ISSN 2220-7864

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

Сессия ИВТН-2012

●

COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENTIFIC RESEARCH

IVTN-2012 Session

Юбилейный сборник материалов
The Anniversary Proceedings

Москва – 2012
Moscow - 2012

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-2012

The Organizational committee thanks all of the participants of the IVTN-2012 session

Юбилейный сборник материалов сессии ИВТН-2012 содержит аннотации докладов, а также тезисы, представленных на электронную конференцию «Информационно-вычислительные технологии в решении фундаментальных и прикладных научных задач» в 2012 году. Среди докладов работы научных коллективов о моделировании и вычислениях, исследовании и разработках, а также о научных проблемах и перспективах в информационных и компьютерных технологиях.
Полные тексты докладов доступны на сайте ИВТН.ru (http://www.ivtn.ru).

The Anniversary Proceeding of IVTN-2012 session contains annotations of the reports and abstracts presented on web-conference « Computer Applications in Science research» in 2012. Among the reports of the research teams for research and development, modeling and computation, as well as academic problems and prospects in information andcomputer technologies.
Full texts of reports are accessible on site IVTN.ru (http://www.ivtn.ru).

© НВК «ВИСТ»
© NVK «VIST»

Уважаемые коллеги!

Представляем вашему вниманию 10-й Юбилейный сборник материалов ИВТН-2012, который традиционно содержит каталог аннотаций докладов на двух языках и тексты тезисов, с указанием постоянного адреса полной версии статьи на сайте ИВТН.ru в Интернете.

За последние годы проект ИВТН.ru привлек более 2000 участников из стран СНГ, Европы, Азии и Америки. Выступал в качестве локальных организаторов крупных Международных Симпозиумов, таких как CMPTI 2007 (http://www.ivtn.ru/cmtpi-2007/index.php), PIERS 2009 (http://www.ivtn.ru/piers-2009/) и PIERS 2012 (http://www.ivtn.ru/piers-2012/). Результатом сотрудничества с иностранными коллегами стал ценный опыт, который будет использоваться в развитии интернет-конференций ИВТН.ru.

С 2013 года издания сессий ИВТН.ru будут доступны в научной электронной библиотеке eLIBRARY.RU (http://elibrary.ru/). Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU - это крупнейший российский информационный портал в области науки, технологии, медицины и образования, содержащий рефераты и полные тексты более 14 млн научных статей и публикаций. Все работы авторов, опубликованные в Сборниках материалов ИВТН.ru, в том числе и работы, опубликованные за прошедший период, войдут в библиографическую базу данных научных публикаций российских ученых с присвоением автору Российского индекса научного цитирования.

Организационный комитет ИВТН.ru выражает искреннюю благодарность всем участникам сессии ИВТН-2012 за предоставленные доклады и сообщения и надеется на дальнее сотрудничество.

До встречи на конференции ИВТН-2013!

С уважением,
Организационный комитет ИВТН.ru
E-mail: org@ivtn.ru
URL: http://www.ivtn.ru
Тел.: +7 495 995 8017

Dear colleagues!

We bring forward the 10th Anniversary proceedings of the Session IVTN-2011, which traditionally contains a catalog of abstracts in both languages with instructions of the permanent address of the full report version at web-site IVTN.ru in Internet are published.

Over the past years the project IVTN.ru attracted more than 2,000 participants from the CIS, Europe, Asia and America. The project serves as a local organizer of major international Symposiums such as CMPTI 2007 (http://www.ivtn.ru/cmtpi-2007/index.php), PIERS 2009 (http://www.ivtn.ru/piers-2009 /) and the PIERS 2012 (http://www.ivtn.ru/piers-2012/). The result of collaboration with foreign colleagues was a valuable experience, which will be used in the development of online conferences IVTN.ru.

Since 2013 edition of the sessions IVTN.ru will be available in Science Library eLIBRARY.RU (http://elibrary.ru/). Scientific Electronic Library eLIBRARY.RU - the largest Russian information portal in the field of science, technology, medicine, and education, which contains abstracts and full text of over 14 million scientific articles and publications. All of the authors, published in the proceedings of IVTN.ru, including works published in the intervening period will be included in a bibliographic database of scientific publications of Russian scientists with assignment author Russian Science Citation Index.

Organizing committee IVTN.ru would like to thank all participants for any reports and communications and hopes to further cooperation.

To a meeting at conference IVTN-2013!

Sincerely yours,
IVTN.ru Organizational Committee
E-mail: org@ivtn.ru
URL: http://www.ivtn.ru
Tel.: +7 495 995 8017

ИВТН-2012
IVTN-2012

●

ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В НАУКЕ

COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENCE

Организаторы
Providers

Конференции ИВТН-2012 организованы по инициативе НВК "ВИСТ", при поддержке научных центров и институтов Российской Академии Наук и Российской Академии Медицинских Наук.

The IVTN-2012 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

ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ РЕШЕНИЯ ПРИКЛАДНЫХ НАУЧНЫХ ЗАДАЧ В АГРОПРОМЫШЛЕННОМ КОМПЛЕКСЕ (АПК)

Колмычкова К.И., Косовский Г.Ю., Футочкина В.А.
Государственное Научное Учреждение Центр Экспериментальной Эмбриологии и Репродуктивных Биотехнологий Российской Академии Сельскохозяйственных Наук

После вступления России в ВТО перед производителями сельскохозяйственной продукции фактически возникла необходимость использования информационных технологий. Информационные технологии позволяют наиболее быстро реализовывать научные и практические знания в области животноводства, оптимизировать производственные процессы. Таким образом, объективной реальностью в сфере аграрной промышленности становится насущная необходимость решения задач, связанных с формированием и эффективным использованием

INFORMATION AND COMPUTER TECHNOLOGY SOLUTIONS APPLIED SCIENTIFIC PROBLEMS IN THE AGRICULTURAL SECTOR

Kolmichkova K.I., Kosovskij G.Yu., Futochkina V.A.
Centre of Experimental Embryology and Reproductive Biotechnologies of the Russian Academy of Agricultural Sciences

After Russia's accession to the WTO in fact there was a need to use information technology to producers of agricultural products. Information technologies offer to the fastest implement scientific and practical knowledge in the field of animal husbandry and to streamline manufacturing processes. Thus, the objective reality in the field of agricultural industry is an urgent need to address the problems related to the development and effective using

После вступления России в ВТО перед производителями сельскохозяйственной продукции фактически возникла необходимость использования информационных технологий. Информационные технологии позволяют наиболее быстро реализовывать научные и практические знания в области животноводства, оптимизировать производственные процессы. Таким образом, объективной реальностью в сфере аграрной промышленности становится насущная необходимость решения задач, связанных с формированием и эффективным использованием его информационного ресурса.

В то время как во многих странах мира рынок информационных ресурсов стремительно развивается, его состояние в России не соответствует современным требованиям. Так, в странах с развитым животноводством (США, Канада, Швеция, Голландия, Дания и т.д) племенным может считаться только животное, в обязательном порядке зарегистрированное в национальной информационной системе. Перечисленные выше страны составляют костяк Международного комитета информационного обеспечения в племенном животноводстве (ICAR), находящегося в непосредственном ведении Всемирной и Европейской ассоциации животноводства (WAAH и EAAH). Этой организацией выработаны определенные требования, рекомендации и нормативные документы, обеспечивающие информационное пространство в племенном животноводстве всего мира [1]. В тоже время в Российской Федерации перевод хозяйств в категорию племенных осуществляется согласно Правилам определения видов организаций племенному делу (Минсельхоз России 2006 г.). Важными критериями для аттестации является ведение племенного учета в длительное время и ежегодное обновление данных. В настоящее время, учет ведется по происхождению, продуктивности и воспроизводству [2].

Но как таковая отсутствует единая база учета племенного скота. В частности, нашим Центром для нужд отечественного АПК предложена к разработке база данных генетических паспортов сельскохозяйственных животных genid.ru . В базу предполагается занесение данных генетической парспортизации, полученных в результате генотипирования животных по хозяйственно полезным признакам и носительству различных заболеваний крупного рогатого скота (КРС).

Проблемой во всем мире становится грамотная интерпретация данных генетического паспорта животного и оптимальный подбор родительских пар на основе этой информации для получения животных с заданными характеристиками. Ведутся разработки программных продуктов автоматизации решения этих задач. В нашем Центре разрабатывается подобная программы для нужд АПК в России, что позволит оптимизировать селекционный процесс и создаст условия для внедрения технологий маркер - направленной селективной работы в хозяйствах на территории РФ. Введение поголовной генетической экспертизы в племенных стадах на территории РФ и стран СНГ позволит значительно ускорить обновление поголовья КРС , в том числе и минимизировав эффект инбридинга.

Внедрение информационных технологий дает возможность племенным предприятиям субъектов федерации войти в единое информационное пространство РФ[3]. Однако для более широкого обмена генетическими

ресурсами внутри АПК, повышения результативности селекции и рентабельности племенных хозяйств, для выхода российской племенной продукции на мировой рынок, необходимо дальнейшее совершенствование системы сбора, накопления и хранения максимально достоверной информации и формирование единой базы данных генетических паспортов КРС в России.

Литература

1. *Королев М.* Животноводство России// март 2012г, 64 с.
2. *Щепкин С., Щукина И., Куликова* Н. Перспективное свиноводство. Теория и практика// №5, 2012г, 58с.
3. Организация, экономика и менеджмент в АПК / Сборник научных трудов. – М.: 2004. – 106 с.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1316 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1316

КОМПЛЕКСНЫЙ ПОДХОД К АНАЛИЗУ СОСТОЯНИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ НЕФТЕДОБЫВАЮЩИХ РАЙОНОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ ГЕОИНФОРМАЦИОННЫХ СИСТЕМ И ДАННЫХ КОСМИЧЕСКОГО ЗОНДИРОВАНИЯ

Ященко И.Г., Алексеева М.Н., Перемитина Т.О.
Институт химии нефти СО РАН

На нефтедобывающих территориях Западной Сибири неблагоприятное воздействие на состояние окружающей природной среды оказывают многочисленные антропогенные факторы, среди которых: функционирование объектов топливно-энергетического и промышленного комплексов, удовлетворение хозяйственно-бытовых и транспортных нужд населения и возникновение чрезвычайных ситуаций. Анализ состояния окружающей среды подразумевает сбор, хранение и обработку данных о количестве и составе загрязнителей в природных компонентах. В данной статье описан комплексный подход к анализу состояния окружающей среды нефтедобывающих регионов с использованием методов статистического анализа, геоинформационных технологий и данных дешифрирования космических снимков (КС). В работе приведена сравнительная характеристика и комплексная оценка экологического состояния нефтедобывающих районов с применением стандартных средств геоинформационных систем, специально разработанного программного обеспечения и данных космического зондирования, что и определяет цель работы.

COMPLEX APPROACH TO THE ANALYSIS OF ENVIRONMANTAL STATE OF OIL-PRODUCING REGION WITH USE OF GIS SYSTEMS AND SATELLITE DATA

Yaschenko I.G., Alekseeva M.N., Peremitina T.O.
Institute of Petroleum Chemistry, Siberian Division of Russian Academy of Sciences

On oil producing in Western Siberia adverse effects on the environment have multiple anthropogenic factors, including: the functioning of the fuel and power and industrial systems, meeting the domestic and transport needs of the population and emergencies. Analysis of the environment involves the collection, storage and processing of data on the number and composition of pollutants in natural ingredients. This paper describes a comprehensive approach to the analysis of the environmental oil-producing regions using the methods of statistical analysis, GIS and data on satellite images. This paper is a comparative description and comprehensive assessment of the ecological state of the oil-producing areas using the standard tools of geographic information systems, special software and data from satellites, which defines the purpose of the work.

На нефтедобывающих территориях Западной Сибири неблагоприятное воздействие на состояние окружающей природной среды оказывают многочисленные антропогенные факторы, среди которых – функционирование объектов топливно-энергетического и промышленного комплексов, удовлетворение хозяйственно-бытовых и транспортных нужд населения и возникновение чрезвычайных ситуаций. Анализ состояния окружающей среды подразумевает сбор, хранение и обработку данных о количестве и составе загрязнителей в природных компонентах. В докладе описан комплексный подход к анализу состояния окружающей среды нефтедобывающих регионов с использованием методов статистического анализа, геоинформационных технологий и данных дешифрирования космических снимков (КС). Приведена сравнительная характеристика и комплексная оценка экологического состояния нефтедобывающих районов с применением стандартных средств геоинформационных систем, специально разработанного программного обеспечения и данных космического зондирования, что и определяет цель работы.

С применением МГК было выявлено в целом невысокое по отношению к другим субъектам РФ загрязнение окружающей природной среды нефтедобывающих территорий Ханты-Мансийского и Ямало-Ненецкого АО, Тюменской и Томской областей. Показано, что в нефтедобывающих субъектах РФ наиболее заметный вклад в загрязнение окружающей среды вносит наличие в них развитой промышленности и жилищно-коммунального хозяйства городов, как показано на примере Тюменской, Омской областях в Западной Сибири, Красноярском крае в Восточной Сибири и в Сахалинской области на Дальнем Востоке. Значительно ухудшают экологическое состояние нефтедобывающих районов чрезвычайные ситуации, такие, как рассмотренные аварийные нефтеразливы в Ханты-Мансийском АО.

Установлено, что при ежегодном нефтезагрязнении земель, составляющих 1 % от общей площади водосборов

в малые реки Нефтеюганского района с поверхностным стоком поступает около 10 т нефтепродуктов. При сбросе сточных вод и смыве нефтепродуктов с загрязненных участков средними реками выносится около 60 т в год, что свидетельствует о значительном ухудшении качества воды в нефтедобывающих регионах. Данные исследования и комплексный анализ состояния окружающей среды могут быть использованы в мониторинговых исследованиях состояния окружающей природной среды нефтедобывающих районов.

Литература

1. *Перемитина Т.О.* Программный комплекс обработки многомерных данных с применением метода главных компонент и геоинформационных технологий // Журнал радиоэлектроники. [Электронный ресурс]: журнал, 2003. – Режим доступа: http://jre.cplire.ru/jre/mar03/6/text.html, свободный.
2. *Коржубаев А.Г., Эдер Л.В.* Нефтедобывающая промышленность России // Бурение & Нефть. [Электронный ресурс]: журнал, 2011. – Режим доступа: http://burneft.ru/archive/issues/2011-04/1, свободный.
3. *Ященко И.Г.* Географическое распределение трудноизвлекаемых нефтей Томской области и их физико-химические свойства // Экспозиция Нефть Газ. 2012. № 3 (21). С. 41-46.
4. *Алексеева М.Н.* Оценка влияния нефтеразливов на состояние растительного покрова и приземного слоя атмосферы с использованием космических снимков / М.Н. Алексеева, Т.О. Перемитина, И.Г. Ященко // Оптика атмосферы и океана. 2011. № 7. С.606-610.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1327 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1327

СЕКЦИЯ 2

КОМПЬЮТЕРНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ, ИХ ОРГАНИЗАЦИЯ (СЕТИ И ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ)

SECTION 2

COMPUTING AND COMPUTING MANAGEMENT (NETWORKS AND PARALLEL COMPUTATION)

МЕТОД РАСЧЕТА ОЦЕНКИ ТЕХНИЧЕСКОГО УРОВНЯ СЛОЖНОГО ТЕХНИЧЕСКОГО ОБЪЕКТА

Есев А.А., Ткачук А.В.
Государственный летно-испытательный центр имени В.П.Чкалова

Изложен метод расчета оценки технического уровня сложного технического объекта, позволяющий получить количественную оценку любого его технического свойства, обеспечить сопоставление технического уровня аналогичных объектов (модификаций, версий и т.п.) и оценить их готовность к испытаниям. Расчет оценки технического уровня основан на квалиметрическом подходе, оценка рекурсивно вычисляется по дереву технических свойств

METOD FOR EVALUATION OF TECHNICAL LEVEL COMPLEX TECHNICAL OBJECTS

Esev A.A., Tkachuk A.V.
State flight-testing center of the Chkalov

The method of calculating the assessment of the technical level of a complex technical object that allow quantitative assessment of any of its technical properties, to provide a comparison of technical level of similar objects (modifications, versions, etc.) and to assess their readiness for the test. Obtain an estimate of the technical level based on their qualitative approach, the estimate is calculated recursively by the technical properties of wood

Технология автоматизированного расчета оценки технического уровня объекта испытаний (ОИ) следует применять тогда, когда возникает необходимость получить однозначную количественную оценку любого технического свойства [1, 2]. С его помощью можно выполнить экспертизу технического уровня различных ОИ и определить их готовность к испытаниям.

Для расчета оценки технического уровня используется квалиметрический подход, при котором коэффициенты качества простых, сложных и комплексных свойств определяются расчетным путем, а коэффициенты весомости свойств и индивидуальные коэффициенты качества простых (качественных) технических свойств – экспертным.

Последовательность экспертизы технического уровня ОИ включает:

- построение дерева технических свойств ОИ;
- определение коэффициентов весомости технических свойств ОИ;
- определение базовых, экстремальных и реальных технических показателей;
- определение технических показателей (коэффициентов качества) простых, сложных, комплексных свойств и показателей ОИ в целом.

Оцениваемым показателем является коэффициент технического уровня (K_T):

$$K_T = \sum_{j}^{S} K_F \mu_F ,$$

где K_F – коэффициент качества F-го сложного (менее сложного) свойства; T – номер оцениваемого комплексного (сложного) свойства (по дереву технических свойств ОИ); S – число сложных (менее сложных) свойств, составляющих j-тое комплексное (сложное) свойство; F – номер сложного (менее сложного) свойства, составляющего комплексное (сложное) свойство (по дереву технических свойств ОИ); μ_F – групповой нормированный коэффициент весомости F сложного (менее сложного) свойства.

Дерево технических свойств ОИ строится слева направо. Крайние правые окончания ветвей представляют собой простые (квазипростые) технические свойства, остальные – сложные и комплексные свойства. При экспертизе технического уровня ОИ в целом дерево должно быть полным, т.е. разделенным на все составляющие технические свойства. В случае экспертизы отдельного технического свойства дерево может быть неполным, т.е. разделенным на составляющие только оцениваемого свойства.

Все группировки свойств делятся на уровни, которые нумеруются слева направо, начиная с нулевого уровня – технических свойств ОИ и заканчивая правым уровнем – простыми (квазипростыми) техническими свойствами. Свойства одного уровня размещаются на одной вертикали. Определение коэффициентов весомости (важности) технических свойств ОИ производится в следующей последовательности:

- составление индивидуальных анкет и их заполнение экспертами (назначение индивидуальных ненормированных коэффициентов весомости);
- согласование мнений экспертов;
- нормирование коэффициентов весомости.

Анкета для определения ненормированных коэффициентов весомости разрабатывалась для каждого

сложного (комплексного) свойства согласно дереву технических свойств ОИ. Комплект индивидуальных анкет (число анкет в комплекте равно числу сложных и комплексных свойств дерева технических свойств ОИ) заполнялся каждым экспертом, куда заносились значения ненормированных коэффициентов весомости.
Экспертная оценка весомости свойств осуществлялется в баллах, от 0 до 100 баллов в зависимости от значимости (весомости, важности) технического свойства.
Базовые ($P_{баз}$) и экстремальные ($P_{экс}$) технические показатели могут быть вычислены по одному из четырех вариантов, в зависимости от варианта задания требований:

$$P_{баз} = \frac{b_1 + b_2}{2},$$

где b_1 и b_2 – крайние значения показателей свойства; $P_{экс}$=0,85b_1, если $P_{рл} < P_{баз}$, или $P_{экс2}$=1,15b_2, если $P_{рл} > P_{баз}$.
2. $P_{баз}$=0 если технические требования заданы в виде предельно допустимых значений; $P_{экс}$=1,15b, где b – предельно допустимое значение технического показателя.
3. Технические требования заданы в виде «не менее» или «не более». Тогда при задании значения показателя в виде «не менее»: $P_{баз}$=2b и $P_{экс}$=0,85b, где b – заданное значение показателя. При задании значения показателя в виде «не более»: $P_{баз}$=0,5b и $P_{экс}$=1,15b.
4. Технические требования заданы в качественном виде (отсутствует единица измерения). Тогда $P_{баз}$=100 и $P_{экс}$=0.
Оценки технического уровня (КТ) ОИ в целом и их комплексных (сложных) свойств рассчитываются по записанной выше формуле. Показатель технического уровня ОИ сложного свойства (Kf), делящегося на простые (квазипростые), может быть определен по формуле:

$$K_f = \sum_j^m \omega_j \mu_j,$$

где f – номер оцениваемого сложного свойства (по дереву технических свойств ОИ); j – номер простого (квазипростого) свойства, составляющего f-е сложное свойство (по дереву технических свойств ОИ); m – число простых (квазипростых) свойств, составляющих f-е сложное свойство; ω_j – коэффициент качества j-того простого свойства; μ_j – групповой нормированный коэффициент весомости j-го простого свойства.
Коэффициент качества простого технического свойства определяется из выражения:

$$\omega_f = \frac{p_{рл} - P_{экс}}{P_{баз} - P_{экс}},$$

где $P_{рл}$ – реальное значение показателя технического свойства; $P_{экс}$ – экстремальное значение показателя технического свойства; $P_{баз}$ – базовое значение показателя технического свойства.
Расчеты по определению технических показателей ОИ в целом проводятся последовательно для всех сложных и комплексных свойств, начиная с последнего уровня (по дереву технических свойств ОИ) и заканчивая нулевым уровнем - технических свойств ОИ.
После выполнения расчетов проводится обработка, анализ и оценка результатов – для этого разработан и реализован специальный программный комплекс. Разработка предложений по улучшению технических свойств ОИ проводится в следующей последовательности:
- определяются свойства (характеристики), которые требуют улучшения (это, прежде всего, простые свойства с низким коэффициентом качества);
- разрабатываются мероприятия (компоновочные, конструктивные и т.д.) по улучшению этих свойств.

Литература

1. *Маслов С.В.* Методика оценивания технических показателей очков ночного видения при проведении наземных испытаний авиационной техники / С.В.Маслов, А.А.Есев // Проблемы безопасности полетов - № 4, 2010. – С. 27 – 35.
2. *Есев А.А.* Методическое обеспечение определения максимальной дальности обнаружения объектов при выполнении поисково-спасательных работ с применением вертолетов, оборудованных очками ночного видения / А.А.Есев, С.А.Базаров, А.В.Русскин, Т.А.Солдатов // Научные и образовательные проблемы гражданской защиты. – № 4, 2011. – С. 45 – 52.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1306 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1306

РАСЧЕТ КОНЦЕНТРАЦИИ ВТОРИЧНЫХ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В КРЕМНИИ, ОБЛУЧЁННОМ ПОТОКОМ ПРОТОНОВ

Богатов Н.М., Коваленко М.С.
Кубанский государственный университет

Рассчитаны численно зависимости концентраций вторичных радиационных дефектов от температуры облучения и концентрации примесей в кремнии, облучённом потоком протонов. Показано, что концентрации вторичных радиационных дефектов зависят от положения уровня Ферми в запрещённой

CALCULATION OF THE CONCENTRATION OF SECONDARY RADIATION-INDUCED DEFECTS IN SILICON IRRADIATED BY PROTONS FLOW

Bogatov N.M., Kovalenko M.S.
Kuban State University

Dependencies of concentrations of secondary radiation-induced defects in silicon on irradiation temperature and impurities concentrations are calculated numerically for silicon irradiated by protons. It is shown, that concentrations of secondary radiation-induced defects in silicon depend on the Fermi level, irradiation temperature

зоне кремния, температуры облучения и определяются вероятностями взаимодействия первичных радиационных дефектов друг с другом и с атомами примесей

and the probability of interaction between primary irradiation defects and impurities

Успехи в области микропроцессорной техники выдвигают задачу поиска и изучения возможностей создания миниатюрных сверхчувствительных датчиков электромагнитного излучения и сенсорных устройств. С этой целью необходим поиск новых материалов, в которых малые воздействия электромагнитного излучения, внешней среды могут вызывать существенные изменения комплекса свойств. Особый интерес представляют полупроводниковые структуры с наномасштабными неоднородностями, к которым относятся области разупорядочения радиусом от 10 до 100 нм. Одним из методов создания таких областей является воздействие ионизирующими частицами. Такой метод позволяет обеспечить контролируемое распределение областей разупорядочения в поверхностной области кремния. Возможности данного метода изучны не полностью. Под действием ионизирующих частиц, кроме областей разупорядочения, образуются также вторичные радиационные дефекты (ВРД), относящиеся к классу точечных: А-центры, К-центры, дивакансии, Е-центры, комплексы SiIB и др. Образование вторичных радиационных дефектов – вероятностный процесс. Создание экспериментальных условий, обеспечивающих существенное превышение вероятности образования областей разупорядочения над вероятностью появления точечных ВРД, необходимо для контролируемого распределения областей разупорядочения в поверхностной области кремния.
Цель работы – рассчитать влияние температуры облучения, концентрации примесей и первичных радиационных дефектов (ПРД) на концентрацию ВРД в кремнии, облучённом потоком протонов.
В результате анализа зависимостей концентраций вторичных радиационных дефектов от температуры облучения T □ [80; 400] K и концентрации примесей получены следующие результаты.
Концентрации ВРД зависят от температуры облучения. Для кремния n-типа данная зависимость сильно выражена в двух температурных интервалах: [80; 120] K и [196; 400] K. В интервале (120; 196) K концентрация ВРД слабо изменяется при изменении температуры облучения. В кремнии p-типа рассматриваемая зависимость сильно выражена в единственном интервале [200; 400] K, а в [80; 200] K практически не наблюдается. Температурные зависимости линейных скоростей генерации ПРД определяют характер температурных зависимостей скоростей генерации ВРД в интервале T □ [80; 400] K. Изменение времени облучения кремния при постоянном флюенсе и температуре не влияет на значения концентрации ВРД. Зависимость концентрации ВРД от начальной концентрации легирующих примесей достаточно сложна, определяется совокупностью конкурирующих процессов взаимодействия ПРД с примесями и ВРД, а так же положением уровня Ферми в запрещённой зоне кремния.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1315 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1315

СЕКЦИЯ 3

МОДЕЛИРОВАНИЕ, ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

SECTION 3

COMPUTER SIMULATION

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛИПИДНЫХ БИСЛОЕВ: ОРИЕНТАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА СВЯЗЕЙ В ЖИРНОКИСЛОТНЫХ ЦЕПЯХ МОЛЕКУЛ ЛИПИДОВ (МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ)

Рабинович А.Л., Lyubartsev A.P.
Институт биологии Карельского научного центра РАН

Методом молекулярной динамики проведено моделирование гомогенных гидратированных бислоев, образованных липидными молекулами фосфатидилхолинов разного строения. Можно классифицировать связи в цепях липидов по форме их функций распределения, т.е. по характеру их упорядочения в бислоях. Все функции распределения можно разделить на группы качественно однотипных функций, и соотнести эти группы с определенными местоположениями связей в углеводородных цепях разной степени ненасыщенности

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS OF LIPID BILAYERS: BOND ORIENTATION PROPERTIES IN FATTY ACID CHAINS OF LIPID MOLECULES

Rabinovich A.L., Lyubartsev A.P.
Karelian Research Centre of Russian Academy of Sciences

Molecular dynamics simulations of homogeneous hydrated phosphatidylcholine bilayers of different structures have been carried out. It is possible to classify the bonds of the lipid chains according to the shape of their distribution functions, i.e. according to the nature of their ordering in the bilayers. All distribution functions can be divided into groups with qualitatively similar features, and to correlate these groups with specific bond locations in hydrocarbon chains of different unsaturation

Метод молекулярной динамики (МД) широко используется для моделирования липидных мембранных систем [1]. В настоящей работе методом МД при температуре T = 303 K исследованы свойства гомогенных гидратированных липидных бислоев, образованных молекулами фосфатидилхолинов (ФХ) различного строения. Каждая липидная молекула содержала две углеводородных цепи: цепь пальмитиновой или стеариновой кислоты (т.е. насыщенную цепь) в положении *sn*-1, и цепь олеиновой, линолевой, линоленовой, стеаридоновой, октадекапентаеновой, арахидоновой, эйкозапентаеновой или докозагексаеновой кислоты (т.е. ненасыщенную цепь, содержащую от 1 до 6 двойных связей цис) в положении *sn*-2.

В расчетной ячейке бислоя в МД экспериментах содержалось по 128 молекул липида данного типа и 3840 молекул воды. Химическое строение липидных молекул воспроизведено строго, атомы водорода учтены явно. Параметры силового поля для расчета энергии соответствовали набору CHARMM27, в который были введены поправки согласно работе [2]. Моделирование осуществлено с помощью пакета программ MdynaMix v.5.2. Длина траектории каждого бислоя составляла 100 нс, из которых первые 20 нс считали участками релаксации. Запись конфигураций осуществляли с интервалом 1 пс. В итоге моделирования рассчитаны и проанализированы различные физические характеристики 16 бислоев, в том числе функции распределения векторов-связей C-C и C-H по ориентациям относительно нормали Z к поверхности каждого из бислоев.

Показано, что можно провести *общую классификацию* связей (как C-C, так и C-H) в цепях липидов по форме их функций распределения, т.е. по характеру их упорядочения в бислоях. Все функции распределения можно разделить на группы качественно однотипных функций, и соотнести эти группы (типы) с определенными местоположениями связей в углеводородных цепях разной степени ненасыщенности. Это позволило выявить сходства и различия между разными участками цепей в молекулах липидов согласно физической картине упорядочения связей в мембранных структурах, а также сравнить эти данные с параметрами порядка связей относительно нормали Z. Наличие двойных связей в цепи существенно меняет характер флуктуаций всех связей по сравнению с таковым в насыщенной цепи. Выделены особые свойства полиненасыщенных цепей липидов и обсуждены фундаментальные причины их существования. Результаты способствуют дальнейшему углублению знаний о физических основах функционирования липидных мембран [3].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 10-03-00201а), программы Президента РФ “Ведущие научные школы” НШ-1642.2012.4.

Литература

1. *Lyubartsev A.P., Rabinovich A.L.* Recent Development in Computer Simulations of Lipid Bilayers // Soft Matter. 2011. V.7. P.25-39.
2. *Högberg C.-J., Nikitin A.M., Lyubartsev A.P.* Modification of the CHARMM Force Field for DMPC Lipid Bilayer // J. Comput. Chem. 2008. V.29. No.14. P.2359-2369.

3. *Рабинович А.Л.* Цепные молекулы как компоненты мембранных систем: компьютерное моделирование // В кн.: Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров. Отв. ред. В.А. Иванов, А.Л. Рабинович, А.Р. Хохлов. М.: Книжный дом “ЛИБРОКОМ”. 2009. С.409-454.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1294 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1294

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МЕМБРАННЫХ СИСТЕМ, МОЛЕКУЛ ЛИПИДОВ И ИХ КОМПОНЕНТОВ

Рабинович А.Л., Lyubartsev A.P., Рипатти П.О., Журкин Д.В., Столяров Д.С.
Институт биологии Карельского научного центра РАН

Методами молекулярной динамики и Монте-Карло проведено исследование свойств совокупности олигомерных углеводородных цепных молекул в разных условиях. Изучены насыщенные и ненасыщенные цепи с метиленпрерывающимися двойными связями cis – типичные компоненты молекул липидов, образующих основу биологических мембран. Условия исследования свойств молекул в изолированном состоянии согласованы с условиями их исследования в мембранах. Осуществлен комплекс взаимно-дополняющих подходов с элементами мультимасштабного моделирования

COMPUTER SIMULATIONS FOR STUDY OF MEMBRANE SYSTEMS, LIPID MOLECULES AND THEIR CONSTITUENTS

Rabinovich A.L., Lyubartsev A.P., Ripatti P.O., Zhurkin D.V., Stolyarov D.S.
Karelian Research Centre of Russian Academy of Sciences

Molecular dynamics and Monte Carlo simulation study of the properties of a set of oligomer hydrocarbon chain molecules under different conditions have been carried out. Saturated and unsaturated chains with methylene-interrupted double bonds cis which are typical constituents of lipid molecules (that are the basis of biological membranes) are studied. To study properties of molecules the conditions in the isolated state are coordinated with those in the membranes. Some mutually complementary approaches with multi-scale modeling items are realized

Методами компьютерного моделирования (молекулярной динамики, МД, и Монте-Карло, МК) проведено комплексное исследование свойств совокупности олигомерных углеводородных цепных молекул (в разных условиях), - насыщенных и ненасыщенных с метиленпрерывающимися двойными связями cis. Цепи такого строения являются компонентами молекул липидов, которые образуют основу биологических мембран. Реализованы варианты исследования свойств этих молекул в изолированном состоянии, согласованные с вариантами их исследования в мембранных структурах, для чего осуществлен следующий комплекс взаимно-дополняющих шагов:

I. Проведено моделирование совокупности мембранных структур методом МД, в полноатомном приближении, при полной гидратации, в одинаковых условиях (по температуре, давлению, методике проведения имитации, количеству молекул липидов в расчетной ячейке) и с использованием единого, апробированного в литературе набора параметров силового поля.

II. Для МД моделирования избраны варианты мембранных систем, образованные липидными молекулами, которые различаются степенью ненасыщенности и/или длиной цепи углеводородных компонентов; в некоторых случаях рассмотрены также молекулы включений. Совокупность молекул липидов выбрана так, чтобы получить информацию об искомых свойствах для всех основных вариантов в данном ряду. Среди этих вариантов есть бислои, моделирование которых осуществлено впервые в литературе. Исследование такой совокупности бислоев способствует разрешению ряда спорных вопросов, в том числе о существовании, о степени универсальности, или об отсутствии некоторых общих зависимостей свойств от строения липидных молекул.

III. Поведение каждой мембранной системы исследовано в широком диапазоне времен (от 1 нс до ~100 нс для гомогенных систем, и от 1 нс до ~200 нс для гетерогенных систем), что позволяет корректно описать большой спектр свойств, провести их сравнение, а также предсказать некоторые тенденции их эволюций в рамках мультимасштабной шкалы.

IV. Изучено влияние внешних условий на свойства олигомерных цепей. Проведено МД моделирование нескольких мембранных липидных систем при разных температурах и давлениях, а также МК моделирование изолированных цепей при разных температурах.

V. Совокупность средних характеристик цепных молекул рассчитана как по результатам моделирования методом МД, так и МК. Параметры полноатомного силового поля при моделировании этими методами были идентичными. Химическое строение олигомерных цепей в МД и МК имитации различалось лишь тем, что группа C=O жирнокислотной цепи, связанная с глицериновым основанием в молекуле фосфолипидов, в МК имитации отдельной цепи заменена группой CH_3. Условия МД моделирования молекул липидов в каждом бислое отвечали жидкокристаллическому состоянию. Цепи в МК имитации изучали в Θ-условиях [1], а также с учетом исключенного объема. Разница в других параметрах МД и МК моделирования отсутствовала, что позволило изучить разницу в свойствах молекул во всех перечисленных состояниях.

Метод МД позволяет получить информацию о свойствах, которые проявляются у системы на относительно коротких интервалах временно́й шкалы (в этом смысле даже сотни нс, т.е. максимально достигнутые в настоящей работе времена, оказываются сравнительно малыми для некоторых явлений, протекающих в изучаемых системах), а метод МК – о равновесных характеристиках. Сравнение результатов позволяет более объективно оценить полученные расчетные данные и проанализировать границы их применимости.

Таким образом, данный подход к исследованию свойств олигомерных цепных молекул в различных условиях содержит элементы мультимасштабного моделирования. Общие принципы такого моделирования предписывают поиск путей согласования результатов, полученных на разных пространственных и/или временных масштабах [2].
В рамках описанного выше подхода методом МД изучены следующие варианты гомогенных бислоев, образованных молекулами фосфатидилхолинов (ФХ) разного строения: 16:0/18:1(n-9)cis ФХ, 16:0/18:2(n-6)cis ФХ, 16:0/18:3(n-3)cis ФХ, 16:0/18:4(n-3)cis ФХ, 16:0/18:5(n-3)cis ФХ, 16:0/20:4(n-6)cis ФХ, 16:0/20:5(n-3)cis ФХ, 16:0/22:6(n-3)cis ФХ, 18:0/18:1(n-9)cis ФХ, 18:0/18:2(n-6)cis ФХ, 18:0/18:3(n-3)cis ФХ, 18:0/18:4(n-3)cis ФХ, 18:0/18:5(n-3)cis ФХ, 18:0/20:4(n-6)cis ФХ, 18:0/20:5(n-3)cis ФХ, 18:0/22:6(n-3)cis ФХ. Изучены модели гетерогенных бислойных систем, образованных ненасыщенными липидными молекулами 18:0/18:1(n-9)cis ФХ, 18:0/18:2(n-6)cis ФХ, 18:0/18:3(n-3)cis ФХ, 18:0/18:4(n-3)cis ФХ, 18:0/18:5(n-3)cis ФХ, 18:0/20:4(n-6)cis ФХ, 18:0/20:5(n-3)cis ФХ, 18:0/22:6(n-3)cis ФХ и молекулами холестерина (~24 мол.%). Основные расчеты методом МД осуществлены с использованием вычислительных ресурсов, предоставленных SNIC (Swedish National Infrastructure for Computing, Stockholm, Sweden). Изучение результатов проведено в каждом из диапазонов временно́й шкалы: ~1, ~10, ~100 нс, т.е. с увеличением диапазона на каждом шаге на порядок. Исследованы тенденции изменения однотипных свойств по мере увеличения временных масштабов, изучены общие закономерности.
Методом МК рассчитаны равновесные характеристики цепей 16:0, 18:0, 18:1(n-9)cis, 18:2(n-6)cis, 18:3(n-3)cis, 18:4(n-3)cis, 18:5(n-3)cis, 20:4(n-6)cis, 20:5(n-3)cis, 22:6(n-3)cis, которые являются компонентами липидных молекул всех перечисленных выше бислоев. Кроме того, методом МК изучены свойства полиненасыщенных цепей N:4(n-6)cis, N:4(n-3)cis, N:5(n-6)cis, N:5(n-3)cis, N:6(n-6)cis, N:6(n-3)cis , где N - количество атомов углерода в цепи, N = 24, 26, 28, 30, 32, 34, 36, 38. Описываемые задачи требуют весьма существенных вычислительных мощностей. Один из эффективных путей – использование параллельных вычислительных систем. Для ускорения расчетов была разработана программа, позволяющая создавать набор параллельных процессов.
По итогам моделирования выявлены как общие для всех липидных молекул свойства, так и свойства, зависящие от химического строения молекул. В частности, показано, что в биомембране существуют механизмы надлежащего изменения некоторых ее локальных свойств с сохранением свойств более общих. Кроме того, выявлена совокупность экстремальных свойств у полиненасыщенных углеводородных компонентов липидов мембран. Наличие экстремальных свойств у определенных компонентов должно приводить к существованию особых свойств соответствующих кластеров мембран, а также таких мембран в целом. Функциональная роль компонентов мембран напрямую связана с молекулярным механизмом, который и обеспечивает реализацию свойств цепей того или иного строения. Выявленные закономерности позволяют предсказать некоторые общие тенденции в рамках мультимасштабной шкалы, установить основные взаимосвязи “структура - свойства” для мембранных структур.
Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 10-03-00201а), программы Президента РФ “Ведущие научные школы” НШ-1642.2012.4.

Литература

1. *Флори П.* Статистическая механика цепных молекул. М.: Мир, 1971. 440 с.
2. Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров. Отв. ред. В.А. Иванов, А.Л. Рабинович, А.Р. Хохлов. М.: Книжный дом “ЛИБРОКОМ”. 2009. 696 с.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1293 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1293

ВЫБОРКА ПО ЗНАЧИМОСТИ ПРИ ГЕНЕРИРОВАНИИ НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРА КОНФОРМАЦИЙ ЦЕПНЫХ МОЛЕКУЛ (МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО)

Журкин Д.В., Рабинович А.Л.
ГОУ ВПО “Петрозаводский государственный университет”

Описан алгоритм моделирования молекул цепного строения методом Монте-Карло в предположении о непрерывном спектре конформаций, с использованием процедуры выборки по значимости. Алгоритм применен к изучению углеводородных цепей различного строения

IMPORTANCE SAMPLING TECHNIQUE FOR COMPUTER GENERATION OF CONTINUOUS SPECTRUM OF CONFORMATIONS OF CHAIN MOLECULES (MONTE CARLO SIMULATIONS)

Zhurkin D.V., Rabinovich A.L.
Petrozavodsk state university

An importance sampling technique for Monte Carlo simulations of chain molecules using continuous spectrum of their conformations is described. The algorithm is used to study hydrocarbon chains of different structure

Метод Монте-Карло (МК) [1] для вычисления интегралов в фазовом пространстве (в пространстве состояний, конформаций, конфигураций) состоит в получении большого числа реализаций случайного процесса, который формируется таким образом, чтобы его вероятностные характеристики совпадали с аналогичными величинами рассматриваемых интегралов.
В настоящей работе описан алгоритм моделирования молекул цепного строения методом МК в предположении о непрерывном спектре конформаций, с использованием процедуры выборки по значимости. Алгоритм применен к изучению углеводородных цепей различного строения. Конформация цепной молекулы

однозначно определяется внутренними переменными: валентными связями *l*, валентными углами θ, торсионными углами φ. Генерирование конформаций проводили в 2 этапа. На 1-м этапе все величины *l* и θ фиксировали при равновесных значениях, а конформацию генерировали только по углам φ в полном диапазоне изменения каждого из них от 0 до 2π. При этом использовали выборку по значимости согласно энергии ближних взаимодействий U_{short}, которую вычисляли с учетом лишь торсионной энергии, энергии невалентных взаимодействий и электростатической энергии поля CHARMM27 (с поправками согласно работе [2]). Предложен алгоритм расчета энергии U_{short} как суммы энергий U_m фрагментов цепи, когда каждый фрагмент содержит 3 последовательных угла внутреннего вращения вокруг связей основной цепи, φ_i, φ_{i+1}, φ_{i+2}, варьирование которых приводит к изменению взаимных положений атомов.
На 2-м этапе осуществляли переход в полученной конформации от внутренних переменных к декартовым координатам всех атомов, производили небольшие смещения каждого атома, случайные по трем осям (X,Y,Z), и вычисляли новые значения внутренних переменных. Такой подход позволял достигнуть обобщенного варьирования всех валентных связей и валентных углов, а торсионные углы претерпевали лишь дополнительные изменения в небольших пределах относительно значений, разыгранных на 1-м этапе. В итоге вычисляли энергию молекулы с учетом всех компонентов поля CHARMM27 и текущие значения искомых наблюдаемых величин H. Вычисление средних характеристик <H> цепи проводили для двух разных состояний - в хорошем растворителе (с учетом эффектов исключенного объема) и в Θ-условиях. Развитый подход позволяет проводить сравнение между собой данных, полученных в рамках метода МК и метода молекулярной динамики при одних и тех же условиях и параметрах силовых полей, - в частности, поля CHARMM27, которое широко используется в расчетах свойств липидных систем методом молекулярной динамики. Расчеты для конкретных цепных молекул проведены на кластере КарНЦ РАН.
Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 10-03-00201а), программы Президента РФ “Ведущие научные школы” НШ-1642.2012.4.

Литература

1. *Рабинович А.Л., Иванов В.А.* Обзор методов компьютерного моделирования молекулярных систем: метод Монте-Карло // В кн.: Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров. Отв. ред. В.А. Иванов, А.Л. Рабинович, А.Р. Хохлов. М.: Книжный дом “ЛИБРОКОМ”. 2009. С.63-119.
2. *Högberg C.-J., Nikitin A.M., Lyubartsev A.P.* Modification of the CHARMM Force Field for DMPC Lipid Bilayer // J. Comput. Chem. 2008. V.29. No.14. P.2359-2369.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1295 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1295

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЧАСТИЦ БЕНЗ(А)ПИРЕНА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ

Клюев С.А.
Южное отделение Института океанологии им. П.П. Ширшова

Эмпирические, полуэмпирические методы и метод молекулярной динамики были использованы для изучения частиц бенз(а)пирена и его производных. В результате проведения компьютерных экспериментов рассчитаны структуры частиц и их энергетические параметры. Полученные данные могут быть использованы для определения путей деградации бенз(а)пирена в природных системах

MODELING OF PARTICLES OF BENZO(A)PYRENE AND ITS DERIVATIVES

Klyuev S.A.
P.P.Shirshov Institute of Oceanology of the Russian Academy of Sciences

The empirical, semi-empirical methods and method of molecular dynamic were used for investigation of the particles of benzo(a)pyrene and its derivatives. The Structures and energetic parameters of particles were considered. The obtained data can be used for determination of the pathways of benzo(a)pyrene degradation in natural systems

Бенз(а)пирен относится к полициклическим ароматическим углеводородам [1]. Данное соединение образуется при высокой температуре (например, в процессе горения веществ) и отличается термодинамической стабильностью. Его считают органическим загрязнителем и обнаруживают в почве, донных отложениях и воде. Медленно происходит деструкция этого соединения в результате химических и биохимических процессов. Некоторые превращения бенз(а)пирена связаны с процессами электронного переноса. В результате акцептирования электрона молекулой бенз(а)пирена получается анион-радикал, а при отдаче электрона - катион-радикал. Данные частицы отличаются высокой реакционной способностью. Например, катион-радикал бенз(а)пирена быстро реагирует с водой, образуя 6-гидроксибенз(а)пирен, который окисляется в присутствии кислорода. Молекула бенз(а)пирена способна перейти в возбужденное состояние и затем испустить энергию в виде света или вступить в химическое превращение. Биохимические превращения бенз(а)пирена связаны с наличием микросомальных смешанно-функциональных оксидаз (класс ферментов, содержащих различные формы цитохрома *P-450*), при участии которых бенз(а)пирен превращается в кислородосодержащие соединения (эпоксиды, диолы и др.). При этом катион-радикал бенз(а)пирена может и не образовываться. В таком случае фермент активирует кислород для его взаимодействия с молекулой бенз(а)пирена. Химически эпоксид бенз(а)пирена превращается в смесь диолов путем изомеризации, а в случае биохимического процесса имеет место присоединение воды. Ферментативная реакция эпоксида с водой является стереоспецифичной. Ясно, что пути химических и биохимических превращений бенз(а)пирена несколько отличаются.

Изучение ион-радикальных и радикальных частиц бенз(а)пирена методом электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) затруднительно. В случае катион-радикала из-за асимметрии частицы (все двенадцать протонов являются неэквивалентными) должны наблюдаться 4096 линий в сигнале ЭПР. Понятно, почему при исследовании атомно-молекулярны частиц подобного типа на первый план выступают расчетные методы.
Эмпирические, полуэмпирические методы и метод молекулярной динамики [2] были использованы для изучения атомно-молекулярных частиц указанных соединений и их ассоциатов. В результате проведения компьютерных экспериментов определены структуры частиц и их энергетические параметры. Важной наглядной характеристикой частиц является наличие или отсутствие планарности, что связано с ароматичностью сопряженной системы. Значение потенциалов ионизации полициклических углеводородов, к которым относится изучаемое соединение, используют для предсказания возможности их участия в ферментативных реакциях в качестве субстратов. Ассоциация оказывает влияние на физико-химические характеристики частиц. Простейший тип ассоциата – димер. Крайние структуры димера связаны с параллельной и перпендикулярной ориентацией циклов.
Полученный материал может быть использован для того, чтобы выделить основные пути химической и биохимической деградации бенз(а)пирена и определить производные данного соединения, которые (наряду с бенз(а)пиреном) представляют потенциальную экологическую опасность.

Литература

1. Chemical Carcinogenesis/edited by T"so P.O.P. and DiPaolo J. A. New York: Dekker, 1974.
2. *Jensen F.* Introduction to computational chemistry. New York: Wiley, 2007.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1296 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1296

ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ В ЗАДАЧАХ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ МЕТОДОМ ПЛП-ПОИСКА

Статников И.Н., Фирсов Г.И.
Институт машиноведения им. А.А.Благонравова РАН

Рассматривается возможность на основе планируемого вычислительного эксперимента на стадии математического моделирования эффективно строить свертки получаемой информации в виде линейной регрессии. Реальные возможности полученного регрессионного уравнения в смысле достигаемой точности проверялись на тестовых линейных функциях без «шума» и с ним, где в качестве шума использовалась «добавка» равномерно распределённых по вероятности псевдослучайных чисел в заданном интервале с заданной дисперсией

LINEAR REGRESSION IN THE TASKS OF THE SIMULATION OF DYNAMIC SYSTEMS BY THE METHOD OF THE PLP- SEARCH

Statnikov I.N., Firsov G.I.
A.A. Blagonravov Mechanical Engineering Research Institute of Russian Academy of Sciences

The possibility on the basis of the planned computational experiment at the stage of mathematical simulation to effectively construct the rolls of the obtained information in the form of linear regression is examined. The real possibilities of the obtained regression equation in the sense of the attainable accuracy were checked on the test linear functions without "noise", also, with it, where as noise was used the "additive" of pseudorandom numbers in the assigned interval of c evenly distributed on the probability by the assigned dispersion

Как известно [1], ПЛП-поиск – это метод рационального проектирования объектов искусственной природы, принадлежащий «семейству методов Монте-Карло» и сконструированный на основе Планирования ЛП τ - последовательностей [2]. Метод используется для анализа математических моделей функционирования проектируемых объектов. Очевидно, что в первую очередь качество результатов проектирования при использовании ПЛП-поиска определяется степенью адекватности математической модели реальному процессу действия объекта, но этот вопрос в данной работе не рассматривается. Использование ПЛП-поиска при анализе математических моделей наряду со многими его свойствами предусматривает возможность «свёртывания» получаемой численной информации путём построения аппроксимирующих регрессионных зависимостей разного вида [3]. Напомним, что в ПЛП-поиске основным конструкционным элементом для проведения вычислительных экспериментов являются матрицы планируемых экспериментов, параметрами которых являются N_0 – общее число ВЭ, равное числу строк матрицы планируемых экспериментов, и J – число варьируемых параметров $\alpha_j (j = \overline{1, J})$, равное числу столбцов матрицы планируемых экспериментов. При этом важнейшими параметрами построения матрицы планируемых экспериментов и статистической обработки результатов вычислительных экспериментов также являются: M_j – количество уровней (сечений), на которые разбивается каждый варьируемый параметр α_j (разработаны два варианта построения матрицы планируемых экспериментов: M_j = const (планирование с фиксированным числом уровней) и M_j = var (разноуровневое планирование)); H – число значений критерия в i – ом сечении j – го варьируемого параметра (объём выборки), если M_j = const и $H = H_{ij}$, если M_j = var. В свою очередь, для каждого из указанных вариантов матриц планируемых экспериментов предусмотрены и такие случаи [4-6]:

$$\alpha_j \in (\alpha_{j*}, \alpha_{j**}); \alpha_j \in [\alpha_{j*}, \alpha_{j**}];$$
$$\alpha_j \in (\alpha_{j*} + \varepsilon_j, \alpha_{j**} - \varepsilon_j); \alpha_j \in (\alpha_{j*} - \varepsilon_j, \alpha_{j**} + \varepsilon_j),$$

где α_{j*} и α_{j**} – соответственно нижняя и верхняя границы интервала варьирования *j* – го параметра, а $0 < \varepsilon_j << 1.$

Рассмотрим уравнение линейной регрессии в ПЛП-поиске

$$\hat{y}(\bar{\Theta}, \bar{\alpha}) = \hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1\alpha_1 + \ldots + \hat{\theta}_m\alpha_m. \quad (1)$$

Здесь $\bar{\Theta}$ – вектор коэффициентов уравнения (1), а угольнички над буквами означают, что в уравнении реально стоят оценки величин коэффициентов $\hat{\theta}_j$, а не их истинные значения. Вывод формул оценок коэффициентов уравнения (1) подробно описан в [1]. Реальные возможности уравнения (1) в смысле достигаемой точности проверялись на тестовых линейных функциях $f_{т.,k}(\bar{\alpha})$ без «шума» и с ним, где в качестве шума использовалась «добавка» равномерно распределённых по вероятности псевдослучайных чисел в интервале *(-β, β*) с заранее вычисляемой дисперсией этих чисел $D = (2\beta)^2/12 = \beta^2/3$. Точность аппроксимации проверялась по сумме двух критериев: среднеквадратичному отклонению $s_1(\bar{\alpha})$ между функциями $f_{т.}(\bar{\alpha})$ и $\hat{y}(\bar{\Theta}, \bar{\alpha})$ и среднему значению модуля отклонений между этими функциями $s_2(\bar{\alpha})$, т.е., сумма *S* равнялась:

$$S = c_1 s_1(\bar{\alpha}) + c_2 s_2(\bar{\alpha}), \quad (2)$$

где c_1 и c_2 – веса значимости выбранных критериев точности. В предположении, что $c_1 + c_2 = 1$, и что эти критерии равноценны (сугубо индивидуальное допущение), формула (2) принимает простой вид:

$$S = 0.5(s_1(\bar{\alpha}) + s_2(\bar{\alpha})).$$

В ходе экспериментальных исследований подтвердилась роль параметра œ, введенного в [1] как критерия, минимизирующего или сводящего к нулю количество одинаковых строк в матрице планируемых экспериментов, если выполняются следующие неравенства:

$$2/M^{J-1} \le œ \le 10^{-J} \text{ при } M_j = \text{const} \quad (3)$$

и

$$2/(M^*)^{J-1} \le œ \le 10^{-J} \text{ при } M_j = \text{var}, \quad (4)$$

где $M^* = J/\sum_{j=1}^{J} 1/M_j$ – среднее гармоническое количеств уровней варьируемых параметров.

По поводу использованных тестовых функций скажем лишь то, что в них подбирались различные сочетания коэффициентов (положительные и отрицательные, рациональные и иррациональные, разнопорядковые), а в двух экспериментах выбранные коэффициенты обеспечили отрицательные значения средней величины выборки, что представило возможность уточнить свойства алгоритма построения вектора $\bar{\Theta}$ в уравнении (1). Результаты расчётов подтверждают роль параметра œ и при решении задачи аппроксимации экспериментальных данных уравнением линейной регрессии: чем ближе значения этого параметра к левой границе неравенств (3) и (4) при соблюдении самого левого граничного условия, тем выше точность аппроксимации. Кроме того, результаты показывают, что для большинства исследовавшихся функций критерии S_k достигают лучших значений при разноуровневом планировании, чем при *Mj = const* при приблизительно одинаковых величинах œ. Этот факт объясняется неодинаковым (вероятностным) влиянием варьируемых параметров на величины S_k. Поэтому, при исследовании математических моделей с дальнейшим прицелом на построение регрессионных зависимостей, возможна существенная экономия ВЭ при следующей тактике: сначала с помощью ПЛП-поиска проводится небольшой вычислительный эксперимент (несколько сотен вычислительных экспериментов), затем устанавливается и ранжируется степень вероятностного влияния на те или иные критерии, а после назначается вектор количеств уровней варьируемых параметров $\bar{M} = (M_1, ..., M_J)$, что позволит при общем (суммарном [1]) числе ВЭ, более меньшем, чем если бы проводить вычислительный эксперимент «вслепую», достигнуть желаемой точности аппроксимации.

Очень важна, сама по себе, и точность значений составляющих вектора $\bar{\Theta}$, особенно, при наличии на входах аппроксимируемой функции шумов. Для ответа на этот вопрос проводились следующие вычислительные эксперименты. При построении матрицы планируемых экспериментов для каждой функции к значениям варьируемых параметров α_j добавлялись шумы β_j, равномерно распределённые по вероятности в интервале $(-\beta_j, \beta_j)$ при условии, что $|\beta_j| << 1$, т.е, элементы строки $\alpha_{s,j}$ в матрице планируемых экспериментов равнялись $\alpha_{s,j} = \alpha_j + \beta_j$. Далее, считали отношение *otn* среднеквадратичных отклонений матриц $\{\alpha_{ij}\}$ и $\{\beta_{ij}\}$: $otn = \sigma(\beta)/\sigma(\alpha)$.

Резюмируя изложенный материал, полагаем что формулы линейной аппроксимации [1] результатов вычислительных экспериментов, полученных на математических моделях, при соблюдении описанных рекомендаций обеспечивают наперёд заданную точность, если установлен сам факт линейной зависимости конструктивных параметров от предъявляемых критериев. Это позволяет во многих случаях перейти от

сложных дифференциальных зависимостей к простым (например, алгебраическим) и использовать последние как предварительные при проектирования объекта, а иногда, и как окончательные.

Литература

1. *Статников И.Н., Андреенков Е.В.* ПЛП-поиск – эвристический метод решения задач математического программирования. – М.: ИИЦ МГУДТ, 2006г. – 140 с.
2. *Соболь И.М.* Многомерные квадратурные формулы и функции Хаара. – М.: Наука, 1969 г. – 288 с.
3. *Статников И.Н., Фирсов Г.И.* Использование ПЛП-поиска в задачах обработки результатов вычислительного эксперимента // Информационно-вычислительные технологии в решении фундаментальных проблем и прикладных научных задач. Сессия ИВТН-2004. Сборник материалов. - М.: NC Group / НВК “Вист”, 2004. - С.51.
4. *Статников И.Н., Фирсов Г.И.* О дополнительных возможностях в алгоритмах ПЛП-поиска при проведении вычислительных экспериментов // Информационно-вычислительные технологии в решении фундаментальных проблем и прикладных научных задач. Сессия ИВТН-2007. Сборник материалов. - М.: NC Group / НВК “Вист”, 2007. - С.17.
5. *Статников И.Н., Фирсов Г.И.* О некоторых инструментальных возможностях ПЛП-поиска // Информационно-вычислительные технологии в решении фундаментальных проблем и прикладных научных задач. Сессия ИВТН-2009. Сборник материалов. - М.: НВК “Вист”, 2009. - С.19.
6. *Статников И.Н., Фирсов Г.И.* Инструментальные возможности ПЛП-поиска // Обозрение прикладной и промышленной математики. – 2011. – Т. 18, вып.5. – С. 808.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1302 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1302

АНАЛОГ ФОРМУЛ КИРХГОФА ДЛЯ НЕСТАЦИОНАРНОГО ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ В ПРОВОДЯЩЕЙ СРЕДЕ

Ефимова И.Г., Ильинский А.С.
Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова

Во временной области получено интегральное представление для векторов напряженностей нестационарного электромагнитного поля в проводящей среде. Поле в произвольный момент времени в любой точке замкнутого объема представлено в виде суммы интегралов по объему и по поверхности, ограничивающей этот объем. Подынтегральные функции содержат напряженности полей и сторонние токи, а также их производные по времени в моменты, предшествующие моменту наблюдения

THE KIRCHHOFF-TYPE FORMULAS FOR THE TIME-DEPENDENT ELECTROMAGNETIC FIELD IN A CONDUCTING MEDIUM

Efimova I.G., Ilinskiy A.S.
M.V.Lomonosov Moscow State University

An integral representation is obtained in the time domain for the vectors of the intensities of the nonstationary electromagnetic field in a conducting medium. At any instant, the field at an arbitrary point in a closed volume is represented as the sum of an integral over the surface bounding this volume and an integral over the volume. The integrands contain field intensities, external currents, and their time derivatives at instants preceding the observation

Нестационарное электромагнитное поле в непроводящей среде выражается в интегральной форме через напряженности электрического и магнитного полей на замкнутой поверхности. При этом напряженности полей, входящие в интегралы являются функциями запаздывающего времени. Эти представления традиционно применяются для вывода интегральных уравнений, используемых для математического моделирования рассеяния нестационарного электромагнитного поля идеально проводящими телами и диэлектрическими телами без потерь, расположенными в непроводящей среде.

Однако до последнего времени метод временных интегральных уравнений не был разработан для случая проводящей среды, так как не было найдено интегральное представление для нестационарного электромагнитного поля в такой среде. В данной работе получено интегральное представление во временной области для нестационарного электромагнитного поля в однородной среде, обладающей проводимостью.

Рассматривается однородная изотропная среда с материальными параметрами, не зависящими ни от времени, ни от пространственных координат. Предполагается, что электрическая и магнитная проницаемости ε и μ, а также электрическая и магнитная проводимости σ^e и σ^m, постоянны и что напряженности электрического и магнитного полей $\boldsymbol{E}$ и $\boldsymbol{H}$ – конечные функции, непрерывные вместе со всеми своими производными во всех обыкновенных точках пространства (там, где нет резких изменений физических свойств среды). Также предполагается, что все функции времени, рассматриваемые в данной работе (напряженности электрического и магнитного полей и объемные плотности сторонних электрического и магнитного токов $\boldsymbol{j}^{eext}$ и $\boldsymbol{j}^{mext}$), и их производные равны нулю до момента времени $t = 0$ включительно.

Для вывода интегрального представления напряженности нестационарного электрического поля, удовлетворяющего неоднородному волновому уравнению, мы используем метод, примененный в монографии [1], и векторный аналог теоремы Грина для замкнутого объема V, ограниченного поверхностью S, удовлетворяющей условиям Ляпунова. Волновое уравнение можно упростить путем исключения первой производной поля с помощью соответствующей замены переменной. Подробный вывод окончательной формулы

$$4\pi\tilde{\tilde{E}}\,|_{\tau=t}=\int_V[-\frac{1}{r}\mu(\frac{\partial\tilde{\tilde{j}}^{eext}}{\partial t}\,|_{\tau=t-r/c}-\frac{ac^2}{2}\,\tilde{\tilde{j}}^{eext}\,|_{\tau=t-r/c})-\frac{1}{r}(b-\frac{a^2c^2}{4})\tilde{\tilde{E}}\,|_{\tau=t-r/c}-[\tilde{\tilde{j}}^{mext}\,|_{\tau=t-r/c}\frac{1}{r^2}+$$

$$+\frac{1}{rc}\frac{\partial\tilde{\tilde{j}}^{mext}}{\partial t}\,|_{\tau=t-r/c}]\times\vec{r}_0-$$

$$-\frac{1}{r}\sigma^m\tilde{\tilde{j}}^{eext}\,|_{\tau=t-r/c}+\frac{1}{r}(\frac{1}{r}div\tilde{\tilde{E}}\,|_{\tau=t-r/c}+\frac{1}{c}\frac{\partial div\tilde{\tilde{E}}}{\partial t}\,|_{\tau=t-r/c})\vec{r}_0]dvdt-\int_{S_2}((\frac{1}{r^2}(\vec{n}\cdot\tilde{\tilde{E}}\,|_{\tau=t-r/c})+$$

$$+\frac{1}{cr}(\vec{n}\cdot\frac{\partial\tilde{\tilde{E}}}{\partial t}\,|_{\tau=t-r/c}))\vec{r}_0+$$

$$+[\vec{r}_0\times(\frac{1}{r^2}[\tilde{\tilde{E}}\,|_{\tau=t-r/c}\times\vec{n}]]+\frac{1}{cr}[\frac{\partial\tilde{\tilde{E}}}{\partial t}\,|_{\tau=t-r/c}\times\vec{n}])-\frac{1}{r}\sigma^m[\vec{n}\times\tilde{\tilde{H}}\,|_{\tau=t-r/c}]-\frac{1}{r}\mu[\vec{n}\times(\frac{\partial\tilde{\tilde{H}}}{\partial t}\,|_{\tau=t-r/c}-\frac{ac^2}{2}\tilde{\tilde{H}}\,|_{\tau=t-r/c})])ds$$

представлен в [2]. Здесь $a=\mu\sigma^e+\varepsilon\sigma^m$, $b=\sigma^m\sigma^e$, $c=\frac{1}{\sqrt{\varepsilon\mu}}$ - скорость света, тильда обозначает произведение соответствующей функции и множителя $\exp(ac^2t/2)$.

Формулу для магнитного поля легко получить с помощью принципа двойственности. В соответствии с полученными соотношениями поле в любой момент времени в любой точке пространства некоторого объема выражается через интеграл по поверхности, ограничивающей этот объем, и интеграл по нему. Подынтегральные функции содержат значения напряженностей полей, значения плотностей токов и производные этих величин в моменты времени, предшествующие моменту наблюдения.

Полученные интегральные представления во временной области для нестационарных электрического и магнитного полей могут быть использованы для вывода интегральных уравнений, что позволит распространить метод временных интегральных уравнений на задачи электродинамического анализа структур с проводящими средами.

Литература

1. *Стрэттон Дж. А.* Теория электромагнетизма. М.-Л.: ГИТТЛ, 1948.
2. *Ильинский А.С., Ефимова И.Г.* Теорема эквивалентности для векторов напряженностей нестационарного электромагнитного поля в проводящей среде // Радиотехника и электроника. 2011. Т.56. №2. С. 143-151.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1304 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1304

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ЭНТАЛЬПИЙ ОБРАЗОВАНИЯ ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ В КОНДЕНСИРОВАННОМ СОСТОЯНИИ

Зауэр Е.А.
Волгоградский государственный технический университет

Сравнением рассчитанных полуэмпирическими квантово-химическими методами энтальпий образования ~50 полициклических ароматических углеводородов и их экспериментальных значений в конденсированном состоянии показано, что наилучшая корреляция между ними наблюдается при использовании метода PM3. С помощью этого метода и выведенного уравнения вычислены энтальпии образования для ~60 соединений данного ряда

PREDICTION OF ENTHALPIES OF FORMATION OF POLYCYCLIC AROMATIC HYDROCARBONS IN THE CONDENSED STATE

Zauer E.A.
Volgograde State Technical University

Comparison of the experimental enthalpies of formation of ~50 polycyclic aromatic hydrocarbons in the condensed state with those calculated by semiempirical quantum-chemical methods showed that the PM3 approximation ensures the best agreement between the experimental and calculated values. The enthalpies of formation of ~60 compounds of this series were calculated using the PM3 method and the corresponding linear regression equation

Квантово-химические методы расчета широко используются для определения энтальпий образования соединений разных классов.

В данной работе с помощью полуэмпирических квантово-химических методов выполнен расчет энтальпий образования полициклических ароматических углеводородов в конденсированном состоянии.

Для выбора метода квантово-химического расчета с помощью программы MOPAC, в которую входят методы PM3, MINDO, AM1 и MNDO, были выполнены полная оптимизация геометрии и рассчитаны энтальпии образования около 50 полициклических ароматических углеводородов с известными экспериментальными значениями энтальпий образования в конденсированном состоянии.
Сравнение экспериментальных и расчетных значений показало, что наилучшая корреляционная связь наблюдается при использовании метода PM3. Она хорошо описывается уравнением линейной регрессии, которое было использовано для прогнозирования энтальпий образования в конденсированном состоянии около 60 полициклических ароматических углеводородов.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1305 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1305

МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ И ИСПУСКАНИЯ КРАСИТЕЛЯ НИЛЬСКОГО КРАСНОГО И ЕГО КОМПЛЕКСОВ С РАЗЛИЧНЫМИ АНАЛИТАМИ ДЛЯ ВИРТУАЛЬНОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ХЕМОСЕНСОРОВ

Фрейдзон А.Я., Сафонов А.А., Багатурьянц А.А.
Центр фотохимии РАН

SIMULATION OF ABSORPTION AND EMISSION SPECTRA OF NILE RED DYE AND ITS COMPLEXES WITH SOME ANALYTES FOR VIRTUAL DESIGN OF MOLECULAR CHEMOSENSORS

Freydzon A.Ya.
Photochemistry Center of the Russian Academy of Sciences

Методом TDDFT с функционалом PBE0 и дисперсионной поправкой Гримме рассчитаны спектры поглощения и испускания красителя Нильского Красного, предлагаемого в качестве индикатора для молекулярных хемосенсоров, а также его межмолекулярных комплексов с различными аналитами. Ряд аналитов включал воду, аммиак, метанол, этанол, ацетон, ацетонитрил, хлороформ и бензол

The absorption and emission spectra of the Nile Red dye, which is intended for use as an indicator in molecular chemosensors, and its intermolecular complexes with a number of small analyte molecules are simulated by TDDFT with the PBE0 functional and Grimme\'s dispersion correction. The series of analytes included water, ammonia, methanol, ethanol, acetone, acetonitrile, chloroform, and benzene

Методом TDDFT с функционалом PBE0 и дисперсионной поправкой Гримме рассчитаны спектры поглощения и испускания красителя Нильского Красного, предлагаемого в качестве индикатора для молекулярных хемосенсоров, а также его межмолекулярных комплексов с различными аналитами. Ряд аналитов включал воду, аммиак, метанол, этанол, ацетон, ацетонитрил, хлороформ и бензол.
Для комплексов с различным расположением красителя и аналита рассчитывались энергии связи в основном состоянии. Обнаружено, что спирты образуют наиболее прочные комплексы с красителем, энергия связи воды несколько меньше. Аммиак и органические растворители образуют слабо связанные комплексы.

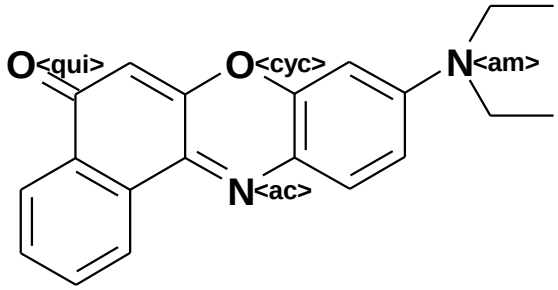

Рис.1. Сайты *связывания* аналитов в Нильском Красном

Обнаружено, что комплексообразование с аналитами незначительно влияет на положение полосы поглощения и полосы флуоресценции из локально-возбужденного (LE) состояния. Однако испускание из скрученного состояния с переносом заряда (TICT) оказалось крайне чувствительным к комплексообразованию. Наиболее отчетливо этот эффект проявляется в комплексах со спиртами и, в меньшей степени, с водой.
Обнаружено также, что диполь-дипольное взаимодействие между красителем и аналитом в возбужденном состоянии сильнее, чем в основном, за счет большего дипольного момента красителя в возбужденном состоянии.
Таким образом, показано, что TICT флуоресценция Нильского Красного может служить аналитическим сигналом при определении наличия спиртов в воздухе, но не позволяет различить метанол и этанол

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1312 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1312

НОВЫЙ МЕТОД ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ DFT БОЛЬШИХ МОЛЕКУЛ

Аникин Н.А., Кузьминский М.Б.
Институт органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН

Предложен новый метод, позволяющий моделировать расчеты DFT больших молекул, и проведена его первичная апробация. Метод использует модельный одноэлектронный гамильтониан (фокиан), аппроксимирующий фокиан современных методов функционала плотности (DFT) в виде, позволяющем кардинально уменьшить расчетное время. По требованиям к объемам вычислительных ресурсов наш метод близком к более грубым полуэмпирическим методам типа PM3, и к модельных методам DFT типа SCC-DFTB

NEW METHOD FOR DFT MODELLING OF LARGE MOLECULES

Anikin N.A., Kuzminskij M.B.
N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian Academy of Sciences

The new method, allowing to model calculations of DFT of big molecules is offered, and primary approbation is carried out it. The method uses a modeling one-electronic Hamiltonian (Fockian), approximating Fockian of modern methods of a functional of density (DFT) in a look allowing cardinally to reduce computer time. According to requirements to volumes of computing resources our method it is close to more rough semi-empirical methods of the PM3 type, and to modeling to the SCC-DFTB type DFT methods

Предложен новый метод, позволяющий моделировать расчеты DFT больших молекул, и проведена его первичная апробация. Метод использует модельный одноэлектронный гамильтониан (фокиан), аппроксимирующий фокиан современных методов функционала плотности (DFT) в виде, позволяющем кардинально уменьшить расчетное время. По требованиям к объемам вычислительных ресурсов наш метод близок к более грубым полуэмпирическим методам типа PM3, и к модельных методам DFT типа SCC-DFTB [1].
Фокиан предложенного метода состоит из нескольких физически различных членов-операторов: оператор кинетической энергии, кулоновского члена, и обменно-корреляционного потенциала. Эти операторы имеют различную физическую природу и различную зависимость от геометрической и электронной структуры молекулы и составляющих ее атомов и связей. Матрицы оператора кинетической энергии и интегралов перекрывания вычисляются точно; матрица кулоновского оператора (одноэлектронная и двухэлектронная ее части) вычисляются неэмпирически. Матрица обменно-корреляционного оператора аппроксимируется суммой атомных вкладов с использованием эмпрических атомных параметров, что позволило сильно уменьшить время расчета.
Проведен выбор эталонных молекул, включающих молекулярные структуры, типичные для протеинов и докинг-комплексов, и типичные фрагменты наноструктур типа фуллеренов, нанотрубок и т.д. Проведены расчеты первого набора из более чем 5 тысяч таких структур методом PBE в известном минимальном базисе MINI. Для эффективности организовано специализированное хранилище результатов расчетов. На языке Fortran-95 разработана и отлажена программа для подбора указанных эмпирическх параметров. Проведена первичная апробация этой программы с подбором параметров атомов H, C, N, O, F, S, Cl.
Апробация показала значительно более хорошее, систематическое воспроизведение матриц фокиана DFT, чем в близком по быстродействию методе SCC-DFTB, и тем более в полуэмпирических методах типа PM3. Это значительно повышает надежность метода по сравнению с альтернативными приближенными методами - SCC-DFTB и полуэмпирическими методами, так как в нашем методе конечные расчетные свойства (электронное распределение, орбитальные и полная энергия, дипольные моменты и т.д.) опираются на систематическую близость нашего фокиана к фокиану DFT, а не на случайное воспроизведение конечных расчетных свойств (что характерно для полуэмпирических методов и отчасти для SCC-DFTB). Одновременно достигается быстродействие на уровне этих альтернативных методов, т.е. на порядки больше, чем в базовом методе DFT.
Работа поддержана РФФИ, проект 11-07-00470.

Литература

1. Zheng G., Lundberg M., Jakowski1 J., Vreven T., Frisch M.J., Morokuma K. Int. J. Quant. Chem, 2009. v.109, N9. p.1841–1854.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1317 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1317

ПРОГРАММНО-АВТОМАТИЗИРОВАННЫЕ СИСТЕМЫ АНАЛИЗА ГЕНОМОВ КАК ФАКТОР ИНТЕНСИФИКАЦИИ ГЕНОМНОЙ СЕЛЕКЦИИ СЕЛЬСКОХОЗЯЙСТВЕННЫХ ЖИВОТНЫХ

Спиридонов А.В., Косовский Г.Ю.
ГНУ ЦЭЭРБ Россельхозакадемии

Задачи сохранения генетических ресурсов и ускорение селекционно-генетической работы требует специального подхода, включающего в себя сохранение полученной информации о геномах животных и её обработку с целью интенсификации селекционно-генетической работы

SOFTWARE-AUTOMATED GENOME ANALYSIS, AS A FACTOR OF THE INTENSIFICATION OF GENOMIC BREEDING OF FARM ANIMALS

Spiridonov A.V., Kosovskij G.Yu.

Objectives for conservation of genetic resources and accelerate breeding and genetic work requires a special approach, which includes maintaining the information about the genomes of animals and processing it in order to intensify the work of selection and genetic

Задачи сохранения генетических ресурсов и ускорение селекционно-генетической работы требует специального подхода, включающего в себя сохранение полученной информации о геномах животных и её обработку с целью интенсификации селекционно-генетической работы. Для решения исследовательских задач использовались различные поколения маркеров, характеризующих генетический полиморфизм. При помощи этих маркеров осуществлялось решение задач по определению чистопородности, генографического происхождения пород и видов, разработка программ сохранения местных пород, а также картирование и определение ассоциаций генов, ответственных за хозяйственно-полезные признаки с целью проведения геномной селекции. Однако во всех этих программах использовалось ограниченное количество молекулярно-генетических маркеров полиморфизма. Обычно такие программы включают в себя в среднем генотипирование до 10 локусов. Последнее время все шире находят своё применение методы, основанные на одновременном анализе от нескольких сот тысяч до нескольких миллионов однонуклеотидных полиморфизмов. Получаемые таким образом данные уже сегодня позволяют при наличии средств и программ автоматизированной обработки данных генетического сканирования осуществлять маркер-направленную или геномную селекцию сельскохозяйственных животных. А создание программных продуктов является актуальной проблемой современной биоинформатики.
Несмотря на достигнутые результаты в области генетической паспортизации и обработки больших массивов данных, на сегодняшний день на рынке отсутствуют программные продукты, позволяющие подбирать родительские пары для получения потомства с заданными характеристиками. Разработка подобных продуктов представляет большую практическую и теоретическую значимость.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1318 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1318

БИОМЕДИЦИНСКАЯ ОНТОЛОГИЯ НОРМАЛЬНЫХ ФИБРОНЕКТИНОВ И ЕГО МУТАНТНЫХ ТРАНСКРИПТОВ, ПОЛУЧЕННЫХ <I> ИН СИЛИКО</I>

Овчарук И.Н., Федотов А.В.
Кемеровская государственная медицинская академия

Во введении к докладу изложена краткая ситуация с методами решения вычислительных задач для получения трнскриптов с ко-доминантных генов фибронектина, имеющего 7 мРНК и реализующих механизм альтернативного сплайсирования в зависимости от эпигеномных состояний клетки. В докладе излагаются данные решения анализа альтернативно спласированных дистантных онтологических последовательностей с помощью различных мРНК, содержащихся в транскриптах ко-доминантных фибронектинов БД МО. Нами были полученных ин силико методом альтернативного сплайсирования Фн для гена FN1. В докладе и в наших ранее выполненных работах, излагаются методы решения вычислительной задачи поиска дистантных и онтологических подобий общих у разных видов животных и человека и показана их роль в структурных конформациях при реализации нормального и патологического фенотипа молекулярной динамики. Получены и проанализированы результаты этого модулирования для общей онтологической последовательности Фн. Совокупность использованных нами программ вычислительного моделирования, связанных модулей и расширений для анализа БД медицинской диагностики, позволяют решать не только задачи научного характера, но и вопросы практического применения для медицинской диагностики. Полученные нами данные представляет интерес для исследователей в области протеомики, геномики, текстомики, клинической персональной медицины

BIOMEDICAL ONTOLOGY OF NORMAL FIBRONECTINS AND ITS MUTANT TRANSCRIPTS, OBTAINED <I> IN SILICO</I>

Ovcharuk I.N., Fedotov A.V.
Kemerovo State Medical Academy

In the introduction to the report is presented brief situation with the methods of solution of computational problems for obtaining transkripts from the co-dominant genes of fibronectins, which has 7 mRNS and realizing the mechanism of alternative splaysing, depending on the epigenetic states of cell. In the report are presented the data of the decision of the analysis of the alternatively placed distant ontological sequences with the aid of different mRNS, which are contained in the transcripts of codominant fibronectins DB MO. By us were obtained other in silico by the method of alternative splaysing. of for theFN1. In the report and in our previously executed works, are presented the methods of the solution of the computational problem of the search of the distant and ontological similarities of animals general in different types and man and is shown their role in the structural conformations in the implementation of the normal and pathologic phenotype of molecular dynamics. The results of this modulation for the general ontological sequence Ib. are obtained and analyzed. The totality of those used by us the programs of computational simulation, connected modules and expansions for the analysis [BD] of medical diagnostics, they make it possible to solve not only problems of scientific nature, but also questions of practical application for medical diagnostics. Obtained by us data there is interest for the researchers in the region of proteomics, genomics, tekstomics, clinical personal medicine

Биомедицинская онтология (БО) - становится реальным инструментом в геномных и протеомных исследованиях, где анализ сложных систем может быть интегрирован в онтологические связи благодаря современным возможностям биоинформационных технологий. Используя эту возможность мы исследовали функции фибронектинов (Фн) которые представили в виде генно-онтологических связей в соответствии с их различными наборами логики, реализуемыми за счет альтернативного сплайсинга 7 мРНК для гена 1 Фн. Для анализа использовали линейку программ, RiboWeb, EcoCyc,MBO,GO,TaO(DLs) и их развитые модули такие

как SOBA, Cytoscape, Proteomics, PRIDE и др.(1)
Компоненты и модули PRotein Ontology(PRO) охватывают как аналитику так и классификацию белков на основе эволюционных отношений. При этом белки представлены в нескольких формах: генной - со связями белков по их семействам и сигнальным связям соответственно их онтологическому статусу и дополнены изоморфными вариантами.

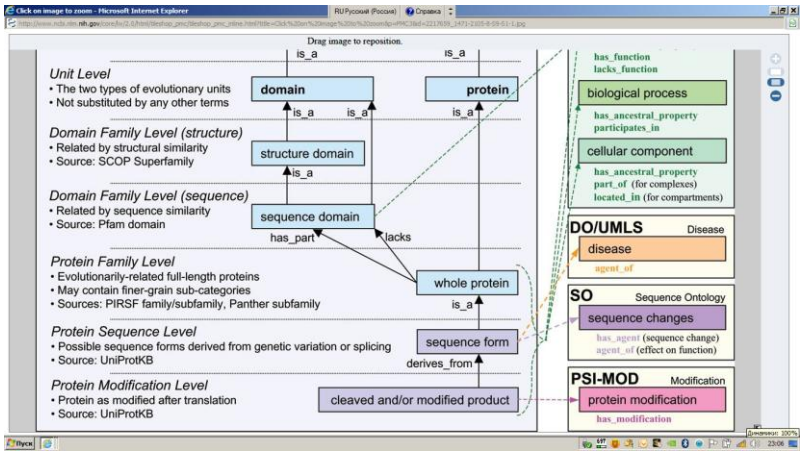

Рис.1. Часть общей логики и стратегии МО для выбора онтологических связей фибронектина и его молекулярных взаимодействий реализуемых на уровне модуляции и в патологических состояниях.

Задачей настоящего исследования было развить далее с помощью вычислительного эксперимента, проблему, которую мы изучаем, с 1980 г. в экспериментальных условиях и с 1990 г. вычислительных ресурсов и БД.[2-4].
Нами сравнены варианта альтернативного сплайсинга мРНК по их ко-доминантным вариантам гена FN1 БД SOBA - по экпрессии дистантных участков в вариантах адаптации клеток к условиям, побуждающим протеом реализовать свой обычный вариант альтернативного сплайсинга и вариант сплайсирования при появлении у клеток **профиля адаптации к усилению пролиферации**. При их выравнивании была установлена общая онтологичесая последовательность - MIFEKHGFRRTTPP. Она также присутствует в составе транскриптов домена Фн тип 3 и РНК Fn27.(6). В докладе будет изложена концептуальная логика такой связи – быть сразу причиной двух разнонаправленных процессов клеточной коммуникации.

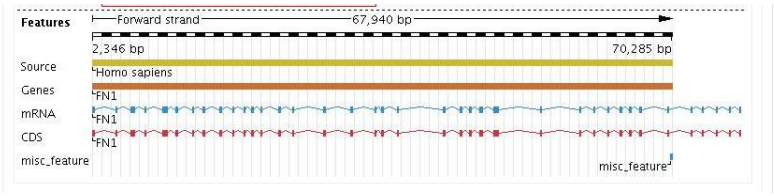

Рис.2. Картирование гена FN1 и его мРНК у человека.

Выбор мРНК для Фн тип 1, и их реконструкция проведена ин силико в модуле программы МО - транскриптом (SOBA transcriptom).(рис.2 внизу)

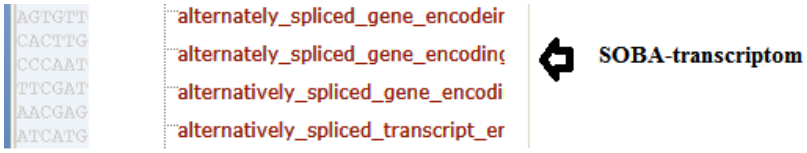

Рис.3. Модуль SOBA- для получения альтернативно сплайсированных транскриптов.

Анализ полученных нами данных в PICR дает возможность последовательно раскрыть наличие АП у разных видов животных и человека при различных состояниях их вовлечения в эпигеномный вариант реализации альтернативного сплайсирования (рис. 4) (внизу).

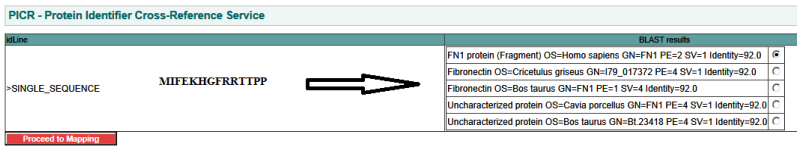

Рис.4.Результат анализа последовательности (пептида) MIFEKHGFRRTTPP в PIKR.(Protein Identifier Cross-reference Service)

Значение таких исследований имеет, как научную перспективу, так и клиническое значение.

Литература

1. *Baker, P. G Goble, . C.A. Bechhofer, S. Paton, N.W. Stevens, R. and A Brass*. An Ontology for

Bioinformatics Applications. Bioinformatics, 15(6):510-520, 1999.
2. *Fedotov A.V., Dyakonov L.P.* European Journal of Cell Biology v.74, p.67, 997.
3. *Fedotov A, Ovcharuk I.*, Research of the mechanism of self-assembly fibronectins in modelling system, 2004.DOI:10.1240/sav_gbm_2004_h_000715
4. *Федотов А.В. Овчарук И.Н*. Эволюция, структураи молекулярная динамикавзаимодействия фибронектиновых мотивов. Материалы ИВТН,2004 http://www.ivtn.ru/2004/biomedchem/enter/paper.php?p=117
5. *Федотов А.В., Винтер В.Г., Овчарук И.Н.* Компьютерный анализ дистантных аминокислотных последовательностей в структуре фибронектинов. Материалы ИВТН-2003, с.10
6. *Helen Y. Wang, Juhua Zhou, Kuichun Zhu, Adam I. Riker, Francesco M. Marincola, Rong-Fu Wang* Role in Extracellular Matrix Formation and Tumor Metastasis J Exp Med. 2002 June 3; 195(11): 1397–1406.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1319 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1319

ПОИСК МЕТОДАМИ IN SILICO БЕЛКОВ, СХОДНЫХ С ИЗВЕСТНЫМИ БЕЛКАМИ СИНАПТОНЕМНОГО КОМПЛЕКСА, В ПРОТЕОМАХ МХОВ, ВЫСШИХ ГРИБОВ И ПРОСТЫХ METAZOA

Гришаева Т.М.
Институт общей генетики им.Н.И.Вавилова РАН

Проведён поиск методами in silico в протеомах мхов, высших грибов и простых Metazoa белков, сходных с известными белками специфической структуры мейоза – синаптонемного комплекса (СК) – семи модельных видов от дрожжей до человека. Показано, что наивысшие показатели сходства у компонентов СК с доменом HORMA, структурирующим хромосомы (Hop1 дрожжей, ASY1 и ASY2 арабидопсиса), у фермента FKBP6 мыши и у белков SYCP3 и SC65 позвоночных. Наиболее родственные белки найдены у мхов, кишечнополостных, губок, плакозоа и нематод

THE IN SILICO SEARCH OF PROTEINS SIMILAR TO KNOWN SYNAPTONEMAL COMPLEX PROTEINS IN PROTEOMES OF MOSSES, HIGH FUNGI AND SIMPLE METAZOA

Grishaeva T.M.
V.I. Vavilov Institute of General Genetics of Russian Academy of Sciences

A search in silico methods in the proteome of mosses, fungi and higher Metazoa simple proteins that are similar to known proteins specific structure of meiosis - synaptonemal complex (SC) - the seven model species from yeast to humans. It is shown that the highest similarity score in the domain of IC components HORMA, the structuring of the chromosome (Hop1 yeast, ASY1 ASY2 and Arabidopsis), the enzyme FKBP6 and mouse proteins SYCP3 and SC65 vertebrates. Most related proteins found in moss, coelenterates, sponges, nematodes and plakozoa

Вопрос о происхождении и эволюции механизма мейоза, в том числе белков, участвующих в мейотических процессах, является в настоящее время одним из актуальных в клеточной биологии [1, 2]. Ранее мы показали, что некоторые структурные белки мейоза тяготеют к бактериальным белкам, тогда как другие – к архейным. Однако сходство этой группы белков с прокариотическими белками весьма низкое, часто на уровне такового для случайных наборов аминокислот [3]. Задачей настоящего исследования явился поиск в протеомах мхов, высших грибов и простых Metazoa белков, сходных с известными белками синаптонемного комплекса (СК) – белковой структуры, формирующейся между конъюгирующими гомологами в профазе I мейоза. Среди примитивных эукариот наибольшее сходство с белками СК показали белки зелёных и бурых водорослей и низших грибов [4].

Было исследовано 33 белка синаптонемного комплекса (СК) семи модельных видов эукариот: дрожжей Saccharomyces cerevisiae и Schizosaccharomyces pombe (Ascomycota), насекомого Drosophila melanogaster, растения Arabidopsis thaliana, нематоды Caenorhabditis elegans, рыбы Danio rerio (в одном случае – Anoplopoma fimbria), млекопитающего Mus musculus.

Аминокислотные последовательности белков СК искали в базах данных NCBI (http://www.ncbi.nlm.nih.gov/guide/) и UniProtKB/TrEMBL (http://www.uniprot.org/uniprot/). Функциональные домены белков СК определяли с помощью программы CDART (http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/cdd/wrpsb.cgi?). В качестве контроля использовали случайные аминокислотные последовательности, генерированные из оригинальных белков программой RandSeq (http://web.expasy.org/randseq/). С помощью программы Protein BLAST (NCBI) вели поиск сходных последовательностей в протеомах мхов (Bryophyta, Anthocerotophyta, Marchantiophyta), высших грибов (Ascomycota и Basidiomycota) и разных групп простых многоклеточных. Среди них кишечнополостные животные (Cnidaria, Ctenophora) и часть Bilateria: губки (Porifera) и плакозоа (Placozoa), Mesozoa, Gnathostomulida, плоские черви (Platyhelminthes) – представители Acoelomata – и ряд таксонов, представляющих первичноротых Coelomata. Параметры BLAST: Max. target sequences – 5000, Expect threshold – 100, остальные – по умолчанию. Анализировали параллельно оригинальные белки СК и случайные аминокислотные последовательности. Показатель сходства Score (результат работы программы BLAST) учитывал три параметра: число совпадений аминокислот, число аминокислот одного типа и число так называемых gaps, т.е. тех случаев, когда в одном белке на данном месте есть аминокислота, а в другом она отсутствует.

Показано, что Mesozoa, Gnathostomulida и часть первичноротых Coelomata не имеют белков, обладающих значимым сходством с белками СК.

Выявлены сверхвысокие показатели сходства Score белков СК дрожжей в протеомах дрожжей и белков СК нематоды в протеомах нематод (сходство «само на себя»), чего и следовало ожидать. Если их не учитывать, то наивысшие показатели сходства с белками почти всех исследованных групп эукариот – у компонентов

латеральных элементов СК, несущих домен HORMA, структурирующий хромосомы (Hop1 дрожжей, ASY1 и ASY2 арабидопсиса и в меньшей степени у HIM-3 нематоды). Максимальные показатели Score для белков Hop1 дрожжей (86), ASY1 (278) и ASY2 (183) арабидопсиса – у белков из протеомов мхов, для белка HIM-3 нематоды (68) – у плоских червей и кишечнополостных. У родственных для C. elegans видов нематод обнаружен белок, аннотированный как HIM-3, хотя сходство невелико (43).
Компоненты СК, несущие другие функциональные домены (SCP-1, SMC, Smc), имеют невысокое, но достоверное сходство с белками нематод и некоторых других групп эукариот. Стабильно высокие показатели сходства имеет белок FKBP6 мыши (Score max = 208 для белков губок и плакозоа), но это фермент, а ферменты всегда более консервативны, чем структурные белки.
Выявлено высокое сходство компонентов СК позвоночных – SYCP3 и SC65 – с белками кишечнополостных животных (Score max 148 для SYCP3 и 105 для SC65), губок и плакозоа (Score max 116 и 110 соответственно), а также нематод (Score max = 130 для SC65). У губки Amphimedon queenslandica найден белок, аннотированный как SYCP3, у круглого червя аскариды – белок, аннотированный как SC65. Для контроля мы сравнили между собой SC65 мыши и рыбы (Score=456), а также SYCP3 мыши и рыбы (Score=263). Видно, что полученные нами показатели сходства этих двух белков с белками данной группы эукариот весьма велики.
При анализе сходства компонентов центрального пространства СК с белками губок и плакозоа обнаружены высокие показатели сходства не только для оригинальных белков, но и для генерированных на их основе случайных аминокислотных последовательностей, содержащих аминокислоты в тех же пропорциях, что и оригинальные белки, и имеющих ту же длину. Это сходство показывают в основном два белка – XP_002107637.1 и XP_002111687.1 – аннотированнные как гипотетические белки TRIADDRAFT из протеома Trichoplax adhaerens (Placozoa), причём эти два белка показывают высокое сходство с оригинальными и случайными белками СК дрожжей, дрозофилы, арабидопсиса, нематоды, мыши и рыбы. Этот феномен можно объяснить наличием ряда специфичных функциональных доменов, в том числе доменов SMC и Smc, присутствующих также в известных белках центрального пространства СК.
Таким образом, среди структурных белков СК наибольшим сходством с белками изученных групп эукариот обладают белки Hop1, ASY1 и ASY2, несущие функциональный домен HORMA, структурирующий хромосомы и рекрутирующий другие белки. Поскольку синаптонемный комплекс строится на основе хромосомных осей путём белок-белкового взаимодействия, понятно, что сходные белки, участвующие в организации хромосом, должны присутствовать в протеомах всех эукариот, имеющих мейоз, что мы и наблюдаем в наших исследованиях.

Литература

1. *Maguire M. P*. Evolution of meiosis // J. Theor Biol. 1992. V.154. P.43-55.
2. *Богданов Ю.Ф*. Изменчивость и эволюция мейоза // Генетика. 2003. Т.39. С.453-473.
3. *И.А. Захаров, С.Я. Дадашев, Т.М. Гришаева*. Ортологи белков мейоза в протеомах прокариот // Доклады Академии наук. 2010. Т.435. №5. С.696-698.
4. *Т.М. Гришаева*. О происхождении белков синаптонемного комплекса: некоторые результаты анализа in silico // Материалы международной конференции «Хромосома 2012» (Новосибирск, 2-7 сентября 2012 г.). Новосибирск: Редакционно-издательский центр НГУ, 2012. С.82-83.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1324 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1324

ИМИТАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ МИГРАЦИИ РАДИОНУКЛИДОВ ПО ТРОФИЧЕСКИМ ЦЕПЯМ И СЕТЯМ В ТРАВЯНИСТЫХ ЭКОСИСТЕМАХ

Мамихин С.В.
Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова

Разработана имитационная модель, которая позволяет прогнозировать с шагом в 1 сутки содержание Cs-137 в компонентах пищевых цепей естественных травянистых экосистем и агроценозов в различных режимах хозяйственного использования (например стойловое содержание в зимний период, варьирование кормового рациона, применение специализированных кормовых добавок и т.д.) при различных условиях поступления радионуклидов. При наличии данных о биомассе растений и животных может проводится расчет запаса радионуклидов на рассматриваемой территории

THE SIMULATION MODEL OF MIGRATION OF RADIONUCLIDES ON ТРОФИЧЕСКИМ TO CHAINS AND NETWORKS IN GRASS ECOSYSTEMS

Mamihin S.V.
M.V.Lomonosov Moscow State University

The simulation model is designed which allows to predict with step per 1 day a Cs-137 contents in the components of food chains in natural grass ecosystems and agrocenosis in various regimes of economic usage (for example a closed contents in winter, variation of food ration, application of the specialized food components etc.) under various conditions of radionuclide arrival. At presence of the data about a biomass of plants and animal the calculation of radionuclide store on considered territory can will be carried out

Радиоактивное загрязнение окружающей среды сопряжено с процессами перераспределения радионуклидов между компонентами экосистем, в том числе и по пищевым цепям и сетям. Интенсивность миграции радионуклидов в этом случае зависит от целого ряда факторов, без учета влияния которых невозможно получить адекватный количественный прогноз загрязнения участников трофических взаимоотношений. В

радиоэкологическом моделировании данный класс моделей до сих пор недостаточно развит как из-за сложности взаимоотношений организмов между собой, так и из-за неоднозначности воздействия абиотических факторов на перераспределение радионуклидов в экосистемах.
Разработана имитационная модель посуточной динамики радионуклидов в основных компонентах (почва, растения, животные) травянистых экосистем разного типа, алгоритм которой позволяет учитывать различные условия поступления радиоактивных веществ в окружающую среду, динамику биологической доступности радионуклидов в системе “почва – растения», сезонное изменение спектра питания животных – участников трофической цепи, возможное применение различных контрмер, влияющих на уровень загрязнения биоты радионуклидами. Данная модель построена на основе модели посуточной динамики ^{137}Cs в системе «почва – растения» [1]. В зависимости от полноты информационного обеспечения расчет содержания радионуклидов в компонентах экосистем может осуществляться как с использованием коэффициентов накопления, так и коэффициентов перехода. При наличии данных о биомассе растений и животных может проводится расчет запаса радионуклидов на рассматриваемой территории.
Имеющиеся на данный момент версии модели позволяют прогнозировать содержание ^{137}Cs в компонентах пищевых цепей естественных луговых экосистем и агроценозов в различных режимах хозяйственного использования (например стойловое содержание в зимний период, варьирование кормового рациона, применение специализированных кормовых добавок и т.д.). При практическом применении модели необходима предварительная идентификация параметров для конкретных экосистем.
Модель может использоваться как расчетный модуль в радиоэкологических географических информационных системах, в которых оценивается загрязнение компонентов растительного покрова и животного сообщества в зависимости от плотности радиоактивного загрязнения рассматриваемой территории, миграции диких животных в пределах этого ареала и режима выпаса сельскохозяйственных животных.
Модель реализовывалась на Бэйсике в среде программирования Qb64. Организована выдача результатов моделирования как в текстово-цифровом, так и в и графическом виде. Дальнейшее развитие модели осуществляется на базе усовершенствованной модели поведения радиоцезия в лесной экосистеме дубравы [1], что позволит прогнозировать содержание ^{137}Cs в мясе диких животных, обитающих на территориях, покрытых данным типом лесов и подвергшихся радиоактивному загрязнению.

Литература

1. *Мамихин С.В.* Динамика углерода органического вещества и радионуклидов в наземных экосистемах (имитационное моделирование и применение информационных технологий). М.: Изд-во Моск. ун-та, 2003.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1292 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1292

ПРИМЕНЕНИЕ НЕЧЕТКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ЗАДАЧЕ ИМПУТИРОВАНИЯ ДАННЫХ

Ященко И.Г., Лучкова С.В., Перемитина Т.О.
Институт химии нефти СО РАН

Применение нечеткого моделирования в задаче импутирования является актуальной задачей. Использование нечеткой системы вместо статистических моделей позволяет тщательней относиться к обрабатываемым данным и повысить точность выполнения решаемой задачи. В настоящей статье предложен алгоритм импутирования данных с применением нечеткой системы на основе метода эволюционной стратегии и исследовано влияние параметров нечеткой системы на процесс импутирования

APPLICATION OF FUZZY MODELING FOR PROBLEMS OF DATA IMPUTATION

Yaschenko I.G., Luchkova S.V., Peremitina T.O.
Institute of Petroleum Chemistry, Siberian Division of Russian Academy of Sciences

The use of fuzzy modeling in problem imputationa is an urgent task. Fuzzy system instead of statistical models allows you to thoroughly treat the processed data and improve accuracy of the problem being solved. In this paper, an algorithm imputirovaniya data using fuzzy system on the basis of evolution strategy and the influence of parameters of fuzzy system on the imputation

В настоящее время технология нечеткого моделирования является одной из развивающихся областей обработки данных. Применение нечетких систем в задаче импутирования вызывает ряд вопросов касательно параметров системы: как правильно выбрать параметры построения базы правил, функции принадлежности, метода эволюционной стратегии, оптимизирующей параметры нечеткой системы, и другие. Данные вопросы очень важны, и являются объектами рассмотрения в данной работе.
Многие исследования связаны со сбором и обработкой данных, представленных в виде таблиц наблюдений. Данные из этих таблиц участвуют как в различных задачах анализа, так и в задачах построения моделей прогноза. Но часто, по различным причинам, эти таблицы содержат пропущенные значения.
Большинство методов анализа данных не могут обрабатывать таблицы с пропущенными значениями, так как получаются не адекватные модели, либо модель вообще построить не возможно. Иногда, получается, откинуть свойства с пропущенными значениями или попытаться подставить среднее значение данного показателя по свойству в таблице. Но подобные действия приводят к потере информации и значительно искажают результаты, а данные все равно нуждаются в обработке. Поэтому «восстановление» или «процедура заполнения пропусков» является очень важным моментом в обработки данных.

Самыми известными методами восстановления являются различные статистические модели, основанные на методе безусловных средних, методе ближайшего соседа, методе главных компонент, регрессии, Z-методе, методе, основанном на производных, и т.д. Методы различными способами восстанавливают значения по имеющимся данным, но, что очень важно, они требуют от данных определенных условий, например, нормальность распределения, что зачастую не выполняется, так как данные природного характера не имеют однородной структуры из-за своих свойств, а процедуры нормировки разрушает связи в данных. Поэтому требуется такой метод, который даст максимально точное восстановленное значение пропуска, и при этом не будет требователен к структуре таблицы наблюдений, либо будет наименее требовательным.
В данной статье, для решения задачи восстановления данных, предлагается применить метод, основанный на нечеткой системе, использующий для идентификации своих параметров эволюционные стратегии.
Целью работы является описание задачи восстановления данных в интерпретации нечеткой системы на основе эволюционной стратегии, и сравнение результатов работы алгоритма с аналогами.
В работе предложены алгоритм идентификации нечеткой системы на основе метода эволюционной стратегии для настройки параметров и алгоритм импутирования. На примере использования массива о свойствах вязких парафинистых нефтей были поставлены вычислительные эксперименты с искусственно «пропущенными» данными. Эксперименты показали, что для различных данных оптимальные параметры системы будут разными, и в каждом случае их необходимо подбирать. Поэтому было показано, как следует выбирать параметры нечеткой системы и эволюционной стратегии. Дальнейшие исследования направлены на более детальный подход к обрабатываемым данным, например, возможность задавать количество термов для каждой переменной, что, возможно, сократит количество правил и снизит вычислительное время, а, следовательно, позволит обрабатывать одновременно выборки большего объема данных.

Литература

1. *Ходашинский И.А., Гнездилова В.Ю., Дудин П.А., Лавыгина А.В.* Основанные на производных и метаэвристические методы идентификации параметров нечетких моделей // Труды VIII международной конференции "Идентификация систем и задачи управления" SICPRO '08. Москва, 2009 г. С.501-528.
2. *S. Hoche, and S. Wrobel.* A Comparative Evaluation of Feature Set Evolution Strategies for Multirelational Boosting // Proc. 13th Int. Conf. on ILP, 2003 г.
3. *Рутковская Д., Пилиньский М., Рутковский Л.* Нейронные сети, генетические алгоритмы и нечеткие системы. М.: Горячая линия – Телеком, 2006.
4. *H.-P. Schwefel*. Numerical Optimization of Computer Models. John Wiley & Sons, 1981
5. *H.-P. Schwefel*. Evolution and Optimum Seeking. New York: John Wiley & Sons, 1995
6. *Дудин П.А*. Применение алгоритма муравьиной колонии для идентификации нечетких моделей // Материалы XLV Международной научной конференции «Студент и научно-технический прогресс» Информационные технологии. НГУ. Новосибирск, 2007. С. 188-189.
7. *Лучкова С.О.* Алгоритмы нечетких систем в задачах импутирования // Материалы III Всероссийской молодежной научной конференции «Современные проблемы математики и механики», г. Томск 2012. С.329-334.
8. *Козин Е.С., Полищук Ю.М., Ященко И.Г*. База данных по физико-химическим свойствам нефтей. Нефть. Газ. Новации. 2011. № 3.С. 13-16
9. *Ященко И.Г., Сваровская Л.И., Перемитина Т.О., Лучкова С.В.* Методы статистического анализа и нечетких систем в исследованиях влияния химического состава и условий залегания нефтей на численность и активность пластовой микрофлоры в задачах повышения нефтеотдачи // Химия нефти и газа: Материалы VIII Международной конференции, 24-28 сентября 2012 г., г. Томск. – Томск: Изд-во Томского государственного университета, 2012.С. 299-302

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1328 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1328

ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ ОБСТАНОВКИ В ОПЕРАТИВНОМ ПОЛЕ ЗРЕНИЯ ЛЕТЧИКОВ, ПРИМЕНЯЮЩИХ ОЧКИ НОЧНОГО ВИДЕНИЯ

Ткачук А.В., Есев А.А.
Государственный летно-испытательный центр имени В.П.Чкалова

Изложены особенности моделирования обстановки в оперативном поле зрения летчиков, применяющих очки ночного видения, по результатам которого определяется яркость фона и засветки на зрачке глаза лётчика, наблюдающего за внекабинным пространством через очки ночного видения

DETAILS OF MODELING SITUATION IN OPERATIVE FIELD OF VIEW PILOT, APPLY NIGHT VISION GOOGLES

Tkachuk A.V., Esev A.A.
State flight-testing center of the Chkalov

Features of the operational model of the situation in the field of view of the pilots who use night vision goggles, the results of which is determined by the brightness of the background illumination on the pupil and eye pilot, watching vnekabinnym space through night vision goggles

Для обеспечения работы лётчика при обнаружении цели в условиях естественных и организованных световых помех необходимо обеспечить защиту объектива прибора от засветок [1 - 3]. Это можно осуществить посредством установки в электронно-оптический преобразователь (ЭОП) очков ночного видения (ОНВ) фильтра, ввода импульсного режима работы преобразователей, а также выбора рабочих зон по курсу полёта с

минимально возможной вероятностью засветки [2, 3].
Отображаемые характеристики объектов фоноцелевой обстановки определяются в спектральном диапазоне длин волн $\Delta\lambda$ = 0,45…1,35 мкм. При этом должны осуществляться последовательные изменения спектральной яркости исследуемого участка поверхности объекта фоноцелевой обстановки, а также спектральной яркости эталона отражения (образца сравнения) в виде плоской белой рассеивающей пластины с известными характеристиками отражения. По результатам измерений производится расчёт коэффициента спектральной яркости как отношение спектральной яркости исследуемой поверхности к спектральной яркости идеально рассеивающей эталонной поверхности.
Входные параметры модели фона: яркость фона, коэффициент ослабления засветки фильтром ЭОП ОНВ, суммарный коэффициент яркости оптических деталей ЭОП и остекления фонаря кабины вертолёта, угол засветки (угол между оптической осью ОНВ и направлением на край Луны или светового источника). Значение угла поступает в модель фона из модели относительного движения (задаётся на этапе отладки модели).
Выходные параметры - яркость фона и засветки на зрачке глаза лётчика, наблюдающего за внекабинным пространством через ОНВ (за тепловизионной или телевизионной «картинкой» на экране индикатора).
Основным направлением совершенствования модели является учет детальных характеристик фона таких, как спектральная плотность, пространственный спектр, интервал корреляции. На практике два типа зависимости шума от размеров поля зрения - линейная и квадратичная. Первый случай характерен для условий, когда шум вызван влиянием фона и по полю не коррелирован, так что помехи суммируются по закону квадратов. Второй случай соответствует полной корреляции помех по полю зрения, т.е. воздействия помех по всему полю суммируются алгебраически. В этом случае увеличивать поле зрения оказывается невыгодно. Модель имитирует завершающий этап фазы обнаружения - обнаружение цели в оперативном поле зрения лётчика, при использовании им ОНВ.
Входные параметры модели: эффективный пороговый блеск, блеск цели, коэффициент пропускания прибора, угол отклонения трассы движения цели от диаметра поля зрения, диаметр выходного зрачка окуляров ОНВ и диаметр зрачка глаза, зависящий от достигнутого уровня темновой адаптации.
Выходные параметры модели: расчетное время для темновой адаптации (в случае, когда заданное время оказалось недостаточным), признаки обнаружения и причины срыва обнаружения (передаются на соответствующие счетчики циклов для анализа и вычисления значения оценки вероятности обнаружения), математическое ожидание времени обнаружения, которое фиксируется счетчиком времени и угол рассогласования.
Адекватность модели в определенной степени подтверждается выбором реальных параметров системы и лётчика. Выбор экспоненциального закона обусловлен тем обстоятельством, что вероятность захвата является условной вероятностью, величина которой зависит от располагаемого времени, которое, в свою очередь, зависит от момента обнаружения, а экспоненциальное распределение вероятности обнаружения доказано экспериментально.

Литература

1. *Маслов С.В.* Анализ рисков безопасности полетов при использовании летным составом вертолетов очков ночного видения / С.В.Маслов, А.А.Есев // Проблемы безопасности и чрезвычайных ситуаций – № 1, 2011. – С. 52 – 57.
2. *Федоров М.В.* Метод расчета дальности действия низкоуровневых телевизионных систем визуализации изображения для летчиков вертолетов / М.В.Федоров, А.А.Есев, Е.М.Еремин // Информационно-измерительные и управляющие системы. – № 5, т.9, 2011. – С. 12 – 17.
3. *Есев А.А.* Методы экспериментальных исследований помехозащищенности вертолетных очков ночного видения / А.А.Есев, А.П.Головкин, А.А.Антошин, А.И.Атрошенко // Полет. - № 2, 2012. – С. 40 – 44.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1307 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1307

СЕКЦИЯ 5

ОБРАБОТКА ДАННЫХ, БАЗЫ ДАННЫХ, АНАЛИЗ ДАННЫХ

SECTION 5

DATA PROCESSING, DATABASES AND DATA ANALYSIS

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ АКТИВНЫХ ВЫЩЕЛАЧИВАЮЩИХСЯ МАТЕРИАЛОВ

Буков Н.Н., Петров Н.Н., Питькина Е.С., Шкабара Н.А., Горохов Р.В.
Кубанский государственный университет

В работе показана возможность прогнозирования времени жизни и ускоренной диагностики эффективности активных выщелачивающихся материалов на основании данных по высвобождению активного соединения на начальном участке стабильной фазы высвобождения. Критический параметр высвобождения находят за короткий срок используя барьерный эффект при введении в композит диффузионного модулятора

PREDICTING THE EFFECTIVENESS OF ACTIVE LEACHING OF MATERIALS

Bukov N.N., Petrov N.N., Pitkina E.S., Shkabara N.A., Gorohov R.V.
Kuban State University

The paper shows the possibility of predicting the lifetime and rapid diagnostic efficiency of active leaching of materials on the basis of data on the release of the active compound in the initial part of the stable phase of release. A critical parameter is found release in a short time using the barrier effect when injected into the composite diffusion modulator

В настоящей работе разработана экспрессная методика прогнозирования эффективности активных выщелачивающихся материалов на основании экспериментального моделирования высвобождения и расчетного алгоритма на основе сопоставления высвобождения активного соединения с пороговой скоростью воздействия, найденной по результатам моделирования.

Для получения различных коэффициентов диффузии выщелачивающегося материала в него вводили различные количества барьерного наполнителя. При его введении характер кривых высвобождения из материала изменяется. Так изначально прямолинейные или медленно ниспадающие кривые становятся экспоненциальными при увеличении массовой доли барьерного наполнителя в диффузной матрице. Таким образом, барьерный наполнитель позволяет изменять скорость высвобождения активных соединений из диффузной матрицы.

Наклон экспоненты может варьироваться в зависимости от содержания барьерного наполнителя, как следствие появляется возможность использования эффекта при различных механизмах ингибируемых/катализируемых процессов, и как следствие применение в различных сферах использования активных выщелачивающихся материалов.

Сопоставление динамики высвобождения активного соединения из наполненного материала и хода процесса с влиянием диффузанта, относительно холостого (неподавляемого) процесса позволяет экспрессно получить критический параметр высвобождения и определять влияние (его отсутствие) диффузанта на процесс.

Аналитические возможности данного подхода были апробированы при создании покрытия контактного типа с антиобрастающим эффектом.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1291 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1291

СТРУКТУРНЫЙ СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕДУР АВТОМАТИЗИРОВАННОГО УПРАВЛЕНИЯ ПОДРАЗДЕЛЕНИЯМИ И ФОРМИРОВАНИЯМИ МЧС РОССИИ

Арцыгов В.Х., Русскин А.В., Кузьмин С.В.
Федеральное казенное учреждение "Национальный центр управления в кризисных ситуациях" МЧС России

Описана многоуровневая модель процедуры контроля выполнения мероприятий по управлению подразделениями и формированиями МЧС России, объединяющая вербальный, математический и информационный слои, соответствующие определенным уровням представления модели

STRUCTURED SYSTEMS ANALISYS FOR AUTOMATED CONTROL UNIT AND FORMATION OF RUSSIA EMERCOM

Artsygov V.H., Russkin A.V., Kuzmin S.V.
The Ministry of Russian Federation for Civil Defense, Emergencies and Elimination of Consequences of Natural Disasters

Multilevel model described control procedures perform management activities units and formations of Russian Emergencies Ministry, combining verbal, mathematical and information layers, an appropriate level of representation of the model

Планирование и контроль выполнения мероприятий в период чрезвычайных ситуаций и на последующих этапах являются важнейшими составляющими минимизации риска чрезвычайных ситуаций и ликвидации их последствий.

Организация и проведение мероприятий по управлению органами и формированиями гражданской обороны в значительной мере обусловливают способность эффективному выполнению ими задач по предназначению и способствуют достижению поставленных перед ними задач. Основными функциями должностных лиц органов управления формированиями гражданской обороны являются [1–5]: непрерывный сбор информации, ее обработка и накопление; анализ собранной информации, моделирование и расчет необходимых показателей; принятие управленческих решений; отработка документов планируемых мероприятий по реализации принятого решения; доведение решения до подчиненных; реализация принятого решения; контроль за реализацией решения; учет и оценка изменений состояния подчиненных подразделений вследствие реализации принятого решения; регулирование отклонений (приведение системы в соответствие установленным требованиям).

Реализацией этих функций является выполнение ряда технологических операций в рамках соответствующих технологических процедур. Очевидно, что выполнение ряда однотипных операций в составе разных процедур целесообразно лишь при условиях изменения входных данных для рассматриваемой операции. Использование результатов выполнения однотипной операции с неизменными исходными данными, учитываемыми при выполнении различных процедур, является одним из путей оптимизации деятельности органов управления подразделениями и формированиями гражданской обороны и направлением применения новых информационно-телекоммуникационных технологий.

Анализ процессов и описаний задач управления органами и формированиями гражданской обороны показывает, что такие задачи требуют большого объема вычислительной работы и учета множества логических зависимостей. Поэтому при описании задач оперативного управления необходимо сформулировать требования по формализации той или иной процедуры, определить правила, обеспечивающие должностному лицу возможность поддержки принятия решений. Общими требованиями являются следующие [3–5]: разработка форм входных и выходных документов; определение частоты отработки документов; разработка принципов и методов ведения контроля выполнения планов и мероприятий.

Контроль в рамках управленческой процедуры предусматривает: определение и четкую формулировку целей (состояний объектов управления, к достижению которых стремятся должностные лица органов управления) и планируемых результатов (установление стандартов), а также определение степени достижения целей и сравнение достигнутых результатов с предполагаемыми результатами.

Результаты контроля являются для должностного лица основанием для корректировки (регулирования) принятых ранее решений, если отклонения в ходе реализации этих решений значительны. Основная причина необходимости контроля заключается в неопределенности, являющейся неотъемлемой частью процесса достижения цели. Поэтому при осуществлении контроля оценивается как ход выполнения принятых решений (запланированных мероприятий), так и соответствие принятых решений реализовавшемуся развитию ситуации. С этой позиции процедура контроля является не только ревизией выполнения подчиненными поставленных задач, но и в известной степени инструментом для оценки качества принятия управленческого решения. Различают три типа контроля: предварительный (до начала цикла управления), текущий (в ходе выполнения мероприятий) и заключительный (по окончании цикла управления).

Общей (базовой) составляющей всех типов процедуры контроля является выработка стандартов и критериев оценки выполняемых решений, сопоставления с ними реальных результатов и постановка задачи на выработку корректирующего (регулирующего) воздействия.

Анализ применения отдельных элементов автоматизированных информационных систем и автоматизированных систем управления в практической деятельности должностных лиц управления подразделениями и формированиями гражданской обороны показал, что вопросы организации контроля выполнения мероприятий недостаточно проработаны теоретически, а контроль за реализацией мероприятий по выполнению решения вышестоящего начальника слабо увязан с анализом выполнения планов структурных подразделений. При этом контролем охватывается незначительная часть мероприятий, выполняемых аппаратом управления, наблюдается превалирование заключительного контроля над предварительным и текущим. Устранение этих недостатков в выполнении процедуры контроля должно быть организовано по следующим направлениям: создание системы контроля, охватывающей основные мероприятия по всем направлениям управления подразделениями и формированиями гражданской обороны; сокращение трудоемкости предварительного и текущего контроля за выполнением мероприятий и повышение его оперативности.

Практическая реализация перечисленных выше положений требует: разработки и внедрения информационных технологий целевого управления, непрерывного планирования организационных мероприятий, выбора рациональной совокупности контролируемых параметров и организации самой процедуры контроля в соответствии с реально существующими ограничениями (ограниченния на достоверность информации, ограничение на возможности информационно–вычислительных средств, используемых для осуществления контроля, ограничения на временные и материальные ресурсы и т. п.).

Согласно теории контроля состояния сложных систем процедура контроля заключается в проверке соответствия качества объекта управления (под которым понимается состояние органов и формирований гражданской обороны) требованиям, задаваемым в виде ограничений на показатели свойств объекта (последние в совокупности и определяют его качество). Показатели свойств объекта, доступные для наблюдения, используются как признаки для определения его состояния, и называются контролируемыми признаками.

Литература

1. *Воскобоев В.Ф.* Управление устойчивостью функционирования технических объектов с учётом

требований по безопасности / В.Ф.Воскобоев // Научные и образовательные проблемы гражданской защиты. 2012. Т.1. № 13. С. 10–14.
2. *Медведев В.Р.* Техническое оснащение тактического и оперативного этапов медицинской эвакуации / В.Р.Медведев [и др.] // Оборонный комплекс – научно–техническому прогрессу России. 2011. № 4. С. 95–103.
3. *Федоров М.В.* Математическая модель автоматизированного контроля выполнения мероприятий в органах военного управления / М.В.Федоров, К.М.Калинин, А.В.Богомолов, А.Н.Стецюк // Информационно–измерительные и управляющие системы. 2011. Т. 9. № 5. С. 46 – 54.
4. *Богомолов А.В.* Экспертно–аналитическое обоснование приоритетных направлений совершенствования системы предупреждения биологических террористических актов / А.В.Богомолов, Т.В.Зуева, С.С.Чикова, М.С.Голосовский // Информатика и системы управления. 2009. № 4. С. 134–136.
5. *Дубынин И.В.* О разработке автоматизированных рабочих мест органов управления медицинской службой / И.В.Дубынин, И.А.Зубков, А.И.Григорьев // Военно–медицинский журнал. 2002. № 7. С. 14–18.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1309 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1309

МЕТОДИКА ИДЕНТЕФИКАЦИИ ЗАКОНА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПОКАЗАТЕЛЕЙ НА МАЛЫХ ВЫБОРКАХ

Рудаков С.В., Логачев С.В., Фещенко К.Б.
Национальный университет гражданской защиты

Изложена методика идентификации закона распределения случайной величины, состоящая в определении параметров ее теоретически возможного распределения по результатам небольшого числа измерений для априорно сформированного набора распределений; построении эмпирической и для каждого из законов распределения теоретической функции распределения; сравнении каждой теоретической функции с эмпирической и принятии решения о соответствии теоретического закона распределения эмпирическому закону

IDENTIFICATION PROCEDURE LAW DISTRIBUTION PARAMETERS ON SMALL SAMPLES

Rudakov S.V., Logachev S.V., Feshenko K.B.
National University of civil protection of Ukraine

The method of identification of the distribution of the random variable, which consists in defining the parameters of its theoretically possible distribution of the results of a small number of measurements to create a set of a priori distributions, empirical construction and for each of the distribution laws of the theoretical distribution function, each compared with the theoretical function of empirical and make decisions about appropriate theoretical distribution law of thumb

Для обеспечения работоспособности сложных технических систем в процессе их эксплуатации необходимо контролировать соответствие текущих значений физических величин нормативным значениям или пределам (допускам) [1-3]. Определение допусков на значение показателя при заданных распределениях вероятностей контролируемых величин и границах допуска в случае, если погрешности устройств контроля не учитываются, особых затруднений не представляет. Наличие погрешностей устройства контроля (средства измерения) приводит к специфическим ошибкам, характеризующим качество контроля. При этом традиционно выделяют ошибки первого и второго рода [2, 3]. Если контролируемая случайная величина и погрешность устройства контроля в вероятностном смысле независимы, то результат контроля можно получить, оперируя с композицией их плотностей распределения, т.е. необходимо знать закон распределения (ЗР) контролируемого показателя и погрешности его измерения. На основании центральной предельной теоремы принято считать, что погрешности измерения всегда распределены нормально. Однако, результаты исследований показывают, что гипотеза о соответствии ЗР погрешности измерения нормальному ЗР для многих классов измерительной техники требует уточнения [1].

Анализ библиографических источников позволил обобщить методы идентификации ЗР по выборкам. Недостаток рассмотренных методов состоит в том, что они требуют значительного количества измерений, т.е. выборка должна содержать более 40-50 объектов. На практике при контроле показателей состояния авиационной техники часто приходится сталкиваться с малым объемом полученной информации. Необходимость идентификации функции распределения по малым выборкам накладывает определенные ограничения на использование существующих методов идентификации ЗР случайной величины и требует разработки новой методики идентификации ЗР контролируемого показателя и погрешности его контроля на маломощных выборках (начиная с 15 объектов), при высокой эффективности идентификации ЗР.

Суть предложенной методики идентификации ЗР состоит в определении параметров теоретически возможного распределения случайной величины по результатам небольшого числа измерений для априорно сформированного набора распределений; построении эмпирической и для каждого из ЗР теоретической функции распределения; сравнении каждой теоретической функции с эмпирической по сумме среднеквадратичных отклонений и по сумме абсолютных отклонений и принятии решения о соответствии теоретического ЗР, имеющего наименьшие значения найденных сумм, эмпирическому ЗР.

Предложенная методика апробирована на выборках, генерируемых датчиками случайных чисел, имитирующих тот или иной ЗР, с количеством повторов, равным 100. Анализ результатов идентификации ЗР для выборки, сформированной соответствующими генераторами случайных чисел, показал, что вероятность

правильной идентификации ЗР близка к единице (за исключением закона Симпсона) уже начиная с объема выборок 35 и более наблюдений. При сравнении ЗР с близкой формой функции плотности вероятности (нормальный ЗР и ЗР Симпсона) объем выборки, при котором ЗР Симпсона определяется по предложенной методике достоверно, составляет 120 и более наблюдений. при том, что надёжное определение ЗР Симпсона по стандартной методике $\chi 2$ Пирсона начинается с объема выборки из 180 наблюдений, что в 1,5 раза больше объема выборки, требуемого для надёжного определения ЗР Симпсона по предложенной методике. Т.е. для выявления ЗР, у которых функции плотности вероятности близки, предложенная методика эффективнее общепринятых. Методика носит универсальный характер и позволяет проводить сравнение ЗР экспериментальных данных с любым ЗР.

Литература

1. *Рудаков И.С.* Методика идентификации вида закона распределения параметров при проведения контроля состояния сложных систем / И.С. Рудаков, С.В. Рудаков, А.В. Богомолов // Информационно–измерительные и управляющие системы. – 2007. – Т. 5. – № 1. – С. 66–72.
2. *Оценка* ресурса высоковольтных конденсаторов по результатам испытаний на переменном напряжении / С.М. Бутко, В.В. Рудаков, Е.Е. Сергеева, С.В. Рудаков // Технічна електродинаміка. – 2012. – № 2. – С. 137–138.
3. Метод поддержки принятия решений по управлению ресурсами при испытаниях авиационной техники / Л.В.Коломиец [и др.] // Информационно–измерительные и управляющие системы. – 2010. – Т. 8. – № 5. – С. 38–40.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1308 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1308

СЕКЦИЯ 6

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

SECTION 6

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

ОСОБЕННОСТИ ПОСТРОЕНИЯ КОСМИЧЕСКИХ СИСТЕМ ИНФОРМАЦИОННОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ВООРУЖЕНИЯ

Стецюк Н.П., Стецюк А.Н.
Лизинговая компания «Гознак-лизинг»

Изложены особенности построения космических систем информационного обеспечения вооружения, основной упор при разработке которых делается на совершенствование информационных подсистем и последующего интегрирования их с ранее созданными образцами

FEATURES BUILDING SPACE SYSTEMS INFORMATION SUPPLY ARMS

Stetsyuk N.P., Stetsyuk A.N.
Leasing company «Goznak-leasing»

Features of construction of space systems information support weapons, the main focus in the design of which is to improve the information subsystems and then integrating them with previously established patterns

В вооруженных конфликтах и контртеррористических операциях последних лет реализованы принципиально новые формы вооруженной борьбы на основе качественно новых средств вооружений за счет роста удельного веса систем высокоточного оружия (ВТО).

Основной упор в разработке таких систем делается, прежде всего, на совершенствование информационных подсистем и последующего интегрирования их с уже существующими образцами, что позволяет многократно приумножать эффективность образцов вооружения и военной техники. При этом информационные космические системы военного и двойного назначения являются основой для создания систем информационного обеспечения ВТО различного назначения.

Основными требованиями, предъявляемыми к ВТО, являются:

- повышенная точность наведения;
- возможность применения оружия в любое время суток;
- оперативность применения;
- многовариантность применения – в зависимости от видов разведывательной, картографической и другой вспомогательной информации, а также складывающихся условий применения и др.

Целью применения ВТО является сдерживание и (или) деэскалация вооруженной агрессии в военных действиях любого масштаба с применением обычных средств поражения.

Высокая результативность применения систем ВТО может быть полностью реализована только при соответствующем уровне развития систем информационного обеспечения их подготовки и применения и, прежде всего, - космических информационных систем. Вместе с тем, проведенный анализ состава, построения и информационных возможностей состоящих на вооружении и перспективных космических систем разведки, связи, топогеодезического и навигационного обеспечения позволяет заключить, что ряд задач информационного обеспечения действий формирований и применения ВТО при поражении стратегических объектов в условиях противодействия противника решаются космическими средствами с ограничениями, а ряд - не могут быть решены вообще.

Это обстоятельство предопределяет необходимость выделения среди известных нового класса космических систем, предназначенных, прежде всего, для информационного обеспечения применения ВТО.

Основной целью информационного обеспечения ВТО должно являться обеспечение его эффективного применения в ходе ведения военных действий.

В настоящее время применение авиационных группировок обеспечивается, главным образом, собственными некосмическими средствами ВВС. Вместе с тем, при оснащении самолетов ВТО, космические системы будут практически единственным средством обеспечения их эффективного применения. Кроме того, при поступлении на вооружение перспективных авиационных комплексов с повышенным радиусом действия и использовании летательными аппаратами малых и сверхмалых высот полета, требуемая надежность, оперативность связи и навигационного обеспечения может быть обеспечена только спутниковыми системами.

Поэтому космическим средствам принадлежит ключевая роль по информационному наполнению автоматизированных систем управления ВВС. Глобальность действия космических средств, возможность их гибкого использования национальными органами управления и получение данных с любых территорий Земли позволяют обеспечить априорное превосходство над противником.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1310 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1310

ОТ ТАБЛИЦ И КРУГОВОЙ ДИАГРАММЫ РАТНЕРА К ДЕКАРТОВЫМ СТРУКТУРАМ ДИАЛЕКТОВ, СИММЕТРИИ, ГРАММАТИКАМ И ИНФОРМАЦИОННОЙ МНОГОСЛОЙНОСТИ ГЕНОВ

Эйнгорин М.Я.
Нижегородский государственный университет им. Н.И.Лобачевского

После открытия двойной спирали Ф. Криком и Дж. Уотсоном, важнейшей работой математиков по исследованию генетических структур является работа Г. Гамова, далее выявление аминокислот (Ак) живого, диалектов и составление таблиц соответствия кодонов - Ак, далее взаимосвязей части параметров Ак в виде единой круговой структуры. В докладе исследованны вопросы взаимосвязи нуклеотидов, Ак и их параметров исходя из разработок многомерных ЗУ

FROM TABLES AND RATNER'S PIE CHART TO CARTESIAN STRUCTURES DIALECTS, SYMMETRY, GRAMMARS AND INFORMATION MULTILAYER GENES

Eingorin M.Y.
N.I.Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod

After the discovery of the double helix Crick and James Watson, the most important work of mathematicians to study the genetic structure is the work of G. Gamow, further identification of amino acids (AK) live, dialects and correspondence tables codons - Ak, then the relationship of the parameters in a single Ak circular structure. In the research report questions the relationship of nucleotides, Ak and their parameters on the basis of development of multi-dimensional memory

После открытия двойной спирали Ф. Криком и Дж. Уотсоном, важнейшей работой математиков по исследованию генетических структур является работа Г. Гамова, далее выявление аминокислот (Ак) живого, диалектов и составление таблиц соответствия кодонов - Ак, далее взаимосвязей части параметров Ак в виде единой круговой структуры [1].

Автор настоящего доклада исследовал вопросы взаимосвязи нуклеотидов, Ак и их параметров исходя из разработок многомерных ЗУ. Для решения задачи первоначально был выбран природный порядок следования нуклеотидов: Т, С, А, G; параметры нуклеотидов и их кодирование: Н2 - 0, Н3 - 1, Pi - 0, Pu - 1. Кодон Х1Х2Х3 был представлен как структура в трехмерная декартовом пространстве. Была выделена естественная анизотропия вдоль оси Х3 в изотропном пространстве графического представления на основе "сильных" ~ С и "слабых" ~ Сл пар нуклеотидов в Х1Х2, симметрия и взаимосвязь комплементарных кодонов структуры. Трехмерная структура была названа "кодонограммой" ~ К. После "покрытия" кодонов К Ак для разных диалектов подтвердилась анизотропия К вдоль оси Х3 и преимущественное покрытие С одной аминокислотой, а Сл = NC - двумя, тремя или совместно с Ter. Структура была названа "аминограммой" ~ А. Показано существование инверсности многих структур К и А диалектов, переменных и их параметров. Были получены новые математические соотношения для К и А, их переменных и параметров [2-7]. За счет избыточности покрытия 20 Ак 64-х кодонов в направлении Х3 [3], были показаны связки однофункциональных вариаций мРНК и белков, многослойность (слои ССК) мРНК, формируемые на базе параметров нуклеотидов К. Показаны структуры слоев ССК [2-7]. Была показана изотропия и структуризация параметров аминокислот, С и Сл, в плоскости Х1Х2 вдоль Х3, для всех диалектов показано расположение кодонов Start и Ter. на взаимно перпендикулярных крайних плоскостях А.

В работах [3-7] даны таблицы систематизации Ак (ЗСА) и закон систематизации диалектов (ЗСД) живой природы. На базе ЗСД была уточнена взаимозаменяемость Ак в связи с выявленным разделением Ак на "базовые" ~ Б и "не базовые" NБ, показана симметрия всех построений природы. Показано существование грамматик диалектов синтеза мРНК [2-7]. Выявленные закономерности носят строго математический характер, и говорит о искусственном происхождении жизни. Очевидно первоначально строились математические основы, далее грамматики диалектов генов, гены и далее живая природа. "Человеческая" математика вторична, значительно более поздняя и, в основном, недостаточна для описания генов живой природа, требует коррекций и дополнений. Последнему посвящена первая часть монографии [8], вторая ее часть - информационно - логическому исследованию грамматик [2-8]. Обсуждается корректность исследователей.

Литература

1. *Ратнер В.А.* "Генетический код как система", Соросовский образовательный журнал, 2000, № 3.
2. *Эйнгорин М.Я.* «Основы кодирования и управления в молекулярной биологии», Изд. НГМА, ISBN № 5 – 7032 – 0390- 02, апрель 2001, С. 120.
3. *Эйнгорин М.Я.* доклады на VI и VII Всероссийских конференциях по биомеханике, «БИОМЕХАНИКА– 2002 - 2003», сборники тезисов докладов, Россия.
4. *Эйнгорин М.Я.* Вестники Нижегородского университета им. Н. И. Лобачевского, Серия «Математическое моделирование и оптимальное управление», выпуски 1 (27) 2004 год, стр. 269-288, (28) 2005 г, стр. 232 – 242, (30) 2006 г, стр. 128 - 141; № 5. 2009 г, С. 176-192.
5. *Эйнгорин М.Я.* Международные конгрессы «БИОТЕХНОЛОГИЯ – состояние и перспективы развития», 2002 - 2007 гг., сборники тезисов докладов, раздел «Фундаментальные исследования".
6. *Эйнгорин М.Я.* Национальные конференции «Информационно–вычислительные технологии в решении фундаментальных проблем и прикладных задач химии, биологии, фармацевтики, медицины», Сессия ИВТН-2002 -2004, 2009 гг., сборники тезисов докладов
7. *Эйнгорин М.Я.* 12 - 17 Международные конференции: «Математика, компьютер, образование», Россия, 2005 - 2010 годы, сборники тезисов докладов, Россия.
8. *Эйнгорин М.Я.* "Математика и грамматики генетических структур живых систем", монография, издание "СКИТ", ISBN 978-5-9904043-1-1, 2012 год, С. 448. Заказы монографии через skit@vmk.unn.ru

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1323 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1323

СЕКЦИЯ 8

ДОКЛАДЫ, НЕ ВОШЕДШИЕ В ОСНОВНЫЕ СЕКЦИИ

SECTION 8

THE REPORTS, WHICH ARE NOT INCLUDED IN THE BASIC SECTIONS

ОСОБЕННОСТИ СЕНСО-МОТОРНЫХ И ПЕРЦЕПТИВНО-МОТОРНЫХ РЕАКЦИЙ СОВРЕМЕННОГО ЧЕЛОВЕКА

Павлов К.И.
Российский государственный педагогический университет имени А.И.Герцена

Ведущим конституциональным признаком современного человека является ювенильность. Цель нашего исследования: изучить сенсо-моторные и перцептивно-моторные реакции у девушек 18-23 лет с разной степенью ювенильности. Девушки с высоким уровнем ювенильности имеют большее время реакции на акустические стимулы, в сравнении с низкоювенильными. Высокоювенильные и среднеювенильные девушки имеют более высокий уровень организации перцептивно-моторных реакций, чем низкоювенильные

INDICATION OF SENSORIMOTORICALS AND PERCEPTOMOTORICALS REACTIONS OF THE MODERN PERSON

Pavlov K.I.
A.I.Herzen State Pedagogical University of Russia

Juvenile is the main constitutional factor of phylogenetic development of the modern person. The aim is to study of sensorimotorical and perceptomotorical reactions of 18-23-year-old females with a different juvenile degree. Highjuveniles females had a more time of sensorimotor reactions to acoustic stimulus than the lowjuveniles females. Highjuveniles and middlejuveniles females have a higher level of development of perceptomotorical reactions in comparison with lowjuveniles females

Ведущим конституциональным признаком современного человека является ювенильность. Цель нашего исследования: изучить сенсо-моторные и перцептивно-моторные реакции у девушек 18-23 лет с разной степенью ювенильности. Девушки с высоким уровнем ювенильности имеют большее время реакции на акустические стимулы, в сравнении с низкоювенильными. Высокоювенильные и среднеювенильные девушки имеют более высокий уровень организации перцептивно-моторных реакций, чем низкоювенильные.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1313 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1313

АДСОРБЦИОННЫЕ СЛОИ ГРАФЕНА НА КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПОДЛОЖКАХ

Свечников А.Б.
Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт"

Проведен теоретический анализ адсорбции графена на поверхностях (100) и (111) кристаллов с алмазоподобной структурой. Как следует из результатов молекулярно-динамического моделирования, графен может проявлять сильно выраженную химическую инертность по отношению к адсорбции. Образование химических связей с атомами подложки сопровождается существенной трансформацией геометрической структуры, в частности, описана геометрия гофроподобной модификации адсорбированного графена

ADSORBED LAYERS OF GRAPHENE ON CRYSTALLINE SUBSTRATES

Svechnikov A.B.
National Research Centre "Kurchatov Institute"

Theoretical analysis of the adsorption of graphene on the (100) and (111) crystals with a diamond-like structure has been done. As follows from the results of the molecular dynamics simulation, graphene could demonstrate chemical inertness to adsorption. Chemical binding with the substrate atoms was accompanied by a significant geometric structure transformation, in particular, we distinguished the geometry of the corrugated graphene

В данной работе представлены результаты квантово-химических расчетов адсорбции нанополос графена на гранях (100) и (111) алмаза, кремния и кубического карбида кремния. Молекулярно- динамическое моделирование и поиск локальных минимумов в кластерном приближение были выполнены в рамках нового полуэмпирического приближения PM7, заменившего менее точное PM6 [1]. Расчет проводился для комнатной температуры.

Грани (100) карбида кремния. Слабая димеризация кремниевой грани (100) SiC и расстояние до графена в 0,21 нм являются результатом действия ван-дер-ваальсовых сил. Строение графена не изменяется, энергия адсорбции ε = 0,53 эВ.

Характер адсорбции изменяется только на углеродной грани (100) SiC, как видно из рис.1.

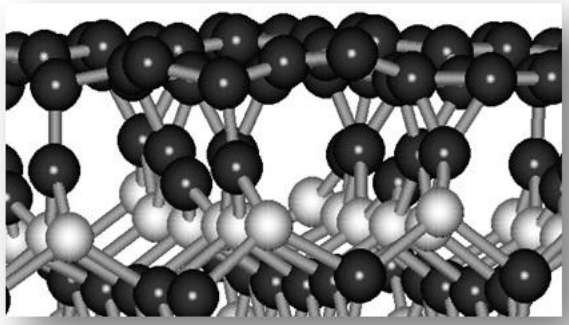

Рис.1 Графен на грани (100) C - SiC.

Часть атомов С подложки образует химические связи с атомами С графена, характерные расстояния С-С порядка 0,15 нм. Однако в самом графене происходит частичная регибридизация связей $sp^2 \rightarrow sp^3$, приводящая к заметному повышению полной энергии системы. Итоговый баланс энергий взаимодействия, с учетом структурной перестройки, дает энергию адсорбции лишь в 0,46 эВ.
Грань (111) алмаза. Адсорбированный графен свободно деформируется в гофроподобную модификацию, как показано на рис.2 а,б.

а) б)

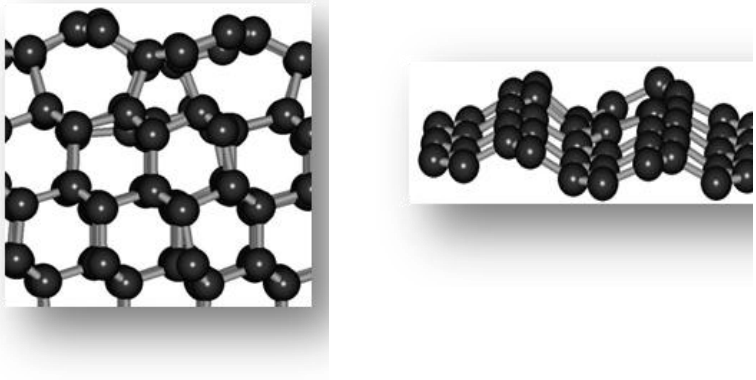

Рис.2 Графен на грани (111) алмаза (а). Отдельно адсорбированный гофро-графен (б).

Часть атомов гофро-графена, расположенные на дне волн, образуют химические связи с атомами подложки. Степень деформации кристаллической структуры адсорбированного графена можно оценить по значениям внутренних длин связей r(C-C) и валентных углов α(C-C-C). Так, на гребне волн r = 0,146 нм и α = 120°, близки к соответствующим величинам для идеального графена (r = 0,142 нм и α = 120°). На дне волн r = 0,153 нм и α = 110°, практически совпадают с характеристика алмаза (r = 0,154 нм и α = 109,5°). Таким образом, гофро-графен представляет собой сильно деформированный графен, а с точки зрения симметрии - это смесь sp^2 и sp^3 гибридных состояний. Длины связей между атомами графена и подложки равны 0,162 нм. Структура на рис.2а является стабильной, но цена, которую приходится платить за модификацию структуры графена (рис.2б) достаточно высока, удельная энергия адсорбции ε = 0,69 эВ.
Выводы. Полученные данные характеризуют идеальный графен, как инертный материал по отношению к адсорбции на алмазные, кремниевые и карбид кремниевые подложки. Количественной мерой инертности служат низкие, менее 1 эВ, величины удельной энергии адсорбции. Наблюдаемое в ряде случаев образование химических связей между атомами графена и подложки, приводит к заметным структурным изменениям, например, образованию гофроподобной модификации графена. Последний факт можно рассматривать, как негативный для задач наноэлектроники.

Литература

1. *Stewart J. J. P.* Optimization of Parameters for Semiempirical Methods V: Modification of NDDO Approximations and Application to 70 Elements // J. Mol. Modeling. 2007. V.13. P.1173-1213.

ВИБРОДИАГНОСТИКА ПОВРЕЖДЕНИЙ СТЕРЖНЯ

Хакимов А.Г.
Институт механики им. Р.Р. Мавлютова Уфимского научного центра РАН

Если стержень имеет единственное повреждение типа поперечной раскрытой трещины, то для определения его координаты, длины и параметров повреждения могут быть использованы три низшие частоты изгибных или крутильных или продольных колебаний. По этим параметрам определяются осевой момент инерции или полярный момент инерции или площадь поперечного сечения в зоне повреждения

DAMAGE DIAGNOSIS OF A ROD

Khakimov A.G.
Institute of Mechanics of the Ufa Branch of Russian Academy of Sciences

If the rod has a unique type of damage transverse crack opening, to determine its location, length, and damage parameter can be used three lower frequency bending or torsional or longitudinal oscillations. Axial moment of inertia and the polar moment of inertia and cross-sectional area at the site of injury determined by these parameters

В случае стержней конечной длины для определения наличия его дефектов может быть использовано изменение спектра собственных частот продольных колебаний [1-8], крутильных колебаний [9-11] или изменение частоты собственных изгибных колебаний [12-13]. В [1] и ряде других работ для стержня, совершающего продольные колебания, трещина моделируется как продольная пружина с жесткостью и для балки, совершающей изгибные колебания, повреждение моделируется вращательной пружиной с жесткостью. В [3] дается решение задачи определения переменной площади поперечного сечения от продольной координаты по известной зависимости перемещения свободного конца стержня от частоты возмущающей силы. Решению обратных задач о продольных, крутильных и изгибных установившихся волнах в стержнях конечной длины посвящены работы [2, 4-13]. Метод конечных элементов используется для анализа изгибных колебаний невращающегося ротора с открытыми трещинами в [14]. В [15] представлен интегральный признак идентификации дефектов в элементах стержневых конструкций, позволяющий определять не только их наличие и местоположение, но и степень поврежденности.

Рассматривается напряженно-деформированное состояние консольной балки (рис. 1). Предполагается, что в балке имеется короткий участок (по сравнению с общей ее длиной) с меньшей площадью поперечного сечения. Этот надрез моделирует ее повреждение, в частности, повреждение, типа раскрытой трещины. Задача состоит в определении координаты надреза и его размеров в приближении гипотезы плоских сечений.

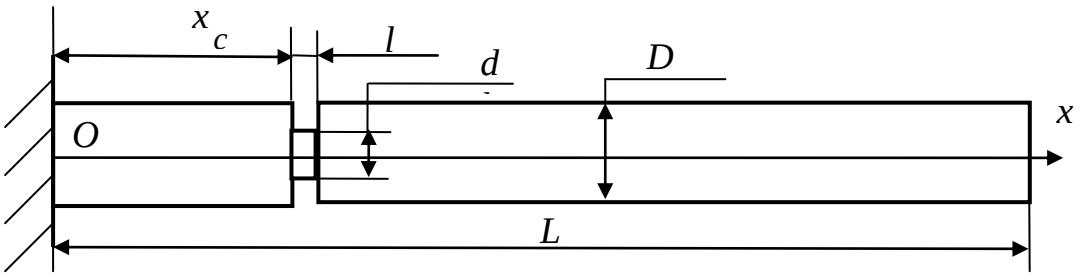

Рис.1. Расчетная схема

Определены собственные частоты изгибных, крутильных и продольных колебаний балки, стержня с искусственным дефектом.

Решение обратной задачи по собственным частотам изгибных, крутильных и продольных колебаний балки, стержня позволяет найти координату, длину и параметры искусственного дефекта.

Если стержень имеет единственное повреждение типа поперечной раскрытой трещины, то для определения его координаты, длины и параметров повреждения могут быть использованы три низшие частоты изгибных или крутильных или продольных колебаний, соответственно. По этим параметрам определяются осевой момент инерции или полярный момент инерции или площадь поперечного сечения в зоне повреждения.

Литература

1. Gladwell G. M. L. Inverse problems in vibration. –Dordrecht, Boston, London: Kluver Academic Publishers, 2004. (Русский перевод: Глэдвелл Г.М.Л. Обратные задачи теории колебаний. – М.–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2008. С.608.
2. Ильгамов М.А. Диагностика повреждений вертикальной штанги // Труды института механики УНЦ РАН. Вып. 5. – Уфа: «Гилем». 2007. С.201-211.
3. Ватульян А. О. Обратные задачи в механике деформируемого твердого тела. М.: Физматлит. 2007. С.224.
4. Ватульян А. О., Солуянов Н. О. Об определении местоположения и размера полости в упругом стержне. // Дефектоскопия. 2005. №9. С.44-56.Киренков И.И. Метрологические основы оптической пирометрии. М.: Изд-во стандартов, 1976.
5. Хакимов А.Г. Диагностика повреждений вертикальной штанги на упругой подвеске. // Электронный научный журнал "Нефтегазовое дело", 2010. URL: http://www.ogbus.ru/authors/Khakimov/Khakimov 1 .pdf.
6. Ilgamov M.A., Sultanov B.Z., Tazhitdinov A.N., Khakimov A.G.. Damage diagnostics in a vertical bar hanged on the elastic suspender with concentrated mass / Abstracts. 10th European Conference on Non-

Destructive Testing. Moscow. Part 1. - M.: Publishing house Spektr, 2010. - P. 345-347.
7. Khakimov A.G. Damage Diagnostics in a Vertical Rod with Concentrated Masses on the Elastic Suspender // International Journal of Mechanics and Applications. 2012. Vol.2, No.5, P. 70-73.
8. Ахметвалиева Э.Н., Ахтямов А.М. Диагностика поперечного надреза вертикальной штанги // Контроль. Диагностика. 2012. № 8. С. 31-34.
9. Хакимов А.Г. О собственных колебаниях вала с моделью искусственного дефекта // Дефектоскопия. 2010. Т. 46. № 6. С. 93-98.
10. Сафина Г.Ф. Исследование по крутильным колебаниям вала с дисками // Дефектоскопия. 2011. Том 47. № 3. С. 51-65.
11. Хакимов А.Г. О собственных колебаниях вала турбокомпрессора с искусственным дефектом // ИВУЗ. Авиационная техника. 2011. № 1. С. 71-73.
12. Ильгамов М.А., Хакимов А.Г. Диагностика повреждений консольной балки с надрезом // Дефектоскопия. 2009. Том 45. № 6. С. 83-89.
13. Ильгамов М.А., Хакимов А.Г. Диагностика повреждений балки на шарнирных опорах // Строительная механика инженерных конструкций и сооружений. 2010 . № 2 . С. 42-48.
14. Guangming Dong and Jin Chen. Vibration analysis and crack identification of a rotor with open cracks // Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 2011, Vol. 28, No. 1, P. 171-182.
15. Акопьян В.А., Черпаков А.В., Рожков Е.В., Соловьев А.Н. Интегральный диагностический признак идентификации повреждений в элементах стержневых конструкций // Контроль. Диагностика. 2012. № 7. С. 50-56.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1301 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1301

ГРАФЕН В КАЧЕСТВЕ НАНОФИЛЬТРА ДЛЯ АТОМОВ И ИОНОВ

Свечников А.Б.
Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт"

Представлено теоретическое исследование процессов прохождения атомных частиц сквозь однослойный графен. Пороговые энергетические потери бомбардирующих частиц были получены с помощью метода молекулярной динамики и квантового расчета сил. Показана возможность графена выступать в роли фильтра легких атомных частиц

GRAPHENE AS NANOFILTER FOR ATOMS AND IONS

Svechnikov A.B.
National Research Centre "Kurchatov Institute"

The theoretical study of the atomic particles penetration through a single-layer graphene is presented. Threshold energy loss of the bombarding particles were obtained by the method of molecular dynamics and quantum calculations of forces. It was shown that graphene could work as a filter of light atomic particles

Представлено теоретическое исследование процессов прохождения атомных частиц сквозь однослойный графен. Пороговые энергетиче-ские потери бомбардирующих частиц были получены с помощью ме-тода молекулярной динамики и квантового расчета сил. Показана возможность графена выступать в роли фильтра легких атомных частиц.

Недавнее сообщение [1] о возможности опреснения морской воды при помощи пористого (d > 0,7 нм) графена вызвало большой интерес у специалистов. Получение пористого графена явилось объектом интенсивных исследований с использованием ионной бомбардировки. С бездефектным графеном ситуация выглядит иначе, обращает на себя внимание, прежде всего, плотная гексагональная атомная упаковка, и как следствие, характерные механическая прочность и химическая стойкость.

Было сделано предположение, что при определенных условиях графен в состоянии пропускать сквозь себя частицы и выполнять функцию фильтра. В число таких частиц могли попасть химические элементы с малыми атомными (ионными) радиусами и с характерными кинетическими энергиями. Для выяснения данного вопроса были проведены расчеты по методу молекулярной динамики.

С целью повышения точности, межатомное взаимодействие моделировалось в рамках квантово-химического приближения PM6 [2]. В бомбардировке участвовали атомы, положительные и отрицательные ионы водорода, элементов 2 и 3 периодов, несколько тяжелых щелочных металлов. Диапазон кинетических энергий был достаточно широк, от 0, 05 эВ до 60 эВ.

Полученные результаты представлены на рис.1. На оси ординат показаны пороговые значения потерь кинетической энергии бомбардирующих частиц (E, эВ). Горизонтальная линия на уровне -17,5 эВ соответствует потерям энергии, приводящим в образованию одиночной вакансии в графене, и получена в рамках использованной расчетной схемы.

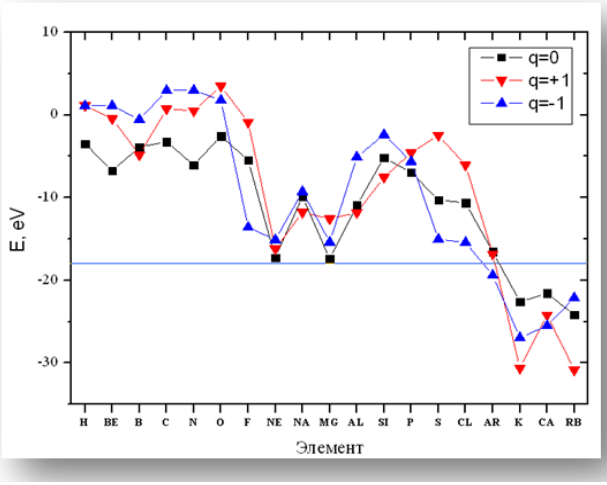

Рис.1 Пороговые энергетические потери частиц при прохождении сквозь графен. Результат молекулярно-динамического моделирования в силовом поле PM6.

Из полученных зависимостей следует, что графен может выступать в качестве фильтра для частиц на основе элементов второго периода, кроме Ne, и нескольких элементов третьего периода. Частицы, Ne, Mg, Ar и всех последующих элементов, не в состоянии проникнуть сквозь монослойный графен без создания механических повреждений.

Механизм фильтрации представляет собой внедрение бомбардирующий частицы в графен, часто с образованием химических связей и заметными деформациями в углеродном окружении. Затем нестабильное состояние распадается, и частица "выстреливает" в направлении, близком к первоначальному.

Литература

1. *Cohen-Tanugi D., Grossman J.C.* Water desalination across nanoporous graphene // Nano Lett., 2012, V.12. N.7. P. 3602–3608.
2. *Stewart J. J. P.* Optimization of Parameters for Semiempirical Methods V: Modification of NDDO Approximations and Application to 70 Elements // J. Mol. Modeling. 2007. V.13. P.1173-1213.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1303 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1303

ФУНДАМЕНТАЛЬНННАЯ ЦЕННОСТЬ, ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ СТОИМОСТЬ И СПРАВЕДЛИВАЯ СТОИМОСТЬ ПРЕДПРИЯТИЯ: ПОНЯТИЯ, ПОКАЗАТЕЛИ И МЕТОДЫ ИХ ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Ревуцкий Л.Д.
Информационное агентство "ИВИС"

Вначале некоторые общие положения о понятии, термине и показателях стоимости чего-либо (актива, предмета, вещи, имущества, собственности). Всё, что продаётся и покупается, сдаётся и берётся в аренду, называют товарами, и только товары имеют стоимости и цены. Для арендуемых товаров устанавливают стоимости и цены их аренды.

В дальнейшем ограничимся рассмотрением только одного из частных видов стоимости собственности как товара - стоимости предприятия. Именно предприятия, а не бизнеса - слова, неправомерно употребляемого в качестве синонима к предыдущему термину.

FUNDAMENTAL VALUES, FUNDAMENTAL COST AND THE FAIR COST OF THE ENTERPRISES: CONCEPT, INDICATORS AND METHODS OF THEIR DETERMINATION

Revuckiy L.D.
Information agency "EVIS"

First we introduce some general provisions on the concept, the term and the indicators of the value of something (the asset, subject, things, property, property). Goods name all that is bought and sold, shall be and is rented, and only the goods are of value and prices. For leased goods set value and the price of them rent.

In the future restrict ourselves to only one of the specific value of the property as of the goods - the value of the enterprise. It is the enterprise, and not business-word, that incorrectly used as a synonym to the previous term.

Полная стоимость любого предприятия состоит из принципиально ключевого стоимостеобразующего показателя его стоимости и драйверов этой стоимости. Простой пример: стоимостеобразующим показателем предприятия является стоимость его комплексной производственно-технической (и организационно-технологической) базы, а драйверами этой стоимости могут служить финансовые обязательства, стоимость непрофильных активов, стоимость земельного участка либо права на его бессрочную либо временную аренду, стоимость инфраструктуры на момент (дату) купли-продажи предприятия и др., если таковые имеются. При этом суммарная величина драйверов ключевой стоимости предприятия может быть ниже или равной, либо в

отдельных случаях даже выше этой стоимости.
Принципиально ключевой, стержневой, основополагающий стоимостеобразующий показатель предприятия будем называть его фундаментальной стоимостью, а соответствующие ей показатели его общей и обменной экономических ценностей - фундаментальной общей и фундаментальной обменной экономическими ценностями такого товара.
Полная стоимость предприятия есть не что иное, как его всесторонняя комплексная обменная экономическая ценность.
Полную стоимость предприятия, установленную на основе (с использованием) его фундаментальной стоимости, без учёта драйверов, зависящих от качества управления производственной деятельностью такого хозяйственного объекта в прошлом, до момента его купли-продажи, назовём полной фундаментальной стоимостью предприятия.
Полную стоимость предприятия с учетом всех без исключения, известных драйверов его фундаментальной стоимости будем называть полной экономически справедливой или далее по тексту - просто полной справедливой стоимостью.
В свою очередь, фундаментальная обменная экономическая ценность, т.е. фундаментальная стоимость предприятия, представляет собой его капитализированную фундаментальную общую экономическую ценность.
Фундаментальная общая экономическая ценность предприятия определяется величиной его годового общего экономического потенциала в денежном выражении. Применяемая на предприятии система оплаты живого труда персонала оказывает существенное влияние на величину его фундаментальной стоимости при использовании доходного подхода для её определения. Отсюда вытекает вывод, что полная стоимость предприятия не является величиной постоянной хотя бы в силу того, что его фундаментальная стоимость может меняться во времени, в том числе и потому, что она подвержена влиянию происходящих в экономике страны политических и социальных изменений (например, регулирования размеров минимальной и других видов заработной платы), а также инфляционных, стагнационных либо дефляционных процессов.
Как было указано выше, полная фундаментальная стоимость предприятия выражается суммой его фундаментальной стоимости и всех существующих весомых по величине драйверов этой стоимости, за исключением тех, которые не зависят от структуры имеющихся у него производственных фондов. Фундаментальная стоимость предприятия является ключевым стоимостеобразующим элементом его полной фундаментальной стоимости, а ключевым стоимостеобразующим элементом самой фундаментальной стоимости предприятия служит его общая фундаментальная экономическая ценность, характеризуемая в денежных единицах. При этом в качестве ценностеобразующего элемента общей фундаментальной экономической ценности предприятия выступает его общий экономический потенциал в денежном выражении, являющийся суммой экономических потенциалов основного и побочного направлений производства продукции, работ и/или услуг рассматриваемого хозяйственного объекта.
Для капитализации общей ценности предприятия при пересчёте её в его обменную ценность (стоимость), целесообразно пользоваться не добавленной стоимостью, а чистым доходом (чистой продукцией) этого объекта хозяйственной деятельности в денежном выражении, но это не принципиально, так как между ними имеет место устойчивая прямо пропорциональная зависимость с простейшими коэффициентами пересчёта.
У прилагательного «фундаментальная» применительно к термину «стоимость» предприятия имеется множество синонимов: нормализованная, нормированная, нормальная, нормативная, потенциальная, ресурсная, пересурсная, номинальная, основополагающая, базовая, объективная, рациональная, научно обоснованная и пр. Представляется, что термины «фундаментальная стоимость предприятия», «полная фундаментальная стоимость предприятия» и «полная справедливая стоимость предприятия» наиболее точно отражают экономическую и социальную суть рассматриваемых стоимостных показателей такого рода объектов. Учитывая приведенные выше соображения, предлагается строго различать фундаментальную и полную фундаментальную стоимости и соответствующие им общую и обменную фундаментальные ценности предприятия и выделить их в самостоятельную группу при рассмотрении аналогичных стоимостных показателей других видов.
Для определения фундаментальной стоимости предприятия в настоящее время могут быть использованы методы затратного и доходного подходов, а также метод применения нормативов удельных капитальных вложений.
Стоимость предприятия, устанавливаемая методами затратного подхода, характеризует его материально-экономическую ценность для владельца и народного хозяйства страны, тогда как его стоимость, определяемая с использованием доходного подхода, даёт убедительное представление о социально-экономической ценности предприятия для всех интересующихся этим вопросом сторон.
Оценка стоимости предприятий - ремесло, а не искусство, но оценщик стоимости этих объектов непременно должен обладать искусством внушения заказчику полного доверия к выдаваемому ему результату выполненной оценочной работы (особенно, если этот результат не был заранее продиктован заказчиком оценщику) и вызывать безоговорочное признание этого результата всеми другими заинтересованными сторонами.
До сих пор трудноразрешимая проблема состоит в том, как отличить приемлемый, достоверный результат оценочной деятельности по экономически значимым объектам оценки от весьма сомнительного, в частности, по использованным методам его получения.
В настоящее время предлагается узаконить уголовное преследование оценщиков за ошибочную оценку стоимости оцениваемых объектов. Для того, чтобы это делать нужно прежде всего иметь весомые доказательства того, что ошибка была допущена умышленно, а доказать такой факт практически невозможно как сегодня, так и будет безнадёжным в перспективе. Есть другие, более надёжные и эффективные профилактические способы борьбы с подлогами в оценке и их следует использовать (ранее упоминалась целесообразность создания Росгоскомоценки для определения стоимости исключительно дорогостоящих

активов; другой вариант - использование в случаях оценки таких активов жюри из 5 и более экспертов соответствующей квалификации, выбираемых из руководства или рядовых членов Экспертных Советов наиболее крупных СРО оценщиков в России). При этом следует предусматривать возможность ротации состава собираемых жюри экспертов в зависимости от специфических особенностей оцениваемых объектов.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1311 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1311

ВЛИЯНИЕ ПРОИЗВОЛЬНЫХ ВАРИАЦИЙ СОСТАВА И ТОЛЩИНЫ ОДНОМЕРНОГО ФОТОННОГО КРИСТАЛЛА С ПРИМЕСНЫМИ СЛОЯМИ ПЛАЗМЫ НА ШИРИНУ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ

Румянцев В.В.
Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАН Украины

Выполнено численное моделирование распространения электромагнитного возбуждения в композитных материалах – несовершенных одномерных фотонных кристаллах (таких как Si/жидкий кристалл и SiO2/Si), которые представляют собой топологически упорядоченные массивы слоев с произвольным набором примесных плазменных слоев. Изучены особенности зависимости ширины запрещенной фотонной зоны от концентрации примесных плазменных слоев. Результаты свидетельствуют о существенной перестройке спектра фотонных мод, вызванной присутствием дефектных слоев в неидеальных сверхрешетках, отличающихся от базовых вариацией как состава, так и толщины

EFFECT OF RADOM VARIATIONS OF BOTH COMPOSITION AND THICKNESS OF 1D PHOTONIC CRYSTAL WITH ADMIXTURE PLASMA LAYERS ON PHOTONIC BAND GAP

Rumyantsev V.V.
Donetsk Institute for Physics and Engineering named after O.O. Galkin National Academy of Sciences of Ukraine

Propagation of an electromagnetic excitation in composite materials - nonideal 1D photonic crystals (such as a Si/liquid crystal and SiO2/Si) which are a topologically ordered sets of layers with a random number of admixture plasma layers - is numerically simulated within the virtual crystal approximation. Peculiarities of the dependence of photonic band gap width on admixture plasma layers concentration have been studied. The results are the evidence of substantial photon mode spectrum reconstruction caused by presence of defect layers in nonideal superlattices which differ from the basic ones in both the composition and thickness

Investigation of disorder effects in an imperfect superlattice allowing modeling the properties of photonic crystal containing the plasma layers is still of a great interest [1]. Development of the theory of photonic structures requires consideration of model systems such as photonic superlattice with plasma layers. Using the virtual crystal approximation [2] we study 1D-superlattice, which is a topologically ordered ensemble (such as a Si/liquid crystal or SiO_2/Si system) with randomly included admixture plasma layers. The superlattice is modeled as a set of macroscopically homogeneous layered system with randomly included extrinsic (with respect to the ideal superlattice) layers of variable composition and thickness. Corresponding configuration-dependent material tensors in our model [3] of the imperfect superlattice are represented in terms of random quantities. After configuration-averaging the translational symmetry of the considered system is "restored" that allows us obtain the system of equations which define normal modes of electromagnetic waves, propagating in one-dimensional “periodic” medium.

To specify the results, let’s firstly consider the propagation of electromagnetic excitation in an imperfect Si/LC 1D superlattice with two elements (layers) in the cell, namely, with the first layer of silicon ($\varepsilon_1 = 11.7$) and the second layer of liquid crystal ($\varepsilon_2^{(1)} = 5.5$).Then we study SiO_2/Si 1D superlattice (with $\varepsilon_1 = 3.7$). The concentration, thickness and permittivity of the basic material layer in the first and second sublattices are denoted as $C_1^{(1)}$, $a_1^{(1)} = a_1, \varepsilon_1^{(1)} \equiv \varepsilon_1$ and $C_2^{(1)}, a_2^{(1)}, \varepsilon_2^{(1)} \equiv \varepsilon_2$, and the corresponding parameters of impurity layers with a different composition $C_{2C}^{(2)} \equiv C_C$ and thickness $C_{1T}^{(2)} \equiv C_T$, as well as $a_2^{(2)}, \varepsilon_2^{(2)}$. Note that the permittivity profile for inhomogeneous plasma is $\varepsilon_2^{(2)}(z) = 1 - \omega_e^2(z)/\omega^2$. For considered model plasma frequency is $\omega_e << \omega$ (collisions in plasma are neglected) and plasma density for $a_{n\alpha}$-th layer varies exponentially:

$$n(z) = n_{cr}\left\{\begin{array}{l}\exp\left[-\delta\left[z-(n-1)d-\sum_{j=1}^{\alpha}a_{nj}+a_{n\alpha}\right]/a_{n\alpha}\right]+\\ +\exp\left[-\delta\left(-z+(n-1)d+\sum_{j=1}^{\alpha}a_{nj}\right)/a_{n\alpha}\right]\end{array}\right\}/2 \quad (1)$$

Gradation parameter δ corresponds to the volume average plasma permittivity $<\varepsilon_2^{(2)}>=0.9$. Below we are considered the case of admixture plasma layers only in LC-sublattice for Si/LC superlattice and in Si-sublattice for SiO_2/Si system. Simple calculations [4] yield the dependence the lowest photonic band gap width $\Delta\omega$ on plasma concentration of the systems studied:

$$\Delta\omega_1/\omega = \left(\varepsilon_1 - f_d f_{1C}\right)^{-1}\sqrt{f_{1C}^2 f_{1T} + f_{2C} f_{2T} + f_{3C} f_{3T}}\,,$$

$$f_d = a_2\left[a_1 + a_2 + C_T\left(a_1^{(2)} - a_1\right)\right]^{-1},\ f_{1T} = \pi^{-2} Sin^2\pi\ f_d\,, \qquad (2)$$

$$f_{2T} = f_d\frac{\pi^{-1}\delta\ Sin2\pi\ f_d + 4 f_d Sin^2\pi\ f_d}{\delta^2 + \left(2\pi\ f_d\right)^2},\ f_{3T} = f_d^{\,2}\frac{Sin^2\pi\ f_d}{\delta^2 + \left(2\pi\ f_d\right)^2},$$

$$f_{1C}^2 = \left[C_C\left(\varepsilon_2 - 1\right) + \varepsilon_1 - \varepsilon_2\right]^2,\ f_{2C} = C_C f_{1C},\ f_{3C} \equiv C_C.$$

The dependence $\Delta\omega\left(C_C\ , C_T\right)$ is shown in Fig. 1 for Si/LC superlattice and in Fig. 2 for SiO_2/Si system for different relative both composition and thickness of layers. Surface 1 in Fig. 1 refers the case of $a_1/a_2 = 0.1$ and $a_1^{(2)}/a_2 = 0.5$, surface 2 corresponds to the case of $a_1/a_2 = 0.5$ and $a_1^{(2)}/a_2 = 0.1$. In Fig. 2 photonic band gap $\Delta\omega_1/\omega$ corresponds to the values $a_1^{(2)}/a_2$ and a_1/a_2 that are equal to 0,1; 10 (surface 1) and 10; 0,1(surface 2).

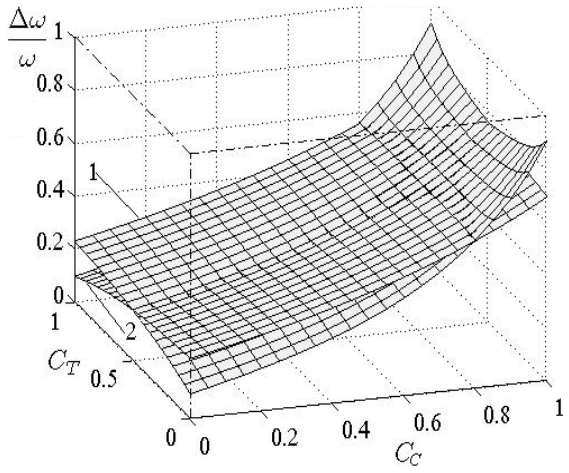

Fig. 1. Concentration dependence for a nonideal Si/LC 1D superlattice which contains plasma layers in LC-sublattice.

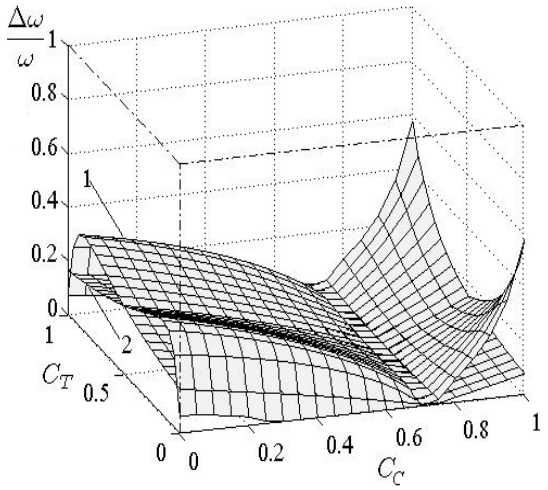

Fig. 2. Concentration dependence for a nonideal SiO_2/Si 1D superlattice which contains plasma layers in Si-sublattice.

Our results show that the optical characteristics of imperfect 1D superlattice may be significantly altered owing to transformation of their photon mode spectrum resulting a presence of admixture layers. Graphic representation $\Delta\omega\left(C_C, C_T\right)$ proves that the concentration dependence for the binary systems considered above differs for different relative composition of plasma layers. The case of nonideal multilayered systems with a larger number of sublattices and components of alien layers supposes a wide variety of specific behaviors of the photonic gap width. This circumstance extends considerably the promises of modeling composite materials with predetermined properties.

References

1. *Xiang-kun Kong, Shao-bin Liu, Hai-feng Zhang, He-lan Guan*. The effect of random variations of structure parameters on photonic band gaps of one-dimensional plasms photonic crystal // Optics Communications. 2011. V. 284. No.12. P.2915-2918.
2. *Parmenter R.H.* Energy Levels of a Disordered Alloy// Phys. Rev. 1955. V. 97. P.587-698.
3. *Rumyantsev V.V., Fedorov S.A., Gumennyk K.V.* Peculiarities of band gap width dependence upon concentration of admixtures randomly included in 1D photonic crystal // Photonic Crystals: Optical Properties, Fabrication and Applications / ed. William L. Dahl, NY: Nova Science Publishers, Inc., 2011. P. 183-200.
4. *Rumyantsev V.V., Fedorov S.A.* Effect of random variations of both the composition and thickness on photonic band gap of one-dimensional plasma photonic crystal // Proceeding of PIERS 2012. The Electromagnetic Academy, 2012. P. 1411-1414

ОСОБЕННОСТИ РИСКОМЕТРИИ ЗДОРОВЬЯ ЧЕЛОВЕКА В УСЛОВИЯХ ГИПОКСИЧЕСКОЙ ГИПОКСИИ

Кукушкин Ю.А., Дворников М.В., Богомолов А.В., Шмакова Л.В.
4-й Центральный научно-исследовательский институт Минобороны России

Изложены особенности оценивания риска потери сознания человеком в экстремальных и аварийных ситуациях, сопряжённых с гипоксическим воздействием, на основе предложенных понятий доза гипоксии и интенсивность гипоксического воздействия.

FEATURES OF HUMAN HEALTH RISK STUDY IN HYPOXIC HYPOXIA

Kukushkin Y.A., Dvornikov M.V., Bogomolov A.V., Shmakova L.V.
4-й ЦНИИ Минобороны России

Features of the risk evaluation unconscious man in extreme and emergency situations associated with hypoxic exposure, based on the proposed concepts of dose of hypoxia and intensity of hypoxia

Ситуации, связанные с воздействием на человека среды с низким парциальным давлением кислорода, которые имеют место, например, при разгерметизации салона самолета, обусловливают высокий риск потери сознания и даже гибели человека.

Известные математические модели позволяют рассчитать оценку такого риска в статических условиях, то есть при сохранении постоянства интенсивности гипоксического воздействия в течение анализируемого интервала времени, что существенно ограничивает область их применения. Преодолеть указанный недостаток можно за счет реализации нормирования воздействия гипоксической газовой среды на организм человека на основе дозового принципа.

С учетом результатов структурной идентификации законов распределения резервного времени потери сознания получены аналитические выражения для расчёта оценок вероятностей потери сознания в зависимости от времени пребывания в гипоксической газовой среде (от дозы гипоксии) в произвольный момент времени.

Структурная и параметрическая идентификация математической модели осуществлена на основе:

1) зависимостей устойчивости организма человека к воздействию высотных факторов в форме кривых равных эффектов в зависимости от давления в кабине, комплектации средств защиты и высотного профиля полета; при этом статистические оценки рассчитывались при выполнении гипотезы о усеченной нормальности функций распределения отклонений значений парциального давления кислорода в трахеальном воздухе, надежности деятельности и резервного времени сохранения работоспособности относительно кривых равных эффектов;

2) теоретических и экспериментальных исследований, подтверждающих гипотезу аддитивности эффектов от использования средств защиты летчика;

3) экспериментального оценивания влияния профессионально значимых факторов средств и условий деятельности на устойчивость организма человека к действию высотного фактора полета.

Методология дозового подхода и реализующее её математическое обеспечение позволяют рассчитать время сохранения работоспособности человека в условиях гипоксической гипоксии и её восстановления после потери сознания, обусловленной воздействием гипоксии. Временем начала восстановления работоспособности человека является момент изменения знака дозы гипоксии, а временем полного восстановления сознания – момент, при котором наступает равенство по модулю положительных и отрицательных доз гипоксии.

Предложенный метод обеспечивает расчет адекватных оценок вероятностей рассматриваемых неблагоприятных эффектов при любых значениях скоростей и профилей изменения парциального давления кислорода в трахее, кратности, времени воздействия гипоксической среды.

Литература

1. *Дворников М.В.* Анализ проблем эксплуатации средств защиты летчика от воздействия высотного фактора / М.В.Дворников, Ю.А.Кукушкин, А.В.Богомолов, В.К.Степанов, В.А.Сухолитко //Проблемы безопасности полетов. – 2002. – №10. – С. 27–31.
2. *Кукушкин Ю.А.* Методика определения потенциальной ненадежности действий и резервного времени сохранения работоспособности летчика в высотном полете / Ю.А.Кукушкин, А.В.Богомолов, М.В.Дворников, В.К.Степанов, В.А.Сухолитко // Проблемы безопасности полетов. – 2002. – №10. – С. 22–27.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1314 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1314

Работа поддержана РФФИ, грант 12-08-01273-а

РАЗЛИЧНЫЕ ВИДЫ ПРОВОДИМОСТИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ Y1-ZPRZBA2CU3O7-Δ

Вовк Р.В., Назиров З.Ф.
Харьковский национальный университет им В.Н.Каразина

В работе исследовано влияние допирования празеодимом на проводимость в базисной плоскости ВТСП-монокристаллов YBaCuO. Установлено, что увеличение степени допирования празеодимом в образцах Y1-xPrxBa2Cu3O7-δ приводит к усилению эффектов локализации и реализации в системе перехода вида металл - диэлектрик, который всегда предшествует сверхпроводящему переходу. Увеличение концентрации празеодима приводит к существенному смещению точки перехода металл - диэлектрик в область низких температур

DIFFERENT TYPES OF CONDUCTIVITY IN SINGLE CRYSTALS Y1-ZPRZBA2CU3O7-Δ

Vovk R.V., Nazirov Z.F.
V.N.Karazin Kharkov National University

We investigate the influence of praseodymium doping on the basis plane conductivity of Y1-xPrxBa2Cu3O7-δ HTSC single crystals. An increase of the degree of praseodymium doping leads to the enhancement of the localization effects and the appearance of a metal – insulator transition in the system, which always precedes the superconducting transition. The increase of the concentration of praseodymium, leads to a significant displacement of the point of the metal - insulator transition in the low temperature region

Как известно [1], характерной особенностью высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) является близость диэлектрического и сверхпроводящего состояний. В связи с этим возникает закономерный вопрос о взаимовлиянии этих состояний и, в этом аспекте, какую роль играют эффекты локализации при возникновении сверхпроводимости в ВТСП? Наибольший интерес для исследования этих вопросов ВТСП-соединение Re1Ba2Cu3O7-δ, где Re = Y или другой редкоземельный элемент (так называемая система 1-2-3). Это обусловлено сразу несколькими причинами. Во-первых, в случае оптимально допированных кислородом образцов, эти соединения имеют достаточно высокую критическую температуру Tc ≥ 90 K, превышающей температуру жидкого азота. Во-вторых, основные свойства этих соединений можно относительно легко варьировать путем изменения содержания кислорода, а также за счет полной или частичной замены составных компонент их изоэлектронными аналогами. При этом известно [1], что замена иттрия другими редкоземельными элементами практически не влияет на основные свойства соединения в нормальном и сверхпроводящем состоянии. Исключение составляет только замена иттрия на празеодим, так называемая «аномалия празеодима» [2]. Внесение даже малых (x ≈ 0,05) добавок празеодима в образцах Y1-xPrxBa2Cu3O7-δ приводит к существенному ухудшению их ведущих свойств, которое выражается в снижении Tc, росте удельного электросопротивления и усилении эффектов локализации. При достижении концентрации x ≈ 0,6 сверхпроводимость в соединении полностью исчезает, и она переходит в диэлектрический состояние. В то же время при таком переходе кристаллическая структура и кислородный индекс соединения остаются практически неизменными. Это, в свою очередь, дает нам возможность постепенного изменения соотношения между различными типами проводимости и, таким образом, более детального изучения электротранспортных процессов в экспериментальных образцах. С учетом вышесказанного, в данной работе была поставлена цель исследовать эволюцию продольной проводимости в монокристаллах Y1-xPrxBa2Cu3O7-δ при различной степени легирования празеодимом в широком интервале концентраций 0 ≤ x ≤ 0,5.

Монокристаллы YBa2Cu3O7-δ выращивали по раствор-расплавной технологии [1]. Для получения кристаллов с частичной заменой Y на Pr, Y1-zPrzBa2Cu3O7-δ, в начальную шихту добавляли Pr5O11 в соответствующем процентном соотношении. Режимы выращивания и насыщение кислородом кристаллов Y1-zPrzBa2Cu3O7-δ были такими же, как и для нелегированных монокристаллов [1]. Как исходные компоненты для выращивания кристаллов использовали соединения Y2O3, BaCO3, CuO и Pr5O11. Электросопротивление в ab-плоскости измеряли по стандартной 4-х контактной методике на постоянном токе до 10 мА. Температуру образца определяли платиновым терморезистором.

Как показали измерения температурных зависимостей электросопротивления в базисной ab-плоскости монокристаллов Y1-xPrxBa2Cu3O7-δ с разной степенью легирования празеодимом, по мере роста концентрации празеодима критическая температура уменьшается, а электросопротивление возрастает, что согласуется с литературными данными [2].

При этом следует отметить, что для концентраций празеодима (0,0 ≤ x ≤ 0,34) экспериментальные кривые ρab(T) сохраняют квазиметаллический характер зависимости. При дальнейшем росте концентрации празеодима эти кривые приобретают вид с характерным термоактивационным прогибом, что свидетельствует об усилении роли эффектов локализации.

Как показал анализ, в координатах ln[ρab/T] - 1/T эти же экспериментальные кривые спрямляются в достаточно широком температурном интервале, что соответствует их описанию с помощью аналитического соотношения:

$$\rho(T) \sim \exp\left(\frac{\Delta}{T}\right), \qquad (1)$$

где Δ - некоторая энергия активации.

В то же время, при понижении температуры ниже некоторого характерного значения начинается систематическое отклонение экспериментальных точек от линейной зависимости, что, согласно [3], может служить признаком реализации в системе перехода металл - диэлектрик (МД) «андерсоновского» типа. Как известно из литературы [3], переход Андерсона может происходить также и в веществах, которые не являются аморфными, но, одновременно, имеют определенную степень неупорядоченности. В соединениях системы 1-2-3 роль такого фактора может играть как разупорядочение лабильной компоненты [1], так и индуцированная допированием празеодимом частичная кластеризация экспериментального образца [2].

В работе [4] для анализа экспериментальных кривых ρab(T) была предложена формула:

$$\rho = \frac{\rho_0 + \alpha T}{1 - n\left[1 - \exp\left(-\Delta E / 2kT\right)\right]} - \frac{\beta T_c}{T - T_c}, \quad (2)$$

где первое слагаемое описывает металлический или полупроводниковый температурный ход электросопротивления в нормальном состоянии, а второе - флуктуационную сверхпроводимость, возникающее при температуре выше резистивного перехода в нормальное состояние; n и 1-n - доли металлической и полупроводниковой проводимостей, соответственно. При этом следует отметить, что все подгоночные параметры, использованные в нашем анализе, являются линейными зависимостями одного из них, фактически совпадает со значениями концентрации празеодима в наших образцах. Таким образом можно сделать вывод о том, что в нашем случае формула (2), как и в работе [4], по сути является однопараметрической.

Используя значения параметров, полученных из анализа наших кривых с помощью формулы (2), мы, по методике [4], разделили вклады, соответствующие металлической и полупроводниковой составляющим проводимости для всех исследованных образцов согласно формулам (3) [4] с использованием вышеуказанных параметров:

$$\sigma_1 = \frac{1-n}{\rho_0 + \alpha T} \quad \text{и} \quad \sigma_2 = \frac{n}{(\rho_0 + \alpha T)\exp\left(\Delta E / 2kT\right)} \quad (3).$$

Как показал анализ, несмотря на то, что с увеличением концентрации празеодима доля полупроводниковой составляющей возрастает, сверхпроводящий переход всегда наступает после того, как начинает выполняться неравенство σмет> σп.п. Иными словами, можно сделать вывод о том, что в образцах Y1-xPrxBa2Cu3O7-δ сверхпроводящий переход всегда предшествует переходу металл - диэлектрик.

Если за точку перехода металл - диэлектрик условно принимать температуру ТМИ, при которой σмет=σп.п., то можно видеть, что увеличение концентрации празеодима приводит к существенному смещению ТМИ в область низких температур.

Литература

1. Vovk R.V., Obolenskii M.A., Zavgorodniy A.A., Goulatis I.L., Beletskii V.I., Chroneos A.. // Physica C. – 2009. –V.469. – P. 203-206.
2. Radousky *H.B.*. // J.Mater. Res. Vol.7, №7, P. 1917-1955 (1992).
3. Mott *N.F.* Metal-insulator transition. - Word Scientific: London, 1974.
4. Волошин *В.А, Абалышева И.С., Бочкова Г.Ю., Бойко Ф.А., Дорошенко Н.А., Южелевский Я.И.* // ФТТ. -1996. -т.38, №5. -с.1553-1558.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1320 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1320

МАГНИТОПРОВОДИМОСТЬ РАЗДВОЙНИКОВАННЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ YBA2CU3O7-Δ

Вовк Р.В., Гвоздиков В.М., Назиров З.Ф., Кругляк В.В.

Харьковский национальный университет им В.Н.Каразина

В работе исследовано влияние угла разориентации между направлением постоянного магнитного поля H=15 кЭ и направлением базисной ab-плоскости a є P(H,ab) на температурные зависимости избыточной проводимости в области переходов в сверхпроводящее состояние раздвойникованных монокристаллов YBa2Cu3O7-d с малым оклонением от кислородной стехиометрии. Установлено, что при температурах T>Tc температурные зависимости избыточной парапроводимости интерпретируются в рамках теоретической модели флуктуационной проводимости Асламазова-Ларкина для слоистых сверхпроводящих систем. Обсуждаются причины появления низкотемпературных «хвостов» (паракогерентных переходов) на резистивных переходах, соответствующих различным режимам фазового состояния вихревой материи.

MAGNETO-CONDUCTIVYTI OF THE UNTWINNED YBA2CU3O7-Δ SINGLE CRYSTALS

Vovk R.V., Gvozdikov V.M., Nazyrov Z.F., Kruglyak V.V.

V.N.Karazin Kharkov National University

In this work we study the influence of the disorientation angle between the direction of constant magnetic field up to 15 kOe and the ab-plane a є P(H,ab) to the temperature dependence of the excess conductivity in the temperature interval of the transition to the superconducting state in untwinned YBa2Cu3O7-d single crystals with a small oxygen hypostoichiometry. At temperature T>Tc, the temperature dependence of the excess para-conductivity is interpreted within the Aslamazov-Larkin theoretical model of the fluctuation conductivity for layered superconductors. The cause of the appearances of low temperature “tails” (para-coherent transitions on the resistive transitions, corresponding to different phase regimes of the vortex-matter state is discussed.

In this work we study the influence of the angle between the constant external magnetic field 15 kOe and the ab-plane α on the shape of the temperature dependence of the resistivity nearby a transition to the superconducting (SC)

state in untwinned YBa2Cu3O7-δ single crystals with a small oxygen hypostoichiometry. Assuming that the excessive conductivity $\Delta\sigma = \sigma - \sigma_0$ [the deviation from the inversely-linear behavior σ0=(A+BT)−1] diverges as Δσ~(T-Tc)-β at the critical temperature Tc we found that the derivative $\chi(T) = -d\ln\Delta\sigma / dT$ is characterized by the following three temperatures: Tc0, TM and Tc, corresponding to the end of the resistive transition in SC state, the melting point of the vortex-lattice and the critical temperature in the mean-field approximation respectively. We found that: (i) the function $\chi(T)$ has a linear asymptotes $\chi(T)^{-1} = \beta^{-1}{}_{c0}(T - T_{c0})$ and $\chi(T)^{-1} = \beta^{-1}{}_{c}(T - T_{c})$ nearby the Tc0 and Tc with $\beta_{c0} > \beta_c \approx 1/2$ which means a crossover from the tree-dimensional-like (3D) behavior, $\beta_c \approx 1/2$, to the lower effective dimensionality. (ii) The width of transitional region Tc - Tc0 increases from 0.3K at zero field and $\alpha = 0$ to approximately 6K at $\alpha = 60^0$. (iii) The peaks at the vortex-melting point TM grow up and shift toward the T_{c0}.with increasing the angle α. (iv) The function $\chi(T)$ displays a universal scaling which means that all points measured at different angles α lay at a single curve in some reduced coordinates. (v) The function $\Delta\sigma(T)$ displays a pseudogap behavior and the 3D-2D dimensional crossover. We relate these features with the Hikami -Larkin theoretical model for the fluctuation conductivity at T>Tc and with the 3D-2D crossover on the vortex-lattice melting line caused by the crossover of the upper critical magnetic field $H_{c2}(\alpha, T)$ trough the elastic moduli of the vortex-lattice which are polynomials of the ratio $H / H_{c2}(\alpha, T)$ at T<Tc.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1321 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1321

ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ НА ТЕМПЕРАТУРНУЮ ЗАВИСИМОСТЬ НОРМАЛЬНОГО ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ YBA2CU3O7-Δ С Δ≈0.45

Вовк Р.В., Хаджай Г.Я., Назиров З.Ф.
Харьковский национальный университет им В.Н.Каразина

Исследована температурная зависимость электросопротивления Y1Ba2Cu3O6.55 в плоскости слоев при гидростатических давлениях до 10 кбар. Полученные зависимости выше ТС могут быть с высокой точность аппроксимированы в рамках модели s–d–рассеяния электронов на фононах. Приложение высокого давления приводит к уменьшению сопротивления, которое при высоких температурах это существенно больше, чем при низких. Это может быть связано с ослаблением электрон-фононного взаимодействия при увеличении давления

EFFECT OF HIGH PRESSURE ON THE TEMPERATURE DEPENDENCE OF THE NORMAL RESISTIVITY SINGLE CRYSTALS YBA2CU3O7-Δ С Δ≈0.45

Vovk R.V., Hadzaj G.Ya., Nazirov Z.F.
V.N.Karazin Kharkov National University

It is investigated the temperature dependency of electric resistance Y1Ba2Cu3O6.55 in the planes of layers under hydrostatic pressures up to 10 kbar. The obtained dependencies above superconducting transition can be approximated with high precision within the framework of model s-d–scattering of electrons on phonons. The increasing of pressure lead to reduction of resistance, which under high temperature is greatly more, than under low. This can be connected with weakening an electron–phonon interaction when the pressure has increasing

Целью настоящей работы является исследование влияния высокого гидростатического давления до 11 кбар на сопротивление в ab-плоскости монокристаллов Y1Ba2Cu3O7-δ с дефицитом кислорода δ≈0.45 и критической температурой Tc≈50 K.

Монокристаллы Y1Ba2Cu3O7-δ выращивали по раствор-расплавной технологии в золотом тигле. Для проведения резистивных исследований отбирали кристаллы прямоугольной формы с размерами 3×0.5×0.03 мм3. Минимальный размер соответствовал направлению вдоль оси c. Кристаллы отжигали в потоке кислорода при 400°C в течение пяти суток. Для полученния δ≈0.45 проводили дополнительный суточный отжиг в воздухе при 600oC с последующей закалкой. Контакты для 4-хзондовой схемы создавали с помощью серебряной пасты и золотых проводников (ø 0.05 мм) с последующим трехчасовым отжигом при 200oC в атмосфере кислорода. Переходное сопротивление таких контактов менее 1 Ома. Гидростатическое давление создавали в автономной камере типа поршень-цилиндр [1] и измеряли манганиновым манометром, температуру – медь-константановой термопарой.

По мере возрастания приложенного давления сопротивление уменьшается– dR300/dP= –4.3·10–3 Ω/kbar, а критическая температура (Tc) образца растет– dTc/dP=0.54 K/kbar, что согласуется с литературными данными [1]. Уменьшение содержания кислорода до δ≈0.45, помимо понижения Tc (от 92 до ~50 K), приводит к отклонению зависимостей ρab(T), книзу от линейного хода, который характерен для оптимально допированных образцов.

Для аппроксимации экспериментальной температурной зависимость сопротивления при T≥60 K использовали

соотношение: $R = \frac{R_0 + R_3}{1 + C_4 \cdot \exp\left(-\frac{T_1}{T}\right)}$, где $R_3 = C_3 \cdot \left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \cdot \int_0^{\theta/T} \frac{X^3 \cdot e^X}{\left(e^X - 1\right)^2} \cdot dX$ – сопротивление, обусловленное s-d рассеянием электронов на фононах, параметр C3 зависит от эффективных массы d и s электронов, энергии Ферми и т.д.; R0 – остаточное сопротивление; θ – температура Дебая; знаменатель 1+C4/exp(T1/T) связывается с дополнительным вкладом в проводимость электронных состояний зоны, энергия дна которой выше EF на величину kT1. Варьируя указанные параметры можно описать экспериментальную температурную зависимость сопротивления со средней погрешность не больше 0.8%; температурная зависимость производной, dR/dT, аппроксимируется примерно с такой же погрешностью.

Получено, что температура Дебая, θ, от давления практически не зависит. R0 и C3, характеризующие процессы рассеяния в образце, монотонно уменьшаются с ростом давления, в частности, dR0/dP ≈ –6.9·10–4 Ω/kbar, что более чем на порядок медленнее, чем уменьшение R300. Уменьшение R0 свидетельствует об улучшении структуры образца под действием приложенного давления. Уменьшение C3 может быть обусловлено уменьшением вероятности индуцированных фононами s-d переходов [2]. С этим же может быть связано и быстрое уменьшение R300 по сравнению с R0.

При приближении к сверхпроводящему переходу экспериментальные значения сопротивления отклоняются вниз от аппроксимации, что связано, вероятно, с возникновением сверхпроводящих флуктуаций.

Литература

1. Vovk R. V., Zavgorodniy A. A., Obolenskii M. A., Goulatis I. L., Chroneos A. and Pinto Simoes V. M. // Modern Physics Letters B V.24, Issue: 22 (2010) P. 2295-2301.
2. Colquitt L. // J. of Applied Physics. 36 (1965) 2454.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1322 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1322

ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ ПАРАМЕТРИЧЕСКИЕ КОЛЕБАНИЯ ТРУБОПРОВОДА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ПЕРЕМЕННОГО ВНУТРЕННЕГО ДАВЛЕНИЯ. ЧАСТЬ II. ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ХАРАКТЕРИСТИК ВНУТРЕННЕГО ДАВЛЕНИЯ В ЖИДКОСТИ, СИЛЫ АРХИМЕДА, СИЛ ИНЕРЦИИ КОРИОЛИСА И СИЛ СОПРОТИВЛЕНИЯ НА ИЗГИБНЫЕ И ВРАЩАТЕЛЬНЫЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ ДВИЖЕНИЯ ТРУБОПРОВОДА.

Шакирьянов М.М., Хакимов А.Г.
ФГБОУ ВПО " Уфимский государственный авиационный технический университет"

SPATIAL PARAMETRICAL VIBRATIONS OF A PIPELINE AFFECTED BY VARIABLE INTERNAL PRESSURE. PART II. RESEARCH ON THE EFFECTS OF CHARACTERISTICS OF INTERNAL PRESSURE IN A LIQUID, ARCHIMEDES FORCE, CORIOLIS INERTIA FORCES AND DRAG FORCES ON FLEXURAL AND ROTARY VIBRATIONAL MOVEMENTS OF A PIPELINE

Shakir'yanov M.M., Khakimov A.G.
Ufa State Aviation Technical University

Работа посвящена решению задачи о пространственных изгибно-вращательных колебаниях трубопровода под действием переменного внутреннего давления. Особое внимание уделено исследованию влияния величин статической и динамической составляющих, круговой частоты и начальной фазы давления в жидкости, выталкивающей силы Архимеда, сил инерции Кориолиса и сил сопротивления на изгибные и вращательные колебательные движения трубопровода

The work is devoted to solving the problem on spatial flexural-rotary vibrations of a pipeline under the action of alternating internal pressure. Special attention is paid to research on the effects of values of static and dynamic components, circular frequency and initial phase of pressure in a liquid, Archimedes buoyancy force, Coriolis inertia forces and drag forces on flexural and rotary vibrational movements of the pipeline

Настоящая статья посвящена решению задачи о пространственных изгибно-вращательных колебаниях трубопровода под действием переменного внутреннего давления. Исследование основано на приближенной математической модели изгибно-вращательных колебательных движений изогнутого собственным весом двухопорного трубопровода, разработанной в предположении малости упругости опор и деформаций трубы, связанных с ее выходом из плоскости изгиба. При этом также учитываются: силы сопротивления, пропорциональные первой степени скорости, выталкивающая сила Архимеда и силы инерции Кориолиса. Результаты вычислений для конкретных значений параметров представлены в виде графиков и дан их анализ. В частности, установлено, что с увеличением статической составляющей внутреннего давления одновременно происходит увеличение амплитуды изгибных колебаний и уменьшение частоты вращательных колебаний трубы. При одной и той же величине статического давления наибольшие изменения амплитуд вращательных и изгибных колебательных движений трубопровода обусловлены изменением значений круговой частоты динамической составляющей внутреннего давления. Показано, что если колебания трубопровода происходят в водной среде, то амплитуды изгибных и вращательных колебаний трубы с учетом и без учета сопротивления отличаются значительно. Если же трубопровод совершает колебания в воздушной среде, то имеет место совпадение результатов вычислений с учетом и без учета сил сопротивления. В последнем случае наблюдается также существенное увеличение частот как вращательных, так и изгибных колебаний

трубопровода. При движении трубопровода в водной среде с увеличением амплитуды динамической составляющей внутреннего давления происходят значительное увеличение амплитуды изгибных колебаний и незначительное увеличение амплитуды вращательных колебаний. Если же трубопровод движется в воздушной среде, то увеличение амплитуды динамической составляющей внутреннего давления приводит к увеличению амплитуд и изгибных и вращательных колебаний. Установлено, что если не учитывается выталкивающая сила Архимеда, то в случае движения трубопровода в водной среде одновременно происходит существенное увеличение частот и уменьшение амплитуд его вращательных и изгибных колебаний. При этом можно также отметить значительное увеличение частоты изгибных биений. В случае же движения трубопровода в воздушной среде его частоты и амплитуды вращательных и изгибных колебаний изменяются незначительно. Отмечено также влияние сил Кориолиса и начальной фазы динамической составляющей внутреннего давления в трубопроводе на его колебательные движения.

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1326 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1326

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПСЕВДОЩЕЛИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ Y1-ZPRZBA2CU3O7-?

Завгородняя Н.Н., Назиров З.Ф., Вовк Р.В.
Харьковский национальный университет им В.Н.Каразина

В работе исследовано влияние допирования празеодимом на проводимость в базисной плоскости ВТСП-монокристаллов YBaCuO. Установлено, что избыточная проводимость (T) образцов в широком интервале температур Tf<T<T подчиняется экспоненциальной температурной зависимости Δs~(1-T/T) exp (Δab/T) и может быть интерпретирована в терминах теории кроссовера БКШ-БЭК, где T представлена, как среднеполевая температура сверхпроводящего перехода

TEMPERATURE DEPENDENCE OF THE PSEUDOGAP IN Y1-ZPRZBA2CU3O7-?

Zavgorodnyaya N.N., Nazirov Z., Vovk R.
V.N.Karazin Kharkov National University

In present work we have investigated the conductivity in the basis plane of the doped by Pr and of YBaCuO single crystals. It is shown, that the excess conductivity for the analyzed samples shows dependence Δs~(1-T/T)exp(Δab/T) in a wide temperature range Tf<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

Как известно, допирование соединения YBaCuO замещающими элементами вызывает изменение плотности носителей тока, тепло-и электропроводности этого сверхпроводни-ка. Важную роль при этом играет вид и концентрация примеси. Особый интерес, в этом аспекте, представляет частичная замена Y на Pr, которая, с одной стороны, приводит к подавлению сверхпроводимости (в отличие от случаев замены Y на остальные редкоземельные элементы), а с другой - позволяет сохранять практически неизменными параметры решетки и кислородный индекс δ [1,2]. В частности, исследования влияния примесей Pr на условия и режимы существования области псевдощелевого состояния (ПЩ) таких соединений [1] играет важную роль не только для прояснения природы высокотемпературной сверхпроводимости, но и для определения эмпирических путей повышения их критических параметров. Следует отметить, что к настоящему времени данные о степени влияния допирования Pr на ПЩ-состояние соединения YBaCuO остаются в значительной степени противоречивыми. Очевидно, определенную роль здесь играет тот факт, что существенная часть экспериментального материала была получена на керамических, пленочных и текстурированных образцах различной технологической предыстории [3,4], имеющих высокое содержание межгранулярных связей. Как было показано в работе [5], при достаточно высокой точности измерений значения псевдощели в широком интервале температур можно определить из зависимостей ab(T) (электросопротивление в базисной плоскости) при температурах ниже некоторого характерного значения T* (температуры открытия псевдощели). В данной работе было исследовано влияние примесей Pr в широком интервале концентраций ($0.05 \le z \le 0.5$) на температурную зависимость псевдощели в монокристаллах Y1-zPrzBa2Cu3O7-δ с различной критической температурой (Tc) при протекании транспортного тока в базисной ab-плоскости.

Литература

1. *Obolenskii M.A., Vovk R.V., Bondarenko A.V., and Chebotaev N.N.*/Localization effects and pseudogap state in YBa2Cu3O7-δ single crystals with different oxygen content.// ФНТ, т.32, №6, с.746-752 (2006).
2. *Radousky H.B.*. A review of the superconducting and normal state properties of Y1-xPrxBa2Cu3O7// J.Mater. Res. Vol.7, №7, P. 1917-1955 (1992).
3. *Kebede A.et al*.// Magnetic ordering and superconductivity in Y1-yPryBa2Cu3O7./ Phys. Rev. B 40, p.4453-4462 (1991).
4. *Ginsberg D.M. (ed),* Physical properties high temperature superconductors I, Word Scientific, Singapore (1989).
5. *Прокофьев Д.Д., Волков М.П., Бойков Ю.А*. Величина и температурная зависимость псевдощели в YBaCuO, полученные из резистивных измерений // ФТТ. - 2003. – Т.45, №7. - С.1168-1176.
6. *Babaev E., Kleinert H.* Nonperturbative XY-model approach to strong coupling superconductivity in two and three dimenshions // Phys. Rev. B. - Vol.59, -1999. –P.12083-12089.
7. *Изюмов Ю. А., Курмаев Э. З.* Новый класс высокотемпературных сверхпроводников в FeAs-системах // УФН. -178,№12. – С. 1307-1334 (2008).

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1298 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1298

ЭФФЕКТЫ ЛОКАЛИЗАЦИИ И ПСЕВДОЩЕЛЬ В МОНОКРИСТАЛЛАХ Y1-ZPRZBA2CU3O7-Δ

Вовк Р.В., Габусу П.А.
Харьковский национальный университет им В.Н.Каразина

В работе исследованы температурные зависимости электросопротивления вдоль оси с монокристаллов Y1-zPrzBa2Cu3O7–δ с различным содержанием празеодима 0.0 < z < 0.5. Обнаружено, что в случае соединения Y1-zPrzBa2Cu3O7–δ при увеличении концентрации празеодима происходит усиление процессов локализации носителей, которое сопровождается переходом от ПЩ–режима к режиму прыжковой проводимости с переменной длинной прыжка

LOCALIZATION EFFECTS AND PSEUDOGAP IN SINGLE CRYSTALS Y1-ZPRZBA2CU3O7-Δ

Vovk R.V., Gabusu P.A.
V.N.Karazin Kharkov National University

In this work the temperature dependence of the resistivity along the c axis of single crystals of Y1-zPrzBa2Cu3O7-δ with different content of praseodymium 0.0 <z <0.5. We found that in the case of compound Y1-zPrzBa2Cu3O7-δ with increasing concentration of praseodymium is a strengthening process of localization of carriers, which is accompanied by the transition from the PG-regime to the hopping conduction with a variable-range hopping

Изучение псевдощелевой аномалии (ПЩ) продолжает оставаться одним из наиболее актуальных направлений физики высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП). Однако, несмотря на большой накопленный литературный материал, до сих пор неясными остаются как сама природа происхождения ПЩ так и вопрос о ее роли в формировании сверхпроводящего состояния в ВТСП. Наиболее перспективным для изучения в этом аспекте являются соединения Y1Ba2Cu3O7-δ, что обусловлено возможностью широкого варьирования их состава путем замены иттрия его изоэлектронными аналогами, либо изменения степени кислородной нестехиометрии. До настоящего времени считалось [1], что в области электротранспортных свойств псевдощель проявляется в отклонении температурной зависимости электросопротивления вниз от линейной зависимости. Однако, как было установлено в недавней работе [2], ПЩ может оказывать существенное влияние на реализацию различных режимов некогерентного переноса заряда поперек базисной плоскости. Так, согласно [2], температурная зависимость поперечного электросопротивления ρc(T) в случае соединения Y1Ba2Cu3O7-δ должна подчиняться соотношению:

$$\rho_c(T) = \frac{\alpha T}{\Delta^*} \exp\left(\frac{\Delta^*}{T}\right), \quad (1)$$

где α- коэффициент зависящий от содержания кислорода, а Δ* – некоторая величина определяющая термоактивационный процесс через энергетическую щель- «псевдощель».

Как отмечалось выше, характерной особенностью соединения Y1Ba2Cu3O7-δ является относительная простота замены иттрия другими редкоземельными элементами [3]. Особый интерес представляет частичная замена Y на Pr, которая, с одной стороны, приводит к подавлению сверхпроводимости [4] (в отличие от случаев замены Y на остальные редкоземельные элементы), а с другой – позволяет сохранять практически неизменными параметры решетки и кислородный индекс соединения [5]. В частности, исследование влияния примесей Pr на условия и режимы существования области псевдощелевого состояния (ПЩ) таких соединений [5] играет важную роль не только для прояснения природы высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП), но и для определения эмпирических путей повышения их критических параметров. Следует отметить, что до настоящего времени данные о степени влияния допирования Pr на проводящие свойства соединения YBaCuO остаются в значительной степени противоречивыми. Очевидно, определенную роль здесь играет тот факт, что существенная часть экспериментального материала была получена на керамических, пленочных и текстурированных образцах различной технологической предыстории, обладающих высоким содержанием межгранулярных связей. Учитывая вышесказанное, в настоящей работе была поставлена цель исследования поперечной проводимости в монокристаллах Y1-zPrzBa2Cu3O7-δ с различной степенью допирования празеодимом.

Монокристаллы YBa2Cu3O7$-\delta$ выращивали по раствор-расплавной технологии [4]. Для получения кристаллов с частичной заменой Y на Pr, Y1-zPrzBa2Cu3O7-δ, в начальную шихту добавляли Pr5O11 в соответствующем процентном соотношении. Режимы выращивания и насыщения кислородом кристаллов Y1-zPrzBa2Cu3O7-δ, были такими же, как и для нелегированных монокристаллов [4]. Как начальные компоненты для выращивания кристаллов использовали соединения Y2O3, BaCO3, CuO и Pr5O11. Характерные размеры кристаллов составляли 2.5x1.5x0.4 мм3 (наименьший размер соответствовал направлению вдоль оси c). Электросопротивление измеряли по восьмиконтактной методике, описанной в [3]. Температуру измеряли платиновым терморезистором.

Как показали измерения температурных зависимостей ρc(T) восьми образцов с различным содержанием празеодима, по мере увеличения концентрации празеодима, электросопротивление образцов возрастает, а критическая темература понижается, что согласуется с литературными данными [4,5]. При этом сами зависимости ρc(T) испытывают переход от квазиметаллического к полупроводниковому поведению, с характерной большой отрицательной кривизной экспериментальных кривых.

Как показал анализ, эти же зависимости в координатах ln(ρ/T) – 1/T (что соответствует их описанию посредством соотношения (1)) в области малых концентраций празеодима ($z \leq 0.23$) и относительно высоких температур достаточно хорошо спрямляются. В тоже время, по мере дальнейшего роста концетрации празеодима, происходит значительное отклонение экспериментальных кривых от этой зависимости. При этом, как показал анализ, эти же кривые ρc(T) в координатах ln(ρ/T) – 1/T0.5, измеренные при относительно большой ($z \geq 0.34$) концентрации празеодима, заметно лучше описываются посредством соотношения для прыжковой

проводимости:

$$\rho_c(T) = T\exp\left(\frac{T_0}{T}\right)^{1/2}, \quad (2)$$

носящего название «закон ½» [3,6]. Здесь, T0 – энергия активации.

Как следует из рисунка, для кривых с концентрацией z≥0.43 при температурах вблизи 94÷127 К наблюдается изменение угла наклона более чем в два раза, что, в свою очередь, свидетельствует об уменьшении энергии активации, и отражает наличие фазовых переходов, наблюдавшихся раннее в работе [7] для монокристаллов YBaCuO. Согласно [7], переходы такого типа оказывают влияние на кинетику переноса заряда и, согласно классическим критериям Мотта [8], могут служить достоверным признаком реализации в системе перехода металл-диэлектрик (МД) «андерсоновского» типа.

Действительно, как показал проведенный анализ наших экспериментальных данных, в области температур, в которой наблюдается систематическое отклонение экспериментальных точек от линейной зависимости в координатах ln[ρab/T] – 1/T, наши кривые достаточно хорошо описываются при помощи асимптотической зависимости, так называемого закона «1/3» [9]:

$$1/\rho \propto T^{1/3}. \quad (3)$$

Такое поведение зависимостей ρ(T) уже наблюдалось ранее экспериментально для аморфных сплавов Gd-Sn.

Таким образом, анализ полученных экспериментальных данных показывает, что в случае соединения Y1-zPrzBa2Cu3O7-δ, по мере увеличения концентрации празеодима происходит усиление процессов локализации носителей, которое сопровождается переходом от ПЩ–режима к режиму прыжковой проводимости. Подобная зависимость свидетельствует о том, что механизм транспорта носителей поперек слоев осуществляется с помощью термоактивационных прыжков с переменной длиной. Показатель 1/2 свидетельствует о том, что прыжковая проводимость одномерна, и/или что кулоновское взаимодействие играет в поперечном транспорте существенную роль. Недавно подобную зависимость обнаружили также в некоторых слоистых органических сверхпроводниках в перпендикулярном магнитном поле [10], что может дать ключ к разгадке некогерентного транспорта поперек слоев. Это явление еще раз подчеркивает отличие ВТСП купратов от ферми-жидкостных металлов, поскольку температурная зависимость сопротивления вдоль и поперек слоев не одинакова и отличается от характерной для обычных металлов.

Литература

1. *Завгородний А.А., Самойлов А.В., Вовк Р.В., Оболенский М.А., Назиров З.Ф., Петренко А.Г., Pinto Simoes V.M.* // Физика и техника высоких давлений, том 20, № 4, с. 80-95 (2010).
2. *G.Luo H., Su H.P., and Xiang T.* // Phys. Rev. B. 77. -2008. –P. 014529 (1-17).
3. *Vovk R.V., Obolenskii M.A., Bondarenko A.V., Goulatis I.L., Samoilov A.V., Chroneos A.I., Pinto Simoes V.M..* // J. Alloys and Compaunds 464, P. 58-66 (2008).
4. *Vovk R.V., Obolenskiy M.A., Zavgorodniy A.A., Lotnyk D.A., Kotvitskaya K.A.* // Physica B 404 (2009) p. 3516-3518.
5. *Radousky H.B.* // J.Mater. Res. -1992. -V.7, №7. -P.1917-1955.
6. *Мейлихов М.З.* // ЖЭТФ. -1999. -Т.115, №4. -С.1484-1496.
7. *Оболенский М.А., Бондаренко А.В., Зубарева М.О.* // ФНТ. -1989. - Т.15, №11. -С.1152-1159.
8. N.F. Mott, Metal-insulator transition, Word Scientific, London (1974).
9. *Imry Y.//* J. Appl. Phys. 52, 1817 (1981).
10. *Gvozdikov V.M.* // Phys. Rev. B 76, 235125 (2007)

http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper.php?p=1325 http://www.ivtn.ru/2012/confs/enter/paper_e.php?p=1325

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) **8**

СЕКЦИЯ 3
Моделирование, численные эксперименты
SECTION 3
Computer simulation **12**

СЕКЦИЯ 5
Обработка данных, базы данных, анализ данных
SECTION 5
Data processing, databases and data analysis **29**

СЕКЦИЯ 6
Интеллектуальные системы и технологии (принятие решений, экспертные системы и т.д.)
SECTION 6
Intelligence systems and technologies (decision-making, expert system etc.) **33**

СЕКЦИЯ 8
Доклады, не вошедшие в основные секции
SECTION 8
The reports, which are not included in the basic sections **35**

ЗАЯВКА НА УЧАСТИЕ В РАБОТЕ ИВТН-2013

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

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

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

* 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

IVTN-2013 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.

You can also fill the application form on web-site: http://www.ivtn.ru/application_e.html

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

ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В РЕШЕНИИ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ И ПРИКЛАДНЫХ НАУЧНЫХ ЗАДАЧ
Сессия ИВТН-2012

COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENTIFIC RESEARCHES
IVTN-2012 Session

Сборник материалов
The Proceedings

Ответственные за выпуск
Компьютерная верстка: *Куприна Ю.*
Перевод: *БеликоваД.*.
Дизайн обложки: *Котельников Д.*
Редактор: *Габусу П.*

Editorial board
Make-up: *Kuprina Yu.*
Translators: *Umerenkova Ya.*
Design: *Kotelnikov D.*
Editor: *Gabusu P.*

ИВТН.ru
Интернет-конференции
Информационно-Вычислительные
Технологии в Науке

IVTN.ru – WEB Conferences
Computer Applications in Science

Главный организатор ЗАО НВК «ВИСТ»
Provided by ZAO NVK «VIST»

http://www.ivtn.ru