

**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ  
ТЕХНОЛОГИИ В РЕШЕНИИ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ  
ПРОБЛЕМ И ПРИКЛАДНЫХ НАУЧНЫХ ЗАДАЧ**

**Сессия ИВТН-2009**



**COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENTIFIC RESEARCH**

**IVTN-2009 Session**

Сборник материалов  
The Proceedings



Москва – 2009

Moscow - 2009

# **ИВТН.ru – электронные конференции**

Информационно-Вычислительные Технологии в Науке

**Главный организатор - НВК "ВИСТ"**

**При поддержке Zenon N.S.P.**

## **IVTN.ru – web conferences**

Computer Applications in Science

**Provided by NVK "VIST"**

**Supported by Zenon N.S.P.**

**Руководитель проекта ИВТН.ru** *Габусу Полина*  
**Исполнительный секретарь ИВТН.ru** *Куприна Юлия*

**IVTN.ru Project Leader** *Gabusu Paulina*  
**IVTN.ru Executive Secretary** *Kuprina Yulia*

Организационный комитет выражает благодарность всем участникам сессии ИВТН-2009

The Organizational committee thanks all of the participants of the IVTN-2009 session

В сборнике материалов сессии ИВТН-2009 представлены аннотации докладов, опубликованных на ИВТН.ru в 2009 году. К публикациям относятся доклады электронных конференций "Информационно-вычислительные технологии в решении фундаментальных и прикладных научных задач", в числе которых доклад д.х.н. М.Е. Эляшберга Advanced Chemistry Development, группа "Structure Elucidator", работы группы ученых, возглавляемых д.х.н. А.В. Погребняком кафедры физической и коллоидной химии Пятигорской государственной фармацевтической академии, цикл работ по сверхпроводимости д.ф.-м.н. Р.В. Вовка (Харьковский национальный университет им В.Н.Каразина, кафедра физики низких температур), и другие.

These proceedings of the IVTN-2009 session present annotations of the reports published at IVTN.ru in 2009. The publications include reports of web-conferences "Computer Applications in Scientific Researches", inclusive of report of Doctor of Chemistry M.E. Elyashberg from group "Structure Elucidator" of Advanced Chemistry Development, , works of group of scientists headed by Doctor of Chemistry A.V. Pogrebnyak from Physical and Colloid Chemistry Department of Pyatigorsk State Pharmaceutical Academy, superconductivity works of Doctor of Physics and Mathematics R.V. Vovk (V.N.Karazin Kharkov National University, Low-Temperature Physics Department), etc.

© НВК «ВИСТ»

© NVK «VIST»

Дорогие коллеги!

Оргкомитет благодарит Вас за участие в электронных конференциях ИВТН.ru «Информационно – Вычислительные Технологии в Науке».

Мы с удовольствием предоставляем Вашему вниманию очередной сборник материалов, собравший в себя доклады участников ИВТН-2009

Традиционно, мы публикуем в нашем издании краткие аннотации заявленных на конференции докладов на двух языках, с указанием постоянного адреса полной версии статьи на сайте ИВТН.ru в Интернете.

За годы своей деятельности электронная библиотека ИВТН.ru собрала свыше 1000 оригинальных авторских научных сообщений, а география читателей расширилась до 50 стран. Коллектив ИВТН.ru неоднократно привлекался в качестве организатора крупных международных научных мероприятий. Сейчас, когда за плечами ИВТН.ru большой опыт, тесные интернациональные связи, нам хотелось бы внести в привычный ход электронных конференций новые веяния, улучшающие качество и повышающие интерес участников к нашему ресурсу.

Именно эту тему мы хотели бы обсудить с Вами. Мы будем рады Вашим предложениям, замечаниям и любым комментариям относительно работы ИВТН.ru.

Заранее благодарим Вас за понимание и поддержку!

С уважением,

Организационный комитет ИВТН.ru

E-mail: [org@ivtn.ru](mailto:org@ivtn.ru)

URL: <http://www.ivtn.ru>

Тел.: +7 495 995 8017

Dear Colleagues!

The Organizational committee thanks you for participation in web-conferences IVTN.ru "Computer Application in Science"

With pleasure we bring forward the regular proceedings with all reports of IVTN-2009 participants.

Traditionally we have published short summaries of reports applied for the conferences in two languages with indication of permanent address of full report version at IVTN.ru web-site in Internet.

For years of our activity IVTN.ru electronic library has collected more than 1000 original author's scientific reports and geography of readers has expanded to 50 countries. IVTN.ru Committee has been organizer of major international scientific events. Today when IVTN.ru has wide experience and close international links we would like to include new ideas into usual trend of events that lead to improving quality and increasing interest to our project among participants.

This is that we would like to discuss with you. We will be glad to hear your suggestions, criticism and any comments concerning IVTN.ru work.

Thank you in advance for understanding and support!

With our best regards,

IVTN.ru Organizational Committee

E-mail: [org@ivtn.ru](mailto:org@ivtn.ru)

URL: <http://www.ivtn.ru>

Tel.: +7 495 995 8017



**ИВТН-2009  
IVTN-2009**



**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ  
В НАУКЕ**

---

**COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENCE**

**Организаторы  
Providers**

Конференции ИВТН-2009 организованы по инициативе НВК "ВИСТ", при поддержке научных центров и институтов Российской Академии Наук и Российской Академии Медицинских Наук.

The IVTN-2009 Conferences were initially organized by NVK "VIST" and supported by Scientific Centers and Institutes of Russian Academy of Sciences and Russian Academy of Medical Sciences.

<http://www.ivtn.ru>

**СЕКЦИЯ 1****ОБЩИЕ ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ И КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В НАУКЕ****SECTION 1****GENERAL PROBLEMS AND PROSPECTS OF COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENCE****КОМПЛЕКСНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ПЕРЕНОСА ПРОТОНА В ИМИДАЗОЛЕ МЕТОДАМИ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ (ИК, РКР) И ЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ****Тен Г.Н., Бурова Т.Г., Баранов В.И.**

Саратовский государственный университет

**INTEGRATED STUDY OF THE INTRAMOLECULAR MECHANISM OF PROTON TRANSFER BY MEANS OF VIBRATIONAL (INFRARED AND RESONANCE RAMAN) AND ELECTRON SPECTROSCOPIES****Ten G.N., Burova T.G., Baranov V.I.**

Saratov State University

На примере имидазола показана возможность исследования внутримолекулярного механизма переноса протона методами колебательной (ИК, РКР и РКР) и электронной спектроскопии.

Важным признаком, подтверждающим внутримолекулярный механизм переноса протона в имидазоле, может служить наличие двух близко расположенных \* - полос в электронном спектре поглощения.

Сравнение структурно-динамических моделей имидазола и аденина показывает, что присоединение к имидазолу пиримидинового кольца в несколько раз уменьшает изменения длин связей и углов в имидазольном кольце, что, в свою очередь, снижает эффект обнаружения внутримолекулярного механизма переноса протона в аденине

<http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper.php?p=1158>

Using imidazol as an example a possibility has been shown to investigate the intramolecular mechanism of proton transfer by means of vibrational (infrared, Raman, and resonance Raman) and electron spectroscopies.

An important feature to confirm the intramolecular mechanism of transfer in imidazol is the presence of two closely adjacent \* - bands in the electron absorption spectrum.

It is seen from the comparison of the structural-dynamical models of imidazol and adenine that due to the attachment of a pyrimidine ring to imidazol the changes of bond lengths and bond angles in it are several times less expressed than in adenine, which in its turn decreases the possibility of detecting the intramolecular mechanism of proton transfer in adenine

[http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper\\_e.php?p=1158](http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper_e.php?p=1158)

**НАДЕЖНОСТЬ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ. ВИДЫ И КРИТИЧНОСТЬ ОШИБОК****Дроботун Е.Б.**

Военная академия воздушно-космической обороны

**SOFTWARE RELIABILITY. FAILURE TYPE AND CRITICALLY****Drobotun E.B.**

Military academy of aerospace defence

В работе рассматриваются качество и надежность программного обеспечения. Приводятся различные показатели надежности программного обеспечения, описываются некоторые подходы к оценке надежности программного обеспечения и анализу видов, последствий и критичности ошибок в программном обеспечении

<http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper.php?p=1173>

Software quality and reliability are considered in this work. Happen to different software reliability, some approaches are described to estimation of software reliability and analysis type, effects and critically failure in software

[http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper\\_e.php?p=1173](http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper_e.php?p=1173)

**СЕКЦИЯ 2****КОМПЬЮТЕРНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ, ИХ ОРГАНИЗАЦИЯ (СЕТИ И ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ  
ВЫЧИСЛЕНИЯ)****SECTION 2****COMPUTING AND COMPUTING MANAGEMENT (NETWORKS AND PARALLEL  
COMPUTATION)****COMPUTER-ASSISTED METHODS FOR MOLECULAR STRUCTURE ELUCIDATION:  
REALIZING A SPECTROSCOPIST'S DREAM****Elyashberg M.E.<sup>1</sup>, Blinov K.<sup>1</sup>, Molodtsov S.<sup>2</sup>, Smurnyy Ye.<sup>1</sup>, Williams A.J.<sup>3</sup>, Churanova T.<sup>1</sup>**<sup>1</sup>Advanced Chemistry Development,<sup>2</sup>Novosibirsk Institute of Organic Chemistry, Siberian Division, Russian Academy of Sciences,<sup>3</sup>ChemZoo Inc.

**Background:** This article coincides with the 40 year anniversary of the first published works devoted to the creation of algorithms for computer-aided structure elucidation (CASE). The general principles on which CASE methods are based will be reviewed and the present state of the art in this field will be described using, as an example, the expert system Structure Elucidator.

**Results:** The developers of CASE systems have been forced to overcome many obstacles hindering the development of a software application capable of drastically reducing the time and effort required to determine the structures of newly isolated organic compounds. Large complex molecules of up to 100 or more skeletal atoms with topological peculiarity can be quickly identified using the expert system Structure Elucidator based on spectral data. Logical analysis of 2D NMR data frequently allows for the detection of the presence of COSY and HMBC correlations of "nonstandard" length. Fuzzy structure generation provides a possibility to obtain the correct solution even in those cases when an unknown number of nonstandard correlations of unknown length are present in the spectra. The relative stereochemistry of big rigid molecules containing many stereocenters can be determined using the StrucEluc system and NOESY/ROESY 2D NMR data for this purpose.

**Conclusion:** The StrucEluc system continues to be developed in order to expand the general applicability, provide improved workflows, usability of the system and increased reliability of the results. It is expected that expert systems similar to that described in this paper will receive increasing acceptance in the next decade and will ultimately be integrated directly to analytical instruments for the purpose of organic analysis. Work in this direction is in progress. In spite of the fact that many difficulties have already been overcome to deliver on the spectroscopist's dream of "fully automated structure elucidation" there is still work to do. Nevertheless, as the efficiency of expert systems is enhanced the solution of increasingly complex structural problems will be achievable.

The article has been published in Journal of Cheminformatics, 1:3, 17 March 2009,  
<http://www.jcheminf.com/content/1/1/3>

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1197](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1197)

**АНАЛИЗ ПОВЕДЕНИЯ СЕТЕВЫХ ИНФРАСТРУКТУР  
ДЛЯ КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА И БЕЗОПАСНОСТИ  
СЕТЕВЫХ РЕСУРСОВ НАУЧНЫХ ОРГАНИЗАЦИЙ**

**Пёрышкин С.В., Жданова М.С., Самохин А.М.**  
Лаборатория сетевых технологий

Современная наука непрерывно использует в своей деятельности компьютерные сети. Трафик, генерируемый запросами сотрудников к сервисам организации является отражением качества и безопасности её работы. Предлагается решение для статистической обработки данных о трафике и анализа поведения сетевых объектов инфраструктуры организации, позволяющее выявлять ранее неизвестные и специфичные инциденты безопасности, оценить качество эксплуатации сети

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1198>

**NETWORK INFRASTRUCTURE BEHAVIOR ANALYSIS  
FOR THE QUALITY AND SECURITY CONTROL OF  
SCIENCE ORGANIZATIONS' INFORMATIONAL  
SERVICES**

**Peryshkin S.V., Zhdanova M.S., Samokhin A.M.**  
Network Technologies Laboratory

Contemporary science continuously utilizes computer networks in its activities. Traffic generated by employees' transactions to the network services of organization appears to reflect the quality and security of its operations. We propose a solution for statistical processing of traffic data and network objects behavior analysis which allows to detect earlier unknown (zero-day) or specific security threats, evaluate the quality of network infrastructure maintenance

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1198](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1198)

**ВТОРИЧНАЯ ПЕРИОДИЧНОСТЬ В СТРУКТУРНЫХ  
И КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИКАХ  
3,3-ДИМЕТИЛЦИКЛОПРОПЕНОВ, ДИ- И  
МОНОЗАМЕЩЁННЫХ ГРУППАМИ –  
X(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub> (X=C, SI, GE, SN, И PB)**

**Панченко Ю.Н., Де Марэ Дж.Р., Абраменков А.В.**  
Московский государственный университет  
им.М.В.Ломоносова

Закономерности в изменениях структурных параметров и колебательных волновых числах прослежены для определённых групп указанных соединений. Закономерности, полученные в виде зигзагообразных линий, аналогичны закономерностям, которые характерны для атомов 14 (IVA) группы периодической таблицы Менделеева. Эта закономерность известна как явление вторичной периодичности

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1179>

**SECONDARY PERIODICITY IN THE STRUCTURAL  
AND VIBRATIONAL CHARACTERISTICS OF  
3,3-DIMETHYLCYCLOPROPENES DI- AND  
MONOSUBSTITUTED BY –  
X(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub> MOIETIES (X = C, SI, GE, SN, OR PB)**

**Panchenko Y.N., De Mare G.R., Abramenkov A.V.**  
M.V.Lomonosov Moscow State University

The regularities of changes in the structural parameters and vibrational wavenumbers have been traced for certain moieties of the title compounds. The regularities obtained in the form of the zigzag lines are analogous to regularities that are characteristic to the atoms of the 14 (IVA) group of the Mendeleev Periodic Table. This is known as the secondary periodicity phenomenon

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1179](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1179)

**ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ТЕРМИЧЕСКОЙ  
ПЕРЕГРУППИРОВКИ АЛЛИЛОВОГО ЭФИРА ПАРА-  
ТРЕТ-БУТИЛФЕНОЛА**

**Рахимова И.М., Колесова Т.В., Ключарева Е.В.,  
Кантор Е.А.**

Уфимский государственный нефтяной технический  
университет

Проведено квантово-химическое исследование (B3PW91/6-31G\*) возможных маршрутов первой стадии термической перегруппировки аллилового эфира пара-трет-бутилфенола. Выполнена оптимизация геометрии исходного эфира, переходных состояний, интермедиата и продукта реакции. Согласно расчетным данным перегруппировка протекает через [3,3]-сигматропный сдвиг, образование π-комплекса маловероятно

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1178>

**STUDIES ON THE MECHANISM OF THE THERMAL  
REARRANGEMENT OF ALLYL-PARA-TERT-  
BUTYLPHENYL ETHER**

**Rakhimova I.M., Kolesova T.V, Klyachareva E.V,  
Kantor E.A.**

Ufa State Petroleum Technological University

Quantum-chemical studies (B3PW91/6-31G\*) on possible routes to first stage of thermal rearrangement of allyl-para-tert-butylphenyl ether is realized. Geometry's optimization of ether, transition states, intermediate and product of reaction is calculated. According to calculated data, rearrangement runs through [3,3]-sigmatropic shift, formation of π-complex is unlikely

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1178](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1178)

**К ГРАММАТИКАМ ДИАЛЕТОВ ГЕНЕТИЧЕСКИХ КОДОВ****Эйнгорин М.Я.**Нижегородский государственный университет им.  
Н.И.Лобачевского

В кратком докладе рассматриваются закономерности кодирования генетических кодов мРНК, закон систематизации аминокислот и закон систематизации диалектов живой природы

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1182>

**TO GRAMMARS OF DIALECTS OF GENETIC CODES****Eingorin M.Y.**

N.I.Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod

The subjects of this brief report are the encoding regularities of mRNA genetic information, the law of the systematization of amino acids, and the law of the systematization of animated nature dialects

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1182](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1182)

**НЕПЛОСКИЕ СТРУКТУРЫ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПОВОРОТНЫХ ИЗОМЕРОВ 2-МЕТИЛБУТА-1,3-ДИЕНА (ИЗОПРЕНА) И 2,3-ДИМЕТИЛБУТА-1,3-ДИЕНА****Панченко Ю.Н., Бок Ч.У., Ларкин Дж.Д.,  
Абраменков А.В., Кюнemann Ф.**Московский государственный университет  
им.М.В.Ломоносова

Колебательные анализы конформеров 2-метилбута-1,3-диена (изопрена) и 2,3-диметилбута-1,3-диена выполнены на уровне MP2(FC)/aug-cc-pVDZ. Измеренные недавно экспериментальные волновые числа конформеров указанных молекул и их дейтероизомеров включены в эти анализы. Рассчитанные неплоские структуры высокоэнергетических поворотных изомеров подтверждены хорошим согласием между экспериментальными и теоретическими волновыми числами исследованных молекул

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1180>

**NON-PLANAR STRUCTURES OF THE HIGH-ENERGY ROTATIONAL CONFORMERS OF 2-METHYLBUTA-1,3-DIENE (ISOPRENE) AND 2,3-DIMETHYLBUTA-1,3-DIENE****Panchenko Y.N., Bok C.U., Larkin D.D.,  
Abramenkov A.V., Kyunemann F.**

M.V.Lomonosov Moscow State University

The vibrational analyses of the conformers of 2-methylbuta-1,3-diene (isoprene) and 2,3-dimethylbuta-1,3-diene were performed at the MP2(FC)/aug-cc-pVDZ level. Recent experimental wavenumbers for the conformers of these molecules and their deuterioisomers were incorporated into these analyses. The theoretical non-planar structures of the high-energy rotational isomers were corroborated by good agreement between the experimental and theoretical wavenumbers of the molecules under investigation

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1180](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1180)

**УЛУЧШЕНИЕ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ФРАГМЕНТОВ БИОМОЛЕКУЛ****Аникин Н.А., Бугаенко В.Л., Кузьминский М.Б.,  
Медкович А.С.**

Институт органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН

Полуэмпирическое описание межмолекулярных взаимодействий улучшено добавлением атом-атомного потенциала, калибруемого МНК по высокоточным расчетам MP2/aug-cc-pVTZ 14550 эталонных димеров 75-ти типов, при учете специфики окружения атомов докинг-комплексов. Для атомов H,C,N,O,F,S,Cl подобраны параметры для 151 пары атомов, наша RMSE 0.31, а исходного PM3 - 0.65 ккал/моль. Тест переносимости на >14000 иных (более крупных и сложных) димеров 189 типов: наша точность 0.38, а PM3 - 0.71 ккал/моль

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1177>

**IMPROVEMENT OF SEMIEMPIRICAL DESCRIPTION OF INTERMOLECULAR INTERACTIONS OF BIOMOLECULE FRAGMENTS****Anikin N.A., Bugaenko V.L., Kuzminskiy M.B.,  
Mendkovich A.S.**

N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian Academy of Sciences

Semiempirical description of intermolecular interactions is improved by addition of atom-atom potential, calibrated by least-squares method on precise calculations MP2/aug-cc-pVTZ 14550 reference dimers of 75 types, at the account of surroundings specific of atoms in doking-complexes. For H,C,N,O,F,S,Cl atoms are calibrated parameters for 151 pair of atoms, our RMSE 0.31, and initial PM3 - 0.65 kcal/mole. Transferability test on >14000 other (more large and difficult) dimers of 189 types: our precision is 0.38, and PM3 - 0.71 kcal/mole

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1177](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1177)

## СЕКЦИЯ 3

## МОДЕЛИРОВАНИЕ, ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

## SECTION 3

## COMPUTER SIMULATION

**АЛГОРИТМ ВЫЧИСЛЕНИЯ КВАНТОВАННОГО РАДИУСА ОРБИТЫ ЭЛЕКТРОНА**  
**Островский Н.В.**

Вятский государственный университет

**ALGORITHM OF CALCULATION OF QUANTED ELECTRON'S ORBIT RADIUS**  
**Ostrovskiy N.V.**

Vyatka State University

Алгоритм включает численное решение системы неравенств  $\varphi(rZ,i) < \varepsilon$ , где  $\varepsilon$  - заданная точность нахождения радиуса, а  $\varphi(rZ,i)$  - специальная функция, выведенная из классических уравнений теории строения атома Нильса Бора

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1206>

The algorithm includes the numerical decision of inequalities system  $\varphi(rZ,i) < \varepsilon$ , where  $\varepsilon$  - the set accuracy of radius calculation, and  $\varphi(rZ,i)$  - the special function deduced from the classical equations of the Niles Bohr's atom theory

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1206](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1206)

**АЛГОРИТМЫ ИМИТАЦИОННЫХ МОДЕЛЕЙ РАСЧЕТА ДОЗОВЫХ НАГРУЗОК В ЛЕСНОЙ ЭКОСИСТЕМЕ****Мамихин С.В., Бадави В.М.**

Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова

**ALGORITHMS OF SIMULATION MODELS FOR CALCULATING THE RADIATION DOSE IN FOREST ECOSYSTEM****Mamihin S.V., Badavi V.M.**

M.V.Lomonosov Moscow State University

Разработаны подходы к моделированию пространственно-временной динамики формирования доз при различных сценариях поведения объекта в лесной экосистеме, послужившие основой для создания имитационных дозиметрических моделей. Наличие достаточно полного банка моделей и карты дозных полей позволит, отслеживая с помощью GPS-навигатора маршрут и время объекта нахождения в дозных полях, получать динамику облучения объекта в процессе его перемещения и адекватно оценивать опасность дозы облучения

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1153>

Approaches for modeling of space-time dynamics of dose formation under different behavior of the object in the forest ecosystems are handled, acting the basis for creating simulation dosimetric models. Furthermore, fully sufficiently bank models and map of the field doses are allowed, following the path with the GPS-navigator and the time of the object location in the dosimetric fields. Therefore, we can get the dynamics of the exposed object to radiation during movement of the object and sufficiently estimate the risk of the radiation doses

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1153](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1153)

**ИМИТАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ ПОВЕДЕНИЯ РАДИОНУКЛИДОВ В ПОЧВАХ СКЛОНОВ И ВОДОСБОРОВ****Мамихин С.В., Шамшурина Е.Н.**

Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова

**THE SIMULATION MODEL OF RADIONUCLIDE BEHAVIOUR IN THE SOIL OF INCLINES AND SMALL CATCHMENTS****Mamihin S.V., Shamshurina E.N.**

M.V.Lomonosov Moscow State University

Поле миграции разбито на элементарные призмы. Объект моделирования представляется в виде последовательности или совокупности призм. Процессы перераспределения радионуклидов, подразделены на относительно медленные, детерминированные (диффузия, конвективный перенос, перенос компонентами биоты) и быстрые, обладающие большой пространственно-временной неопределенностью (эрозия). Воспроизведение эрозионных и конвективно-диффузионных процессов реализуется с помощью двух автономных подмоделей

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1154>

The migration field is divided on partial prisms. The plant of model operation is represented as a sequence or population of prisms. The processes of reallocation of radionuclides, are subdivided on relatively slow, determined (diffusion, convective transposition, transposition by biota components) and fast, possessing of high spatially - temporal indeterminacy (erosion). The imitation of erosive and convectively - diffusion processes is implemented with the help of two independent submodels.

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1154](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1154)

### МОДЕЛИ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ДИНАМИКИ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ ИХ ЭРГОДИЧЕСКИХ СВОЙСТВ

Мазилина О.В., Кузьмин В.И.

Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики (ТУ)

Введен алгоритм обработки данных статического разреза, позволяющий определить пороговые значения, при достижении которых системы проходят через кризис. Сопоставление таких точек кризиса с данными о динамике систем позволяет прогнозировать сроки наступления кризиса. Проведен анализ соответствий критических уровней характеристик систем, соответствующих кризисам, реализуемых для набора иерархически упорядоченных структур. Результаты иллюстрируются рассмотрением данных статического разреза для Нью-йоркской биржи, группы компаний, представляющих отдельную отрасль и индивидуальных компаний. На этой основе показаны соответствия выявленных критических уровней по данным статического разреза в динамике группы компаний и компаний, а так же возможность прогнозных оценок кризисов в их развитии

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1175>

### MODELS OF FORECASTING OF DYNAMICS OF SYSTEMS ON THE BASIS OF THEIR ERGODIC PROPERTIES

Mazilina O.V., Kuzmin V.I.

Moscow State Institute of Radio Engineering, Electronics, Engineering and Automatics

An algorithm for the processing of static view of data has been introduced which makes it possible to determine threshold values, at which systems reach the crisis. By correlating these critical points with the system dynamics data it is possible to predict the due dates of the crisis. A correspondence analysis of the critical levels of the system characteristics, which correspond to crises, has been performed for a set of hierarchized structures. The results are illustrated by the static view of data for the New York stock exchange, the group of industrial companies, and some individual companies. The correlation has been demonstrated between the critical levels found from the static view of data for the group of companies and individual companies and the data on their dynamics. Finally, predictive estimates have been given as regards crises in their development

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1175](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1175)

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНЫХ ПЕРЕГРУППИРОВОК В КАРБЕНИЕВЫХ ИОНАХ 4-МЕТИЛ-1,3-ДИОКСАНА

Шорников Д.В., Горбунова Н.В., Исякаева Е.Б., Кантор Е.А.

Уфимский государственный нефтяной технический университет

Методом функционала плотности (B3PW91/6-31G\*\*) рассчитаны различные варианты внутримолекулярных перегруппировок в карбениевых ионах 4-метил-1,3-диоксана. Выяснено, что по термодинамическим параметрам оптимальным является 1,5-сдвиг водорода, а в результате 1,3-перегруппировки образуется самый энергетически выгодный конечный ион

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1168>

### SIMULATION OF INTRAMOLECULAR REARRANGEMENT IN THE CARBENIUM IONS OF THE 4-METHYL-1,3-DIOXANE

Shornikov D.V., Gorbunova N.V., Isyakaeva E.B., Kantor E.A.

Ufa State Technical Oil University

Density functional technique (B3PW91/6-31G\*\*) has been used to calculate different variants of intramolecular rearrangements in carbene ions of 4-methyl-1,3-dioxane. A 1,5-hydrogen shift has been recognized to be the optimal thermodynamic parameter. Besides, a 1,3-rearrangement results in the formation of the most energetically favorable final ion

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1168](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1168)

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПРИВАТИЗАЦИИ В УКРАИНЕ

Панченко Н.Г.

Украинская государственная академия железнодорожного транспорта

В статье рассмотрено влияние взаимосвязей процессов приватизации на создание добавочной стоимости. Предложено использование линейной многофакторной регрессионной модели для определения согласованности процессов приватизации и их влияние на формирование добавочной стоимости

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1192>

### MODELING OF PRIVATISATION PROCESS IN UKRAINE

Panchenko N.G.

Ukrainian State Academy of Railway Transport

In article influence of interrelations of privatisation processes on creation of additional cost is considered. Use linear multifactorial regression is offered to model for definition of a coordination of privatisation processes and their influence on formation of additional cost

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1192](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1192)

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ  
ФОТОИЗОМЕРИЗАЦИИ УГЛЕВОДОРОДОВ С  
СОПРЯЖЕННЫМИ КРАТНЫМИ СВЯЗЯМИ**

**Дриджер В.Е., Исаков М.Х., Михайлов И.В.,  
Баранов В.И.**

Институт геохимии и аналитической химии им.  
В.И.Вернадского РАН

Проведено моделирование фотохимических превращений ряда метилзамещенных молекул диенов. Проанализирована кинетика процессов и особенности их спектральных проявлений во времени. Рассчитаны квантовые выходы реакций. Полученные результаты количественно согласуются с экспериментом. Показана возможность проведения предсказательных расчетов характеристик фотохимических реакций сложных молекул

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1162>

**SIMULATION OF PHOTOISOMERIZATION  
PROCESSES OF HYDROCARBONS WITH  
CONJUGATE MULTIPLE BONDS**

**Dridger V.E., Ishakov M.X., Mihaylov I.V., Baranov V.I.**

Institute of geochemistry and analytical chemistry of  
V.I.Vernadskogo RAN

Simulation of photochemical conversions of dienes methylated molecules is carried out. Kinetics of the processes and time dependent spectral curves are analysed. Quantum yields of the reactions are calculated. Obtained results agree with experiment data quantitatively. Possibility of realisation of predictive calculations of photochemistry reactions characteristics of complex molecules is shown

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1162](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1162)

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОТОХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ  
ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗОЛА**

**Исаков М.Х., Дриджер В.Е., Михайлов И.В.,  
Баранов В.И.**

Институт геохимии и аналитической химии им.  
В.И.Вернадского РАН

Предложен метод расчета квантовых выходов реакций. Проведено моделирование процессов изомеризации ксилолов и диэтилбензолов. Рассчитанные квантовые выходы количественно согласуются с экспериментом

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1167>

**MODELLING OF PHOTOCHEMICAL REACTIONS OF  
BENZENE DERIVATIVES**

**Ishakov M.H., Dridger V.E., Mihaylov I.V., Baranov V.I.**

Institute of geochemistry and analytical chemistry of  
V.I.Vernadskogo RAN

Method of calculation of quantum yields of reactions is offered. Modelling of photo-isomerisation processes in xylene and diethylbenzene is carried out. Calculated quantum yields are in quantitative agreement with experimental data

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1167](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1167)

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕМЕНТОВ МОЛЕКУЛЯРНЫХ  
ЭЛЕКТРОННЫХ УСТРОЙСТВ**

**Клюев С.А.**

Волжский политехнический институт

N- и S- содержащие гетероциклические соединения рассмотрены как модели молекулярных электронных устройств. Изучены начальные и одноэлектронно окисленные формы

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1160>

**MODELING OF ELEMENTS OF MOLECULAR  
ELECTRONIC DEVICES**

**Klyuev S.A.**

Volga Polytechnic Institute

N- and S-containing heterocyclic compounds as model elements of the molecular electronic of devices were considered. The initial and one electron oxidized forms were studied

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1160](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1160)

**ОПТИМИЗАЦИЯ МЕТОДА ПОИСКА  
ФУНКЦИОНАЛЬНО СХОДНЫХ БЕЛКОВ ЭУКАРИОТ  
С ОПРЕДЕЛЕННОЙ ВТОРИЧНОЙ СТРУКТУРОЙ**

**Гришаева Т.М., Дадашев С.Я., Богданов Ю.Ф.**

Институт общей генетики им.Н.И.Вавилова РАН

В протеоме планарии *Schmidtea mediterranea* проведен поиск *in silico* возможных ортологов белков Zip1p, ZYP1, SYP-1, C(3)G и SYCP1, формирующих поперечные фибриллы (ПФ) синаптонемного комплекса у разных видов эукариот. Из более чем 650 белков, сходных по первичной структуре с известными белками ПФ, отобрано только два. На основе этого исследования предложен оптимизированный метод поиска функционально сходных белков эукариот с определенной вторичной структурой

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1166>

**OPTIMIZATION OF THE METHOD OF SEARCHING  
FOR FUNCTIONALLY SIMILAR PROTEINS OF  
EUKARYOTES WITH DISTINCT SECONDARY  
STRUCTURE**

**Grishaeva T.M., Dadashev S.Ya., Bogdanov Yu.F.**

V.I. Vavilov Institute of General Genetics of Russian  
Academy of Sciences

An *in silico* search of potential orthologs of proteins Zip1p, ZYP1, SYP-1, C(3)G, and SYCP1, which form the transverse filaments (TF) of the synaptonemal complex of various eukaryotes, has been performed in the proteome of planarians *Schmidtea mediterranea*. Of 650 proteins similar in their initial structure to the known TF proteins only two have been selected. Based on this study an optimized method of search of functionally similar proteins of eukaryotes with a definite secondary structure has been proposed

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1166](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1166)

**СТРУКТУРНО-ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ И  
КОНФОРМАЦИОННЫЕ ПРЕДПОСЫЛКИ  
СТРАТЕГИИ ДОКИНГА В РЕДАКТОРЕ MOLEGRO  
VIRTUAL DOKING НА МОДЕЛИ ФИБРОНЕКТИНА  
БОВИСНОГО**

**Федотов А.В., Овчарук И.Н**

Кемеровская государственная медицинская академия

Изложены возможности структурно-функционального и конформационного анализа макромолекул для целей поиска ниши, подготовки модели и анализа процессов постановки в док лигандов различного назначения. Обсуждены возможности нового редактора для молекулярного докинга Molegro Virtual Doking и его преимущества по сравнению с существующими. Проведен анализ некоторых инструментов и подходы для аффинных характеристик фибронектина бовисного

<http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper.php?p=1156>

**STRUCTURALLY FUNCTIONAL AND  
CONFORMATIONAL PRECONDITIONS OF STRATEGY  
DOKING IN EDITOR MOLEGRO VIRTUAL DOKING ON  
MODEL FIBRONECTIN BOVINUM**

**Fedotov A.V., Ovcharuk I.N.**

Kemerovo State Medical Academy

Possibilities structurally functional and conformational the analysis of macromolecules for search of a niche, preparation of model and the analysis of processes of statement in dock ligands of different function are stated. Are discussed possibility the new editor for molecular doking Molegro Virtual Doking and its advantages in comparison with the existing. The analysis of some tools and approaches for affinity characteristics fibronectin bovinum is done

[http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper\\_e.php?p=1156](http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper_e.php?p=1156)

**ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАДАЧ  
РАССЕЯНИЯ И ПОГЛОЩЕНИЯ  
ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН ДИАПАЗОНА  
МОБИЛЬНОЙ СВЯЗИ НА НЕОДНОРОДНЫХ  
БИОЛОГИЧЕСКИХ ТКАНЯХ**

**Воронина Н.Ю., Куликов С.П.**

Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики (ТУ)

В работе рассматривается задача численного анализа взаимодействия электромагнитного излучения диапазона мобильной связи и других СВЧ-источников с неоднородными биологическими органами и тканями. Задача поставлена в строгой формулировке на основе объемных интегральных уравнений электродинамики и далее в математическом плане сводится к численному решению больших комплексных систем линейных алгебраических уравнений с симметричной неэрмитовой матрицей. Для решения таких СЛАУ обосновывается применение метода оптимальной простой итерации. Успешное применение метода МОПИ базируется на знании спектральных свойств интегрального оператора перехода, а затем соответствующей ему матрицы перехода, а также на разработанных явных алгоритмах по определению оптимального параметра МОПИ. При переходе от задачи с редкой вычислительной сеткой к задаче с более густой сеткой используется принцип неизменности оптимального параметра. Численно решены некоторые конкретные задачи поглощения электромагнитного излучения диапазона мобильной связи на моделях человеческих органов и тканей

<http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper.php?p=1210>

**NUMERICAL ANALYSIS OF SCATTERING AND  
ABSORPTION PROBLEMS OF ELECTROMAGNETIC  
WAVES OF A MOBILE COMMUNICATION RANGE ON  
NON-UNIFORM BIOLOGICAL STRUCTURES**

**Voronina N.Yu., Kulikov S.P.**

Moscow State Institute of Radio Engineering, Electronics, Engineering and Automatics

The problem of the numerical analysis of interaction of electromagnetic waves of a mobile communication range and other microwaves sources with non-uniform biological bodies and structures is put in the strong formulation on the basis of the volume integral equation and further in the mathematical plan is reduced to the numerical solution of large complex systems of the linear algebraic equations (SLAE) with symmetric non-hermit matrix. For the solution, such SLAE application of a method of optimum simple iteration (MOSI) proves. Successful application of this method is based on knowledge of spectral properties of the integral transition operator and on the developed algorithms of optimum parameter MOSI definition. The principle of optimum parameter stability is used at transition from a problem with a rare computing grid to some with a dense one. Some absorption problems of electromagnetic waves of a mobile communication range on models of human bodies are numerically solved

[http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper\\_e.php?p=1210](http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper_e.php?p=1210)

**СЕКЦИЯ 4****ВИЗУАЛИЗАЦИЯ В НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ****SECTION 4****VISUALIZATION IN SCIENTIFIC RESEARCHES****QM И MD-ИССЛЕДОВАНИЕ ИНИЦИИРОВАНИЯ АЛЬФА-СПИРАЛИЗАЦИИ ПЕПТИДОВ КИСЛЫМИ И ОСНОВНЫМИ АМИНОКИСЛОТНЫМИ ОСТАТКАМИ.****Кондратьев М.С., Кабанов А.В., Комаров В.М.**

Институт биофизики клетки РАН

**QM AND MD-INVESTIGATION OF INITIATION OF ALPHA-HELIMERIZATION OF PEPTIDES BY ACIDIC AND BASIC AMINO-ACID RESIDUES****Kondratev M.S., Kabanov A.V., Komarov V.M.**

Institute of Cell Biophysics of Russian Academy of Sciences

В работе на основе проведенных квантово-химических и молекулярно-динамических расчетов процесса спирализации коротких пептидов обсуждается возможный механизм ускоренного образования первого витка альфа-спирали. Показаны точки старта и точки терминации такого процесса, а также проведено сравнение с экспериментальными данными

<http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper.php?p=1204>

A possible mechanism of the accelerated formation of the first alpha-spiral turn is discussed in the paper on the basis of quantum-chemical and molecular mechanics calculations of the short peptide spiralization process. Starting and termination points of such a process are shown, as well as the comparison with the experimental data is performed

[http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper\\_e.php?p=1204](http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper_e.php?p=1204)**R<sup>N</sup>- ГРАВИТАЦИЯ И ДИНАМИЧЕСКОЕ НАРУШЕНИЕ СИММЕТРИИ****Котвицкий А.Т., Крючков Д.В.**

Украинская государственная академия транспорта

**R<sup>N</sup>- GRAVITATION AND DYNAMIC SYMMETRY BREAKDOWN****Kotvytskiy A.T., Kryuchkov D.V.**

Ukrainian State Academy of Transport

Данное исследование посвящено возможности динамической генерации фермионной массы и динамическому нарушению симметрии в формализме уравнений Швингера–Дайсона для гравитации с произвольными степенями скалярной кривизны. Показано, что в случае плоской фоновой метрики такой эффект отсутствует (в рамках этого формализма). В случае произвольного искривленного фоновое пространство – времени такой эффект может иметь место и тогда необходимо учитывать в лагранжиане гравитационного поля все слагаемые такого типа, так как они дают одинаковый вклад по малым квантовым поправкам

<http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper.php?p=1190>

The investigation is concerned with the possibility of the dynamic generation of fermionic mass and the dynamic symmetry breakdown in the formalism of Schwinger–Dyson equations for the gravitation with arbitrary degrees of scalar curvature. Such an effect has been shown to be absent in the case of the flat background metric (within the frames of the formalism given). However this effect can occur in the case of the arbitrary curved background space-time. In this case all the summands of this type should be taken into account in the gravitation field lagrangian because of their similar contribution into small quantum corrections

[http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper\\_e.php?p=1190](http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper_e.php?p=1190)

**О ВЛИЯНИИ ПОПЕРЕЧНОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ  
НА РАЗМЕРНОСТЬ ФЛУКТУАЦИОННОЙ  
ПАРАПРОВОДИМОСТИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ  
YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3-z</sub>Al<sub>z</sub>O<sub>7-Δ</sub>**

**Вовк Р.В., Завгородний А.А., Оболенский М.А.,  
Самойлов А.В.**

Харьковский национальный университет им  
В.Н.Каразина

В работе исследовано влияние постоянного магнитного поля до 12.7 кЭ при ориентации H||c на различные режимы флуктуационной парапроводимости монокристаллов YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3-z</sub>Al<sub>z</sub>O<sub>7-δ</sub> (z≤0.5) с однонаправленной системой ДГ при геометрии протекания транспортного тока I||DG, когда влияние двойников на процессы рассеяния носителей минимизировано

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1187>

**ABOUT THE INFLUENCE OF TRANSVERSE  
MAGNETIC FIELD ON DIMENSION OF  
FLUCTUATIONAL PARACONDUCTIVITY IN  
MONOCRYSTALS YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3-z</sub>Al<sub>z</sub>O<sub>7-Δ</sub>**

**Vovk R.V., Zavgorodny A.A., Obolenskii M.A.,  
Samoilov A.V.**

V.N.Karazin Kharkov National University

The paper deals with the influence of static magnetic field up to 12.7 kOe with the orientation H||c on various regimes of fluctuational paraconductivity of monocrystals YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3-z</sub>Al<sub>z</sub>O<sub>7-δ</sub> (z≤0.5) with a unidirectional DW-system with the geometry of transport current I||DG, when the influence of twins on carrier scattering is minimized

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1187](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1187)

**ПИК ЭФФЕКТ В ТЕКСТУРИРОВАННЫХ YBCO-  
КРИСТАЛЛАХ СЛАБО ЛЕГИРОВАННЫХ СЕРЕБРОМ**

**Вовк Р.В., Лотник Д.А., Завгородний А.А.,  
Оболенский М.А., Ковач И., Антал В., Дико П.,  
Фехер А.**

Харьковский национальный университет им  
В.Н.Каразина

В настоящей работе экспериментально исследованы кривые намагничивания M(B) в текстурированных образцах YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-δ</sub> и YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3-x</sub>Ag<sub>x</sub>O<sub>7-δ</sub> (при x≈0.02). Обнаружено появление максимума намагничивания в промежуточных полях (Пик-эффект - ПЭ), который наблюдался в достаточно широком диапазоне температур 40 K<T<75 K при ориентации магнитного поля H||c. Показано, что влияние на ПЭ объемного пиннинга доминирует при более низких температурах, а влияние поверхностного пиннинга - при более высоких. Значение j<sub>c,max</sub> для кристаллов YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3-x</sub>Ag<sub>x</sub>O<sub>7-δ</sub> смещается в сторону более высоких магнитных полей, что, возможно, связано с наличием дополнительных центров пиннинга образованных за атомами серебра

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1185>

**PEAK-EFFECT IN AG-DOPED MTG-YBCO CRYSTALS**

**Vovk R.V., Lotnyk D.A., Zavgorodnij A.A., Obolenskii  
M.A., Kovac J., Antal V., Diko P., Feher A.**

V.N.Karazin Kharkov National University

M(B)-curves were experimentally investigated. Fishtail-effect (FE) was observed in MTG- YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-δ</sub> and YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3-x</sub>Ag<sub>x</sub>O<sub>7-δ</sub> (at x≈0.02) crystals in wide temperature range 40 K<T<75 K at orientation of magnetic field H||c. It was obtained that influence of bulk pinning on FE is more effective at low temperatures while influence of surface barriers is more effective at high temperatures. The value j<sub>c,max</sub> for Ag-doped crystals is bigger then for a pure one that caused by an additional pinning centers by means of silver atoms

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1185](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1185)

**РЕЗИСТИВНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПСЕВДОЩЕЛИ В  
СЛАБО ЛЕГИРОВАННЫХ ПРАЗЕОДИМОМ  
МОНОКРИСТАЛЛАХ YBACUO С ЗАДАННОЙ  
ТОПОЛОГИЕЙ ПЛОСКИХ ДЕФЕКТОВ**

**Вовк Р.В., Завгородний А.А., Оболенский М.А.,  
Самойлов А.В., Петренко А.Г.**

Харьковский национальный университет им  
В.Н.Каразина

В работе исследовано влияние слабого легирования празеодимом на проводимость в базисной плоскости ВТСП-монокристаллов YBaCuO. Установлено, что избыточная проводимость Δσ(T) образцов в широком интервале температур T<sub>f</sub><T<T\* подчиняется экспоненциальной температурной зависимости Δσ~(1-T/T\*)exp(Δ\*<sub>abf</sub>/T) и может быть интерпретирована в терминах теории кроссовера БКШ-БЭК, где T\* представлена, как среднеполевая температура сверхпроводящего перехода

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1184>

**RESISTIVITY INVESTIGATIONS OF PSEUDOGAP IN  
SLIGHTLY DOPED BY PRASEODYMIUM YBACUO  
SINGLE CRYSTALS WITH THE GIVEN TOPOLOGY OF  
FLAT DEFECTS**

**Vovk R.V., Zavgorodny A.A., Obolenskii M.A.,  
Samoilov A.V., Petrenko A.G.**

V.N.Karazin Kharkov National University

In present work we have investigated the conductivity in the basis plane of the slightly doped by Pr and of YBaCuO single crystals. It is shown, that the excess conductivity Δσ(T) for the analyzed samples shows dependence Δσ~(1-T/T\*)exp(Δ\*<sub>abf</sub>/T) in a wide temperature range T<sub>f</sub><T<T\*, where T\* is the mean field temperature of superconducting transition. The temperature dependence of the pseudogap can be satisfactorily described in terms of the BCS-BEC crossover theoretical model

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1184](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1184)

**СТРУКТУРНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ В  
МОНОКРИСТАЛЛАХ  $\text{HO}_1\text{BA}_2\text{CU}_3\text{O}_{7-\Delta}$  С  
НЕДОСТАТКОМ КИСЛОРОДА**

**Вовк Р.В., Оболенский М.А., Завгородний А.А.,  
Самойлов А.В.**  
Харьковский национальный университет им  
В.Н.Каразина

В работе исследовано влияние отжига при комнатных температурах на проводимость в базисной плоскости монокристалла  $\text{HO}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7.5}$  с пониженным содержанием кислорода, закаленных от температур  $650^\circ\text{C}$ . Обнаружено, что в процессе отжига происходит общее расширение области линейной зависимости  $\rho_{ab}(T)$ , смещение вниз по температуре участка, соответствующего переходу металл-диэлектрик и значительная трансформации формы резистивных переходов в сверхпроводящее состояние. При этом абсолютная величина температуры открытия псевдощели уменьшается приблизительно на 20 К. Полученные результаты объясняются упорядочением лабильного кислорода без изменения его концентрации в образце. Сделана оценка характерных размеров кластеров характеризующихся различным содержанием кислорода, а также проведен сравнительный анализ экспериментальных данных с оценками, полученными в рамках кластерной теории высокотемпературной сверхпроводимости

<http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper.php?p=1186>

**STRUCTURAL RELAXATION IN OXYGEN DEFICIENT  
 $\text{HO}_1\text{BA}_2\text{CU}_3\text{O}_{7-\Delta}$  SINGLE CRYSTALS**

**Vovk R.V., Obolenskii M.A., Zavgorodny A.A.,  
Samoilov A.V.**  
V.N.Karazin Kharkov National University

The effect of annealing at room temperatures on the conductivity in the basis plane of oxygen deficient  $\text{HO}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7.5}$  single crystals, tempered from a temperature of  $650^\circ\text{C}$  is investigated. We determine that during the annealing process an extension of the area of the linear dependence of the resistivity  $\rho_{ab}(T)$  occurs. A shift downwards of the temperature interval corresponding to the metal-to-insulator transition and a considerable transformation of the form of the resistivity transfers to the superconducting state was observed. The absolute value of the temperature that the pseudo-gap regime commences is reduced by about 20 K. The results are attributed to labile oxygen ordering without changing the concentration of oxygen in the sample. The estimation of the cluster sizes is characterized by the differences in oxygen content. We perform a comparative analysis between the experimental data with the predictions of the high-temperature superconductivity cluster theory

[http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper\\_e.php?p=1186](http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper_e.php?p=1186)

**ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ФАЗОВЫХ  
ПЕРЕХОДОВ В ЛИТИЙ АММОНИЙ СУЛЬФАТЕ**

**Шамшин А.П.**

Украинская государственная академия  
железнодорожного транспорта

Исходя из теор. группового анализа найдено релевантное неприводимое представление по которому происходит сегнетоэластический фазовый переход в кристалле сегнетоэлектрика – сегнетоэластика лития аммония сульфата. Построен термодинамический потенциал, описывающий этот псевдособственный переход. Получены температурные зависимости констант жесткости, которые хорошо согласуются с экспериментальными данными

<http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper.php?p=1188>

**THE PHENOMENOLOGICAL DESCRIPTION OF  
PHASE TRANSITIONS IN LITHIUM AMMONIUM  
SULPHATE**

**Shamshin A.P.**

Ukrainian State Academy of Railway Transport

Starting with the group analysis the relevant irreducible representation on which occurs ferroelastic phase transition in a ferroelectric - ferroelastic crystal of lithium ammonium sulphate is found. The thermodynamic potential featuring this pseudoproper transition is constructed. Temperature dependences of elastic constants which will well be come to agreement with experimental data are gained

[http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper\\_e.php?p=1188](http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper_e.php?p=1188)

## СЕКЦИЯ 5

## ОБРАБОТКА ДАННЫХ, БАЗЫ ДАННЫХ, АНАЛИЗ ДАННЫХ

## SECTION 5

## DATA PROCESSING, DATABASES AND DATA ANALYSIS

**“DRUG” – КОМПЬЮТЕРНАЯ БАЗА ХРАНЕНИЯ ХИМИЧЕСКИХ И БОЛОГИЧЕСКИХ ДННЫХ НА ОСНОВЕ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ БАЗАМИ ДАННЫХ MYSQL****Погребняк А.В., Вотинцев Н.П.**

Пятигорская государственная фармацевтическая академия

Основой любой научной деятельности является сбор данных, их систематизация и анализ. Одним из лучших средств работы с информацией служат реляционные базы данных (БД)

<http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper.php?p=1205>

**“DRUG” – A COMPUTER CHEMICAL AND BIOLOGICAL DATA STORAGE BASE WITH THE DATA BASE MANAGEMENT SYSTEM MYSQL AS A BACKGROUND****Pogrebnyak A.V., Votintsev N.P.**

Pyatigorsk State Pharmaceutical Academy

Any scientific work is based on data acquisition, data systematization and analysis. Among the best means of handling information are relational databases (DB)

[http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper\\_e.php?p=1205](http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper_e.php?p=1205)

**ИМИТАЦИЯ КОНФОРМАЦИОННОГО ПОВЕДЕНИЯ ДЛИННОЦЕПОЧЕЧНЫХ ПОЛИЕНОВЫХ ЖИРНОКИСЛОТНЫХ КОМПОНЕНТОВ ФОСФОЛИПИДОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО: ОТ ИССЛЕДОВАНИЯ СВОЙСТВ К ПРЕДСКАЗАНИЮ ФУНКЦИЙ****Рабинович А.Л., Рипатти П.О., Столяров Д.С.**

Институт биологии Карельского научного центра РАН

Рассмотрен вопрос о свойствах и функциях необычных “длинноцепочечных” полиненасыщенных жирнокислотных компонентов молекул фосфолипидов природных мембран. Методом Монте-Карло проведена имитация совокупности таких необычных цепей и расчет ряда их свойств. Полученные результаты позволяют конкретизировать и обосновать возможные функции “длинноцепочечных” компонентов в биомембранах

<http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper.php?p=1165>

**MONTE CARLO COMPUTER SIMULATIONS OF CONFORMATIONAL BEHAVIOUR OF VERY LONG CHAIN POLYENOIC FATTY ACID CONSTITUENTS OF PHOSPHOLIPIDS: FROM THE STUDY OF THEIR PROPERIES TO PREDICTION OF FUNCTIONS****Rabinovich A.L., Ripatti P.O., Stolyarov D.S.**

Karelian Research Centre of Russian Academy of Sciences

Properties of unusual “very-long-chain” polyunsaturated fatty acids of natural membrane phospholipids are considered and functions of the chains are discussed. To study the properties of such unusual lipid chains Monte Carlo computer simulations were performed. Possible functions of “very-long-chain” polyunsaturated constituents can be specified and founded using the calculated properties

[http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper\\_e.php?p=1165](http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper_e.php?p=1165)

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВЕЙВЛЕТ-АНАЛИЗА ПРИ МОНТЕ-КАРЛО МОДЕЛИРОВАНИИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ****Шамшин А.П.**

Украинская государственная академия железнодорожного транспорта

Целью настоящей работы является применение вейвлет – анализа (ВА) при Монте-Карло (МК) моделировании фазовых переходов (ФП) и расчете термодинамических параметров кристалла ферроэлектрика – ферроэластика лития аммония сульфата (ЛАС)  $\text{LiNH}_4\text{SO}_4$

<http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper.php?p=1183>

**WAVELET ANALYSIS IN MONTE CARLO SIMULATION OF PHASE TRANSITION****Shamshin A.P.**

Ukrainian State Academy of Railway Transport

The objective of this paper is to use wavelet analysis (WA) in Monte Karlo (MK) simulation of phase transitions (PT) and in calculation of the thermodynamical parameters of ferroelectric/ferroelastic crystal  $\text{LiNH}_4\text{SO}_4$  (lithium ammonium sulfate)

[http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper\\_e.php?p=1183](http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper_e.php?p=1183)

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЦЕНТРАЛЬНО-СИЛОВОЙ СИСТЕМЫ ЕСТЕСТВЕННЫХ КООРДИНАТ В РАСЧЁТАХ ВЕРОЯТНОСТЕЙ ИЗОМЕРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ**

**Михайлов И.В.**

Институт геохимии и аналитической химии им.В.И.Вернадского РАН

Использование центрально-силовой системы естественных координат при расчёте вероятностей изомерных превращений позволяет полностью автоматизировать ту часть вычислений, которая касается определения вида связи между нормальными координатами изомерных форм

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1159>

**METHOD OF CENTRAL-FORCE SYSTEM OF NATURAL COORDINATES IN ISOMER TRANSFORMATION PROBABILITY CALCULATIONS**

**Mihaylov I.V.**

V.I.Vernadsky Institute of Geochemistry and Analytical Chemistry of Russian Academy of Sciences

Central-force system of natural coordinates application turns the determination a kind of normal coordinates mixing into fully automatic module of the software for isomer transformation probability calculations

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1159](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1159)

**ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФИБРОНЕКТИНА БОВИСНОГО ИНСТРУМЕНТАМИ КОМПЬЮТЕРНЫХ ПРОГРАММ INFORMAX SUIT 8 И CLC PROTEIN**

**Овчарук И.Н., Федотов А.В.**

Кемеровская государственная медицинская академия

Не смотря на то, что многие принципы и цели для обсуждаемого нами направления исследований - биоинженерия белковых структур, остаются во многом декларативными все же некоторые успехи постепенно становятся все более очевидными. Так с помощью КП InforMax и CLC Protein во многом стали более понятны принципы организации белковых структур в эволюционном плане а их использование внесло достаточно весомый вклад в знания о белковых структурах и их пространственной структуре. Другая область которую мы обсуждаем в докладе-это возможность с помощью КП моделирования белков исследовать модель в лучшем виде, чем она изучается на уровне рентгено-структурного анализа белка и тем более, что ее можно предположить такого рода исследованиям, сокращая тем самым затраты на исследования. Последнее положение особенно касается исследований в области биомедицины и проектировании лекарств а также лигандов и пептидов. В этой связи огромная доля исследований переместилась в область методологии протеомики . анализ протеолитических фрагментов, гидрофильно-гидрофобных взаимодействий белков с микросубстратами своего окружения, с Кп мембраной и поверхностью биореакторов в биотехнологическом производстве (Rubing,1997) биодетекторы (Moore et al. 1997), биосенсоры (Kumamarut et al.1998) и направленного транспорта лекарственных веществ в область патологического повреждения Кп и тканей(Pai et al. 1996). На примере белка Fn показана практическая палитра возможностей КП использовать их в этом качестве и указаны феноменальные условия при которых КП могут быть использованы, как инструментальное средство решения практических задач белковой инженерии - области практического применения биоинформатики

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1176>

**RESEARCH PHYSICAL AND CHEMICAL PROPERTIES FIBRONECTIN BOVINUM TOOLS OF COMPUTER PROGRAMS INFORMAX SUIT 8 AND CLC PROTEIN**

**Ovcharuk I.N., Fedotov A.V.**

Kemerovo State Medical Academy

Not looking at that many principles and the purposes for a direction of researches discussed by us - bio-engeniering albuminous frames, remain in many respects declarative nevertheless some successes gradually become more and more obvious. So by means of КП InforMax and CLC Protein principles of the organisation of albuminous frames in the evolutionary plan became in many respects more clear and their use has led powerful enough contribution to knowledge of albuminous frames and their regional frame. Other range which we discuss in the report-it possibility by means of PK modelling of proteins to investigate model in the best possible way, than it is studied at level of rentgeno-structural analysis of protein and the more so, that it is possible to premise such исследованиям, reducing thereby expenses for researches. Last position especially concerns researches in the field of biomedicine and designing of medicines and also ligands and peptides. Thereupon a huge lobe of researches migration in methodology range proteomics - analysis proteolytic fragments, it is hydrophilic-hydrophobic interactions proteins with microsubstrata of the environment, with Кп a membrane and a surface of bioreactors in biotechnological effecting (Rubing, 1997) biodetectors (Moore et al. 1997), biosensors (Kumamarut et al.1998) and the directed transport of medicinal materials in range of pathological damage Кп and fabrics (Pai et al. 1996). On protein Fn example the practical palette of possibilities PK is shown to use them in this quality and be specified phenomenal conditions at which PK can are used, as tool means of the decision of practical problems of albuminous engineering - ranges of practical application of biocomputer science

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1176](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1176)

**КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ  
ТЕРМИЧЕСКОЙ ПЕРЕГРУППИРОВКИ  $\alpha$ ,  $\gamma$ -  
ДИМЕТИЛАЛЛИЛОВОГО ЭФИРА ОРТО-  
МЕТОКСИФЕНОЛА**

**Митягин Д.Н., Надыршина Е.В., Шорникова Е.Д.,  
Ключарева Е.В., Кантор Е.А.**

Уфимский государственный нефтяной технический  
университет

Установлено, что термическая перегруппировка  $\alpha$ ,  $\gamma$ -диметилаллилового эфира орто-метоксифенола проходит с образованием 6- и 4-( $\alpha$ ,  $\gamma$ -диметилаллил)-2-метоксифенолов в соотношении 4:1. Проведено квантовохимическое исследование (B3PW91/6-31G(d)) возможных маршрутов образования продуктов реакции. Выявлено, что перегруппировка  $\alpha$ ,  $\gamma$ -диметилаллилового эфира орто-метоксифенола зависит как от кинетических, так и термодинамических факторов, что обуславливает появление в продуктах реакции как 6-( $\alpha$ ,  $\gamma$ -диметилаллил)-2-метоксифенола, так и 4-( $\alpha$ ,  $\gamma$ -диметилаллил)-2-метоксифенола

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1164>

**QUANTUM CHEMISTRY STUDY OF THE THERMAL  
REARRANGEMENT  $\alpha$ ,  $\gamma$ -DIMETHYLALLYL ETHER  
OF THE ORTHO-METHOXYPHENOL**

**Mityagin D.N., Nadyrshina E.V., Shornikova E.D.,  
Klyuchareva E.V., Kantor E.A.**

Ufa State Technical Oil University

It is installed that thermal rearrangement  $\alpha$ ,  $\gamma$ -dimethylallyl ether of the ortho-methoxyphenol passes with formation 6- and 4-( $\alpha$ ,  $\gamma$ -dimethylallyl)-2-methoxyphenol in correlation 4:1. It is organized quantum chemistry study (B3PW91/6-31G(d)) possible route forming the products of reaction. It is revealed that reaction is checked as kinetic, so and thermodynamic factor, as depend on the appearance in product of the reactions as 6-( $\alpha$ ,  $\gamma$ -dimethylallyl)-2-methoxyphenol, so and 4-( $\alpha$ ,  $\gamma$ -dimethylallyl)-2-methoxyphenol

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1164](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1164)

**О ВОЗМОЖНОСТЯХ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ  
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ ДЛЯ  
БЕЗЭТАЛОННОГО АНАЛИЗА ОРГАНИЧЕСКИХ  
СОЕДИНЕНИЙ, СОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОАТОМЫ**

**Потешный Д.И., Павлючко А.Н.**

Институт геохимии и аналитической химии им.  
В.И.Вернадского РАН

Проведены квантово-химические расчеты спектров для основной и ближней ИК области для более чем 40 гетероатомных молекул. Наилучшее совпадение с экспериментальными спектрами получено при использовании базиса ccpVQZ в MP2 приближении

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1163>

**ON POSSIBILITY OF USING QUANTUM-CHEMICAL  
CALCULATIONS FOR REFERENCE-FREE ANALYSIS  
OF ORGANIC COMPOUNDS CONTAINING  
HETEROATOMS**

**Poteshniy D.I., Pavlyuchko A.N.**

Institute of geochemistry and analytical chemistry of  
V.I.Vernadskogo RAN

Quantum chemical calculations of the spectra for main and near infrared regions have been taken for more than 40 heteroatomic molecules.

The best coincidence with the experimental spectra has been obtained with the ccpVQZ basis set in the MP2 approximation

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1163](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1163)

**О НЕКОТОРЫХ ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫХ  
ВОЗМОЖНОСТЯХ ПЛП-ПОИСКА**

**Статников И.Н., Фирсов Г.И.**

Институт машиноведения им. А.А.Благонравова РАН

Рассмотрены различные варианты построения матриц планируемых экспериментов (МПЭ), с помощью которых оказывается возможным при заданной вероятности получаемых оценок привести анализ свойств исследуемой математической модели к анализу те же свойств, но в зависимости в среднем от каждого варьируемого параметра. Рассматриваются случаи формирования МПЭ как с одинаковыми, так и с различным числом уровней по каждому параметру

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1172>

**О НЕКОТОРЫХ ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫХ  
ВОЗМОЖНОСТЯХ ПЛП-ПОИСКА**

**Statnikov I.N., Firsov G.I.**

A.A. Blagonravov Mechanical Engineering Research  
Institute of Russian Academy of Sciences

Are examined the diverse variants of the construction of the matrices of the planned experiments (MPE), with the aid of which it proves to be possible with the given probability of the obtained estimations to lead the analysis of the properties mathematical of the model to the analysis being investigated the same of properties, but the dependence on the average on each varied parameter. Are considered the cases of formation MPE as with the identical, so also with different number of levels for each parameter

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1172](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1172)

**О ПРИМЕНЕНИИ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ  
ПОВЫШЕНИЯ УСТОЙЧИВОСТИ РАБОТЫ  
ИСКУССТВЕННОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ В  
ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧАХ**

**Федотов И.Е.**

Московский государственный институт радиотехники,  
электроники и автоматики (ТУ)

Рассмотрена задача повышения устойчивости работы искусственной нейронной сети в условиях избыточности ее параметров. Избыточность параметров, внесенная на этапе выбора конфигурации, в большинстве случаев присутствует в обученной сети вследствие отсутствия четких правил выбора ее конфигурации. Вследствие этого может возникать неадекватное поведение сети при подаче входных данных, не встречавшихся в обучающей выборке. Показано, как на основе метода Монте-Карло может быть повышена устойчивость работы сети в случае зашумленных входных данных

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1181>

**USING MONTE-CARLO METHOD FOR INCREASE OF  
ARTIFICIAL NEURAL NETWORK STABILITY IN  
APPLICATIONS**

**Fedotov I.E.**

Moscow State Institute of Radio Engineering, Electronics,  
Engineering and Automatics

The task of increase of artificial neural network stability is considered in conditions of network redundancy. Network parameters redundancy is present in most cases in a learned neural network because of absence of clear rules for choosing of network configuration. As a consequence, there can be a non-adequate network behavior in case of input data that were not foreseen on the stage of network learning. Described an approach to increase of neural network stability in such cases, which can be very useful for noised data analysis. The approach is based on Monte-Carlo method

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1181](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1181)

**РАЗРАБОТКА СТРУКТУРНОЙ КЛАССИФИКАЦИИ  
АЛЬФА/БЕТА-БЕЛКОВ, СОДЕРЖАЩИХ  
СЕМИСЕКМЕНТНЫЕ АЛЬФА/БЕТА-МОТИВЫ**

**Гордеев А.Б., Ефимов А.В.**

Институт белка РАН

Разработана современная иерархическая классификация альфа/бета-белков, содержащих семисекментные альфа/бета-мотивы. В её основу положено построенное для данной группы белков структурное древо. База данных содержит 870 белков и доменов, из них неомологичных – 294, а построенное структурное древо включает в себя 310 укладок цепи, из которых 85 – обнаружено в белках. Вся информация о базе данных и структурном древе этого класса белков доступна в Интернете по адресу: <http://strees.protres.ru>

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1152>

**ELABORATION OF STRUCTURAL CLASSIFICATION  
OF PROTEINS CONTAINING SEVEN-SEGMENT  
ALFA/BETA-MOTIFS**

**Gordeev A.B., Efimov A.V.**

Institute of Protein Research of Russian Academy of  
Sciences

A modern hierarchical classification of alpha/beta proteins with seven-segment alpha/beta motifs has been developed based on a structure tree built specially for this group of proteins. The database is formed of 870 proteins and domains, including 294 nonhomologous ones. The structure tree includes 310 chain folds, of which 85 are found in proteins. For the complete information about the database and structure tree of this protein class go to the Web-site: <http://strees.protres.ru>

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1152](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1152)

**РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ТРОЙНЫХ  
СИСТЕМ**

**Сатгараев А.Н., Николаев В.Ф., Султанова Р.Б.**

Казанский государственный технологический  
университет

Экспериментальное определение термодинамических характеристик в тройных системах значительно более трудоемко, чем в бинарных. Поэтому большой практический интерес имеет возможность приближенной оценки термодинамических свойств трехкомпонентной системы на основе данных соответствующих бинарных систем. Сопоставление результатов расчета с данными эксперимента необходимо для анализа специфических межмолекулярных взаимодействий между компонентами тройной системы, а также выяснения особенностей ведущих к сильным отклонениям системы от идеального поведения

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1202>

**CALCULATION OF THE THERMODYNAMIC TERNARY  
SYSTEMS**

**Satgaraev A.N., Nikolaev V.F., Sultanova R.B.**

The Kazan state technological university

Experimental determination of the thermodynamic characteristics in ternary systems is more laborious than in binary ones. This is why the possibility of a tentative estimate of the thermodynamic characteristics of the ternary system based on the corresponding binary system data is of keen practical interest.

The comparison of the calculations with the experimental data is necessary for the analysis of the specific intermolecular interactions between the components of the ternary system and also for the identification of the features which lead to the strong deviation of the system from error-free behavior

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1202](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1202)

**РАСЧЕТЫ В АТОМНОЙ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ  
ФИЗИКЕ НА ОСНОВЕ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ  
РАССЕЯНИЯ В СИСТЕМЕ НЕСКОЛЬКИХ ТЕЛ****Позднеев С.А.**

Физический институт им.П.Н.Лебедева РАН

Рассматривается приближение в системе нескольких тел для расчетов различных процессов а атомной, молекулярной и химической физике

<http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper.php?p=1194>

**FEW-BODY APPROXIMATION IN ATOMIC AND  
MOLECULAR PHYSICS****Pozdneev S.A.**

P.N.Lebedev Physical Institute of Russian Academy of Sciences

Few-body approximation in atomic,molecular and chtvbcfk physics are disscased

[http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper\\_e.php?p=1194](http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper_e.php?p=1194)

**ЭВОЛЮЦИОННЫЙ АЛГОРИТМ ПОИСКА  
АЛЬТЕРНАТИВНЫХ ПРОЕКТНЫХ РЕШЕНИЙ****Смирнов В.В.**

Бийский технологический институт

Разработан соответствующий генетический алгоритм. Работа алгоритма представляет собой итерационный процесс. В каждом поколении реализуется отбор хромосом пропорционально приспособленности. Алгоритм использует многоточечные операторы кроссовера и мутации. Реализована возможность выбора используемого для воспроизводства числа хромосом. При проведении численных экспериментов достигнуты хорошие показатели конвергенции поколений при различном числе участвующих в воспроизводстве хромосом

<http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper.php?p=1203>

**EVOLUTIONARY ALGORITHM OF ALTERNATIVE  
DESIGN DECISIONS SEARCH****Smirnov V.V.**

Biysk Tehnological Institute

The corresponding genetic algorithm is developed. Algorithm work represents iterative process. In each generation selection of chromosomes of proportionally fitness is realised. The algorithm uses multidot operators of crossover and mutations. Possibility of a choice of number of chromosomes used for reproduction is realised. At carrying out of numerical experiments good indicators of convergence of generations are reached at various number of chromosomes participating in reproduction

[http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper\\_e.php?p=1203](http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper_e.php?p=1203)

## СЕКЦИЯ 6

### ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ И ТЕХНОЛОГИИ (ПРИНЯТИЕ РЕШЕНИЙ, ЭКСПЕРТНЫЕ СИСТЕМЫ И Т.Д.)

## SECTION 6

### INTELLIGENCE SYSTEMS AND TECHNOLOGIES (DECISION-MAKING, EXPERT SYSTEM ETC.)

**АВТОМАТИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ПОДБОРА ЭМУЛЬГАТОРА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ШАМПУНЕЙ**  
**Погребняк А.В., Вотинцев Н.П., Погребняк Л.В.**  
 Пятигорская государственная фармацевтическая академия

**AUTOMATION OF THE PROCESS OF EMULSIFIER SELECTION IN SHAMPOO PRODUCTION**  
**Pogrebnyak A.V., Votintsev N.P., Pogrebnyak L.V.**  
 Pyatigorsk State Pharmaceutical Academy

Подбор оптимального эмульгатора при разработке состава лечебных и иных шампуней представляет собой сложную практическую задачу. Последняя становится особенно сложной, если в состав шампуня входят биологически активные вещества (БАВ). Поверхностно активные соединения (ПАВ) и другие традиционные компоненты шампуней создают достаточно агрессивную химическую среду и принятию решения о включении в шампунь тех или иных БАВ должен предшествовать этап доказательства взаимной совместимости химических компонентов

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1201>

The selection of an optimal emulsifier in the development of the compositions of medicated and other shampoos seems a challenging practical task, which becomes even more complicated in case of the presence of biologically active additives (BAA) in their composition. Since surfactants (SA) and other traditional components in composition of shampoos create a rather aggressive chemical medium, the decision on the introduction of these or those BAA into the shampoos should be anticipated by proving that all the chemical components are mutually compatible

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1201](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1201)

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ САНИТАРНО-ЭПИДЕМИОЛОГИЧЕСКИХ РАССЛЕДОВАНИЙ ВСПЫШЕК ОСТРЫХ КИШЕЧНЫХ ИНФЕКЦИЙ**  
**Габусу П.А., Чикова С.С., Михеев О.В.**  
 ЗАО НВК "ВИСТ"

**USAGE OF COMPUTER TECHNOLOGIES FOR INCREASE OF EFFECTIVENESS OF SANITARY-HYGIENIC INVESTIGATION OF ACUTE ENTERIC INFECTIVE EPISODE**

**Gabusu P.A., Chikova S.S., Mikheyev O.V.**  
 ZAO NVK "VIST"

Автоматизированная система предназначена для обработки информации, получаемой при расследовании причин возникновения вспышек острых кишечных инфекций. Состоит из подсистемы сбора данных, подсистемы статистической обработки данных и подсистемы базы знаний. Подсистема сбора данных включает модули: «Регистрационные данные», «Жалобы и симптомы», «Сведения эпидемиологического анамнеза», «Продукты питания». Использование автоматизированной системы позволяет повысить оперативность и достоверность анализа данных для установления основных детерминант эпидемического процесса, минимизировать риск искажения информации и сократить время принятия управленческих решений

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1212>

Automation system is used to investigate reason of acute enteric infective episode appearance information processing. It consists of data collection subsystem, statistical data processing subsystem and knowledge base subsystem. Data collection subsystem includes modules: "Registration data", "Complaints and symptoms", "Epidemiological anamnesis data", "Victual". Automation system usage makes it possible to increase operability and trustworthiness of data analysis for identification of main determinant of epidemic process, minimize information distortion risk and reduce managerial decision time

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1212](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1212)

**МОНИТОРИНГ СБОЕВ И НЕСООТВЕТСТВИЙ В РАБОТЕ ОРБИТАЛЬНОГО КОМПЛЕКСА КАК СОСТАВНАЯ ЧАСТЬ МЕНЕДЖМЕНТА РИСКА КОСМИЧЕСКИХ СИСТЕМ****Михеев О.В., Черленяк Н.Н., Волков О.В.  
ЗАО НВК "ВИСТ"**

В статье приведен краткий анализ современных требований к организации менеджмента риска космических систем. Показана целесообразность использования в процессе мониторинга риска автоматизированных систем, обозначены их задачи и возможности. Представлены результаты анализа данных о несоответствиях или сбоях в работе оборудования и оценочный прогноз их количества в краткосрочной и долгосрочной перспективе

<http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper.php?p=1211>

**MONITORING OF FAILURES IN WORK OF THE ORBITAL COMPLEXES AS A COMPONENT MANAGEMENT OF RISK OF SPACE SYSTEMS****Mikheyev O.V., Cherlenyak N.N., Volkov O.V.  
ZAO NVK "VIST"**

This paper contains a brief analysis of modern requirements to organization of management of space systems risk. Reasonability of usage of automation systems risk in monitoring process is shown and its problems and facilities are indicated. Results of analysis of data of failures in work of equipment and evaluation forecast of its quantity in short-term and long-term prospect are presented

[http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper\\_e.php?p=1211](http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper_e.php?p=1211)

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ АБСОЛЮТНОЙ КОНФИГУРАЦИИ ХИРАЛЬНЫХ ЦЕНТРОВ В ОДНО- И ДВУХАТОМНЫХ СПИРТАХ С ПОМОЩЬЮ МТРА****Тюмкина Т.В., Парфёнова Л.В., Берестова Т.В., Халилов Л.М.**

Институт нефтехимии и катализа РАН

Для создания адекватной модели при определении абсолютной конфигурации оптически активных спиртов 2-этил-1-гексанола (1) и 2-бутил-1,4-бутандиола (2) проведён конформационный анализ МТРА и МТРА их эфиров с помощью квантовохимических расчётов на DFT-уровне (PBE/3 $\xi$ , Priroda 6.0). Установлено, что в исходной R-МТРА син- и анти-перипланарные относительно связей C<sub>α</sub>OMe и C=O конформеры являются минимумами на ППЭ, а в МТРА эфирах обнаружено энергетическое преимущество конформеров sp/ap/ap (по связям CO-O, O-C<sub>1</sub> и C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>). В результате показана применимость МТРА для определения абсолютной конфигурации 2-этилзамещенных моноолов и 1,4-диолюв, так как только в данной конформации возможно влияние ароматического заместителя. Экспериментальное подтверждение получено с помощью ДЯМР и относительных углов вращения

<http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper.php?p=1200>

**THE ASSIGNMENT OF CHIRAL CENTER ABSOLUTE CONFIGURATION IN B-CHIRAL MONO- AND DIOLS WITH MTPA REAGENT****Tumkina T.V., Parfenova L.V., Berestova T.V., Halilov L.M.**

Institute of Petrochemistry and Catalysis of Russian Academy of Sciences

To create an adequate model for the determination of the absolute configuration of optically active alcohols such as 2-ethyl-1-hexanol (1) and 2-butyl-1,4-butandiol (2) a conformational analysis of MTPA and MTPA of their ethers has been performed based on DTF-quantum-chemical calculations (PBE/3 $\xi$ , Priroda 6.0). It has been stated that in the initial R-MTPA syn- and anti-periplanar (relative to C<sub>α</sub>OMe and C=O-bonds) conformers are positioned in the minimums of PES, while in MTPA of ethers the energetic prevalence of sp/ap/ap (which correspond to CO-O, O-C<sub>1</sub> and C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>-bonds) conformers has been found. As a result MTPA has been shown to be well applicable for the determination of the absolute configuration of 2-ethyl-substituted monools and 1,4-diols due to the influence of an aromatic substituent possible only in this conformation. DNMR and relative rotation angle techniques have conformed the results experimentally

[http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper\\_e.php?p=1200](http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper_e.php?p=1200)

**СРАВНИТЕЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПАКЕТОВ ПРИКЛАДНЫХ ПРОГРАММ КВАНТОВОЙ ХИМИИ****Позднеев С.А.**

Физический институт им.П.Н.Лебедева РАН

Представлены основные достоинства и недостатки основных пакетов программ, применяемых для квантомеханических расчетов

<http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper.php?p=1196>

**COMPARATIVE CHARACTERISTICS OF APPLICATION PROGRAM PACKAGES FOR QUANTUM CHEMISTRY****Pozdneev S.A.**

P.N.Lebedev Physical Institute of Russian Academy of Sciences

The main merits and drawbacks of basic application program packages used for quantum-mechanical calculations have been presented

[http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper\\_e.php?p=1196](http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper_e.php?p=1196)

**СЕГМЕНТАРНОЕ УПРАВЛЕНИЕ ЗАТРАТАМИ В СИСТЕМЕ ДИРЕКТ-КОСТИНГ****Семенова Д.А., Вовк О.С.**

Донецкий национальный университет

**A SEGMENT MANAGEMENT BY EXPENSES IN THE DIRECT-COSTING SYSTEM****Semenova D.A., Vovk O.S.**

Donetsk National University

Рассмотрены некоторые особенности современных механизмов, обеспечивающих действенную систему управления затратами предприятий Украины путем разделения затрат по центрам их возникновения и центрам ответственности. Проанализированы основные факторы, влияющие на децентрализацию управления затратами и распределение соответствующих полномочий путем делегирования их разным уровням управления по аналогии с разработанной моделью коммуникационных связей процесса бюджетирования. При этом подчеркивается важная роль ИТ-методов, которые не только позволяют проанализировать экономическую ситуацию для каждого конкретного случая с учетом сколь угодно большого числа различных факторов и параметров, но и во много раз уменьшают время, необходимое для этого

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1191>

Some features of modern mechanisms, providing effective control the system by the expenses of enterprises of Ukraine by the division of expenses on the centers of their origin and centers of responsibility are considered. Basic factors, influencing on decentralization of management expenses and distributing of the proper plenary powers by delegation their different levels of management by analogy with the developed model of communication connections of process of budgeting, are analysed. In this case IT-methods have very important role. IT-methods allow analyzing an economic situation for every concrete case with an account very large number of different factors and parameters and minimize time necessary for it

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1191](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1191)

## СЕКЦИЯ 8

### ДОКЛАДЫ, НЕ ВОШЕДШИЕ В ОСНОВНЫЕ СЕКЦИИ

## SECTION 8

### THE REPORTS, WHICH ARE NOT INCLUDED IN THE BASIC SECTIONS

#### **БАРЬЕРЫ ИНВЕРСИИ ЦИКЛА 2,4-ДИМЕТИЛ-1,3-ДИОКСАНА**

**Шорников Д.В., Горбунова Н.В., Паукова И.С., Кантор Е.А.**

Уфимский государственный нефтяной технический университет

Методом ВЗPW91/6-31G\*\* рассчитаны барьеры инверсии цикла 2,4-диметил-1,3-диоксана. Определены энергии стационарных точек и переходных состояний на пути инверсии. Барьер аксиально-экваториальной изомерии составляет 12,0-13,95 ккал/моль

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1169>

#### **BARRIERS OF INVERSION OF A CYCLE OF 2,4-DIMETHYL-1,3-DIOXANE**

**Shornikov D.V., Gorbunova N.V., Isyakaeva E.B., Kantor E.A.**

Ufa State Technical Oil University

The method ВЗPW91/6-31G\*\* designs barriers of inversion of a cycle of 2,4-dimethyl-1,3-dioxane. Energy of stationary points and transitional states is determined on way of inversion. The barriers of axial-equatorial isomerization are defined 12,0-13,95 kkal/mol

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1169](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1169)

#### **ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОПОЛОС**

**Свечников А.Б.**

Российский научный центр "Курчатовский Институт"

Результаты неэмпирических расчетов систем, состоящих из двух углеродных нанополос, свидетельствуют о высокой химической активности последних. В результате минимизации полной энергии получены наночастицы со структурой нанотрубок и наножелобов

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1174>

#### **CARBON NANOSTRIPE INTERACTIONS**

**Svechnikov A.B.**

The Russian Research Centre Kurchatov Institute

The results of ab initio calculations demonstrated high chemical activity of the systems formed by two carbon nanostripes. Some nanoparticles with nanotube and channeled structures were obtained after the procedure of total energy minimization

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1174](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1174)

#### **К ВОПРОСУ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВЕЛИЧИНЫ ЧЕЛОВЕЧЕСКОГО КАПИТАЛА ПРЕДПРИЯТИЙ**

**Ревуцкий Л.Д.**

Информационное агентство "ИВИС"

Рассмотрены понятие, термины и показатели человеческого капитала предприятий. Различаются показатели живого и совокупного человеческого капитала предприятия, предлагаются методы расчета величины этих показателей. Особое внимание в статье уделено вопросу номенклатуры и определения величины показателей результативности и эффективности использования человеческого капитала на предприятиях. В числе приоритетных показателей принятой номенклатуры названы показатели отдачи и рентабельности человеческого капитала предприятий, а также уровень использования их социального потенциала, исчисляемого по соответствующим стоимостям привлекаемого труда. Мониторинг и контроль этих показателей позволяет руководству предприятий принимать обоснованные, высокоэффективные управленческие решения

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1134>

#### **TO THE PROBLEM OF HUMAN CAPITAL ASSETS SIZING**

**Revuckiy L.D.**

Information agency "EVIS"

The notion, terms and parameters of human capital assets have been considered.

The parameters of living and cumulative human capital assets are specified, and the methods for their calculation are suggested. Special attention has been given to the problem of nomenclature and the assessment of the value of the performance indicator and the measure of efficiency of human capital assets at enterprises.

Among the priorities of the accepted nomenclature are output indicator and profitability ratio of the human capital assets as well as the level of utilization of their social potential calculated from the corresponding labor costs. By monitoring and controlling these parameters the executive management of the enterprises can take well-grounded and highly efficient managerial decisions

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1134](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1134)

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ  
ВОЗМОЖНЫХ ПУТЕЙ МИГРАЦИИ ВОДОРОДА В  
КАРБЕНИЕВОМ ИОНЕ 2-МЕТИЛ-1,3-ДИОКСАНА**  
Шорников Д.В., Никитин С.П., Никитина А.П.,  
Кантор Е.А.

Уфимский государственный нефтяной технический университет

Методом DFT (B3PW91) в комбинации с базисом 6-31G(d,p) смоделирован процесс превращения оксониевого иона молекулы 2-метил-1,3-диоксана в карбениевый ион. Изучены возможные пути внутримолекулярной миграции водорода и определены энергетические барьеры этих переходов  
<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1170>

**QUANTUM-CHEMICAL RESEARCH OF POSSIBLE  
WAYS OF MIGRATION OF HYDROGEN IN  
CARBENIUM ION OF 2-METHYL-1,3-DIOXANE**  
Shornikov D.V., Nikitin S.P., Nikitina A.P.,  
Kantor E.V.

Ufa State Technical Oil University

Method DFT (B3PW91) in a combination with basis 6-31G(d,p) simulates transformation process of oxsonievuy ion of molecule 2-methyl-1,3-dioxane in carbenium ion. Explore possible ways of intramolecular migration of hydrogen and identifies energy barriers of these transitions  
[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1170](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1170)

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ  
ВОЗМОЖНЫХ ПУТЕЙ МИГРАЦИИ ВОДОРОДА В  
КАРБЕНИЕВОМ ИОНЕ 2,5-ДИМЕТИЛ-1,3-  
ДИОКСАНА**

Шорников Д.В., Никитина А.П., Никитин С.П.,  
Кантор Е.А.

Уфимский государственный нефтяной технический университет

Методом DFT (B3PW91) в комбинации с базисом 6-31G(d,p) смоделирован процесс превращения оксониевого иона молекулы 2,5-диметил-1,3-диоксана в карбениевый ион. Изучены возможные пути внутримолекулярной миграции водорода и определены энергетические барьеры этих переходов  
<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1171>

**QUANTUM-CHEMICAL RESEARCH OF POSSIBLE  
WAYS OF MIGRATION OF HYDROGEN IN  
CARBENIUM ION OF 2,5-DIMETHYL-1,3-DIOXANE**

Shornikov D.V., Nikitina A.P., Nikitin S.P.,  
Kantor E.V.

Ufa State Technical Oil University

Method DFT (B3PW91) in a combination with basis 6-31G(d,p) simulates transformation process of oxsonievuy ion of molecule 2,5-dimethyl-1,3-dioxane in carbenium ion. Explore possible ways of intramolecular migration of hydrogen and identifies energy barriers of these transitions  
[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1171](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1171)

**НОВЫЙ МЕТОД ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ МОЛЕКУЛ  
БИОПОЛИМЕРОВ**  
Позднеев С.А.

Физический институт им.П.Н.Лебедева РАН

Предложен принципиально новый метод химической связи молекул биополимеров, основанный на эффекте возникновения специфического многочастичного взаи-модействия, при условии малости энергии связи между кластерами этой системы  
<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1199>

**NEW METHOD OF CHEMICAL BONDING BETWEEN  
BIOPOLYMER MOLECULES**  
Pozdneev S.A.

P.N.Lebedev Physical Institute of Russian Academy of Sciences

A conceptually new method of chemical bonding between biopolymer molecules has been proposed based on the effect of the emergence of specific many-body interaction, provided that the binding energies between the clusters of this system are low  
[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1199](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1199)

**ПОСТАНОВКА И РЕШЕНИЕ НЕКОТОРЫХ  
ОПТИМИЗАЦИОННЫХ ЗАДАЧ ПРЕПАРАТИВНОЙ  
ЖИДКОСТНОЙ ЭЛЮЕНТНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ В  
ТЕРМИНАХ ПРОБЛЕМЫ МОМЕНТОВ****Трехонин С.В.**

ОАО «Государственный научный центр – Научно-исследовательский институт атомных реакторов»

В терминах проблемы моментов предложен общий подход к теоретическому исследованию оптимизационных задач возникающих в препаративной хроматографии.

В рамках предлагаемого подхода сформулированы интересные с точки зрения практики задачи определения оптимальной длины колонки и размера пробы.

Предложен метод решения поставленных задач, основанный на преобразовании Джонсона. Метод реализован программно в виде компонента SPO комплекса RadioChrom. Работоспособность SPO продемонстрирована на примере разделения смеси самария и европия

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1155>

**DEFINITION AND SOLUTION OF SOME  
OPTIMIZATION PROBLEMS OF PREPARATIVE  
LIQUID ELUTION CHROMATOGRAPHY IN TERMS OF  
THE MOMENT PROBLEM****Trekhonin S.V.**

JSC "State Scientific Center Research Institute of Atomic Reactors"

A general approach to the theoretical investigation of the optimization problems arising in preparative chromatography has been proposed in terms of the moment problem.

Interesting in practical terms problems of the determination of the optimum column length and sample size have been formulated within the frames of the approach described.

A Johnson transform method has been suggested for the solution of the problems set. The method has been programmed as an SPO component of the RadioChrom complex. The SPO efficiency has been demonstrated in the process of the separation of samarium and europium

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1155](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1155)

**РАСЧЕТ ТЕРМОХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК  
ПРОИЗВОДНЫХ ТИОФЕНА****Зауэр Е.А.**

Волгоградский государственный технический университет

С помощью полуэмпирических квантово-химических методов PM3, MINDO, AM1 и MNDO, входящих в программный пакет MOPAC, рассчитаны энтальпии образования производных тиофена. Сравнение вычисленных значений с экспериментальными данными показало, что они хорошо между собой коррелируют и могут быть описаны с помощью уравнений линейной регрессии. Эти уравнения могут быть использованы для прогнозирования энтальпий образования производных тиофена

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1157>

**CALCULATION OF THERMOCHEMICAL  
CHARACTERISTICS OF DERIVATIVES THIOPHENE****Sauer E.A.**

Volgograd State Technical University

By means of semiempirical quantum chemical methods PM3, MINDO, AM1 and MNDO, entering into software package MOPAC, are calculated heats of formations of derivatives thiophene. Comparison of the calculated values with experimental data has shown that they well among themselves correlate and can be described by means of the equations of linear regress. These equations can be used for forecasting enthalpy of formations of derivatives thiophene

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1157](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1157)

**РЕАКТОМ ФИБРОНЕКТИНА****Федотов А.В.**

Кемеровская государственная медицинская академия

В 2008 году появившиеся сообщения о достаточно доступных путях расшифровки сигнальных путей для отдельно взятой молекулы вызвали восхищение исследователей в области биоинформатики. В конце 2009 года мы свободно разговариваем на тему визуализации геномных взаимодействий для любой молекулы и можем развивать на уровне моделей для клетки развитие процессов (биологических реакций) для любого самого сложного взаимодействия в отношениях белок-белок, клетка – клетка клетка-рецептор и т.д

<http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper.php?p=1209>

**REACTOME FIBRONECTIN DATABASE****Fedotov A.V.**

Kemerovo State Medical Academy

In 2008 the ravishing attention of the researchers in the field of bioinformatics was drawn to the information about fairly accessible ways of signal path decoding for an individual molecule. As early as in the end of 2009 we feel at ease discussing the topic of visualization of genome interaction in any molecule. Using cell models we can even simulate processes (biological reactions) for any interactions including the most complex ones, such as protein-protein, cell-cell, cell-receptor interactions, etc

[http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper\\_e.php?p=1209](http://www.ivtn.ru/2009/conf/enter/paper_e.php?p=1209)

### СОВРЕМЕННЫЕ НАУЧНЫЕ ПОДХОДЫ К ПОНИМАНИЮ ЖИВОЙ И НЕЖИВОЙ МАТЕРИИ

**Королев А.С.**

Московский государственный институт радиотехники,  
электроники и автоматики (ТУ)

В докладе анализируются определения живой материи, существующие в физике, биологии, генетике. Показывается, на что, в первую очередь, в понимании живой материи обращают внимание ученые различных областей науки. Предпринимается попытка сформировать по результатам анализа такое определение живой материи, в котором учитывались бы принципиальные особенности живого, специфицирующие его и отличающие от неживого. Также в докладе показывается, какие из приведенных особенностей живого можно моделировать при помощи современной физики и математики. Обсуждаются возможности квантовой физики и р-адической математической физики для моделирования иерархичности и самовоспроизведения живых систем, а также наличия у них сознания

<http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper.php?p=1193>

### THE MODERN SCIENTIFIC APPROACHES TO UNDERSTANDING OF LIVING AND NONLIVING MATTER

**Korolev A.S.**

Moscow State Institute of Radio Engineering, Electronics,  
Engineering and Automatics

The definitions of living and nonliving matter are given in this report from the points of view of physicists, biologists, and geneticists. The focus of the scientists' attention in respect of understanding of living matter is shown. An attempt is made to give a complex definition of living matter based on the analysis. The main specifying and distinguishing features of living matter as opposed to nonliving matter are indicated.

The features of living matter are also listed in the report that can be simulated by means of modern physics and mathematics. The possibilities of quantum physics and p-adic mathematical physics in the simulation of hierarchy and self-reproduction of living systems are discussed along with the presence of consciousness in them

[http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper\\_e.php?p=1193](http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper_e.php?p=1193)

### ТЕОРИЯ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ Позднеев С.А.

Физический институт им.П.Н.Лебедева РАН

Рассматривается теория химических реакций на основе квантовой теории в системе нескольких тел

<http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper.php?p=1195>

### THEORY OF CHEMICAL REACTIONS Pozdneev S.A.

P.N.Lebedev Physical Institute of Russian Academy of  
Sciences

Few body quantum theory of scattering applied for the theory of chemical reactions

[http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper\\_e.php?p=1195](http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper_e.php?p=1195)

### ЭЛЕКТРОННЫЙ ПЕРЕНОС И ДИССИПАЦИЯ ЭНЕРГИИ

**Клюев С.А.**

Волжский политехнический институт

Моделировался перенос электронов между анионами и молекулами, сопряженный с акцептированием образовавшихся радикалов растворителем. Энергетический эффект процесса акцептирования радикалов повышал реакционную способность частиц в реакциях электронного переноса

<http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper.php?p=1161>

### ELECTRON TRANSFER AND ENERGY DISSIPATION

**Klyuev S.A.**

Volga Polytechnic Institute

The electron transfer between anions and molecules, connecting with acceptance of formed radicals by solvent was modeled. An energy effect of the radical acceptance increased the electron transfer reactivity of the particles

[http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper\\_e.php?p=1161](http://www.ivtn.ru/2009/confs/enter/paper_e.php?p=1161)

**СОДЕРЖАНИЕ****CONTENTS****ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ  
В НАУКЕ****COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENCE****СЕКЦИЯ 1**

Общие проблемы и перспективы использования информационных и компьютерных технологий в науке

**SECTION 1**

General problems and prospects of computer applications in science

**6****СЕКЦИЯ 2**

Компьютерные вычисления, их организация (сети и параллельные вычисления)

**SECTION 2**

Computing and computing management  
(networks and parallel computation)

**7****СЕКЦИЯ 3**

Моделирование, численные эксперименты

**SECTION 3**

Computer simulation

**10****СЕКЦИЯ 4**

Визуализация в научных исследованиях

**SECTION 4**

Visualization in scientific researches

**14****СЕКЦИЯ 5**

Обработка данных, базы данных, анализ данных

**SECTION 5**

Data processing, databases and data analysis

**17****СЕКЦИЯ 6**

Интеллектуальные системы и технологии (принятие решений, экспертные системы и т.д.)

**SECTION 6**

Intelligence systems and technologies (decision-making, expert system etc.)

**22****СЕКЦИЯ 8**

Доклады, не вошедшие в основные секции

**SECTION 8**

The reports, which are not included in the basic sections

**25**



## ЗАЯВКА НА УЧАСТИЕ В РАБОТЕ ИВТН-2010

Для принятия участия в работе конференции заполните и направьте, пожалуйста, в оргкомитет ИВТН.ru форму заявки.

Тезисы и/или расширенный доклад перешлите по адресу: [org@ivtn.ru](mailto:org@ivtn.ru)

Вы можете заполнить эту форму на сайте по адресу: <http://www.ivtn.ru/application.html>

<b>Фамилия:</b>	
<b>Имя-Отчество:</b>	
<b>Организация:</b>	
<b>Подразделение:</b> (факультет, отдел, лаборатория)	
<b>Должность:</b>	
<b>Ученая степень:</b>	
<b>Телефон:</b>	
<b>Факс:</b>	
<b>E-mail:</b>	
<b>URL:</b>	
<b>Страна:</b>	
<b>Индекс:</b>	
<b>Почтовый адрес:</b>	
<b>Название доклада на русском языке:</b>	
<b>* Название доклада на английском языке:</b>	
<b>Соавторы:</b>	
<b>Тезисы доклада (имя файла):</b>	
<b>Расширенный доклад (имя файла):</b>	
<b>Краткая аннотация: на русском языке (не более 500 символов)</b>	
<b>* Краткая аннотация: на английском языке (не более 500 символов)</b>	

\* Если у Вас возникнут трудности с переводом, оставьте в данном поле сообщение "трудности с переводом".  
Наши переводчики решат эту проблему.

Координаты организационного комитета: Тел./Факс: +7 495 995-8017, E-mail: [org@ivtn.ru](mailto:org@ivtn.ru)

## IVTN-2010 APPLICATION FORM

For participating in conference you have to send the filled application form to IVTN.ru Organizing Committee.

Your theses and/or enlarged report please send by E-mail: [org@ivtn.ru](mailto:org@ivtn.ru).

You can also fill the application form on web-site: [http://www.ivtn.ru/application\\_e.html](http://www.ivtn.ru/application_e.html)

<b>Surname:</b>	
<b>Name:</b>	
<b>Company/Organization:</b>	
<b>Department:</b>	
<b>Job position:</b>	
<b>Scientific degree:</b>	
<b>Phone:</b>	
<b>Fax:</b>	
<b>E-mail:</b>	
<b>URL:</b>	
<b>Country:</b>	
<b>Zip/Postal Code:</b>	
<b>Postal address:</b>	
<b>* Title of the report:</b> (in Russian)	
<b>Title of the report:</b> (in English)	
<b>Co-authors:</b>	
<b>Theses of the report:</b> (file name)	
<b>Enlarged report:</b> (file name)	
<b>* Short abstract in Russian</b> (no more than 500 symbols)	
<b>Short abstract in English:</b> (no more than 500 symbols)	

\* If you will have some difficulties with translation, put in this field the message "difficulties with translation". Our translators will decide this problem.

Organizational committee coordinates: Tel./Fax: +7 495 995-8017, E-mail: [org@ivtn.ru](mailto:org@ivtn.ru)

**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В РЕШЕНИИ  
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ И ПРИКЛАДНЫХ НАУЧНЫХ ЗАДАЧ  
Сессия ИВТН-2009**

**COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENTIFIC RESEARCHES  
IVTN-2009 Session**

Сборник материалов  
The Proceedings

**Ответственные за выпуск**

Компьютерная верстка: *Воронина Н.*

Перевод: *Воронина Н.*

Дизайн обложки: *Котельников Д.*

Редактор: *Габусу П.*

**Editorial board**

Make-up: *Voronina N.*

Translators: *Voronina N.*

Design: *Kotelnikov D.*

Editor: *Gabusu P.*