demands.

We will apply this approach to functions for which we already know the moments, which we obtain from the known distributions and the corresponding relation (5). This allows us to evaluate the method's performance by comparing the approximated distributions with the known ones.

First, we apply this method to the Wigner semicircular distribution, given for $R = 2$ by:

$$P'(x) = \frac{1}{\pi}\sqrt{2-x^2}, \quad |x| \leq \sqrt{2}. \tag{13}$$

To construct the approximation, we need to choose an initial distribution $P(x)$. For simplicity and faster convergence, we select a constant function:

$$P(x) = \frac{1}{2\sqrt{2}}, \quad |x| \leq \sqrt{2}. \tag{14}$$

Figure 2 shows how the approximated function $P'_M(x)$ progressively converges to the target distribution as M increases.

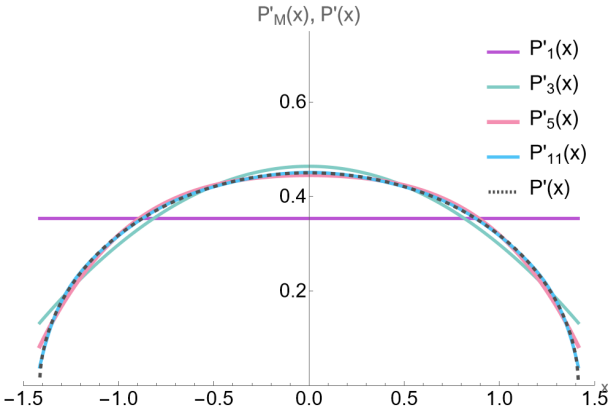


Figure 2: Convergence of the approximated function $P'_M(x)$ towards the target distribution $P'(x)$. The curves correspond to different values $M = 1,3,5,11$, illustrating the improvement in accuracy as M increases.

As another example, we attempt to approximate the following function (r and g are constants):

$$P'(x) = \frac{1}{2\pi}\left(r + 2g\Delta + 4gx^2\right)\sqrt{\Delta - x^2}, \quad \text{for } |x| \leq \sqrt{\Delta}. \tag{15}$$

where

$$\Delta = \frac{1}{6g}\left(\sqrt{r^2 - 48g} - r\right). \tag{16}$$

Again, we choose the initial distribution as a constant function:

$$P(x) = \sqrt{\frac{3g}{2}}\frac{1}{\sqrt{\sqrt{r^2+48g} - r^2}}. \tag{17}$$

This choice provides a well-normalized starting point and ensures a stable numerical evaluation. Figure 3 illustrates how the approximated distribution $P'_M(x)$ converges to $P'(x)$ as M increases. Here, we use the parameter values $g = 1$ and $r = -4$.

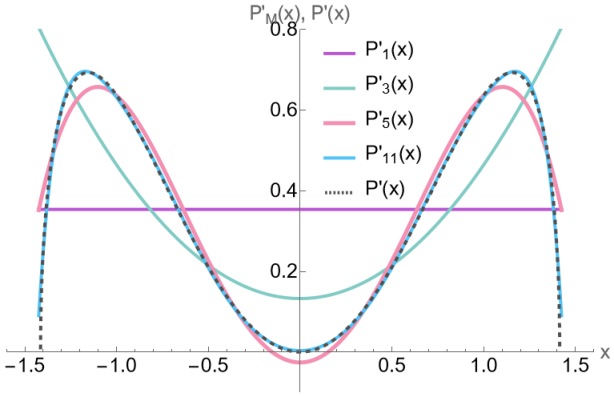


Figure 3: Convergence of $P'_M(x)$ to the target distribution $P'(x)$ for different values of M. The curves correspond to $M = \{1,3,5,11\}$, showing how increasing M refines the approximation.

From the Fig.(2-3), it follows that even for the value $M = 11$, the approximated distribution $P'_M(x)$ closely matches the desired result. In the following article, we will mostly compute with $M = 15$, where the approximation accuracy still exceeds the numerical complexity.

3 Bootstrap method

In the previous section, we demonstrated how to reconstruct the probability density from known moments. However, the main objective of this paper

is to explore a scenario where the moments are unknown and need to be determined. To address this challenge, we apply the bootstrap method, which, by using an appropriate recurrence relation and the semidefiniteness condition, allows us to generate the necessary moments.

In the following chapter, we first demonstrate the application of the bootstrap method to the Linear Harmonic Oscillator (LHO) as an interesting example of how the technique works. We then extend this approach to find moments and derive the probability densities for simple matrix models from them.

3.1 Linear harmonic oscillator

We begin by demonstrating the application of the method to determine the energy levels of the harmonic oscillator. In this case, we will present the method within the Hamiltonian formalism, while for matrix models, we will adopt the path integral formalism. A comprehensive description of this application of the Bootstrap method can be found in the article [Aikawa et al., 2022]. The following is a summary of the key points.

To solve the problem using the Hamiltonian formalism, we begin with a general state $|\alpha\rangle$.

We consider a set of operators $\{O_n\}$, from which we define a new operator $\tilde{O}$ as:

$$\tilde{O} \coloneqq \sum_{n=1}^{N} c_n O_n, \tag{18}$$

for which the following condition must be satisfied for each state $|\alpha\rangle$:

$$\langle\alpha|\tilde{O}^\dagger\tilde{O}|\alpha\rangle \geq 0. \tag{19}$$

This condition leads to the semidefiniteness requirement for the Bootstrap matrix M, which is crucial for ensuring the proper properties of the operators:

$$M \coloneqq \begin{pmatrix} \langle O_1^\dagger O_1\rangle & \langle O_1^\dagger O_2\rangle & \cdots & \langle O_1^\dagger O_K\rangle \\ \langle O_2^\dagger O_1\rangle & \langle O_2^\dagger O_2\rangle & \cdots & \langle O_2^\dagger O_K\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle O_K^\dagger O_1\rangle & \langle O_K^\dagger O_2\rangle & \cdots & \langle O_K^\dagger O_K\rangle \end{pmatrix} \geq 0. \tag{20}$$

The structure of this matrix depends on the Hamiltonian under consideration. The general form of the Hamiltonian consists of a kinetic term and a potential term:

$$H = \frac{1}{2}P^2 + V(X). \tag{21}$$

When we take $|\alpha\rangle = |E\rangle$ as an energy eigenstate, the following conditions hold:

$$\langle E|[H,O]|E\rangle = 0 \tag{22}$$

and

$$\langle E|HO|E\rangle = E\langle E|O|E\rangle. \tag{23}$$

In the [Aikawa et al., 2022], various operators are considered, such as $\{X^n\}$, $\{X^mP^n\}$, and the ladder operators a and $a^\dagger$. The choice of operators determines the recurrence relations and, consequently, the bootstrap matrix M. In this paper, we provide a summary of the results for the set of operators $\{X^n\}$ as a representative example.

We define the operator $\tilde{O}_X$ as:

$$\tilde{O}_X \coloneqq \sum_{n=0}^{K} c_n X^n. \tag{24}$$

Using relations (22) and (23), and for the general Hamiltonian $H = \frac{1}{2}P^2 + V(X)$, we can derive the recurrence relation for different potential functions $V(x)$ using the operators $\{X^n\}$. The recurrence relation is:

$$\begin{aligned} n(n-1)(n-2)\langle X^{n-3}\rangle - 8n\langle X^{n-1}V(X)\rangle \\ + 8nE\langle X^{n-1}\rangle - 4\langle X^n V'(X)\rangle = 0. \end{aligned} \tag{25}$$

Now, we solve (25) for the harmonic oscillator, where the potential is $V(x) = \frac{1}{2}X^2$. By exploiting the symmetry of the system, we set $\langle X^{2n+1}\rangle = 0$, and from normalization, we know that $\langle X^0\rangle = 1$. Through calculations, we find that $\langle X^2\rangle = E$. For $n \geq 4$, the recurrence relation becomes:

$$\begin{aligned} \langle X^n\rangle = \frac{(n-1)(n-2)(n-3)\langle X^{n-4}\rangle}{4n} \\ + \frac{8(n-1)E\langle X^{n-2}\rangle}{4n}. \end{aligned} \tag{26}$$

This relation allows us to iteratively compute the values for $\langle X^n\rangle$, which are used to populate the Bootstrap matrix:

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & E & \cdots \\ 0 & E & 0 & \cdots \\ E & 0 & \frac{3}{2}E^2 + \frac{3}{8} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \tag{27}$$

We can now numerically iterate through different values of E and determine the intervals for which the Bootstrap matrix is semidefinite. The results, which approximate the values found in the article, are presented in the table below.

K	1	2	3	4
7	0.493 ± 0.075	$E \geq 1.132$		
10	0.503 ± 0.006	1.573 ± 0.205	$E \geq 1.963$	
13	0.5000 ± 0.0003	1.513 ± 0.023	$E \geq 2.326$	
16	0.50000 ± 0.00001	1.499 ± 0.002	2.506 ± 0.060	$E \geq 3.286$

Table 1: Bootstrap-generated values for the first four energy eigenstates of the Hamiltonian with a quadratic potential.

A similar procedure can be followed for the potential $V(X) = \frac{1}{2}X^2 + \frac{1}{4}X^4$. The recurrence relations for different operator choices are thoroughly discussed in [Aikawa et al., 2022]. However, this example will suffice as an illustration, allowing us to move on to the Bootstrap method in matrix models.

3.2 Bootstrap method in matrix model

Unlike the Bootstrap method examined in the case of the LHO, we now base our approach on the path-integral formalism. For the expected value of a function $f(\Phi)$, we obtain the following expression:

$$\langle f \rangle = \frac{\int d[\phi]\, f(\phi) e^{-N^2 S(\phi)}}{\int d[\phi]\, e^{-N^2 S(\phi)}}. \tag{28}$$

Here, $e^{-N^2 S(\phi)}$ represents the probability measure. In the subsequent steps, we will investigate the probability density of the eigenvalues of Hermitian matrices, $\rho(\lambda)$, for different actions S. We build on the work from [Kazakov and Zheng, 2021] to demonstrate this approach.

Just as we derived a recurrence relation from conditions (22) and (23) for the LHO, which led to the determination of the energy spectrum through the semidefiniteness of the bootstrap matrix M (20), we will now proceed in a similar manner using equation (28).

In particular, through the Dyson–Schwinger equations:

$$\int d[\phi]\, \frac{\partial}{\partial \phi_{ij}} \left((\phi^k)_{ij} e^{-N^2 S(\Phi)} \right) = 0, \tag{29}$$

and based on [Kazakov and Zheng, 2021, Lin, 2020], for a general potential $V(\Phi)$ appearing in the action $S(\Phi) = \frac{1}{N}\mathrm{Tr}V(\Phi)$, we obtain the recurrence relations:

$$N \left\langle \mathrm{Tr}(\phi^k V'(\Phi)) \right\rangle = \sum_{q=0}^{k-1} \langle \mathrm{Tr}(\phi^q) \rangle \left\langle \mathrm{Tr}(\phi^{k-1-q}) \right\rangle. \tag{30}$$

According to [Tekel, 2015], the moments are defined by $\mathrm{Tr}(\phi^n)$ as:

$$m'_n = \frac{1}{N} \langle \mathrm{Tr}(\phi^n) \rangle. \tag{31}$$

By combining equations (30) and (31), we can, in certain cases, obtain a recurrence relation that sequentially generates the moments m'_n. We will demonstrate this process more concretely on specific matrix models.

In order to obtain specific values, we need a second condition, which is provided by the Hamburger moment problem [Kazakov and Zheng, 2021]. This condition ensures the semidefiniteness of the bootstrap matrix K formed from the moments m'_n, as shown below:

$$K = \begin{pmatrix} m'_0 & m'_1 & m'_2 & \dots \\ m'_1 & m'_2 & m'_3 & \dots \\ m'_2 & m'_3 & m'_4 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \geq 0. \tag{32}$$

From normalization, we have $m'_0 = 1$. Depending on the action S and its symmetries, we can set the odd moments m'_{2n+1} to zero, which simplifies the calculation of all moments.

Once the moments m'_n are determined, we can approximate the desired distribution $\rho(\lambda)$ using (12). The initial distribution is chosen to be normalized over an appropriate interval and should resemble the expected form of the target distribution. This ensures the approximation is as accurate as possible, even for smaller values of M.

Using the computed moments, the approximated distribution is given by:

$$P'_M(\lambda, t) = P(\lambda) \sum_{n=0}^{M} \frac{1}{N_n} A_n B_n,$$

$$A_n B_n = \begin{vmatrix} 1 & m_1 \cdots & m_n \\ m_1 & m_2 \cdots & m_{n+1} \\ m_2 & m_3 \cdots & m_{n+2} \\ \vdots & \vdots \ddots & \vdots \\ m_{n-1} & m_n \cdots & m_{2n-1} \\ 1 & m'_1 \cdots & m'_n \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 1 & m_1 \cdots & m_n \\ m_1 & m_2 \cdots & m_{n+1} \\ m_2 & m_3 \cdots & m_{n+2} \\ \vdots & \vdots \ddots & \vdots \\ m_{n-1} & m_n \cdots & m_{2n-1} \\ 1 & \lambda \cdots & \lambda^n \end{vmatrix}. \tag{33}$$

Here, m_n are the moments of the initial distribution $P(\lambda)$, and m'_n are the moments obtained through the bootstrap method.

For the approximation, we express the first few terms in the series expansion as follows:

$$P'_M(\lambda,t) = P(\lambda)\left(1+\frac{1}{N_1}\begin{vmatrix}1 & m_1\\ 1 & m'_1\end{vmatrix}\begin{vmatrix}1 & m_1\\ 1 & \lambda\end{vmatrix}+ \right.$$
$$\left. +\frac{1}{N_2}\begin{vmatrix}1 & m_1 & m_2\\ m_1 & m_2 & m_3\\ 1 & m'_1 & m'_2\end{vmatrix}\begin{vmatrix}1 & m_1 & m_2\\ m_1 & m_2 & m_3\\ 1 & \lambda & \lambda^2\end{vmatrix}+\cdots\right), \tag{34}$$

where N_1 and N_2 are the normalization factors according to (8). We will demonstrate this procedure using examples such as a quadratic action and an action with a quartic potential.

3.2.1 The Wigner semicircle distribution

We begin by considering the simplest model, with the corresponding action given by:

$$S = \frac{1}{2}r\frac{1}{N}\mathrm{Tr}(\phi^2). \tag{35}$$

According to equation (30) leads to the following recurrence relation:

$$\sum_{q=0}^{s-1}\langle\mathrm{Tr}(\phi^q)\rangle\left\langle\mathrm{Tr}(\phi^{s-1-q})\right\rangle - Nr\left\langle\mathrm{Tr}(\phi^{s+1})\right\rangle = 0. \tag{36}$$

Starting from the conditions that the odd moments vanish and that the first moment is normalized, $m'_0 = 1$, we can express m'_{s+1} as:

$$m'_{s+1} = \frac{\sum_{q=0}^{s-1} m'_q m'_{s-1-q}}{r}. \tag{37}$$

This system is particularly simple, as the recurrence relation directly generates specific values for the moments for a given r, without requiring the use of the semidefiniteness condition on the bootstrap matrix K.

For the moments m'_n, we obtain the following values:

m'_0	m'_{2n+1}	m'_2	m'_4	m'_6	m'_8	m'_{10}	m'_{12}
1	0	$\frac{1}{r}$	$\frac{2}{r^2}$	$\frac{5}{r^3}$	$\frac{14}{r^4}$	$\frac{42}{r^5}$	$\frac{132}{r^6}$

Table 2: Values of the moments m'_s.

Notice that the pattern in the generated moments can generally be expressed as:

$$m_{2n} = \frac{C_n}{r^n}, \tag{38}$$

where C_n are the Catalan numbers:

$$C_n = \frac{1}{n+1}\binom{2n}{n}. \tag{39}$$

This result directly follows from the similarity between the recurrence relation (37) and the recurrence relation for the Catalan numbers:

$$C_n = \sum_{k=0}^{n-1} C_k C_{n-1-k}. \tag{40}$$

We now present several results for different values of r:

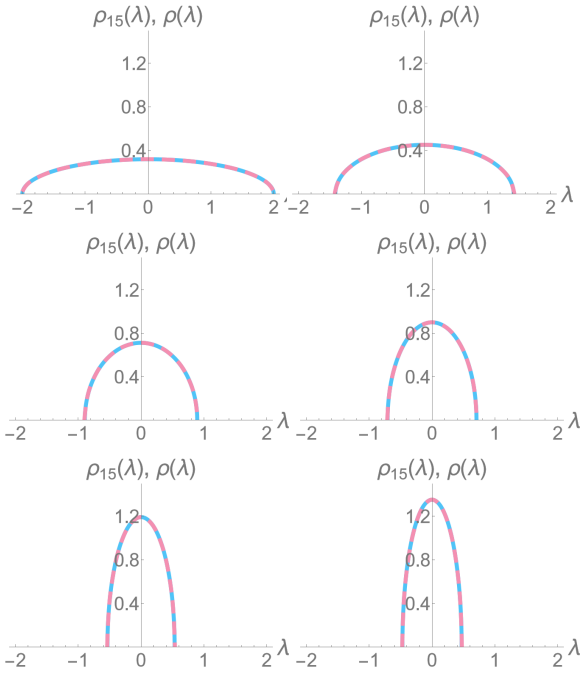


Figure 4: Approximated $P'_M = P'_{15}$ (red dashed line) compared with the exact probability density $\rho(\lambda)$ (blue solid line) for $r = \{1,2,5,8,14,18\}$ (from left to right).

3.2.2 The quartic potential

Now, we will demonstrate a case where it is necessary to use the second condition, the semidefiniteness of the bootstrap matrix K,32, to find suitable moments m'_n. When working with a quartic potential, the action is defined as:

$$S = \frac{1}{N}\left(\frac{1}{2}r\,\mathrm{Tr}(\phi^2) + g\,\mathrm{Tr}(\phi^4)\right). \tag{41}$$

We proceed analogously to the previous case, with the key difference that the recurrence relation takes the form:

$$\sum_{q=0}^{s-1}\left\langle \mathrm{Tr}(\phi^q)\right\rangle \left\langle \mathrm{Tr}(\phi^{s-1-q})\right\rangle - Nr\left\langle \mathrm{Tr}(\phi^{s+1})\right\rangle - 4gN\left\langle \mathrm{Tr}(\phi^{s+3})\right\rangle = 0. \tag{42}$$

By substituting relation (31), we obtain an expression for the moments, and the recurrence relation can be written as:

$$m'_{s+3} = \frac{\sum_{q=0}^{s-1} m'_q m'_{s-1-q} - r m'_{s+1}}{4g}. \tag{43}$$

Assuming that $m'_0 = 1$ and $m'_1 = 0$, higher-order moments are computed iteratively, starting from the expressions derived above.

For instance, when $s = 1$, we obtain the following expression:

$$m'_4 = \frac{m'^2_0 - r m'_2}{4g} = \frac{1 - r m'_2}{4g}. \tag{44}$$

This allows us to fill the bootstrap matrix and determine the values of m'_2 for which it remains semidefinite:

$$K = \begin{pmatrix} 1 & 0 & m'_2 & \dots \\ 0 & m'_2 & 0 & \dots \\ m'_2 & 0 & \frac{1-rm'_2}{4g} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \geq 0. \tag{45}$$

After obtaining the moments, we proceed analogously using the method in (12).

For the given effect, the initial distribution is chosen as in equation (17) for the values of λ.

Since the moments for the initial function are already known, such as:

$$\begin{aligned} m_n &= \int_{-\sqrt{\lambda}}^{\sqrt{\lambda}} P(\lambda)\lambda^n d\lambda, \\ &= \int_{-\sqrt{\lambda}}^{\sqrt{\lambda}} \sqrt{\frac{3g}{2}} \frac{1}{\sqrt{\sqrt{r^2+48g} - r^2}} \lambda^n d\lambda, \end{aligned} \tag{46}$$

where $P(\lambda)$ is an even function, the integration over a symmetric interval results in zero for all odd powers of x^{2n-1}. Thus, we have:

$$P'_M(\lambda,t) = P(\lambda)\left(1 + 0 + \frac{(m'_2 - m_2)(m_2 - \lambda^2)}{m_2^2 - m_4} + \cdots\right). \tag{47}$$

The approximated distribution P'_M was compared to the analytically computed probability densities [Tekel, 2015] for both the one-cut and two-cut solutions. The one-cut solution (blue line) is given by:

$$\rho_1(\lambda) := \frac{1}{2\pi}\left(r + 2gk + 4g\lambda^2\right)\sqrt{k - \lambda^2}, \tag{48}$$

for the interval $\lambda^2 < k$, where $k = \frac{1}{6g}\left(\sqrt{r^2+48g} - r\right)$.

The two-cut solution (green line) is expressed as:

$$\rho_2(\lambda) := \frac{2g|\lambda|}{\pi}\sqrt{a^2 - (b - \lambda^2)^2}, \tag{49}$$

for the interval $(-\sqrt{b+a}, -\sqrt{b-a}) \cup (\sqrt{b-a}, \sqrt{b+a})$, where $a = \sqrt{\frac{1}{g}}$ and $b = -\frac{r}{4g}$.

The following table presents a comparison between the generated moments using the Bootstrap method and the analytically computed moments:

g = 1	**r = 1**	**r = -4**	**r = -7**
m'_n	**Exact / BM**		
m'_0	1.0 / 1.0	1.0 / 1.0	1.0 / 1.0
m'_2	0.3125 / 0.3125	1.0 / 0.999	1.75 / 1.75
m'_4	0.1719 / 0.1719	1.25 / 1.2497	3.3125 / 3.3124
m'_6	0.1133 / 0.1133	1.75 / 1.7496	6.6719 / 6.6717
m'_8	0.082 / 0.082	2.625 / 2.624	14.0977 / 14.0973
m'_{10}	0.063 / 0.063	4.125 / 4.1237	30.905 / 30.9045
m'_{12}	0.0504 / 0.0504	6.7031 / 6.7008	69.7141 / 69.7123
m'_{14}	0.0415 / 0.0415	11.1719 / 11.1675	160.838 / 160.833

Table 3: Comparison of exact calculations and the bootstrap method for different values of r.

The moments generated by the bootstrap method do not differ significantly from those calculated analytically and provide the desired results in approximation (12). We have plotted the approximated probability densities and compared them with the known analytical solutions for the one-cut and two-cut symmetrical cases:

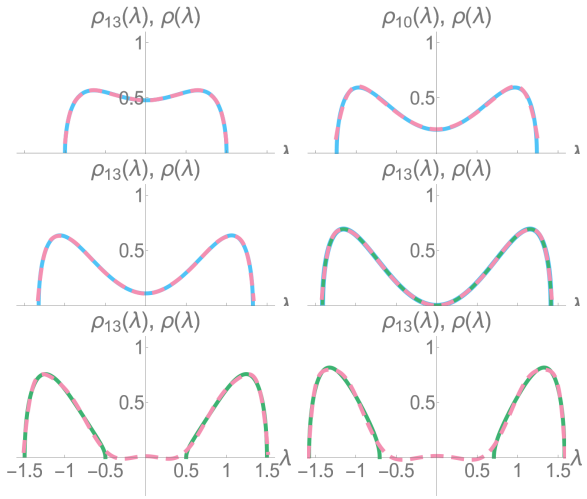


Figure 5: Bootstrap-generated probability densities with $g = 1$. P'_M (red dashed line), one-cut (blue solid line), two-cut (green solid line). From left to right, the plots correspond to $r = \{1, -2, -3, -4, -5, -6\}$.

3.3 Phase diagram

One of the key motivations for this study is to explore the potential of using the bootstrap method to construct phase diagrams for specific models. The phase diagram reveals the transition between different solutions of the probability density functions of the eigenvalues of Hermitian matrices. In this context, we focus on two well-established solutions: the one-cut (48) and two-cut (49) solutions, which were previously obtained through the bootstrap method, as shown in Figure 5.[1]

.

The boundary between these solutions, characterized by the parameters r and g, is already well-documented in the literature [Tekel, 2015]. However, our approach aims to directly generate this boundary using the bootstrap theory. By examining various combinations of the parameters r and g, we observe the type of solution that emerges, contributing to the overall understanding of the phase structure.

[1]To avoid manually verifying each solution, we applied a simple rule: as shown in Fig. 5, the one-cut solution crosses zero twice, whereas the two-cut solution crosses zero four times (except at the coexistence point, where both cross zero three times). This criterion was used to distinguish between the solutions.

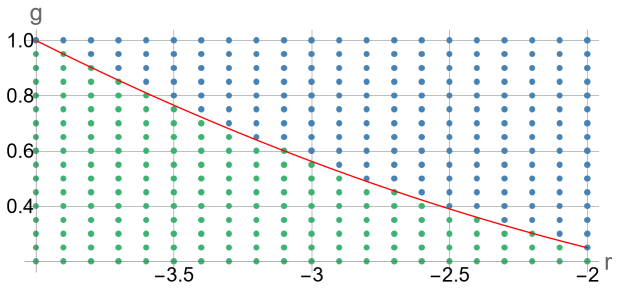


Figure 6: Phase diagram illustrating the transition between the one-cut (blue dots) and two-cut (green dots) solutions. The red curve $r = -4\sqrt{g}$ marks the boundary separating the two phases.

From the phase diagram, it is evident that the boundary between the one-cut and two-cut solutions is delineated by the curve $r = -4\sqrt{g}$, which agrees with the results presented in [Tekel, 2015]. This reinforces the accuracy and reliability of the bootstrap method in reproducing known phase transitions and provides a foundation for further exploration of more complex models.

4 Dependence on the choice of the initial function

An important aspect of our study is the dependence of the initial function on the resulting approximation. The choice of the function and the interval over which it is normalized plays a critical role in the speed at which our approximation converges to the correct solution.

Our findings suggest that when selecting an interval smaller than the desired probability density, undesirable results occur even for small values of M, preventing the approximated function from converging to the sought solution. Conversely, when a larger interval is chosen, increasing M helps the function converge to the desired distribution; however, this approach is constrained by computational resources. Therefore, determining the appropriate normalization interval for the initial function becomes a crucial parameter that requires careful optimization.

Fortunately, this search is simplified by the fact that when using a small interval, the function's behaviour becomes noticeably incorrect even for small values of M, which aids in guiding the parameter search more effectively.

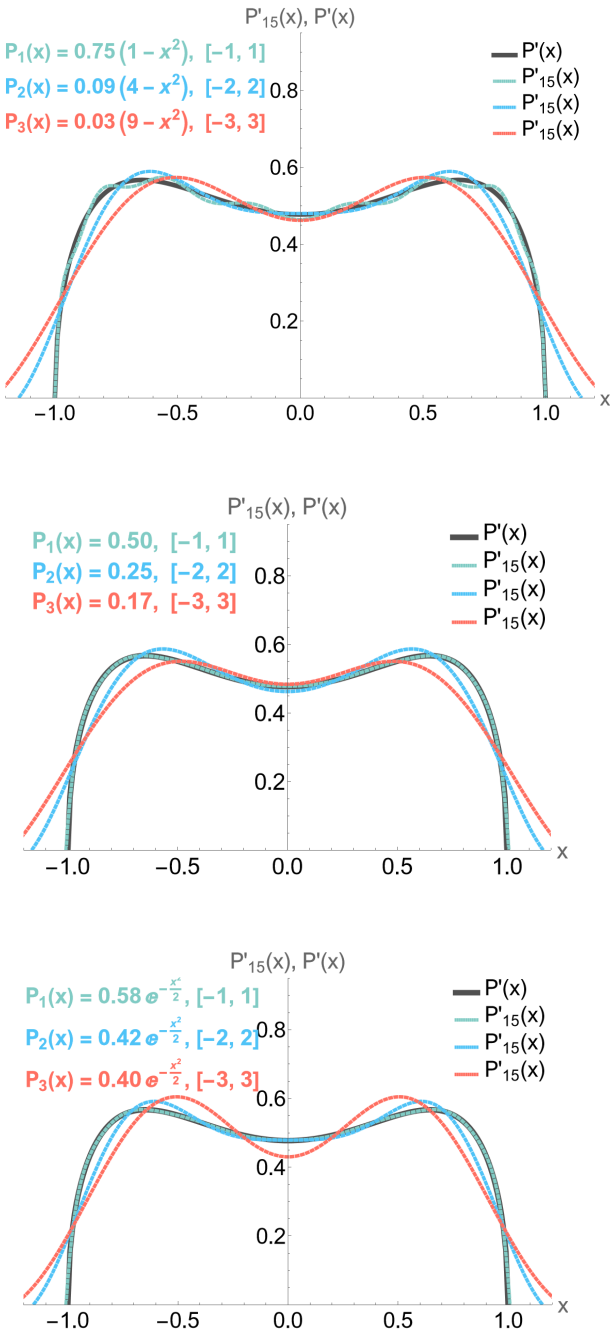


Figure 7: Comparison of the approximation P_{15} with the target probability density $P'(x)$=$\rho_1(x)$ from equation (48) for $g = 1$, $r = 1$, and initial functions (from top to bottom): parabolic, constant, and Gaussian over the intervals $(-1,1);(-2,2);(-3,3)$.

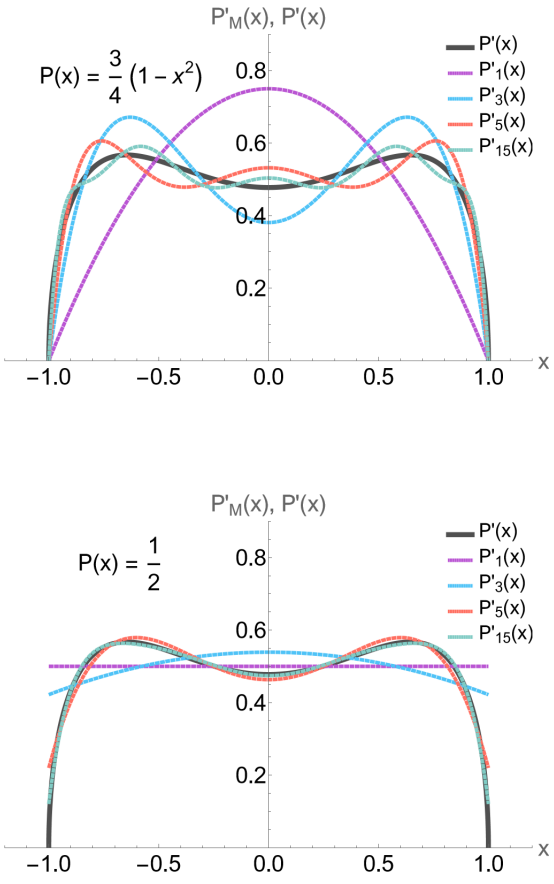
To evaluate the accuracy of the approximation, we calculated the quadratic error, which quantifies the deviation between the function $P'(x)$ and its approximation $P'_M(x)$ over various intervals.

Interval	Parabolic	Constant	Gaussian
$[-1,1]$	0.00026	0.0000111	0.0000128
$[-2,2]$	0.00189	0.00257	0.00209
$[-3,3]$	0.00447	0.00508	0.00678

Table 4: Quadratic error of the approximation for different intervals.

From Table 4, it is evident that the choice of interval affects the accuracy of the approximation. Furthermore, the choice of initial function used also influences the quality of the approximation. Our results indicate that when normalizing over a suitable interval, the differences between the constant and Gaussian functions are minimal, suggesting that both types of functions perform similarly under these conditions.

In the following graphs, we demonstrate how the approximation changes as a function of M for each of the three initial functions: parabolic, constant and Gaussian.



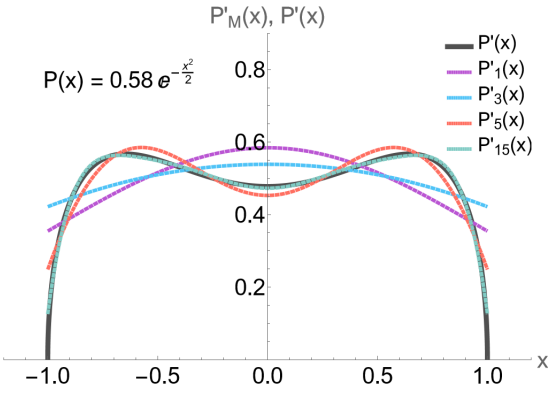


Figure 8: Comparison of the approximation P'_M with the target probability density $P'(x)$=$\rho_1(x)$ from equation (48) for $g = 1$, $r = 1$, and initial functions (from top to bottom): parabolic, constant, and Gaussian, for different choices of $M = 1, 3, 5, 15$.

We observe that even for small values of M, the approximation using either a constant or Gaussian function quickly converges to the desired solution.

For the Gaussian function, the choice of σ significantly influences the accuracy of the approximation. When σ is set to 1 or larger, the results improve compared to using a smaller value for σ.

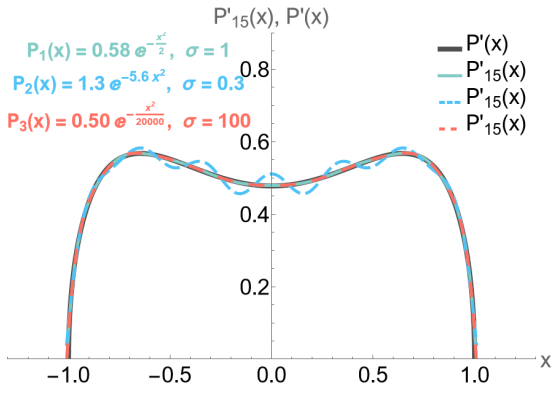


Figure 9: Influence of the Gaussian parameter σ on the approximation accuracy for different values of σ.

5 Conclusion

This work aimed to connect the bootstrap method with the reconstruction of eigenvalue probability densities in simple matrix models. The bootstrap method has become increasingly popular as a way to extract information about systems without relying on complex calculations or extensive simulations.

By deriving recurrence relations (37, 42) and using the Hamburger moment problem together with the semidefiniteness condition (32), we obtained the corresponding moments m'_n. The main contribution of this paper is the combination of this approach with the approximation method from [Tekel and Cohen, 2012], which enabled us to reconstruct the target probability densities $\rho(\lambda)$ (see Figs. 4–5) and map the phase diagram for the quartic potential (Fig. 6). We also showed (Figs. 7–9) how the choice of the initial distribution and the interval affect the quality of the approximation.

Although we focused on simple models, our ongoing work indicates that this method is also applicable to more complex cases, such as the cubic asymmetric multitrace matrix model, where analytic results are not available. We have also observed non-preferred solutions, like asymmetric phases in the quartic model. Future work will focus on improving the reconstruction procedure and automating the extraction of phase diagrams, as well as testing the method on more complicated models.

References

[Aikawa et al., 2022] Aikawa, Y., Morita, T., and Yoshimura, K. (2022). Bootstrap method in harmonic oscillator. *Physics Letters B*, 833:137305.

[Kazakov and Zheng, 2021] Kazakov, V. and Zheng, Z. (2021). Analytic and numerical bootstrap for one-matrix model and. *Unsolvable" Two-Matrix Model*.

[Lin, 2020] Lin, H. W. (2020). Bootstraps to strings: solving random matrix models with positivity. *Journal of High Energy Physics*, 2020(6):1–28.

[Tekel, 2015] Tekel, J. (2015). Matrix model approximations of fuzzy scalar field theories and their phase diagrams. *Journal of High Energy Physics*, 2015(12):1–25.

[Tekel and Cohen, 2012] Tekel, J. and Cohen, L. (2012). Constructing and estimating probability distributions from moments. In *Automatic target recognition XXII*, volume 8391, pages 114–123. SPIE.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, pp. 380–388
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Adam Kubiš, Juraj Tekel

Quantum mechanics on three-dimensional noncommutative space in the language of matrix models

Adam Kubiš[1]* Juraj Tekel[2]†‡

[1] FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2] Department of theoretical physics, Faculty of mathematics, physics and informatics, Comenius University in Bratislava, Mlynska Dolina, 8428 48, Bratislava, Slovakia

Abstract: Attempts to unify quantum theory and the theory of gravity suggest that the structure of spacetime at very small distances is not continuous. One specific realization of this idea is the fuzzy onion model. In this model, space is constructed as a series of concentric noncommutative fuzzy spheres of increasing radius, where the step in the radius of the spheres corresponds to the scale of noncommutativity on the spheres. For a finite number of spheres, functions on this space and operators acting on these functions can be expressed in the language of matrices. This allows us to analyze simple quantum-mechanical situations in this space. For some of these situations, we have investigated the energy spectrum and the wave functions of stationary states and compared results with the commutative case. In addition, some of the results will be compared with those obtained by other authors.

Keywords: quantum mechanics, fuzzy onion, noncommutative space

1 Introduction

The unification of quantum theory and gravity theory predicts that space at small scales will no longer be continuous. Beyond a certain threshold, it will be impossible to distinguish two points from each other, and the concept of a point will lose its meaning. This discretization of space can be achieved in several ways. Space can be divided into chunks, for example, using a grid, but such a description does not preserve the necessary rotational symmetry.

This is where non-commutative spaces come into play. One well-known non-commutative space is phase space in quantum mechanics. The momentum and position operators in quantum mechanics do not commute, and a direct consequence of this fact is the Heisenberg uncertainty principle. If we now take two position operators and set them to not commute with a non-commutativity scale λ, we achieve the result that space is divided into Planck cells. The advantage of such a construction is that it still preserves rotational symmetry. The disadvantage, however, is that this construction is easily done only in spaces with even dimensions and is hard to apply to our three-dimensional space.

In section 2, we introduce such a two-dimensional non-commutative space — the fuzzy sphere. With the help of two-dimensional fuzzy spheres, in section 3 we introduce the fuzzy onion model, a three-dimensional non-commutative space composed of fuzzy spheres. We describe how to define derivatives on it and, subsequently, define the Laplace operator on the fuzzy onion. Before starting with quantum mechanics, however, in section 4, we rewrite the fuzzy onion space in the language of vectors, and the operators in the language of matrices that act on these vectors. After defining all the necessary theory, we will be able to begin investigating simple quantum mechanical situations on the fuzzy onion.

As the first example, in section 5 we study the fuzzy onion with the Coulomb potential. We repeat the results obtained in [1] for stationary states with zero angular momentum ($l = 0$) and add the results we obtained for states with non-zero angular momentum. Then, in section 6, we study the fuzzy onion with the potential of a 3D isotropic harmonic oscillator. We examine the stationary states with zero angular momentum, obtain their energy spectrum, and wavefunctions. These results are also compared with [2], where the same situation was considered, and a formula for the energies with corrections from non-commutativity was derived. Finally, in section 7, we study the fuzzy onion with the Cornell potential — a situation used to explain the mass of bound states of heavy quarks. The results obtained will be compared not only with experimental data but also with [3], where this situation was considered, and again a formula for the energies with corrections from non-commutativity was derived.

*kubis31@uniba.sk
†juraj.tekel@fmph.uniba.sk
‡Supervisor

2 The fuzzy sphere S^2_λ

A sphere is a set of points that are at the same distance from the center. However, a sphere can also be described algebraically using the functions of spherical harmonics that satisfy the following relations

$$[L_i^{(N)}, [L_i^{(N)}, Y_{lm}^{(N)}]] = l(l+1)Y_{lm}^{(N)}, \tag{1}$$

$$[L_3^{(N)}, Y_{lm}^{(N)}] = mY_{lm}^{(N)}, \tag{2}$$

where the operators L_i satisfy the commutation relation $[L_i, L_j] = \varepsilon_{ijk}L_k$. The spherical harmonics form an infinite-dimensional set that satisfies these relations. However, there also exist finite-dimensional sets of matrices that satisfy these relations. If the classical sphere S^2 can be described using the algebra of spherical harmonics, what does the algebra of matrices describe? It describes the so-called fuzzy sphere. The non-commutativity of the matrix algebra causes there to be no exact point on the fuzzy sphere. This means that upon closer inspection, it would appear blurred, hence the name "fuzzy sphere."

The fuzzy sphere is thus described by a set of $N \times N$ matrices that satisfy relations (1) and (2). These matrices also serve as a basis for Hermitian matrices

$$\Phi^{(N)} = \sum_{l=0}^{N-1} \sum_{m=-l}^{l} c_{lm}^{(N)} Y_{lm}^{(N)}, \tag{3}$$

where the superscript N denotes the matrix dimension. This expansion allows us to interpret finite-dimensional matrices as fields on the fuzzy sphere.

An integration over a fuzzy sphere of unit radius is realised by taking a trace

$$\int \Phi^{(\infty)} d\Omega \to \frac{4\pi}{N} \operatorname{tr}_N \Phi^{(N)}. \tag{4}$$

The angular Laplace operator is defined using L_i generators

$$\mathscr{K}^{(N)}\Phi^{(N)} = [L_i^{(N)}[L_i^{(N)}, \Phi^{(N)}]]. \tag{5}$$

3 The fuzzy onion $\mathscr{O}_\lambda$ model

In this section, we construct a three-dimensional noncommutative space using fuzzy spheres. On this space, we will define the necessary operators.

3.1 Definition of fuzzy onion

How can a three-dimensional space be constructed using two-dimensional fuzzy spheres? In the fuzzy onion model, the space is built as a set of concentric spheres of increasing radius. The radius will grow with step equal to the scale of noncommutativity on each sphere. This way, we have constructed a three-dimensional noncommutative space. The fuzzy spheres arranged in this way resemble layers of an onion, hence the name of the model. It is important to note, however, that noncommutativity in the radial direction is of a different type than in the angular direction.

Now we will show how this space can be described mathematically in the language of matrices. A different mathematical description of the fuzzy onion model is given in the paper [4], but it describes the fuzzy onion with an infinite number of spheres. Our description of the model will be slightly different, making it more suitable for numerical computations.

This fuzzy onion model can be described using a block diagonal matrix. Each block represents one sphere.

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Phi^{(1)} & & & \\ & \Phi^{(2)} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \Phi^{(M)} \end{pmatrix}. \tag{6}$$

The dimension of Ψ matrix is then

$$d = \sum_{N=1}^{M} N^2 = \frac{M(M+1)(2M+1)}{6}. \tag{7}$$

The integral over the entire fuzzy onion space is then simply the sum of the integrals over the individual fuzzy spheres

$$\int d^3x\psi = \int r^2 dr \int d\Omega\psi, \tag{8}$$

which becomes

$$\sum_{N=1}^{M} (\lambda N)^2 \lambda \frac{4\pi}{N} \operatorname{tr}_N \Phi^{(N)} = \operatorname{Tr}(4\pi\lambda^2 r\Psi), \tag{9}$$

where we defined the radius matrix r as

$$r = \begin{pmatrix} \lambda\mathbb{1}_{1\times1} & & & \\ & 2\lambda\mathbb{1}_{2\times2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & M\lambda\mathbb{1}_{M\times M} \end{pmatrix}. \tag{10}$$

The angular component of the Laplace operator is known, as we inherited it from the angular Laplace operator on the fuzzy sphere. It can be written as an operator acting on the matrix Ψ

$$\mathscr{K}_L\Psi = r^{-2}\begin{pmatrix} \mathscr{K}^{(1)}\Phi^{(1)} & & \\ & \ddots & \\ & & \mathscr{K}^{(M)}\Phi^{(M)} \end{pmatrix}. \quad (11)$$

However, to define the full Laplace operator, we still need its radial component. Hence, we must define the radial derivative on the fuzzy onion model.

3.2 Definition of radial derivative

To define the radial derivative, we need to compare fields on fuzzy spheres of different sizes. This means comparing matrices of different sizes.

We can solve this problem by defining *up* and *down* operators.

When the *down* operator acts on a matrix, it reduces its dimension by one. It does this by cutting off the last terms Y_{lm} corresponding to the largest number $l = N$ from the matrix $\Phi^{(N+1)} = \sum_{l=0}^{N}\sum_{m=-l}^{m=l} c_{lm}^{(N+1)}Y_{lm}^{(N+1)}$. Simply put, in matrix form — remove the last row and column of the matrix.

$$\begin{gathered} \mathscr{D} : \Phi^{(N+1)} \to \Phi^{(N)}, \\ c_{lm}^{(N)} = c_{lm}^{(N+1)} \quad \text{for} \quad l \leq N-1. \end{gathered} \quad (12)$$

When the *up* operator acts on a matrix, it increases its dimension by 1. It does this by adding additional Y_{lm} terms corresponding to $l = N$ to the matrix $\Phi^{(N)} = \sum_{l=0}^{N-1}\sum_{m=-l}^{m=l} c_{lm}^{(N)}Y_{lm}^{(N)}$, and assigning the coefficient c_{Nm} the value 0. Simply put, in matrix form — add one more row and column to the end of the matrix, where all the entries are zero.

$$\begin{gathered} \mathscr{U} : \Phi^{(N)} \to \Phi^{(N+1)}, \\ \begin{cases} c_{lm}^{(N)} = c_{lm}^{(N+1)} & \text{for} \quad l \leq N-1 \\ c_{lm}^{(N+1)} = 0 \end{cases}. \end{gathered} \quad (13)$$

Now, we can define the radial derivative using the *up* and *down* operators

$$\partial_r^{(N)}\Phi^{(N)} = \frac{\mathscr{D}\Phi^{(N+1)} - \mathscr{U}\Phi^{(N-1)}}{2\lambda}. \quad (14)$$

This is clearly motivated by the formula

$$f'(x) = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{f(x+\varepsilon) - f(x-\varepsilon)}{2\varepsilon}. \quad (15)$$

We can also write the second radial derivative

$$\partial_r^{2(N)}\Phi^{(N)} = \frac{\mathscr{D}\Phi^{(N+1)} - 2\Phi^{(N)} + \mathscr{U}\Phi^{(N-1)}}{\lambda^2}. \quad (16)$$

This is similarly motivated by the formula

$$f''(x) = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{f(x+\varepsilon) - 2f(x) + f(x-\varepsilon)}{\varepsilon^2}. \quad (17)$$

A problem arises at the innermost and outermost layers, where adjacent layers are missing. In such cases, we define that $\mathscr{D}\Phi^{(N)}$ and $\mathscr{U}\Phi^{(N)}$ are zero. For the outermost layer, this is also consistent with the zero Dirichlet boundary condition.

It is also important to note that in such a construction, we have $\partial_r^2 \neq \partial_r\partial_r$.

Now, we can write the radial component of the Laplace operator

$$\mathscr{K}_R\Psi = \partial_r^2\Psi + 2r^{-1}\partial_r\Psi. \quad (18)$$

The Laplace operator on the fuzzy sphere is simply the sum of the radial and angular components of the Laplace operator

$$\mathscr{K} = \mathscr{K}_L + \mathscr{K}_R. \quad (19)$$

However, the entire model can also be viewed from a different perspective, as we will show in the next section.

4 The fuzzy onion as a vector model

The entire model can, in fact, be considered from a different perspective. Since the whole fuzzy onion can be described using matrices, and matrices form a vector space, the fuzzy onion can actually be written as a vector. This viewpoint doesn't really add anything new to the theory, but it's useful because it allows the operators to be written in the form of matrices that act on vectors.

In the vector model, we rewrite the matrix $\Phi^{(N)}$ by writing its coefficients as a column vector with dimension N^2

$$\mathscr{C}^{(N)} = (c_0^{(N)}, c_1^{(N)}, \ldots, c_{N^2-1}^{(N)})^T. \quad (20)$$

The entire fuzzy onion can then be written as a d-dimensional vector

$$\mathscr{C} = (\mathscr{C}^{(1)}, \mathscr{C}^{(2)}, \ldots, \mathscr{C}^{(M)})^T. \quad (21)$$

If the fields on the fuzzy onion are vectors, operators can be expressed as matrices acting on these vectors.

The matrix r can be rewritten as a block-diagonal matrix

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} \lambda \mathbb{1}_{1\times 1} & & & \\ & 2\lambda \mathbb{1}_{4\times 4} & & \\ & & \ddots & \\ & & & M\lambda \mathbb{1}_{M^2\times M^2} \end{pmatrix}, \quad (22)$$

that is composed of matrices $\lambda N \mathbb{1}_{N^2\times N^2}$ for $N = 1,2,\ldots,M$. Earlier, the matrix r was also a matrix, but with a different dimension because it previously acted on a matrix, whereas now it acts on a vector.

The angular component of the Laplacian can also be expressed as a block-diagonal matrix

$$\mathbf{K}_L = \mathbf{r}^{-2} \begin{pmatrix} \mathbf{K}^{(1)} & & & & \\ & \mathbf{K}^{(2)} & & & \\ & & \mathbf{K}^{(3)} & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \mathbf{K}^{(M)} \end{pmatrix}, \quad (23)$$

where $\mathbf{K}^{(N)}$ is the angular Laplacian acting on the N-th fuzzy sphere, which itself is a block-diagonal matrix composed of matrices $l(l+1)\mathbb{1}_{(2l+1)\times(2l+1)}$ for $l = 0,1,\ldots,N-1$.

Since the first and second radial derivatives are defined using the coefficients $c_{lm}^{(N)}$, it's easy to write the matrix $\mathbf{D}_R$ representing ∂_r and the matrix $\mathbf{D}_R^2$ representing ∂_r^2.

The Laplace operator can then be written in the vector representation of the fuzzy onion as a $d \times d$ matrix acting on the d-dimensional column vector $\mathscr{C}$

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_L + \mathbf{K}_R, \quad (24)$$

where

$$\mathbf{K}_R = \mathbf{D}_R^2 + 2\mathbf{r}^{-1}\mathbf{D}_R. \quad (25)$$

The fact that we have been able to express the operators as matrices will be important in the next section, where we will study simple quantum mechanical situations. The Hamiltonian appearing in each of these situations can be written as a matrix. Searching for the energy spectrum will then involve finding the eigenvalues of the Hamiltonian matrix, and finding the wavefunctions will mean finding the eigenvectors.

5 The Coulomb problem

As a first case, let's consider the fuzzy onion with the Coulomb potential. This situation arises, for example, when solving the hydrogen atom in quantum mechanics. The Hamiltonian in classical quantum mechanics has the form

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta - qr^{-1}, \quad (26)$$

where we set $\hbar = m_e = q = 1$. Since in previous sections we have defined the relevant operators, there is no problem now to write the corresponding Hamiltonian in the fuzzy onion model

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2}\mathbf{K} - \mathbf{r}^{-1}. \quad (27)$$

Since we are now considering the vector representation, the matrix $\mathbf{H}$ acts on the column vector $\mathscr{C}$. The stationary Schrödinger equation takes the form

$$\mathbf{H}\mathscr{C} = E\mathscr{C}. \quad (28)$$

In solving this problem, the standard procedure is to search for the solution in the form of a product of the radial and angular components. We can do something similar by fixing a specific pair (l,m). In this case, each fuzzy sphere is represented by a single coefficient $c_{lm}^{(N)}$ and the d-dimensional vector becomes an M-dimensional vector, with each number representing one fuzzy sphere

$$\mathscr{C}_{lm} = (c_{lm}^{(l+1)}, \ldots, c_{lm}^{(M)},). \quad (29)$$

Only fuzzy spheres with $N \geq l+1$ can carry angular momentum with number l so the smaller ones are omitted (as if they were set to zero).

In the standard solution, the next step is to write the differential equation for the radial component

$$\left[-\frac{1}{2}\Delta_r - \frac{1}{r} + \frac{l(l+1)}{2r^2}\right] R_{nl} = ER_{nl}. \quad (30)$$

The equivalent in the fuzzy onion model is

$$\left[-\frac{1}{2}\mathbf{K}_R - \mathbf{r}^{-1} + \frac{1}{2}l(l+1)\mathbf{r}^{-2}\right] \mathscr{C}_{lm} = \mathbf{E}\mathscr{C}_{lm}. \quad (31)$$

Thus, for fixed (l,m) the energy levels and wavefunctions can be found by simply searching for the eigenvalues and eigenvectors of this matrix

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2}\mathbf{K}_R - \mathbf{r}^{-1} + \frac{1}{2}l(l+1)\mathbf{r}^{-2}. \quad (32)$$

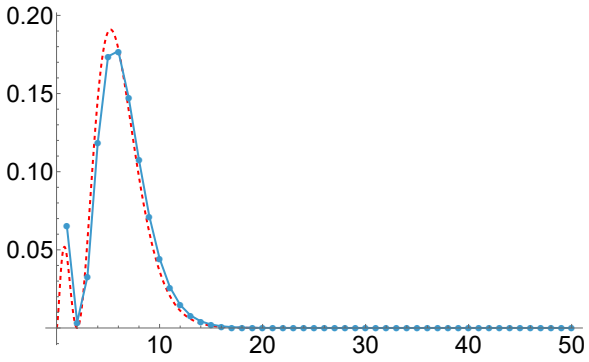


Figure 1: Radial probability distribution for the Coulomb potential for $n = 2$, $M = 50$, $\lambda = 1$

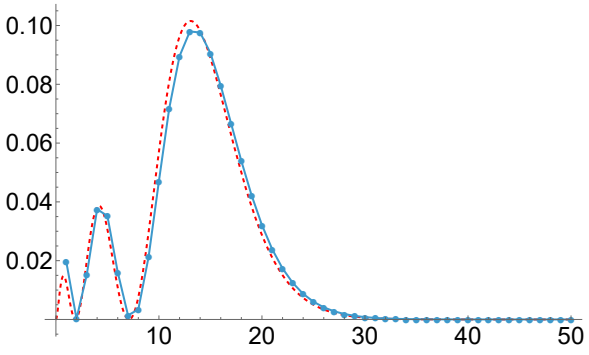


Figure 2: Radial probability distribution for the Coulomb potential for $n = 3$, $M = 50$, $\lambda = 1$

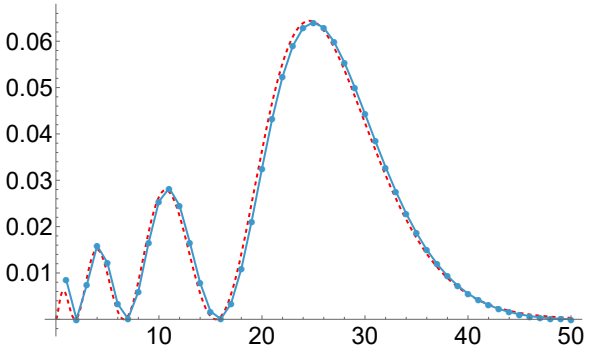


Figure 3: Radial probability distribution for the Coulomb potential for $n = 4$, $M = 50$, $\lambda = 1$

5.1 Results for $l = 0$

For $l = 0$ (and therefore $m = 0$) we get the Hamiltonian in the form

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2}\mathbf{K}_R - \mathbf{r}^{-1}. \tag{33}$$

This situation has already been considered in the paper [1], meaning that we should obtain exactly the same results. In the paper [4], an exact result for the Coulomb problem in the fuzzy onion was obtained in the limit $M \to \infty$. As seen from the first row of Table 1, our results exactly match the results obtained in [1], and as $M \to \infty$ they also approach the exact results from [4]. The results of our computation for given set of values M,λ also perfectly agree with the results obtained independently in [5]. We also found the eigenvectors, and similarly to the paper [1], we were able to obtain the radial probability distributions of the stationary states, examples shown in Figures 1, 2, and 3. The dashed red line represents the radial probability distribution as we know it from classical quantum mechanics in continuous R^3, while the blue line represents the radial probability distribution in the fuzzy onion model with $M = 50$ and $\lambda = 1$. However, these results are simply a repetition of the results obtained in [1], and as a new addition, we considered states with non-zero angular momentum.

5.2 Results for non-zero orbital angular momentum number l

What hasn't been considered are results for (l,m) different than zero. The Hamiltonian for non-zero (l,m) in the fuzzy onion model takes the form

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2}\mathbf{K}_R - \mathbf{r}^{-1} + \frac{l(l+1)}{2}\mathbf{r}^{-2}. \tag{34}$$

It is important to note that only fuzzy spheres with $l \geq N+1$ can carry angular momentum of l, meaning that all lower values are excluded.

Another interesting observation is that the Hamiltonian for (l,m) depends only on the number l, not on m. Thus, for a given l, the results for all m will be the same. The energy spectrum is again obtained by finding the eigenvalues of the matrix $\mathbf{H}$.

In classical quantum mechanics, the energy spectrum depends only on the quantum number n. Our results in Table 1 may seem surprising at first glance because it appears that the energy spectrum depends on l. The reason for the observed difference is likely due to the fact that, for the same n but different l, the wavefunctions of these states look different in classical quantum mechanics. States with $l \neq 0$ are less localized at the center and are more "spread out". Therefore, for a given M, they are more squeezed in, resulting in a higher energy.

Independently of our work, the results for the energy spectrum for non-zero l were also obtained in

n	1	2	3	4	5	6
$E_n(l=0)$	-0.4142	-0.1180	-0.05410	-0.0308	-0.0179	-0.0031
$E_n(l=1)$	-	-0.1131	-0.0517	-0.0296	-0.0172	-0.0026
$E_n(l=2)$	-	-	-0.0545	-0.0307	-0.0185	-0.0055
E_n^{CQM}	-0.5	-0.125	-0.0556	-0.0313	-0.02	-0.0139

Table 1: Comparison of our results for $M = 50$, $\lambda = 1$ with the results from classical quantum mechanics for different values of n,l

[5], and just like for $l = 0$, they agreed with ours.

6 3D isotropic harmonic oscillator

Now let's consider the case of the fuzzy onion with the potential of a 3D harmonic oscillator. This situation has already been considered in the paper [2], which obtained a perturbative result for the fuzzy onion in the limit $M \to \infty$, so we can now compare it with ours. The Hamiltonian for the 3D isotropic harmonic oscillator in classical quantum mechanics is

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2, \tag{35}$$

where we set $\hbar = m = \omega = 1$ which in the vector representation of the fuzzy onion corresponds to the Hamiltonian

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2}\mathbf{K} + \frac{1}{2}\mathbf{r}^2. \tag{36}$$

Now, we apply a similar procedure as in the Coulomb problem and separate the solution into radial and angular parts. The Hamiltonian for the radial part can again be derived from the differential equation for the radial part in classical quantum mechanics. It will look similar to the previous situation, except that the Coulomb potential will be replaced by the potential of the harmonic oscillator

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2}\mathbf{K}_R + \frac{1}{2}\mathbf{r}^2 + \frac{1}{2}l(l+1)\mathbf{r}^{-2}. \tag{37}$$

The energy spectrum and wavefunctions will again be obtained by searching for the eigenvalues and eigenvectors of the matrix $\mathbf{H}$.

For $l = 0$, the Hamiltonian takes the form

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2}\mathbf{K}_R + \frac{1}{2}\mathbf{r}^2. \tag{38}$$

6.1 Results

For $M = 50$ and $\lambda = 1$ we compared the resulting energies of the first five stationary states with the results for the same λ from [2] as well as with the results from classical quantum mechanics in Table 2. We observe a certain level of agreement and assume that as $\lambda \to 0$ and $M \to \infty$, our results would converge to those of classical quantum mechanics. For $n = 0$ state and various values of M and λ, we further compared our results with those from [2]. The result from [2] is a perturbative result for the fuzzy onion with parameter λ and a number of spheres $M \to \infty$. Our result should therefore approach the results from [2] for a given λ and increasing M , but it should not coincide exactly, since our result is exact for some finite M whereas the result from [2] is perturbative for $M \to \infty$. This effect can be observed in Table 3. For a given λ, as M increases, the relative difference between our result and the result from [2] converges to a constant. This constant likely represents the relative difference between the perturbative and exact results for a given λ as $M \to \infty$.

By finding the eigenvalues, we also obtained the radial wave functions of the stationary states and plotted the radial probability distribution for $n = 2$ in Figures 4, 5, and 6 for three different values of the parameters M, λ. The obtained graphs align with our intuition about the model. When $\lambda \to 0$ but M is too small, the wave function is localized in a small region, as seen in Figure 6. When M is sufficiently large, two scenarios occur. If λ is sufficiently small, the radial probability distribution resembles the result from classical quantum mechanics, as shown in Figure 4. However, if λ is too large, the wave function starts to lose its shape because a significant portion of the function is lost in the gap between two spheres, as observed in Figure 5.

n	0	1	2	3	4
E_n	1.498	3.492	5.481	7.465	9.443
E_n[2]	1.485	3.479	5.468	7.452	9.430
E_n^{CQM}	1.5	3.5	5.5	7.5	9.5

Table 2: The energies of the first five stationary states of the 3D isotropic harmonic oscillator for $M = 100$ and $\lambda = 0.1$ are compared with the results for the first five states from [2] and the results from classical quantum mechanics.

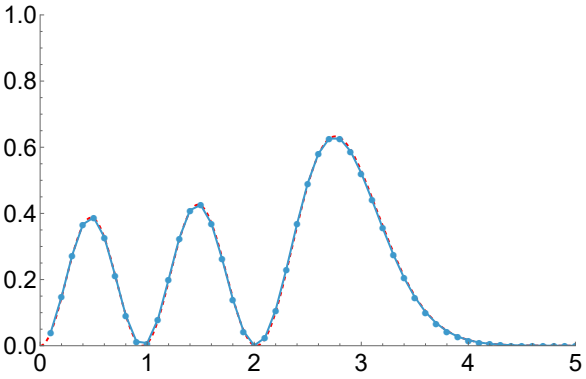


Figure 4: Radial probability distribution for 3D harmonic oscillator potential for $n = 2$, $M = 100$, $\lambda = 0.1$

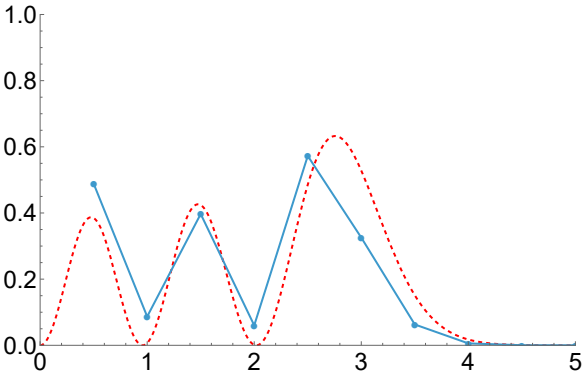


Figure 5: Radial probability distribution for 3D harmonic oscillator potential for $n = 2$, $M = 100$, $\lambda = 0.5$

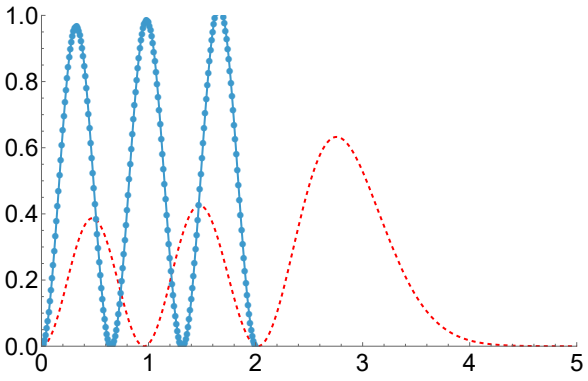


Figure 6: Radial probability distribution for 3D harmonic oscillator potential for $n = 2$, $M = 200$, $\lambda = 0.01$

M	$\lambda = 0.1$	$\lambda = 0.01$	$\lambda = 0.001$
50	$8.76 \cdot 10^{-3}$	$9.21 \cdot 10^{-1}$	$9.99 \cdot 10^{-1}$
100	$8.76 \cdot 10^{-3}$	$6.99 \cdot 10^{-1}$	$9.97 \cdot 10^{-1}$
200	$8.76 \cdot 10^{-3}$	$1.46 \cdot 10^{-1}$	$9.88 \cdot 10^{-1}$
400	$8.76 \cdot 10^{-3}$	$9.66 \cdot 10^{-5}$	$9.51 \cdot 10^{-1}$
800	$8.76 \cdot 10^{-3}$	$8.75 \cdot 10^{-5}$	$8.07 \cdot 10^{-1}$
1600	$8.76 \cdot 10^{-3}$	$8.75 \cdot 10^{-5}$	$3.42 \cdot 10^{-1}$
3200	$8.76 \cdot 10^{-3}$	$8.75 \cdot 10^{-5}$	$1.46 \cdot 10^{-3}$

Table 3: The relative differences between our results and those from [2] for the state $n = 0$ and for different values of M and λ. We can see that when $M\lambda \gg 1$, the relative differences converge to a constant.

7 The Cornell potential

The last situation we will examine is the Cornell potential in the fuzzy onion model. The Cornell potential is used to phenomenologically explain the mass of quarkonia. Charm and bottom quarks are heavy quarks, and their bound states, quarkonium, can still be well described using non-relativistic quantum mechanics. In this framework, the binding is described by the so-called Cornell potential

$$V_Q(r) = -\frac{C}{r} + Br. \tag{39}$$

Quarkonium has been studied in the paper [3] and a correction to the energies due to the noncommutativity of the fuzzy onion was also calculated. The Hamiltonian with the Cornell potential has the form

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - \frac{C}{r} + Br, \tag{40}$$

state	present work	experiment
1S	3.013	3.097
2S	3.880	3.686
3S	4.527	4.039
4S	5.114	4.223

Table 4: Comparison of experimental and our results for the energies of the first four mass states of the bound charm-anticharm system. The number of spheres is $M = 50$ and $\lambda = 1$

where we set $\mu = 1$. In the fuzzy onion model, this corresponds to the Hamiltonian

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2}\mathbf{K} - C\mathbf{r}^{-1} + B\mathbf{r}. \tag{41}$$

Similarly to the previous cases, we separate the solution into radial and angular parts, and we will consider the solution for zero angular momentum $l = 0$. In this case, the Hamiltonian for the radial part becomes

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2}\mathbf{K}_R - C\mathbf{r}^{-1} + B\mathbf{r}. \tag{42}$$

The energy spectrum will be obtained by finding the eigenvalues of the matrix $\mathbf{H}$.

We will consider the binding of $c\bar{c}$ quarks, $b\bar{b}$ quarks, and $c\bar{b}$ quarks. The first few energies of these bindings are already known from experiments. We will also compare our results with the correction due to non-commutativity from the paper [3].

7.1 Results

In tables 4, 5, and 6, the experimental data are compared with our results. The corresponding values of the constants B and C were taken from the paper [3], where they were determined using the experimental values of energies of first two states $1s$ and $2s$.

Next, we compared our result with the energy relation including the noncommutativity correction derived in [3]. For comparison, we chose dimensionless constants $B = 1$ and $C = 1$. Similar to the case of the 3D oscillator, the results in [3] are perturbative results corresponding to a given λ as $M \to \infty$. For a fixed λ, as M increases to infinity, we should approach a constant value representing the relative difference between the exact result and the perturbative result from [3]. From Table 7 we observe that our results behave as expected.

state	present work	experiment
1S	9.499	9.460
2S	10.806	10.023
3S	11.753	10.355
4S	12.545	10.579

Table 5: Comparison of experimental and our results for the energies of the first four mass states of the bound bottom-antibottom system. The number of spheres is $M = 50$ and $\lambda = 1$

state	present work	experiment
1S	6.221	6.274
2S	7.287	6.871

Table 6: Comparison of experimental and our results for the energies of the first four mass states of the bound bottom-anticharm system. The number of spheres is $M = 50$ and $\lambda = 1$

8 Conclusions

In this paper, we have explored a specific type of noncommutative three-dimensional space known as the fuzzy onion model. We defined the necessary operators and investigated three fundamental quantum-mechanical systems: the Coulomb potential, the 3D isotropic harmonic oscillator, and the Cornell potential.

The Coulomb potential was previously studied in [1], but only for the case $l = 0$. We revisited this analysis and obtained the same energy spectrum and

M	$\lambda = 0.1$	$\lambda = 0.01$	$\lambda = 0.001$
50	$7.459 \cdot 10^{-1}$	$9.302 \cdot 10^{-1}$	$9.995 \cdot 10^{-1}$
100	$7.459 \cdot 10^{-1}$	$6.390 \cdot 10^{-1}$	$9.978 \cdot 10^{-1}$
200	$7.459 \cdot 10^{-1}$	$4.423 \cdot 10^{-1}$	$9.909 \cdot 10^{-1}$
400	$7.459 \cdot 10^{-1}$	$7.304 \cdot 10^{-1}$	$9.595 \cdot 10^{-1}$
800	$7.459 \cdot 10^{-1}$	$7.305 \cdot 10^{-1}$	$7.962 \cdot 10^{-1}$
1600	$7.459 \cdot 10^{-1}$	$7.305 \cdot 10^{-1}$	$3.292 \cdot 10^{-2}$
3200	$7.459 \cdot 10^{-1}$	$7.305 \cdot 10^{-1}$	$7.259 \cdot 10^{-1}$

Table 7: The relative difference between our values and the values in [3]. As M increases, the difference approaches a constant value, likely representing the discrepancy between the exact result and the perturbative result from [3].

wave functions. Furthermore, we extended the study to nonzero values of l and successfully derived the corresponding energy spectrum. Independently, the same results were obtained in [5], and our findings were in full agreement.

The 3D isotropic harmonic oscillator was analyzed in [2] using a different mathematical approach, yielding a perturbative result in the $M \to \infty$ limit. We obtained new results - energy spectrum and wave functions - for $l = 0$ and compared them with those predicted by classical quantum mechanics. Additionally, we discussed the agreement between our findings and the results in [2].

The Cornell potential was previously studied in [3], where the analysis was again based on a perturbative approach in the $M \to \infty$ limit. We computed the energy spectrum and compared our results with experimental data, as well as with those reported in [3].

These three cases represent only a small subset of the quantum-mechanical systems that could be explored within the fuzzy onion model. A particularly interesting direction for future research would be the quartic oscillator with a potential of $\sim r^4$. Moreover, a more detailed analysis of our results is warranted, particularly for different limits of parameters M and λ. It would also be interesting to explain why the energy spectrum in the case of the Coulomb potential does not depend on m. Additionally, it would be valuable to investigate whether our findings provide insight into the possible values of the noncommutativity parameter λ.

Acknowledgments

We are grateful to the Faculty of Mathematics, Physics, and Informatics at Comenius University in Bratislava for the extraordinary scholarship that provided us with access to Wolfram Mathematica for our calculations.

References

[1] Samuel Kováčik and Juraj Tekel. Fuzzy onion-like space as a matrix model. *Phys. Rev. D*, 109(10):105004, 2024.

[2] B. Bukor. Noncommutative quantum mechanics. Bachelor's thesis, Comenius University, Bratislava, 2022.

[3] Benedek Bukor and Juraj Tekel. On quarkonium masses in 3D non-commutative space. *Eur. Phys. J. Plus*, 138(6):499, 2023.

[4] Veronika Gáliková, Samuel Kováčik, and Peter Prešnajder. Quantum Mechanics in Noncommutative Space. *Acta Phys. Slov.*, 65(3):153–234, 2015.

[5] Matej Hrmo, Samuel Kováčik, Patrik Rusnák, and Juraj Tekel. Hydrogen Atom in a Fuzzy Spherical Cavity. 3 2025.

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 389
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Sára Folajtárová, Peter Maták, Katarína Nedeľková

Freeze-in of dark matter and quantum statistical effects

Sára Folajtárová* Peter Maták† Katarína Nedeľková‡

Katedra teoretickej fyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

Freeze-in is one of the known dark matter production mechanisms [Hall et al., 2010]. Neglecting the initial abundance of dark matter particles χ, we assume they are slowly produced from the in-equilibrium initial states ϕ. The key quantity is the χ production rate γ. For the $\phi\phi \to \chi\chi$ production process and the classical Maxwell-Boltzmann phase-space densities [Gondolo and Gelmini, 1991]

$$\gamma_{\mathrm{MB}} = \frac{T}{64\pi^4} \int_{4m^2}^{\infty} \mathrm{d}s \sqrt{s-4m^2} K_1\left(\frac{\sqrt{s}}{T}\right) \oint\!\!\!\!\!\!- |M|^2 \quad (1)$$

where m is the χ mass, K_1 is the first modified Bessel function of the second kind, and $\oint\!\!\!\!\!\!- |M|^2$ is the squared amplitude of the process integrated over the final state momenta.

While the rate in Eq. (1) was derived for dark matter freeze-out within the classical kinetic theory, for freeze-in production occurring at higher temperatures, quantum statistical effects are more important [Lebedev and Toma, 2019]. In this work, we expand the quantum Bose-Einstein densities into a geometric series

$$\frac{1}{\exp\{-E/T\}-1} = \sum_{w=1}^{\infty} [\exp\{-E/T\}]^w. \quad (2)$$

Truncation of the series at lower values of w is considered as an approximation for quantum statistical effects for the production rate and the frozen-in dark matter density. Therefore, let us define

$$\gamma_{kl} = \int \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}_1}{(2\pi)^3 2E_1} \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}_1}{(2\pi)^3 2E_1} \mathrm{e}^{-\frac{kE_1+lE_2}{T}} \oint\!\!\!\!\!\!- |M|^2. \quad (3)$$

and

$$\gamma_w = \sum_{k,l=1}^{w} \gamma_{kl}. \quad (4)$$

Note that for $w = 1$ yields the classical rate of Eq. (1) is reproduced, while $w = \infty$ gives the Bose-Einstein result.

A similar procedure can be applied to production via heavy particle decays $\phi_2 \to \phi_1\chi$. The results are plotted in Fig. 1.

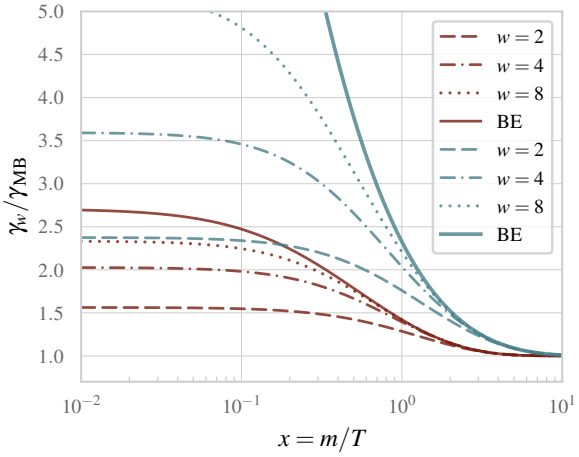


Figure 1: Quantum statistical enhancement for $\phi\phi \to \chi\chi$ (blue) and $\phi_2 \to \phi_1\chi$ (red). For the latter, m is the ϕ_2 mass, while ϕ_1 and χ were considered massless.

Solving the Boltzmann equation with two-particle initial states, the complete quantum statistics enhanced the relic density by 11.5%, while $w = 2$, $w = 4$, and $w = 8$ yield 8.7%, 10.9%, and 11.3%, respectively. For decays, the same calculation gave 42.0%, while for $w = 2$, $w = 4$, and $w = 8$ we obtained 29.0%, 35.6% and 39.2%. We conclude that even the low-w truncation in Eq. (2) produces reasonably accurate results while significantly simplifying the calculation. Analytical expressions for the approximated rates and further details will be available in Ref. [Folajtárová et al., 2025].

References

[Folajtárová et al., 2025] Folajtárová, S., Maták, P., and Nedeľková, K. (2025). In preparation.

[Gondolo and Gelmini, 1991] Gondolo, P. and Gelmini, G. (1991). Cosmic abundances of stable particles: Improved analysis. *Nucl. Phys. B*, 360(1):145–179.

[Hall et al., 2010] Hall, L. J., Jedamzik, K., March-Russell, J., and West, S. M. (2010). Freeze-in production of FIMP dark matter. *Journal of High Energy Physics*, 2010(3):80.

[Lebedev and Toma, 2019] Lebedev, O. and Toma, T. (2019). Relativistic freeze-in. *Physics Letters B*, 798:134961.

*folajtarova2@uniba.sk
†matak1@uniba.sk
‡nedelkova5@uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 390
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Matej Hrmo, Samuel Kováčik, Patrik Rusnák, Juraj Tekel

Coulomb Problem in a spherical cavity in a Fuzzy Onion Matrix Model

Matej Hrmo[*] Samuel Kováčik[†‡] Patrik Rusnák[§] Juraj Tekel[¶]

Department of theoretical physics, Faculty of mathematics, physics and informatics, Comenius University in Bratislava, Mlynská Dolina, 8428 48, Bratislava, Slovakia

We introduce the fuzzy onion matrix model, a three-dimensional quantum space made up of concentric fuzzy spheres with increasing radii. Fuzzy spheres, or noncommutative spheres, are two-dimensional quantum space models that resemble the standard commutative sphere. The key advantage is that functions on this space (fields) are represented as Hermitian matrices. By stacking these spheres, we extend the construction to three dimensions, allowing functions to remain matrix-representable. The field on the N-th sphere, denoted as $\Phi^{(N)}$, defines the field on the fuzzy onion as

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Phi^{(1)} & & & \\ & \Phi^{(2)} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \Phi^{(M)} \end{pmatrix}. \tag{1}$$

Further details on this model can be found in [Kováčik and Tekel, 2024].

One of the key problems we investigate within this model is the Coulomb problem. Our focus is on determining its energy spectrum, which requires solving the eigenvalue equation

$$H\Psi = E\Psi, \tag{2}$$

a fundamental problem in quantum mechanics. This equation simplifies significantly if we exploit spherical symmetry and restrict our analysis to the $l = 0$ mode. The angular part of the kinetic term in the Hamiltonian is inherited from fuzzy spheres, whereas the radial part has been specifically defined, and we are examining the behavior of this definition.

Through our analysis, we found that taking the limits $M \to \infty$ (number of layers) and $\lambda \to 0$ (layer spacing) recovers standard, nonquantized space. The way this limit is taken determines the outcome: if $M\lambda \to \infty$, we obtain the full three-dimensional space, while keeping $M\lambda = \text{const.}$ confines it within a spherical cavity.

This distinction is crucial for our Coulomb problem simulations. Since numerical methods require finite M, we study the problem within a cavity rather than infinite space. While large M improves approximation, boundary effects remain significant. However, rather than a limitation, finite M reveals distinct phenomena, such as *mirror energies*—connecting solutions with positive and negative potential energies—and *AF-states* (Almost-symmetric fuzzy), where radial wave functions of minimal and maximal energy states share the same number of peaks.

The Coulomb problem in a spherical cavity is often studied in chemical physics as a model for atoms under pressure, and we have replicated energy spectra with high precision. A key advantage of our model is its flexibility: unlike traditional approaches, which require new theoretical formulations for each potential, our framework only requires adding new matrices to the Hamiltonian, enabling spectrum calculations without extensive modifications.

For a more comprehensive discussion on the topics covered in this extended abstract, the reader is referred to the full paper [Hrmo et al., 2025].

Acknowledgments

This work was supported by the Faculty of Mathematics, Physics, and Informatics at Comenius University in Bratislava under the Vedecká pomocná sila scheme.

References

[Hrmo et al., 2025] Hrmo, M., Kováčik, S., Rusnák, P., and Tekel, J. (2025). Hydrogen atom in a fuzzy spherical cavity.

[Kováčik and Tekel, 2024] Kováčik, S. and Tekel, J. (2024). Fuzzy onion as a matrix model.

[*] matej.hrmo@gmail.com
[†] samuel.kovacik@fmph.uniba.sk
[‡] Supervisor
[§] rusnak57@uniba.sk
[¶] juraj.tekel@fmph.uniba.sk

Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Bratislava, 2025, p. 391
ISBN 978-80-8147-165-0, © 2025 Ján Ramaj, Martina Sabová, Peter Maták

Minimal effective theory for neutrino masses, dark matter, and matter-antimatter asymmetry cogenesis

Ján Ramaj* Martina Sabová† Peter Maták‡§

Katedra teoretickej fyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

According to Sakharov's conditions, *CP* violating processes occurring out of thermal equilibrium are necessary to produce the asymmetry between matter and antimatter [Sakharov, 1991].

Let us consider the operator $\hat{O}_{B-L} = lH$, where l and H are the lepton and Higgs doublets, respectively. This operator carries a $B-L$ number and is a singlet under the Standard-Model gauge group. We couple it to an operator $\hat{O}_X$ and its charge conjugate $\hat{O}_X^C$. While the couplings in $\hat{O}_{B-L}$ and $\hat{O}_X$ can become real after field redefinitions, the coupling in $\hat{O}_{B-L}^2$ remains complex. Following the minimality principle, we consider $\hat{O}_X = \phi\bar{\psi}^c$, where ψ is a Dirac fermion with mass m and ϕ is a scalar with mass $m' < m$, obtaining the effective Lagrangian density

$$\begin{aligned}\mathscr{L} &= -\frac{\kappa_a}{\Lambda}\phi(\bar{\psi}^c P_L l_a)H - \frac{\omega_a}{\Lambda}\phi^*(\bar{\psi}P_L l_a)H \\ &\quad + \frac{\lambda_{ab}}{4\Lambda}(H\bar{l}_a^c)P_L(l_b H) + H.c. \qquad (1)\end{aligned}$$

To make the lighter ϕ stable, dark-sector particles are charged under a symmetry group G such that $\hat{O}_X$ is a singlet under G.

In the Standard Model, neutrinos are massless, contrary to experimental evidence. Adding the interactions of Eq. (1) to the Standard Model brings in means to generate neutrino masses. After the electroweak symmetry breaking, the Higgs field acquires a non-zero vacuum expectation value v, and, via $\hat{O}_{B-L}^2$ operator, the neutrinos become massive.

The asymmetries of $lH \to \psi\phi$ and other relevant processes were calculated employing a modified version of cutting rules [Blažek and Maták, 2021].

We consider two scenarios that result in lepton asymmetry: dark matter freeze-in and freeze-out. Assuming freeze-in with $m \ll T_{\rm reh}$ and only dominant terms in Boltzmann equations for the dark matter and lepton number asymmetry leads to the upper limit expression for the ratio of baryon $\Omega_{\rm B}$ and dark matter

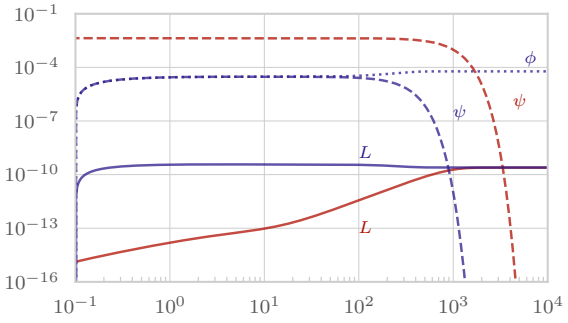


Figure 1: Particle densities and lepton number asymmetry as a function of $x = m/T$ for the freeze-in (blue) and freeze-out (red) scenarios, with $m = 10^{10}$ GeV, $\Lambda = 10^{14}$ GeV, $T_{\rm reh} = 10^{11}$ GeV, and values of couplings chosen to ensure the right value of asymmetry is obtained.

$\Omega_{\rm DM}$ parameter densities

$$\frac{\Omega_{\rm B}}{\Omega_{\rm DM}} \leq \frac{63}{316\pi}\frac{{\rm Im}[\kappa\lambda^*\omega]}{(|\kappa|^2+|\omega|^2)\sqrt{{\rm Tr}\lambda^*\lambda}}\frac{m_p m_\nu}{v^2}\frac{m}{m'}, \qquad (2)$$

where m_p stands for the proton mass and m_ν is the square root of the sum of squares of neutrino masses.

In the freeze-out scenario, particles are in equilibrium at high temperatures. As the temperature drops below m, lepton number is produced in asymmetric $\psi \to \phi^* lH$ decays. The observed dark matter relic abundance can be achieved through simple freeze-out of ϕ at higher values of $x = m/T$. The dark matter density and lepton number asymmetry evolution in both scenarios are shown in Fig. 1. Further details will be available in Ref. [Maták et al., 2025].

References

[Blažek and Maták, 2021] Blažek, T. and Maták, P. (2021). *CP* asymmetries and higher-order unitarity relations. *Phys. Rev. D*, 103:L091302.

[Maták et al., 2025] Maták, P., Ramaj, J., and Sabová, M. (2025). In preparation.

[Sakharov, 1991] Sakharov, A. D. (1991). Violation of *CP* invariance, *C* asymmetry, and baryon asymmetry of the universe. *Soviet Physics Uspekhi*, 34(5):392.

*ramaj2@uniba.sk
†sabova111@uniba.sk
‡peter.matak@fmph.uniba.sk
§Supervisor