

ТОМ 2

МОЛОДЁЖЬ И НАУКА

Материалы IX Всероссийской
научно-технической конференции
студентов, аспирантов и молодых ученых,
посвященной 385-летию со дня основания
г. Красноярска

МОЛОДЁЖЬ И НАУКА

Том 2



Министерство образования и науки Российской Федерации
Сибирский федеральный университет

МОЛОДЕЖЬ И НАУКА

**Материалы IX Всероссийской
научно-технической конференции
студентов, аспирантов и молодых ученых,
посвященной 385-летию со дня основания г. Красноярска**

В трех томах

Том 2

Красноярск
СФУ
2013

УДК 001.591(063)
ББК 72я431
М754

М754 **Молодежь** и наука: материалы конф.: в 3 т. Т. 2 / отв. за выпуск
О.А. Краев. – Красноярск: Сиб. федер. ун-т, 2013. – 100 с.

ISBN 978-5-7638-2881-8
ISBN 978-5-7638-2883-2 (Т. 2)

Выпуск сборника материалов IX Всероссийской научно-технической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Молодёжь и наука» с международным участием, посвященной 385-летию со дня основания г. Красноярска, поддержан за счет средств, предоставленных Краевым государственным автономным учреждением «Красноярский краевой фонд поддержки научной и научно-технической деятельности» путем выделения целевого финансирования.

УДК 001.591(063)
ББК 72я431

ISBN 978-5-7638-2881-8
ISBN 978-5-7638-2883-2 (Т. 2)

© Сибирский
федеральный
университет, 2013

СОДЕРЖАНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ	6
<i>П.В. Семенов, А.В. Логинов</i> ТЕОРИЯ РАЗРУШЕНИЯ ЧЕЛЯБИНСКОГО МЕТЕОРИТА	7
<i>Т.В. Федорова</i> МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ СУФФОЗИИ, ПРИВОДЯЩИХ К ПРЕЖДЕВРЕМЕННОМУ РАЗРУШЕНИЮ ДОРОЖНЫХ ПОКРЫТИЙ	11
<i>С.М. Бузилова, М.В. Дерягин</i> ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО МОДЕЛЕРА САД СРЕД «SolidWorks» И «КОМПАС-3D» ДЛЯ УСКОРЕННОГО ИЗУЧЕНИЯ ОСНОВ НАЧЕРТАТЕЛЬНОЙ ГЕОМЕТРИИ	16
<i>М.В. Осипов</i> ЗАДАЧА ПРИБЛИЖЕНИЯ ФУНКЦИЙ И ЕЕ КОМПЬЮТЕРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ	20
<i>М.В. Рыжков</i> ПРОГРАММНАЯ СИСТЕМА ОЦЕНКИ РИСКА РАЗВИТИЯ И ДИАГНОСТИКИ ЛОР-ЗАБОЛЕВАНИЙ	26
<i>М.А. Курако, А.О. Диденко</i> АЛГОРИТМИЧЕСКАЯ И ИНФОРМАЦИОННАЯ ПОДДЕРЖКА МОДЕЛИРОВАНИЯ ЦУНАМИ	28
<i>Д.Ю. Коноплев</i> ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ АНАЛИЗА ИЗМЕНЧИВОСТИ ПОВЕРХНОСТНОЙ СОЛЕННОСТИ ОКЕАНА ПО СПУТНИКОВЫМ ДАННЫМ	34
<i>С.И. Баишаков</i> АКСИОМАТИЗАЦИЯ ИНТУИЦИОНИСТСКИХ ЛОГИК МАЛОЙ ГЛУБИНЫ	39

<i>А.В. Белосохова</i> ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ АКТИВНОЙ ПРИМЕСИ ЕФЗ В АТМОСФЕРЕ Г. КРАСНОЯРСКА.....	44
<i>В.Г. Копылова</i> ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФУНКЦИЙ ИСТОЧНИКА СИСТЕМ УРАВНЕНИЙ СОСТАВНОГО ТИПА ДЛЯ НЕКОТОРЫХ НАЧАЛЬНО-КРАЕВЫХ ЗАДАЧ.....	47
<i>А.А. Ефремов</i> ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГИБРИДНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ К РЕШЕНИЮ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ НЕРАЗРЫВНОСТИ МОДИФИЦИРОВАННЫМ МЕТОДОМ ТРАЕКТОРИЙ.....	53
<i>Л.Ф. Губайдулина, В.А. Дюфрейн</i> РАЗРАБОТКА ИГРЫ «БЫКИ И КОРОВЫ».....	56
<i>А.С. Керн, А.С. Лукоткин</i> НЕКЛАССИЧЕСКИЕ ЛОГИЧЕСКИЕ ЭЛЕМЕНТЫ И КВАНТОВЫЕ КОМПЬЮТЕРЫ.....	58
<i>А.А. Никулина</i> РАЗРАБОТКА САЙТА «ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ПРОСТРАНСТВА»	63
<i>И.А. Иванов</i> СИСТЕМА ПОДДЕРЖКИ ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЙ МНОГОКРИТЕРИАЛЬНОГО ВЫБОРА НА БАЗЕ КОЭВОЛЮЦИОННОГО ГЕНЕТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА	65
<i>М.Н. Кучеров</i> ИССЛЕДОВАНИЕ МНОГОМЕРНЫХ ДАННЫХ МЕТОДАМИ ФАКТОРНОГО АНАЛИЗА.....	70
<i>А.Н. Лисина</i> ГЕНЕТИЧЕСКАЯ ИЗМЕНЧИВОСТЬ ПОПУЛЯЦИЙ ЛИСТВЕННИЦЫ СИБИРСКОЙ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ ISSR-PCR АНАЛИЗА.....	74

<i>М.А. Столяр</i> МЕХАНИЗМЫ АНТИТРОМБОТИЧЕСКОГО ДЕЙСТВИЯ АСПИРИНА: ГЕНДЕРНЫЕ ОТЛИЧИЯ И СВЯЗЬ С ПАТОГЕНЕЗОМ JAK-2 ПОЗИТИВНЫХ МИЕЛОПРОЛИФЕРАТИВНЫХ ЗАБОЛЕВАНИЙ	77
<i>П.А. Козлов, И.А. Макаров, Е.И. Шнейдер</i> СТРУКТУРА ЛОКАЛЬНОГО ПОЛЯРОНА В МОДЕЛИ ЭМЕРИ	81
<i>Н.С. Павловский</i> СИНТЕЗ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ОКСИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ.....	86
<i>Е.А.Каплина, И.Л. Гравдан, Н.С. Мирошников, А.В. Груздев, Ш.Ш. Ширматов</i> ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ ВОССТАНОВИТЕЛЯ НА СТЕПЕНЬ ИЗВЛЕЧЕНИЯ МЕТАЛЛА	90
<i>А.О. Лыхин</i> КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИНГЛЕТ-ТРИПЛЕТНОГО ПЕРЕХОДА КЛАСТЕРА $[\text{Fe}_2\text{S}_2(\text{SCH}_3)_4]^{2-}$	94

ПРЕДИСЛОВИЕ

Статьи расположены в алфавитном порядке по названию секции:

1. Вопросы современного естествознания.
2. Геология, минералогия и петрография.
3. Инженерная и компьютерная графика. Начертательная геометрия и черчение.
4. Инженерная математика.
5. Информатика: Вычислительная техника, информационные сети и системы.
6. Информатика: Прикладная математика, математическое моделирование, информационная безопасность.
7. Информатика: Системный анализ, автоматизация и управление.
8. Математика, информатика: Алгебра, математическая логика и дискретная математика.
9. Математика, информатика: Вычислительная математика и математическое моделирование.
10. Математика, информатика: Дифференциальные уравнения.
11. Математика, информатика: Информационные технологии.
12. Математика, информатика: Математический анализ и теория функций.
13. Математика, информатика: Моделирование и оптимизация сложных систем.
14. Математика, информатика: Теория вероятностей, математическая статистика и финансово-актуарная математика.
15. Математика, информатика: Школьная секция «Актуальные проблемы физико-математических наук».
16. Современные проблемы биологии – успехи научной молодёжи.
17. Физика твердого тела.
18. Химия: Актуальные проблемы химии.

ТЕОРИЯ РАЗРУШЕНИЯ ЧЕЛЯБИНСКОГО МЕТЕОРИТА

П.В. Семенов, А.В. Логинов
Научный руководитель И.А. Баранова
Сибирский федеральный университет

Недавно в воздушном пространстве России произошло событие, которое получило собственное название «Челябинский метеорит». Данный метеорит разрушился не при ударе о поверхность Земли, а на высоте 20 км. Такие метеориты, которые разрушались в атмосфере, не долетая до поверхности Земли, встречались и раньше в истории планеты, например, Тунгусский метеорит. Причиной разрушения таких небесных тел является не только механическое воздействие, но что-то иное, поэтому мы решили выяснить, что именно разрушило их.

Мы поставили перед собой следующие задачи:

1. Рассмотреть минеральный состав метеоритов.
2. Изучить физические процессы, происходящие в метеоритах при их разрушении.
3. На основе полученных знаний и анализа информации построить теорию разрушения Челябинского метеорита.

Метеоритами называют тела космического происхождения, упавшие на поверхность крупного небесного объекта [1]. Они представляют собой физические тела со сложным минеральным составом и классифицируются следующим образом:

- ледяные, состоящие из льда и замерзших газов;
- железные – из никелистого железа, которое может иметь в небольшом количестве примесь силикатов (до 10 %);
- железокремнистые, содержащие в равном количестве и железо, и силикаты;
- каменные, состоящие из различных минералов (камасит (93,1 % Fe; 6,7Ni; 0,2Co) и тэнит (75,3 % Fe; 24,4Ni; 0,3Co), оливины (Mg, Fe/2SiO₄), силикаты и пироксены (MgFe/2SiO₃, (Mg,Fe)SiO₃), плагиоклаз (mCaAl₂Si₂O₈ · nNa₂Al₂Si₆O₁₆), стекло) [2], [3].

Космическое тело, двигающееся в атмосфере Земли, испытывает аэродинамическое торможение вплоть до своего полного разрушения или соприкосновения с земной поверхностью. При торможении метеоров и болидов наблюдаются различные физические эффекты – свист, шипение, генерация ударной волны, инверсионные следы, электрические и магнитные аномалии. Такие эффекты могут сопровождать все типы метеоритов. Их выраженность,

с одной стороны, зависит от размеров тела (чем больше тело, тем лучше выражены эффекты), с другой стороны – от типа химического состава.

Процессы разрушения также протекают зависимости от типа, размеров, скорости и угла вхождения в атмосферу. Основными процессами, определяющими разрушение метеоритов, являются:

- нагрев за счет трения об атмосферу, в результате чего наблюдается свечение;
- возникновение термомеханических напряжений внутри тела, в результате чего наблюдается свист, шипение (звуковые эффекты);
- генерация ударной волны со стороны атмосферы Земли, и чем больше угол вхождения в атмосферу, тем сильнее ударная волна и, как следствие, возникают большие механические разрушения.
- нагрев металлосодержащих метеоритов, за счет явления электромагнитной индукции.

По материалам, предоставленным НАСА [4] и средствами массовой информации [5] о Челябинском метеорите, известно, что он вошел в атмосферу со скоростью 18,6 км/с, ориентировочный эффективный диаметр астероида оценивался примерно от 18 м до 20 м, масса около 11000 т, угол вхождения в атмосферу приблизительно 29°. Приблизительная суммарная энергия воздействия составляла 440 кт (в килотоннах взрывчатки TNT). Данное событие признанно похожим на Тунгусский метеорит (1908 г.). Анализ найденных фрагментов показал, что по составу метеорит является не однородным. В основном он состоит из силикатных хондритов, т. е. его основу составляют диэлектрики.

Разрушение данного метеорита может происходить под воздействием всех выше перечисленных процессов, кроме явления электромагнитной индукции. Но ни один из этих процессов не объясняет наличие яркой белой вспышки и практически мгновенного разрушения, которое сопровождалось громким звуком взрыва метеорита. Яркая белая вспышка свидетельствует о наличии электромагнитных волн повышенной мощности. Известно, что электромагнитные волны излучаются, только если есть движущиеся с ускорением заряженные частицы, таким образом можно сделать вывод, что на метеорите были заряженные частицы.

Данный вывод согласуется с теорией А. Невского, согласно которой заряженные частицы образуются вследствие термоэлектронной эмиссии. Электроны с поверхности движущегося тела захватываются и уносятся встречным потоком плазмы. Тело приобретает все возрастающий положительный заряд. Из теории А. Невского следует, что образуется огромный электрический диполь с концентрированным положительным зарядом на поверхности и рассеянным отрицательным зарядом в плазменном хвосте. Положительный заряд поверхности при достижении телом некоторой скорости стабилизируется и достигает значительной величины, между телом и

Землей возникает огромная разность потенциалов, которая может привести к пробое воздушного слоя между метеоритным телом и Землей, т. е. К РАЗРЯДУ МОЛНИИ, который сопровождается ОЧЕНЬ СИЛЬНЫМ ВЗРЫВОМ [6]. Однако воздушный пробой под действием электрического поля должен сопровождаться молнией в виде яркого огненного столба от Земли к метеориту. В случае Челябинского метеорита молниеподобного разряда не наблюдалось, но вспышка была, а значит, электрические заряды на метеорите присутствовали. Мы можем сделать вывод о том, что механизм разрушения данного метеорита нельзя объяснить с позиции только выше описанной модели. Мы предлагаем вашему вниманию теорию разрушения этого метеорита, более согласующуюся с наблюдаемым эффектом, основанную на синтезе представлений теории разрушения горных пород электрическими методами, о диэлектрических материалах и теории А. Невского об электроразрядном взрыве каменных метеоритов [6].

Действительно, вследствие взаимодействия метеорита с атмосферой, он разогревается, в результате чего наблюдается термоэлектронная эмиссия (А. Невский). Рассматривая данный метеорит как диэлектрик, мы пришли к выводу, что пробой наблюдается не между Землей и метеоритом, а внутри самого метеорита, поэтому и не наблюдалось разряда молнии между Землей и метеоритом.

Рассмотрим данное явление подробнее. На поверхности диэлектрика образуется избыточный положительный заряд, который по теории поляризации должен притягивать к себе внутри вещества отрицательный заряд, который в свою очередь притягивает положительный заряд и т. д. (рисунок). По закону сохранения заряда внутри метеорита индуцируется отрицательный заряд, равный по внешнему положительному. В результате взаимодействия этих зарядов и происходит пробой материала метеорита. Внутри метеорита объемная плотность электрической энергии больше, чем на поверхности, т. к. плотность заряда внутри метеорита больше, чем на поверхности.

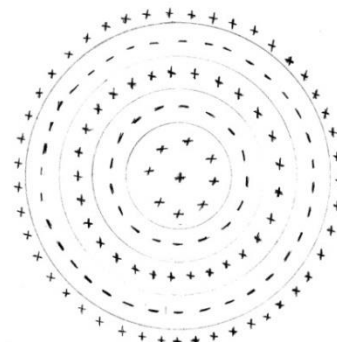


Рис.

Объемная плотность энергии электрического поля $\omega_э$ рассчитывается по формуле

$$\omega_э = \frac{1}{2} \varepsilon \varepsilon_0 E^2 = \frac{\sigma^2}{2\varepsilon \varepsilon_0}, \quad (1)$$

где ε – диэлектрическая проницаемость метеорита; $\varepsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м – электрическая постоянная; $\sigma = q/S$ – поверхностная плотность заряда; E – напряженность электрического поля.

Исходя из этого, можно сделать вывод, что разрушение метеорита происходит изнутри и практически мгновенно. Именно этим объясняется громкий хлопок при взрыве.

Количество энергии Q , необходимое для плавления одного кубометра породы V , определяется по формуле

$$\frac{Q}{V} = c\rho\Delta T + \rho\lambda, \quad (2)$$

где c – теплоемкость породы; λ – удельная теплота плавления породы; ρ – плотность породы; $\Delta T = (T_{\text{пл}} - T_0)$ – разница температур между температурой плавления $T_{\text{пл}}$ и температурой метеорита в вакууме $T_0 \approx 0\text{К}$.

Будем считать, что вся объемная плотность энергии электрического поля идет на плавление одного кубометра породы. Используя формулы (1) и (2), можно рассчитать заряд, который находится на поверхности метеорита

$$q = \sigma 4\pi R^2 = 4\pi R^2 \sqrt{2\varepsilon\varepsilon_0(c\rho\Delta T + \rho\lambda)}, \quad (3)$$

где R – радиус метеорита.

Представленная теория позволяет: 1) объяснить разрушение каменных и каменно-железных метеоритов вследствие электризации и термоэлектронной эмиссии с последующим выносом отрицательного заряда в хвост метеорита, накоплением положительного заряда на поверхности и индуцированного отрицательного заряда внутри, что приводит к пробое материала метеорита и его разрушению; 2) объяснить наличие ярко-белой вспышки при взрыве разлетающимся не скомпенсированным зарядом; 3) рассчитать заряд, индуцированный на поверхности.

Список литературы

1. Метеорит: Википедия – свободная энциклопедия. URL: <http://ru.wikipedia.org/wiki/>.
2. Метеориты и метеоры: астрономия. URL: http://skystars.pp.ru/meteors_and_meteorits.html.
3. Метеорит. Русское общество любителей метеоритики. URL: <http://www.meteoritics.ru/forum/viewtopic.php?t=31>.
4. Nosa. URL: http://www.nasa.gov/mission_pages/asteroids/news/asteroid20130215.html.
5. Метеорит над Челябинском не связан с астероидом 2012 DA14: Большая вселенная. URL: <http://www.biguniverse.ru/posts/meteorit-nad-chelyabinskom/>.
6. URL: <http://www.eventhorizon.ru/forums/index.php?act=ST&f=19&t=201>.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ СУФФОЗИИ, ПРИВОДЯЩИХ К ПРЕЖДЕВРЕМЕННОМУ РАЗРУШЕНИЮ ДОРОЖНЫХ ПОКРЫТИЙ

Т.В. Федорова

Научный руководитель О.Ю. Перфилова

Сибирский федеральный университет

Мы часто наблюдаем ямы на дорогах и провалы тротуарной плитки, для многих это стало привычной картиной. Регулярно слышим в выпусках новостей, что во дворе жилого дома провалился автомобиль или появилась очередная яма на недавно отремонтированной дороге. Кто виноват в преждевременном разрушении дорожного покрытия и как предотвратить эти процессы, – в работе мы постарались ответить на эти вопросы.

В период 2011–2012 гг. нами проводился мониторинг состояния дорожных покрытий на территории Кировского и Центрального районов г. Красноярска. Это позволило выявить геологический процесс, неблагоприятно влияющий на качество дорожного покрытия.

Цель работы: Выяснить с точки зрения инженерной геологии, всегда ли виноваты строители в преждевременном разрушении дорожного покрытия.

Были поставлены следующие **задачи:**

- Изучить в Кировском и Центральном районах современные геологические процессы, влияющие на качество дорог.
- Выявить наиболее важный геологический процесс, способствующий разрушению дорожного покрытия.
- Выяснить, каким способом можно ослабить влияние этих процессов.
- Провести эксперименты по моделированию наиболее опасного геологического процесса (суффозии).

Методы исследования: полевые наблюдения, фотодокументация проявлений геологических процессов, приводящих к преждевременному разрушению дорожного полотна (суффозионных воронок, результатов разрушения дорожного покрытия), эксперименты по моделированию суффозионных процессов.

В результате работы установлено, что основной причиной преждевременного разрушения дорожных покрытий является суффозия. Суффозия (от лат. *Suffosio* – подкапывание) – это механический вынос из рыхлых пород мельчайших частиц (песчаных и алевритовых) подземны-

ми потоками. Именно с суффозией связано образование просадок на поверхности земли в виде «блюдец» и «воронок», диаметр которых может достигать 10 м и более. Подчиненную роль в процессах суффозии играют выщелачивание и растворение. Они дополнительно разрыхляют породу, благодаря чему увеличивается скорость фильтрации воды через нее. Некоторые пески, даже не содержащие в себе растворимые составляющие, разрыхляются фильтрующимся через них потоком в результате выноса наиболее мелких зерен.

Размыв породы может происходить при струйчатом движении воды через породу, т. е. по достаточно крупным пустотам и каналам, в которых возможно завихрение струи, что нередко приводит к срыву слабо связанных частиц породы. Наиболее интенсивно процессы суффозии протекают в тонко- и мелкозернистых песках, лессовидных грунтах и суглинках. В меньшей степени они проявляются в более плотных глинистых породах. Причем размыв в них начинается по трещинам. Более подвержены внутреннему размыву глины, богатые монтмориллонитом, значительно изменяющиеся в объеме при различном изменении влажности. В обнажениях такие глины легко шелушатся и осыпаются. Струйчатое движение воды по трещинам срывает и уносит частицы там, где при переменном высыхании и увлажнении связь их с породой нарушается. Процесс размыва обычно не распространяется глубоко в толще глин, т. к. для этого струи должны иметь высокую скорость, которая возникает только вблизи колодцев ливневой канализации. Основными условиями возникновения механической суффозии являются:

1. Неоднородность гранулометрического состава грунтов оценивается с помощью предложенного Л.В. Передельским коэффициента неоднородности (K_n). Суффозионными грунтами являются песчаные грунты с $K_n > 20$, а при $K_n < 10$ грунт считается не суффозионным.

2. Критическая величина гидравлического градиента водного потока, ниже которого происходит только ее медленная фильтрация без вымывания мелких частиц.

3. Наличие условий для выноса мелких частиц на дневную поверхность в основании склонов, различных выемках.

В естественных условиях суффозия развивается сравнительно медленно (до десятков лет), однако под влиянием техногенных факторов (прорывы водопровода и канализации), в местах с техногенным нарушением состава грунтов (места прокладки трубопроводов, кабеля) ее скорость резко возрастает и отрицательно сказывается на дорогах и тротуарах, построенных на породах не устойчивых к суффозионным процессам. Суффозионные воронки хорошо заметны на грунтовых проселочных дорогах. Асфальтированные же дороги могут скрыть довольно крупные воронки, что

представляет серьезную угрозу для транспорта и людей. Иногда в СМИ появляются сообщения о том, что легковая или даже грузовая машина провалилась под асфальт. Чаще всего это – результат суффозии. Несколько лет назад подобный случай произошел в г. Красноярске на пр. Ленина.

Зимой происходит замерзание воды (а она при этом расширяется), и на участках переувлажненных грунтов образуются мини бугры пучения. Весной лед тает и на месте таких бугров образуются трещины и провалы на дорожном покрытии, в которые активно просачивается талая и дождевая вода, в результате чего увеличивается как скорость движения подземных потоков (ускоряется размыв снизу), так и эрозия (размыв сверху).

Застройка г. Красноярска проводилась преимущественно на поверхности террас р. Енисей. Всего в г. Красноярске выделяется 9 надпойменных террас. Наибольшим развитием пользуется III (Красноярская) терраса, на которой расположен центр города. Терраса аккумулятивная, сложенная галечниками с линзами песка. Местами галечник покрыт лессовидными суглинками и буграми переветренных песков. Мощность осадков 20 м.

Главные улицы правобережья расположены на II (Ладейской) террасе. На уровне V (Березовской) террасы расположен крупный микрорайон города «Зеленая Роща», постройки Академгородка и Студенческого городка располагаются на поверхности VII (Торгашинской) террасы р. Енисей, а новые здания (в том числе и главный корпус) Сибирского федерального университета – на VIII (Худоноговской) террасе. Аллювиальные отложения, перекрывающие цоколь остальных террас, имеют мощность до 40 м. Представлены они переслаивающимися между собой бурыми известковистыми супесями и суглинками с прослоями глин; охристо-бурым песком с гальками кремнистых пород: песчаника, гранита, и в нижней части иногда галечниками, в составе которых представлены вулканические и кремнистые породы, жильный кварц; встречаются плохо окатанные обломки вендских песчаников.

Таким образом, литологический состав террасовых отложений р. Енисей является благоприятным для проявления суффозии. Поэтому на территории г. Красноярска активно развиты суффозионные процессы. Они имеют как природное, так и техногенное происхождение (прорывы водопроводных и канализационных сетей). Проявления суффозионных процессов негативно сказывается на качестве дорожного покрытия.

Многочисленные попытки дорожников самостоятельно решить данную проблему, приводят к новым проявлениям суффозионных процессов. Дело в том, что строители зачастую пытаются ликвидировать только внешние проявления этих разрушительных процессов – суффозионные воронки. В своей работе мы бы хотели обратить внимание не только дорожников, но и чиновников, отвечающих за ремонт дорог, на данную пробле-

му и выяснить, а всегда ли виноваты строители в плохом качестве и недолговечности дорожного покрытия. Часто с последствиями суффозии (ямами на дорогах) пытаются бороться путем так называемого «ямочного ремонта». Суффозионные воронки засыпают щебнем, кирпичом, бетонируя их и закрывая «заплатами» из свежего асфальта. Но на месте недавно положенной заплатки вновь неизбежно образуются ямы. Это происходит потому, что разрушение дорожного покрытия (асфальта или тротуарной плитки) происходит не сверху, а под землей. Суффозионные воронки не случайно группируются в цепочки, указывая на направление течения подземного водного потока. Часто суффозионные просадки наблюдаются вблизи колодцев ливневой канализации т. к. здесь происходит значительное увеличение скорости фильтрации подземных потоков, и усиливаются процессы выноса мелкозема из грунтов. Поэтому прежде, чем бороться с ямами на дорогах, следует выяснить их причину возникновения.

В течение 2012 г. в разных районах г. Красноярска нами были проведены наблюдения над характером проявления процессов суффозии как на грунтовых дорогах, так и на дорогах с асфальтовым покрытием, а также на тротуарах, вымощенных плиткой. Были сделаны многочисленные фотографии (рис). В ряде случаев удалось сделать серию фотографий одних и тех же объектов весной, летом, а затем осенью 2012 г. и проследить динамику возникновения и углубления суффозионных воронок, в том числе и на участках, где недавно был проведен «ямочный» ремонт дорожного покрытия.



*Рис. Глубокая суффозионная воронка на тротуаре
(пр. Красноярский рабочий 78, г. Красноярск)*

Суффозия – процесс очень сложный, мало изученный, и смоделировать его абсолютно точно в домашних условиях невозможно, также как и невозможно наблюдать все сопутствующие процессы, поскольку некоторые из них протекают глубоко под землей. Однако можно попробовать получить простейшую модель суффозионных процессов, используя несложную установку. Она представляет собой лоток прямоугольной формы, выполненный из прозрачного оргстекла толщиной около 3 мм. Длина лотка 26 см, ширина – 11 см и высота – 14,5 см. В одной из торцевых стенок сделано круглое сливное отверстие диаметром около сантиметра, находящееся на высоте 1 см от дна лотка. При помощи данной установки нами были смоделированы некоторые процессы вымывания мелкозема из грунтов различного гранулометрического состава и образования просадок на поверхности в зависимости от скорости водного потока. В результате наших наблюдений можно сделать выводы о том, как предотвратить или уменьшить влияние суффозионных процессов при строительстве дорог в таких крупных мегаполисах как Красноярск, где основанием для дорог служит достаточно мощная толща сравнительно рыхлых аллювиальных отложений.

Как правило, все мероприятия по борьбе с развитием суффозии давно известны и направлены на то, чтобы прекратить или существенно сократить поступление воды по внутренним полостям пород и максимально снизить скорость ее течения. При строительстве и эксплуатации дорог на подверженных суффозии грунтах необходимо строго соблюдать правила и использовать целый ряд специальных мер для защиты дорожного покрытия от проникновения через него вглубь атмосферных осадков и технических вод. Это достигается различными путями: регулированием поверхностного стока атмосферных вод; перекрытием места выхода подземных вод тампонированием или присыпкой песка; устройством дренажей для осушения пород или уменьшения скорости фильтрации воды; упрочнением ослабленных суффозией пород методами цементации или глинизации, а также предварительным уплотнением рыхлого грунта.

Выбор конкретного приема зависит от геологического строения и гидрогеологической обстановки на данной строительной площадке, типа и вида грунтов оснований, характер засоления и технических возможностей подрядной организации.

Суффозионные процессы оказывают существенное влияние и на прочность возводимых зданий и сооружений, т. к. могут приводить к неравномерной просадке их фундаментов.

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО МОДЕЛЕРА
CAD СРЕД «SolidWorks» И «КОМПАС-3D»
ДЛЯ УСКОРЕННОГО ИЗУЧЕНИЯ ОСНОВ
НАЧЕРТАТЕЛЬНОЙ ГЕОМЕТРИИ**

С.М. Бузилова, М.В. Дерягин
Научный руководитель Л.Н. Головина
Сибирский федеральный университет

Принцип создания чертежа это представление реального трехмерного пространства, как совокупности двухмерных (плоских) изображений, выполненных на чертежной бумаге. В основе этой технологии создания чертежей лежит концепция представления пространства и тел в нем проецированием их на три взаимно перпендикулярные плоскости. При таком подходе грамматикой для создания чертежа и решения конструкторских задач служит начертательная геометрия, базирующаяся на аналитической геометрии в пространстве.

В САД средах деталь любой сложности создается синтезом из простейших тел путем их объединения или вычитания. Большинство задач раздела начертательной геометрии, геометрического черчения, проекционного черчения при использовании компьютерной технологии проектирования решается автоматически геометрическим ядром САД – сред (моделером). На рис. 1 представлен корпус вакуумного насоса, выполненного в первом семестре студентом первого курса специальности «САПР» в среде «**SolidWorks**».

Линии пересечения указанных на рис. 1 поверхностей в традиционной (бумажной) технологии строятся с помощью вспомогательных секущих плоскостей. При решении этих задач необходимо найти множество точек, которые при соединении образуют искомую линию пересечения.

На рис. 2 представлена головка вакуумного насоса, часть линий пересечения поверхностей которого находится с помощью вспомогательных секущих сфер.

В среде «**SolidWorks**» линии пересечения указанных поверхностей были построены автоматически геометрическим ядром (моделером). Для правильного создания моделей детали корпуса и головки вакуумного насоса в этой среде необходимо корректно построить эскизы всех элементов детали с учетом их геометрической формы, т. е. правильно построить примитивы эскиза (линия, окружность, дуга и др.), проставить нужные размеры и заложить правильные взаимосвязи (совпадение, касательность, равенство, коллинеарность и др.) (рис. 3).

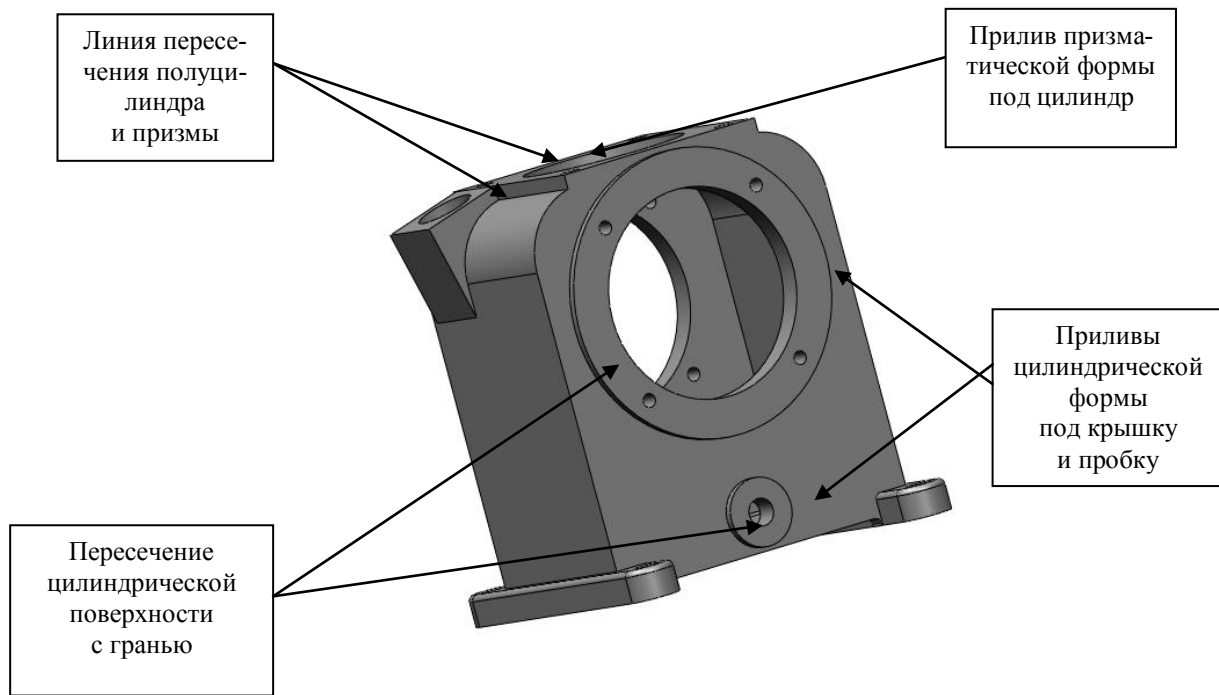


Рис. 1. Корпус вакуум-насоса

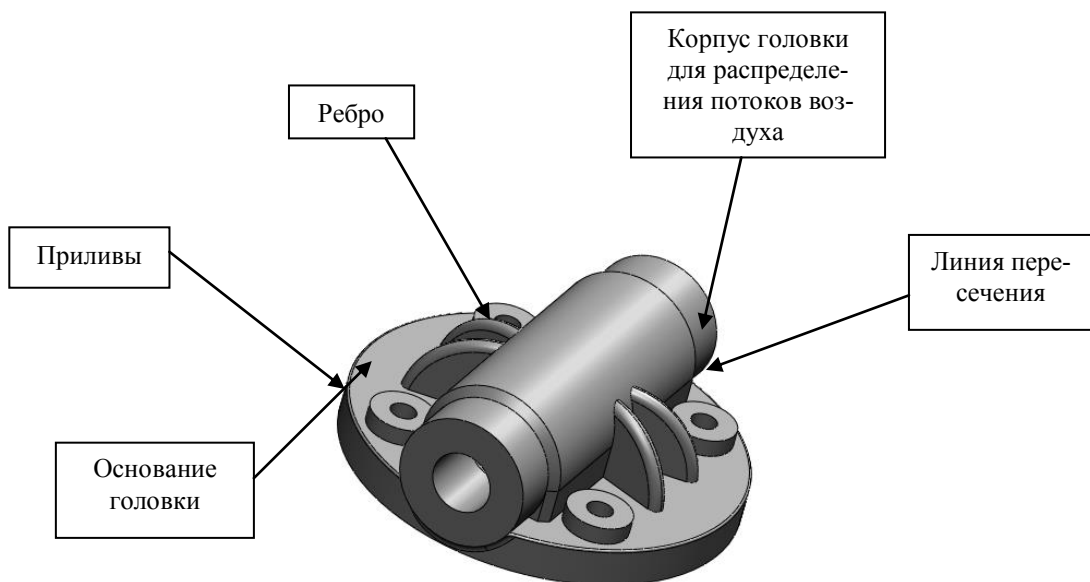


Рис. 2. Головка вакуумного насоса

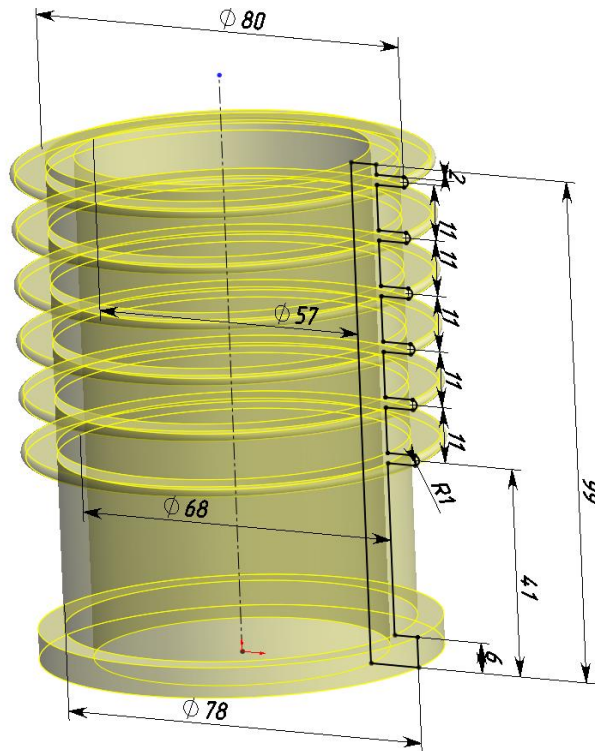


Рис. 3. Эскиз цилиндра вакуумного насоса

Для построения ребра головки цилиндра необходимо создать дополнительную плоскость, расположенную под углом к плоскости дерева конструирования. Для некоторых элементов деталей приходится строить эскиз и траекторию и выполнять твердотельную операцию «бобышка по траектории». Применяются и другие способы построения эскиза: «преобразования объекта», «смещения объекта», «динамическое зеркало», что позволяет точно строить линии пересечения поверхностей геометрическим ядром (моделером).

Правильно построенный эскиз имеет черный цвет. На рис. 3 представлен эскиз цилиндра вакуумного насоса, модель которого создается твердотельной операцией вращения.

Благодаря автоматическому решению задач начертательной геометрии в САД средах, у студента появляется больше времени для анализа элементов деталей по чертежу, чтобы создавать модели адекватные чертежу. Конечный результат этапа 3D моделирования представлен в виде сборочной единицы и разреза по оси коленвала вакуумного насоса (рис. 4).

Создание 2D чертежей по 3D моделям автоматически реализуется их проецированием на выбранную пользователем плоскость, генерации разрезов, сечений, местных видов и т. п. Чертеж корпуса вакуумного насоса, выполненный в первом семестре студентом первого курса специальности «САПР» в среде «SolidWorks» по 3D модели представлен на рис. 5.

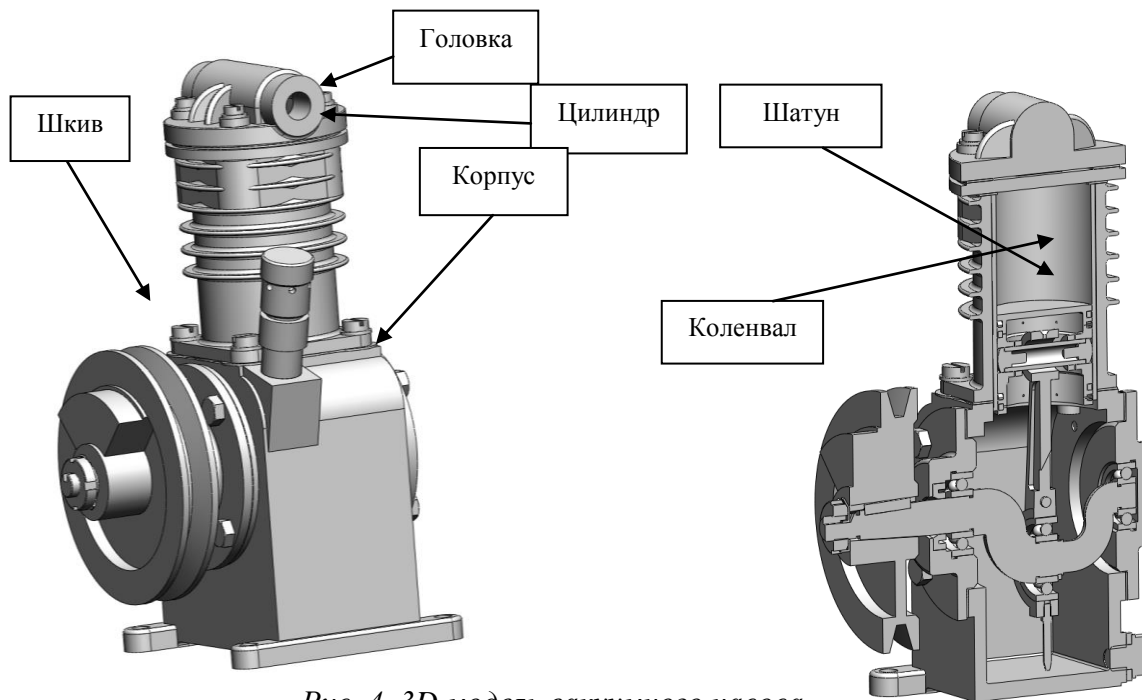


Рис. 4. 3D модель вакуумного насоса

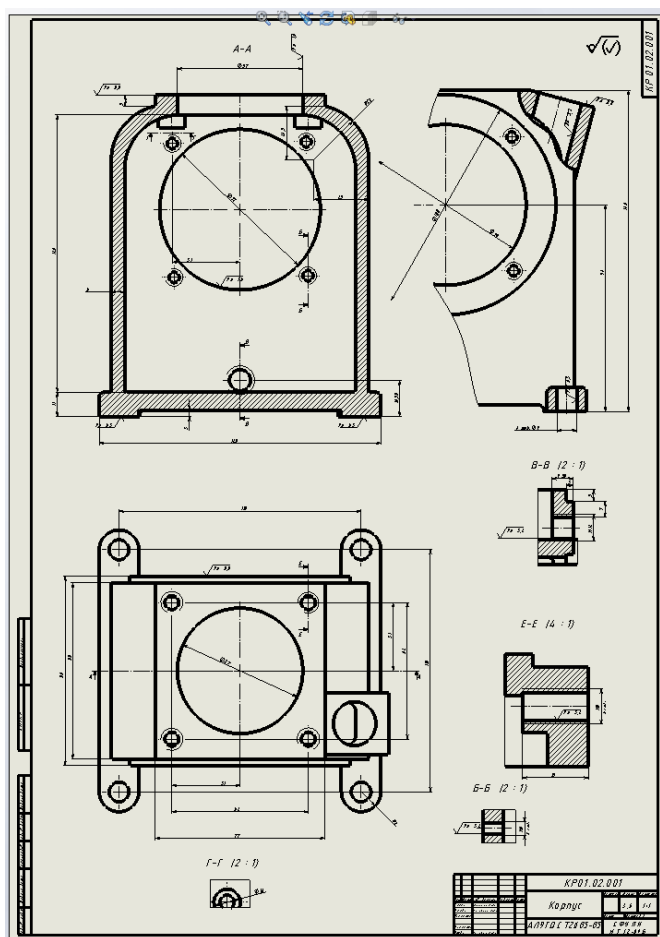


Рис. 5. Рабочий чертеж корпуса вакуумного насоса

Внедрение в учебный процесс САД сред, в которых решение задач начертательной геометрии выполняются автоматически геометрическим ядром (моделером) позволяет студенту быстрее учиться правильно представлять форму сложных деталей, их взаимосвязь в чертеже. Быстрее научиться читать сборочные чертежи повышенной сложности, по чертежу понимать взаимосвязь составных частей изделия, понимать принцип действия изделия, что продемонстрировано на представленных рисунках в этой статье.

Список литературы

1. Гордон В.О., Семенцов-Огиевский М.А. Курс начертательной геометрии. Л.: Наука, 1988. 271с.
2. SolidWorks 2010 // Справочная система программного комплекса.

УДК 519.6

ЗАДАЧА ПРИБЛИЖЕНИЯ ФУНКЦИЙ И ЕЕ КОМПЬЮТЕРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

М.В. Осипов

Научный руководитель В.В. Осипов

Сибирский федеральный университет

Для понимания сущности решаемой задачи рассмотрим практический пример. Допустим, что в результате проведения эксперимента по исследованию зависимости теплоемкости вещества от температуры получены данные:

Т 300 500 600

С 53 78 100

Полагая, что теплоемкость является непрерывной функцией от температуры, требуется определить, пользуясь экспериментальными данными, значения теплоемкости при температуре 450 К.

Другими словами, требуется определить значение таблично представленной непрерывной функции в тех точках внутри интервала, где она не задана. Эта задача называется *интерполированием*. Если требуется

определить значение таблично заданной функции за пределами интервала, то такая задача является задачей *экстраполяции*. Более общей является задача аппроксимации функций, которая заключается в приближенной замене функции $f(x)$, некоторой функцией $\varphi(x)$, так чтобы отклонение функции $\varphi(x)$ от $f(x)$ в заданной области было бы наименьшим по некоторому критерию. В данном исследовании речь пойдет о первой задаче.

Требуется построить *интерполяционную* функцию $\varphi(x)$, которая приближенно заменяет исходную таблично заданную функцию $y = f(x)$ и проходит через заданные точки (узлы интерполяции), т. е. $\varphi_i(x_i) = y_i$. Если удалось построить интерполяционную функцию $\varphi(x)$, то с ее помощью можно определить значение исходной функции $f(x)$ в любой точке.

Решение задачи интерполяции требует: определиться с выбором интерполяционной функции $\varphi(x)$; выбрать критерий оценки погрешности интерполяции $R(x)$; выбрать узлы интерполяции для обеспечения наибольшей точности восстановления исходной функции $f(x)$; определить (разработать) алгоритм нахождения приближенной функции с заданной точностью.

Заметим, что поставленная задача интерполирования допускает множество решений, т. к. через заданные точки можно провести множество функций разной сложности.

В качестве интерполяционных функций $\varphi(x)$ могут быть использованы:

- линейные комбинации функций $1, x, x^2, \dots, x^n$ (многочлены степени n);
- $\cos n x, \sin n x$ (ряды Фурье);
- $e^{-\alpha x}$ (в задачах накопления и распада).

Наибольшее применение в качестве интерполяционной функции получил полином вида

$$\varphi(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_n x^n. \quad (1)$$

Достоинством представления (1) через усеченный ряд Тейлора является возможность оценить погрешность этого усечения.

Если использовать (1) в качестве интерполяционного многочлена, то необходимо определить $(n+1)$ коэффициент a_0, a_1, \dots, a_n . Для этого используя табличные данные, получаем систему

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_0 + a_2 x_0^2 + \dots + a_n x_0^n = y_0 \\ a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + \dots + a_n x_1^n = y_1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_0 + a_1 x_n + a_2 x_n^2 + \dots + a_n x_n^n = y_{n1} \end{cases} \quad (2)$$

Естественно, возникает вопрос о существовании и единственности решения системы (2). Определителем системы (2) является определитель Вандермонда

$$\begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^n \end{vmatrix} \neq 0,$$

который отличен от нуля, т. к. узлы x_i – различны. Следовательно, система (2) по теореме Кронекера – Капелли имеет единственное решение при любых правых частях y_i , т. е. коэффициенты интерполяционного многочлена $\varphi(x)$ находятся однозначно.

При линейной интерполяции для i -го интервала можно составить уравнение прямой, проходящей через две заданные точки

$$y = a_i x + b_i, \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i,$$

где $a_i = \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}$; $b_i = y_{i-1} - a_i x_{i-1}$.

Квадратичная интерполяция в качестве интерполяционного многочлена на отрезке $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ принимает многочлен второго порядка $y = a_i x^2 + b_i x + c_i$, $x_{i-1} \leq x \leq x_{i+1}$.

В докладе приводятся примеры линейной и квадратичной интерполяции для заданных таблиц значения функции.

Обобщением приведенных выше подходов являются интерполяционные многочлены Лагранжа первой степени

$$(n=1) \quad L_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f_1,$$

второй степени

$$L_2(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} f_0 + \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} f_1 + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} f_2 \quad (3)$$

и в общем случае

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^n P_{ni}(x) f_i, \quad (4)$$

где

$$P_{ni}(x) = \frac{(x - x_0) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots (x - x_n)}{(x_i - x_0) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)}, \quad (5)$$

$i = 0, 1 \dots n$.

Интерполяционный многочлен (4) называется интерполяционным многочленом Лагранжа, а функции (5) – лагранжевыми коэффициентами.

Из (4) и (5) следует, что в задачах интерполирования многих функций в одной точке x при одинаковых узлах интерполяции x_0, x_1, \dots, x_n лагранжевые коэффициенты одинаковы и поэтому могут быть вычислены один раз.

Компьютерное построение полиномов Лагранжа, определенных (4), (5) требует разработки программы, структурно представляющей вложенные циклы: внешний цикл, определяющий ввод x_1, x_2, \dots, x_n для вычисления во вложенном цикле лагранжевых коэффициентов, и внешний цикл для вычисления произведения в $L_n(x)$.

При интерполировании по формулам Лагранжа естественно возникают вопросы: оценки погрешности и проблема сходимости интерполяционного процесса.

Если для функции $y = f(x)$ построен интерполяционный полином Лагранжа $L_n(x)$, принимающий в точках x_0, x_1, \dots, x_n заданные значения $y_0 = f(x_0), \dots, y_n = f(x_n)$, то возникает вопрос, насколько близко построенный полином приближается к функции $f(x)$ в других точках, т. е. как велик остаточный член $R_n(x) = f(x) - L(x)$.

Предположим, что при $x \in [a, b]$, содержащим все узлы интерполирования, функция $f(x)$ имеет все производные $f'(x), f''(x), \dots, f^{(n+1)}(x)$ до $(n+1)$ -го порядка включительно.

Можно доказать, что если известна верхняя граница

$$M_{n+1} = \max_{x \in [a, b]} |f^{(n+1)}(x)|,$$

получим оценку для абсолютной погрешности интерполяционной формулы Лагранжа

$$\left| R_n(x) \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} L(x) \right|, x \in [a, b].$$

На практике считают, что эмпирические результаты более простой функции (линейной) дают погрешность в различных узловых точках, лежащую в пределах от 5 до 35 %. Более сложная формула квадратичной интерполяции обеспечивает погрешность не более 5 %.

Обсуждая вопрос, будет ли стремиться к нулю погрешность интерполирования $f(x) - \varphi(x)$, если число узлов n неограниченно увеличивать, надо иметь в виду:

1. Свойства сходимости или расходимости интерполяционного процесса зависят как от выбора последовательности сеток, так и от гладкости функции $f(x)$.

2. Известны примеры несложных функций, для которых интерполяционный процесс расходится.

Так последовательность интерполяционных многочленов, построенных для непрерывной функции $f(x) = |x|$ по равноотстоящим узлам на отрезке $[-1, 1]$, не сходится к функции $|x|$ ни в одной точке отрезка $[-1, 1]$, кроме точек $-1, 0, 1$.

При интерполировании с равностоящими узлами $x_{i-1} - x_i = h$, $i = 0, 1, 2, 3, \dots$ вводится понятие конечной разности как разности между значениями функции в соседних узлах интерполяции и используется **первая интерполяционная формула Ньютона**.

$$P_n(x) = y_0 \Delta y + \frac{q(q-1)}{2!} \Delta^2 y_0 + \frac{q(q-1)(q-2)}{3!} \Delta^3 y_0 + \dots + \frac{q(q-1)(q-2)\dots(q-n+1)}{n!} \Delta^n y_0,$$

где $q = \frac{x - x_0}{h}$,

для интерполирования функции $y = f(x)$ в окрестности начального значения $x = x_0$, где q мало по абсолютной величине, и **вторая** интерполяционная формула Ньютона, удобная для интерполирования вблизи конца таблицы:

$$P_n(x) = y_n + q \frac{\Delta y_{n-1}}{1!} + q(q+1) \frac{\Delta^2 y_{n-1}}{2!} + q(q+1)(q+2) \frac{\Delta^3 y_{n-3}}{3!} + \dots + q(q+1)\dots(q+n-1) \frac{\Delta^n y_0}{n!},$$

$$q = \frac{x - x_n}{h}.$$

Остаточный член первой интерполяционной формулы Ньютона:

$$\frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!} h^{n+1} q(q-1)\dots(q-n), \quad q = \frac{x - x_0}{h},$$

где ξ – некоторое промежуточное значение между узлами интерполирования x_0, x_1, \dots, x_n и рассматриваемой точкой x .

Остаточный член второй интерполяционной формулы Ньютона:

$$\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} h^{n+1} q(q+1)\dots(q+n), \quad q = \frac{x - x_n}{h}$$

где ξ – некоторое промежуточное значение между узлами интерполирования и рассматриваемой точкой.

Результаты и выводы

Выявлено построение приближенной функции по экспериментальным данным является актуальной практической задачей.

Принято к сведению на основе изучения теории:

- Существует один и только один интерполяционный полином при заданном наборе узлов интерполяции (Формулы Лагранжа, Ньютона порождают один и тот же полином).

- Порядок интерполяционного полинома $\varphi(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n$ определяется количеством заданных узлов интерполяции (при « n » узлах, порядок $\varphi(x)$ равен $(n - 1)$).

- Интерполяционный многочлен $L_n(x)$ в форме Лагранжа содержит значения $f(x_i)$ в явном виде. Это удобно, когда необходимо построить интерполяционный многочлен на тех же узлах, но для другой функции – $g(x)$. Тогда значения $f(x_i)$ достаточно заменить на $g(x_i)$. Многочлен $L_n(x)$ в форме Ньютона содержит $f(x_i)$ неявно (через разделенные разности). Однако он удобен, когда для этой же функции $f(x)$ необходимо увеличить порядок n . Тогда к исходному многочлену достаточно добавить несколько членов стандартного вида.

- Если максимальные разности практически постоянны, то результат интерполирования обыкновенно имеет столько верных десятичных знаков, сколько их есть в табличных данных, и поэтому оценка погрешности не обязательна. При пользовании интерполяционной формулой Лагранжа нет возможности следить за ходом конечных разностей, и поэтому следует, если это возможно, оценивать остаточный член.

- Повышение точности интерполяции целесообразно проводить за счет специального выбора узлов x_i интерполяции (а не за счет повышения порядка полинома).

Разработан алгоритм интерполирования и реализован для ряда функций.

Определено направление дальнейших исследований: приближение функций тригонометрическими полиномами.

ПРОГРАММНАЯ СИСТЕМА ОЦЕНКИ РИСКА РАЗВИТИЯ И ДИАГНОСТИКИ ЛОР-ЗАБОЛЕВАНИЙ

М.В. Рыжков

Научный руководитель Л.И. Покидышева

Сибирский федеральный университет

Программные комплексы давно стали неотъемлемой частью медицинских исследований. Однако на сегодняшний день не существует программ, способных не только поставить диагноз, но и оценить риск развития патологии еще до ее наступления. Отоларингологические заболевания являются большой социально-экономической проблемой, связанной не только со стремительным ростом распространенности, но и тяжестью течения этих заболеваний. Особенное затруднение вызывает постановка диагноза в районах Крайнего Севера ввиду нехватки профессиональных медицинских кадров и узких специалистов.

Целью данной работы является разработка приложения, использование которого предполагает обследование пациентов в области оториноларингологии.

Разработана структура системы, алгоритмы оценки риска развития лор-заболеваний и постановки предварительного диагноза, программное обеспечение. Программа хранит информацию о пользователях (врачах), пациентах и проводимых обследованиях. В ней реализовано разделение прав между пользователями на доступ к управлению информацией о своих подчиненных, пациентах, а также права на доступ к выполнению обследований. Программа включает несколько модулей – видов обследований: *аудиометрическое обследование, анамнез, оториноларингологический осмотр, лабораторное обследование, оценка риска развития нарушения слуха, общее состояние здоровья.*

Первые пять модулей работают по принципу: выясняется анамнез, проводится оториноларингологический осмотр, и, в случае необходимости, аудиометрическое обследование. Программный модуль производит анализ полученной информации и выдает результаты врачу. Эти результаты могут помочь ему в постановке окончательного диагноза и сэкономить время, которое очень ценно в условиях прогрессирующего заболевания. Информация хранится в собственной базе данных, что позволяет эффективно следить за динамикой заболевания и, в случае необходимости, оперативно предпринять необходимые действия.

Последний модуль производит анализ результатов предыдущих и подводит итог относительно общей картины здоровья пациента.

В системе реализован многопользовательский режим с возможностью работы в сети, что дает возможность нескольким врачам использовать ее одновременно и работать со своими пациентами, не дожидаясь, пока коллеги закончат проведение обследований своих. Настройка прав доступа на управление информацией о пользователях, пациентах, доступ к возможности проведения обследований дают возможность использовать программное обеспечение в условиях крупной больницы, специализированной на лор-заболеваниях, т. к. позволяет создать иерархию «начальник–подчиненный», назначая пользователю свой уровень доступа. Возможности сетевого приложения позволяют производить обследования и вносить в программу данные сразу, не покидая специализированной лаборатории или кабинета с установленным необходимым оборудованием. Вся информация хранится централизованно на сервере, что позволяет врачу иметь доступ к данным из любого места в больнице. Например, врач может провести необходимые обследования в специализированных для этого лабораториях, а затем в своем кабинете спокойно подумать над полученными результатами и поставить правильный диагноз, назначить лечение.

На практике это реализовано следующим образом. Программа включает 3 крупных блока: база данных, сервер и клиент.

База данных хранит всю информацию о пациентах, пользователях, обследованиях. Информация о пользователях включает личные данные, права доступа к пациентам и обследованиям. На пациентов в базе хранятся личные данные, история проведенных обследований. Также в базу включена информация о существующих в программе обследованиях и правила принятия решений на каждое обследование.

Сервер является посредником между базой данных и клиентами. Он получает запросы от клиента, применяет их к базе и, в зависимости от требований запроса от клиента, передает информацию об успешном/неудачном выполнении запроса, либо отправляет клиенту таблицу с данными (например, выборка списка всех доступных пользователю пациентов в базе). Также управляет подключением пользователей к базе, следит, чтобы один и тот же пользователь не мог работать с системой из разных мест в один и тот же момент времени.

Клиент предоставляет пользователю интерфейс для работы с программой. К нему относятся функции подключения к серверу, авторизации пользователя в системе, передача запросов серверу и получение результатов их выполнения. Если говорить более подробно: анализ введенных данных обследований и отправка результатов анализа серверу для определения предварительного диагноза, передача серверу новых и измененных

данных о пользователях, пациентах и обследованиях, получение и вывод пользователю текущих.

Общение блоков сервер и клиент системы между собой будет реализовано передачей сообщений и данных. Сообщения в такой системе будут передаваться следующим шаблоном:

<Команда>~<Параметр1>~<Параметр2>~...~<ПараметрN>

Блок системы получает сообщение целиком и декодирует его, разбивая на составные части по принципу: знак тильда является разделителем команды и параметров друг от друга. Блок анализирует пришедшую команду и, в зависимости от нее, решает, какие действия необходимо выполнить и как использовать пришедшие параметры.

Если клиент запрашивает выборку из базы, сервер осуществляет выборку и передает результаты в два этапа. На первом этапе из полученной на сервере таблицы с выборкой извлекается ее структура и посылается клиенту сообщением, клиент создает пустую таблицу и применяет полученную структуру к ней. Вторым этапом сервер сериализует данные таблицы и передает их блоками двоичных данных, пока не передаст все. Клиент получает эти данные и десериализует в текстовые данные таблицы. Готовая таблица представляется пользователю.

Для работы программы необходима операционная система WindowsXP и выше, NetFramework 4.0, а также поддержка локальной сети. С программой можно работать и на одном компьютере, указав в клиенте адрес сервера localhost, но для достижения наибольшей эффективности в работе рекомендуется использовать программу в локальной сети.

Система имеет понятный интерфейс и не затрудняет работу врача непосредственно с содержимым базы данных.

УДК 550.3

АЛГОРИТМИЧЕСКАЯ И ИНФОРМАЦИОННАЯ ПОДДЕРЖКА МОДЕЛИРОВАНИЯ ЦУНАМИ

М.А. Курако, А.О. Диденко
Научный руководитель К.В. Симонов

Сибирский федеральный университет

Параметры природных и природно-техногенных катастроф (их сила, характер воздействия и др.) разнообразны. Многочисленность и разнообразие морских природных опасных процессов, сложность и изменчивость

режима сильнейших подводных землетрясений и цунами делают актуальной проблему создания алгоритмического и информационного обеспечения для анализа данных комплексного мониторинга и оценки опасности.

Известно, что причиной большинства цунами являются подводные землетрясения большой магнитуды и определенного механизма очага, во время которых происходит резкое смещение участка морского дна. В результате над очаговой зоной возникает поднятие водной поверхности, которое затем распространяется в виде цуга волн. В работе предлагаются подходы для анализа соответствующих данных гео- и гидрофизического мониторинга с целью оперативной оценки опасности.

Геомониторинг цунамигенных землетрясений. Решение указанной задачи предполагает разработку схем типизации морских катастроф сейсмической природы и моделей единообразного описания процессов подготовки сильных цунамигенных землетрясений. В ходе исследований разработана вычислительная методика оценки параметров сильных землетрясений, включающая следующие этапы: оценка стадии сейсмического процесса для выделенной очаговой области; параметризация энергетических характеристик процесса для оценки магнитуды ожидаемого катастрофического события; построение аппроксимирующих функций, позволяющих оценить время ожидаемого катастрофического события.

На первом этапе происходит выделение области подготовки сильного цунамигенного землетрясения. Критерием для такого выделения служат признаки, характеризующие общий повышенный фон значений ряда предвестников, которые регистрируются на основе системы сейсмического мониторинга. Выполняется разделение регистрируемых сейсмических событий в анализируемой пространственно-временной последовательности на высокоэнергетические и низкоэнергетические уровни, характеризующие состояние изучаемой среды и определяющие условия возникновения сейсмической катастрофы. Для выделенной очаговой области осуществляется оценка стадий процесса подготовки сильнейшего землетрясения.

Процессы развития сейсмической катастрофы описываются в терминах определенной модели, когда состояние катастрофы в момент времени i определяется вероятностью p продолжения развития катастрофы и ее состоянием в момент $(i-1)$. Показывается, что модели катастроф, соответствующие схемам кумулятивного и мультипликативного типа, представляют собой функции перехода системы из состояния $(i-1)$ в состояние i и позволяют генерировать эмпирические распределения, присущие катастрофам разного типа.

Стадия катастрофы определяется значением параметра R , характеризующим отношение экстремального состояния к нормальному. Для 1-й стадии разброс силы катастроф и значений поражающих факторов мал, и

характер распределения этих величин обычно описывается нормальным законом с малой дисперсией. При 2-й стадии катастрофы эмпирические распределения величин часто описываются экспоненциальным законом. Функции распределения величин для 3-й стадии катастрофы в большинстве случаев достаточно хорошо описываются степенным распределением. Показано, что процесс подготовки сильного землетрясения описывается комбинацией схем кумулятивного и мультипликативного типов, где экспоненциальный закон описывает распределение энергии от землетрясений в целом, а степенной позволяет учесть наиболее сильные, но редкие значения энергии землетрясений, которыми нельзя пренебречь.

На следующем этапе анализа рассматривается «энергетический» подход описания очаговой области подготовки сильного цунамигенного землетрясения, основанный на параметризации энергетической характеристики изучаемого сейсмического процесса. В качестве характерного временного интервала изучаемого процесса берутся сейсмические периоды между двумя сильными землетрясениями $T_k = t_k - t_{k-1}$. Количественное описание сейсмического процесса в течение временного интервала T_k – это установление закономерностей в последовательности землетрясений с магнитудой в интервале между минимальным и пороговым значениями. Состояние сейсмической системы внутри сейсмического цикла описывается кумулятивными энергетическими параметрами среды, на основе которых вычисляется энтропия системы, из которой и находится оценка магнитуды ожидаемого землетрясения.

На третьем этапе на основе анализа эмпирических временных рядов $M(t)$ сейсмического мониторинга процесса подготовки сильного землетрясения для выделенных очаговых областей выполняется аппроксимация неизвестной функциональной зависимости по известным парам $(t, M(t))$. Разработанная методика позволяет быстро обрабатывать и анализировать данные, что важно, т. к. точность оценки параметров ожидаемого сильного землетрясения увеличивается с каждым новым сейсмическим событием.

Гидрофизический мониторинг. Прямая задача гидрофизического мониторинга распространения волн цунами в реальной акватории решается методом расщепления по направлениям с использованием программного комплекса MOST (Method of splitting tsunami). Объединение вычислительной методики решения обратной задачи совместно с методикой решения прямой задачи позволяет производить моделирование на GPU (Graphics Processing Unit).

Моделирование состоит из двух этапов. На первом этапе происходит восстановление формы очага цунами путем решения обратной задачи, основываясь на данных ближайших DART станций. На втором этапе восстановленный очаг передается на вход процедуре численного моделирования распространения волн цунами на основе программного комплекса MOST.

В цикле работ С.Ю. Доброхотова и др. предложены новые эффективные асимптотические формулы решения линейризованной системы уравнений мелкой воды над неровным дном. Решения локализованы в окрестности фронтов, на которых с течением времени вследствие переменности коэффициентов появляются фокальные точки и точки самопересечения. Полученные формулы для асимптотических решений задачи Коши с локализованными начальными данными волнового уравнения с переменной скоростью для линейризованной системы уравнений мелкой воды позволяют восстанавливать форму очага цунами при решении обратной задачи. Разработаны элементы вычислительной методики восстановления формы источника по мареограммам на ближайших DART станциях.

Пакет программ MOST использует модель расчета распространения волны цунами над глубоководной акваторией при помощи метода расщепления по пространственным переменным. Для численного расчета распространения волны цунами используется нелинейная система дифференциальных уравнений мелкой воды. Модель мелкой воды хорошо описывает процесс распространения волн цунами в открытом океане при условии, что горизонтальные размеры подвижки океанического дна, генерирующие эту волну, значительно превосходят глубину океана.

Алгоритм численного решения системы строится на основе метода расщепления по пространственным направлениям. Для этого рассматриваются две вспомогательные системы, каждая из которых зависит только от одной пространственной переменной. В дальнейшем для численного решения системы достаточно построить устойчивые разностные схемы. Расчет движения волны происходит в два этапа: на первом этапе производится вычисление смещения волны вдоль оси X , на втором – вдоль оси Y . При этом расчет вдоль разных строк, данных по оси X , можно производить независимо. Аналогичная ситуация и для расчета вдоль оси Y . Размерность расчетного поля для акватории Тихого океана составляет 2581×2879 .

Программная реализация параллельной версии. Для реализации расчетов использованы многоядерные вычислительные системы (SMP) и графические процессоры. При переносе вычислительных алгоритмов на SMP системы использована технология OpenMP, применяемая для распараллеливания внешних расчетных циклов. Такими циклами в программном комплексе MOST являются циклы расчетов смещения волны вдоль осей. Разработанный программный модуль интегрируется в исходные коды программы MOST путем замены вычислительной части. Данный подход целесообразно применять для систем с количеством процессоров не более шести. Хорошая масштабируемость достигается для систем с числом вычислительных ядер до 4, после чего происходит падение производительности при использовании 8 и более вычислительных ядер. Это связано с тем, что итерации цикла выполняются

очень быстро и ядрам требуется часто обращаться к общей области памяти, что приводит к частому вытеснению данных из кэша и необходимости производить синхронизацию кэшей, на что и тратится основное время.

Благодаря высокой степени параллелизма, заложенного в данном алгоритме (в силу того, что вычисления инвариантов и параметров волны вдоль осей могут производиться независимо для каждой строки/столбца данных), возможна его эффективная реализация для графических процессоров. Адаптация кода для GPU выполнена путем последовательного переноса участков кода на GPU. Размер блока нитей в расчетной сетке взят равным 16x16 потоков. Таким образом, все пространство моделирования разбито на равные блоки. Как в дальнейшем показало профилирование и вычислительные эксперименты, именно такая конфигурация является оптимальной для загрузки потоковых мультипроцессоров GPU. При этом на видеокарте NVIDIA GeForce 9800 GX2 время выполнения одной итерации составило в среднем 0,25 с.

Наиболее сложной в плане реализации оказалась функция расчета высоты волны. Внутри нее требовалось проводить большое количество проверок на граничные условия (наличие берегов, материков и островов) и вести интенсивное чтение данных из памяти. Для упрощения этой функции заранее выполнен просчет некоторых условий, что позволило исключить вложенные проверки. Кроме того, все необходимые для расчета данные перенесены в разделяемую память. В результате модификации кода поверхность океана перестала самопроизвольно раскачиваться, время вычисления одной итерации уменьшилось и составило в среднем 0,23 с. на одну итерацию по времени.

Для выявления направлений дальнейшей оптимизации использовался профилировщик CUDA. Анализ показал, что несмотря на простой вид функций, вычисляющих инварианты вдоль осей, непоследовательное (некогерентное) чтение и запись происходят по 2,6 миллиона раз, в то время как последовательное (когерентное) – всего несколько тысяч. Для того чтобы получить последовательное чтение, произведена замена функции выделения памяти на их аналоги, производящие выделение выровненных участков памяти. В результате количество непоследовательных обращений к памяти сократилось до нуля и время обработки одной итерации по времени составило 0,037 с.

Для программ на CPU работа с памятью происходит эффективно, если данные в памяти расположены рядом друг с другом и легко помещаются в кэш или CPU может определить шаблон доступа к памяти, опять же заранее подгружая данные в кэш. У GPU для помещения данных в кэш можно использовать текстуры. При этом в кэш текстуры помещаются те данные, которые локализованы в двухмерном пространстве относительно данных, к которым идет обращение. Данная оптимизация привела к использованию текстурной памяти и небольшой модификации вычислитель-

ных ядер. Выигрыш от такой оптимизации составил в среднем 0,03 с. на итерацию – около 10 %. Финальное тестирование выполнено на NVIDIA Tesla C1060. Полученный результат – 0,02 с. на итерацию, что дает выигрыш по времени на 2 порядка.

Таким образом, реализация программного комплекса MOST на параллельных архитектурах позволяет значительно увеличить производительность вычислений, уменьшая время вычислений с нескольких часов до нескольких минут. При этом применяемые оптимизации позволяют увеличить производительность OpenMP версии комплекса на порядок, а версии для графических процессоров – на 2 порядка.

Реализация системы. Для эффективной реализации системы моделирования цунами и анализа данных комплексного мониторинга за очаговыми областями сильнейших цунамигенных землетрясений применяется параллельная версия системы, разрабатываемая в настоящее время, в которой для слежения за каждым очагом выделяется отдельное вычислительное ядро. Анализируемые данные геомониторинга хранятся в базе данных, где каждая таблица базы данных представляет собой каталог землетрясений для одной выделенной области.

Структура подсистемы сейсмического мониторинга включает в себя следующие компоненты: 1) процессор-мастер, задачей которого является слежение за актуальностью данных, проверкой их корректности и обновлением данных в режиме реального времени, которое может происходить во время работы приложения; 2) процессоры-вычислители, в задачи которых входит обработка поступающих данных, относящихся к конкретному очагу, и запись результатов в базу данных; 3) база данных – хранилище, содержащее первоначальные данные комплексного мониторинга, а также результаты их обработки; 4) большой экран, позволяющий оперативно, в режиме, близком к реальному времени, отображать текущую обстановку по выбранным очаговым зонам и результаты их обработки.

Распределение работы производится процессором-мастером и заключается в определении объемов всех каталогов и выделении необходимого количества ресурсов для вычислений. В силу независимости между исследуемыми очагами для обработки каждой очаговой области выделяется отдельный процессор, выполняющий функции процессора-вычислителя.

В настоящее время производится адаптация и тестирование алгоритмического и программного обеспечения для моделирования длинных волн типа цунами в открытом океане для источника, форма которого близка к реальному очагу цунами. На основе разработанной вычислительной методики выполнены численные эксперименты по моделированию распространения волн цунами в акватории Тихого океана последних цунамигенных землетрясений и цунами за период 2012–2013 гг.

**ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ
ДЛЯ АНАЛИЗА ИЗМЕНЧИВОСТИ ПОВЕРХНОСТНОЙ
СОЛЕННОСТИ ОКЕАНА ПО СПУТНИКОВЫМ ДАННЫМ**

Д.Ю. Коноплев
Научный руководитель А.В. Картушинский

Сибирский федеральный университет

Мировой океан – важнейший объект для наблюдения и изучения. Он связан с процессами глобального переноса энергии и вещества, обмена с атмосферой кислородом и углекислым газом. Данные факторы делают актуальным изучение Мирового океана. Зная, как ведут себя различные процессы в Мировом океане, например течения, можно спрогнозировать дальнейшие варианты поведения климата на планете.

Температура и соленость воды, скорость течения, концентрация хлорофилла, изменение в пространстве и во времени этих параметров принадлежат к числу наиболее важных. Например, соленость и температура определяют плотность морской воды, которая, в свою очередь, является важнейшим фактором, определяющим движение водных масс в океанах. Океанологическая циркуляция играет решающую роль в формировании климата Земли и его изменений.

Соленость океанических вод имеет огромное значение для природы, т. к. содействует смягчению климата планеты, потому что, препятствуя замерзанию морской воды, – обуславливает в полярных и приполярных областях более продолжительное соприкосновение океанических вод с атмосферой, а это, в свою очередь, увеличивает количество тепла, отдаваемого водами воздуху. Также океаническая соленость усиливает вертикальную циркуляцию вод, потому что плотность воды на поверхности океанов увеличивается не только от понижения ее температуры, но еще и от испарения. Замерзание соленой воды тоже способствует возникновению вертикальной циркуляции, потому что поверхностная вода при замерзании получает часть солей, не перешедших в лед, становится плотнее и опускается вниз, замещающие же ее более теплые нижние слои отдают свое тепло воздуху.

Методы измерения океанологических параметров можно условно разделить на контактные и дистанционные. К контактными методам можно отнести измерения судовых наблюдений и измерения, полученные с буйковых станций. К дистанционным методам – самолетные и спутниковые измерения. У каждого метода существуют свои преимущества и недостатки, например, при измерении контактными методами можно достичь более

точных значений солености, чем при измерении дистанционными методами, в свою очередь, контактные измерения не могут обеспечить большой пространственный охват и повторяемость, в отличие от дистанционных, поэтому метод измерения солености выбирается в зависимости от поставленной задачи.

На сегодняшний день соленость поверхности Мирового океана измеряют 3 спутника:

- Зонд-ПП;
- SMOS (Soil Moisture and Ocean Salinity);
- Aquarius.

Зонд-ПП – это малый космический аппарат для фундаментальных космических исследований на базе унифицированной платформы «Карат». Зонд-ПП предназначен для развития и совершенствования методов наблюдения Земли из космоса радиометрическими средствами в дециметровом диапазоне длин волн.

Спутник SMOS (Soil Moisture and Ocean Salinity – влажность почв и соленость океана) разработан Европейским космическим агентством. На нем используется интерферометр-радиометр MIRAS (Microwave Imaging Radiometer by Aperture Synthesis), позволяющий проводить в глобальном масштабе измерения влажности почв и растительности суши.

Спутник Aquarius был разработан НАСА и аэрокосмическим агентством Аргентины при участии космических агентств Канады, Франции и Италии. Он состоит из аргентинского аппарата SAC-D (Satelitede Aplicaciones Cientificas-D) и научного инструмента Aquarius, созданного НАСА. Основной задачей спутника является измерение степени солености в разных районах мирового океана, а также измерение параметров скорости ветра, температуры воды, интенсивности осадков, влажности атмосферы.

Большинство дистанционных измерений океанологических параметров находится в свободном доступе, например, данные о солености, измеренные с помощью спутника Aquarius, размещены на файловом сервере: <ftp://podaac-ftp.jpl.nasa.gov/allData/aquarius/>. Для удобства пользователей файлы данных по солености можно скачивать с определенным временным усреднением или без усреднения. Каждый файл содержит набор метаданных, в которых указаны подробные характеристики района съемки, аппаратуры съемки, времени начала и конца съемки, а также множество других характеристик. Помимо метаданных в файле существуют данные значений цвета – палитра. Она нужна для визуализации информации о солености по представленным цветам. При обработке числовых значений солености за месяц добавлении к ним соответствующей палитры (рис. 1) можно получить примерный результат распределения солености на поверхности Мирового океана, который представлен на рис. 2, 3.



Рис. 1. Палитра цвета для значений солёности

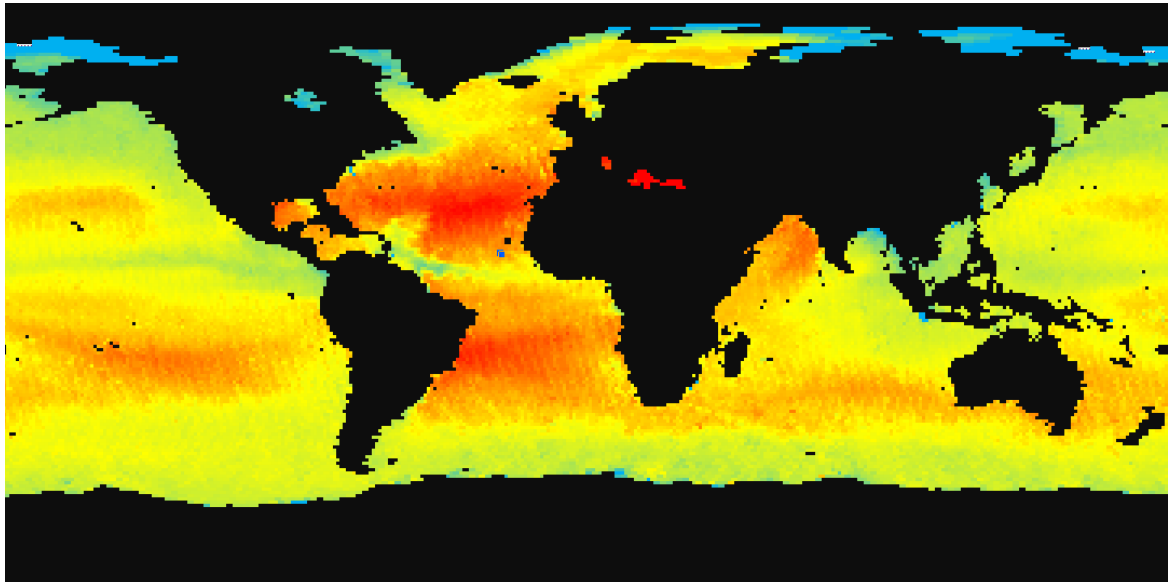


Рис. 2. Среднемесячные значения солёности на поверхности Мирового океана в период с 1 по 30 сентября

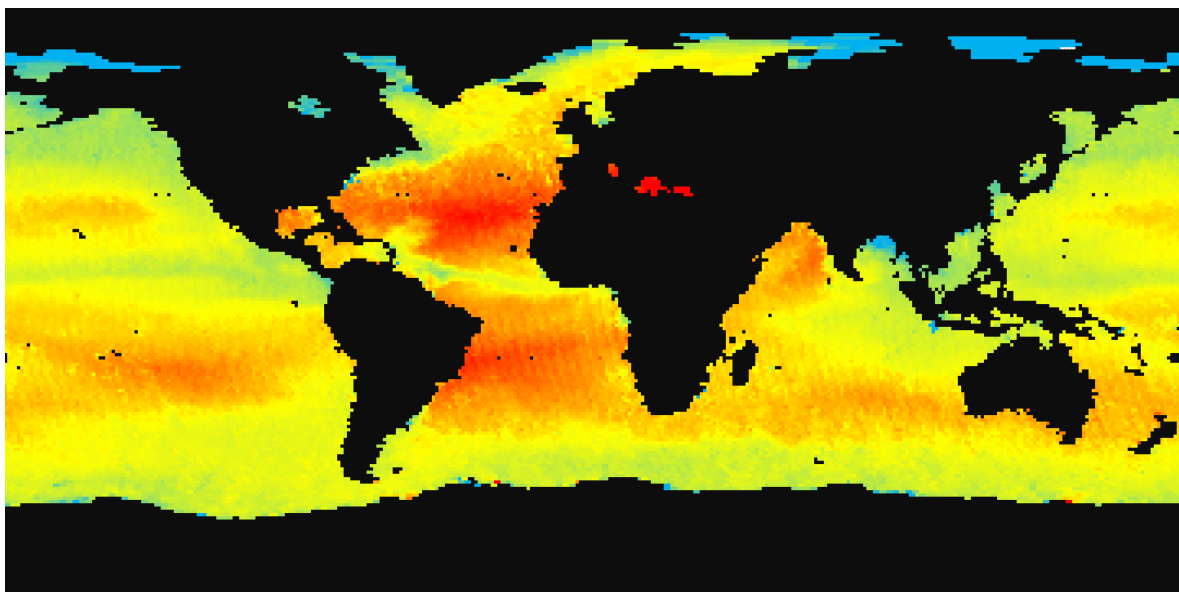


Рис. 3. Среднемесячные значения солёности на поверхности Мирового океана в период с 1 по 31 октября

Нахождение градиента солености является основной задачей будущего программного обеспечения. Данные солености представляют собой дискретные значения в областях 100×100 км, целесообразно представлять эти значения в виде координатной сетки, которая разбита на прямоугольные области, представленные на рис. 4.

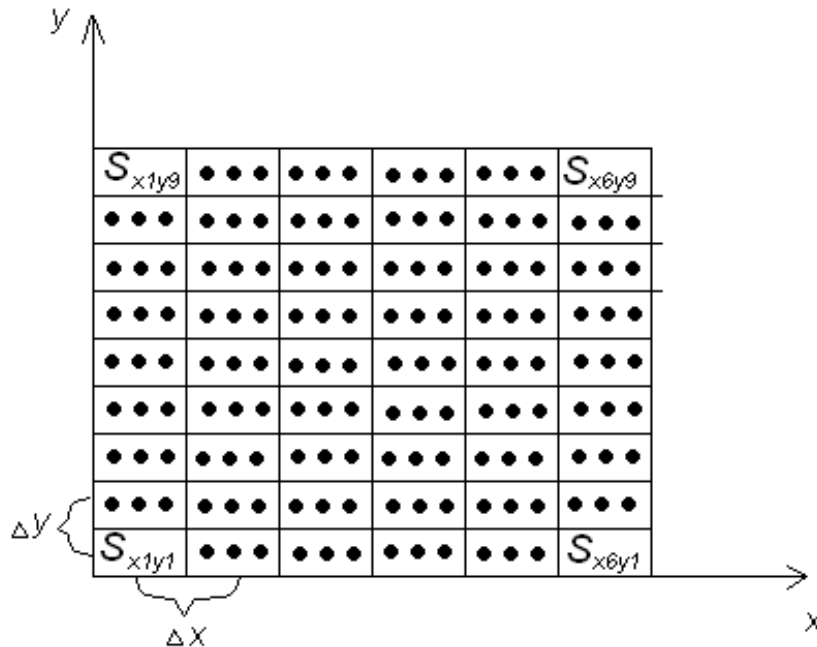


Рис. 4. Координатная сетка, где $S(x_i, y_j)$ – значение солености, а Δx и Δy – значения шага сетки соответственно по x и y

Расчет градиентов только в одном направлении, например широтном по x или меридиональном по y , не отображает полную картину пространственного изменения солености, поэтому для работы будут использоваться абсолютные значения градиентов, рассчитанные с помощью широтных и меридиональных значений градиентов. Для нахождения градиентов используются разностные уравнения.

1. Для расчета широтных значений градиентов:

$$\frac{\partial S}{\partial x} = \frac{S_{i+1,n} - S_{i,n}}{\Delta x}.$$

2. Для расчета меридиональных значений градиентов:

$$\frac{\partial S}{\partial y} = \frac{S_{n,j+1} - S_{n,j}}{\Delta y}.$$

3. Для расчета абсолютных значений градиентов:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial L}\right)^2 = \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2 = \left(\frac{S_{i+1,n} - S_{i,n}}{\Delta x}\right)^2 + \left(\frac{S_{n,j+1} - S_{n,j}}{\Delta y}\right)^2;$$

$$\frac{\partial S}{\partial L} = \sqrt{\left(\frac{S_{i+1,n} - S_{i,n}}{\Delta x}\right)^2 + \left(\frac{S_{n,j+1} - S_{n,j}}{\Delta y}\right)^2}.$$

Геометрический смысл расчета градиентов показан на рис. 5.

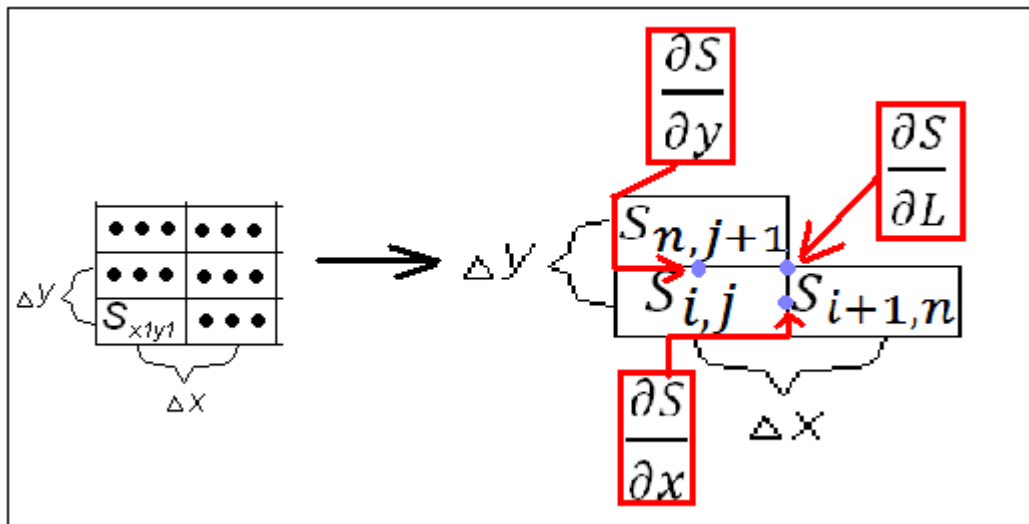


Рис. 5. Значения градиентов на координатной сетке

В работе продемонстрирован алгоритм для расчета абсолютных градиентов, который разработан для выявления закономерностей в процессах Мирового океана, а также для улучшения его анализа. Изучение изменчивости градиентов солености океана на различных пространственных и временных интервалах необходимо для определения зон высокой и низкой динамической активности. В этих зонах сталкиваются теплые и холодные водные массы, а также водные массы с высокими и низкими значениями солености, где возникают резкие градиенты и создаются условия для развития интенсивных динамических и тепловых взаимодействий океана с атмосферой, влияющих на формирование современного климата и его изменений. Поэтому задача изучения процессов в Мировом океане является актуальной.

АКСИОМАТИЗАЦИЯ ИНТУИЦИОНИСТСКИХ ЛОГИК МАЛОЙ ГЛУБИНЫ

С.И. Башмаков

Научный руководитель М.И. Голованов

Сибирский федеральный университет

В работе А.В. Чагрова и М.В. Захарьяшева доказан факт алгоритмической неразрешимости задачи аксиоматизации табличных логик. Также ими доказана возможность конечной аксиоматизации табличных суперинтуиционистских логик [1]. Пользуясь возможностью семантического изучения логик путем рассмотрения соответствующих им фреймов, мы поставили задачу создания полных систем аксиом некоторых логик малой глубины.

Фреймом Крипке, или просто фреймом называется частично упорядоченное множество $F := \langle F, \leq \rangle$ (кратко, ч.у.м.). То есть отношение \leq является рефлексивным, транзитивным и антисимметричным.

Означиванием называется отображение V , удовлетворяющее следующим свойствам:

1. $V: P \rightarrow 2^W$, т. е. $\forall p \in P (V(p) \subseteq W)$;
2. $(\forall a \forall b \in W)(\forall p \in P)(a \leq b \Rightarrow (a \in V(p) \Rightarrow b \in V(p)))$.

Интуиционистская модель Крипке – тройка $M = \langle F, \leq, V \rangle$.

Важное свойство интуиционистской модели Крипке заключается в следующем: если формула α истинна на элементе a , заданной интуиционистской модели, и $a \leq b$, то α истинна и на b .

Также разъяснения требует операция импликации в условиях интуиционистских логик: $\phi \rightarrow \psi$ выполняется в точке x , если во всех $y \geq x$, когда выполняется ψ , выполняется и ϕ .

На первом этапе нами были построены все корневые фреймы глубины ≤ 3 . С учетом дополнительных ограничений на ширину (2 точки) получены следующие 10 фреймов (рис. 1).

Построены также 10 их замкнутых классов (по числу фреймов), состоящих из порождающих фреймов, их подфреймов и p -морфных образов. Построенные классы не исчерпывали все возможности, поэтому также были построены классы фреймов, представляющие собой всевозможные комбинации объединений десяти построенных замкнутых классов, но отличные от них. Все классы были представлены в виде решетки, каждый узел

которой соответствует определенному замкнутому классу фреймов. Здесь самым маленьким элементом стал класс, представленный одним одноточечным фреймом F_0 , самым сложным – объединение классов F_6, F_7, F_8 . Данный класс состоит сразу из всех десяти фреймов. В свою очередь, более сложный класс фреймов адекватен более узкой логике, наиболее же простой класс – фрейм F_0 – представляет собой классическую пропозициональную, наиболее широкую логику. Поэтому не возникло трудностей с построением решетки логик – она антиизоморфна построенной решетке классов фреймов (рис. 2).

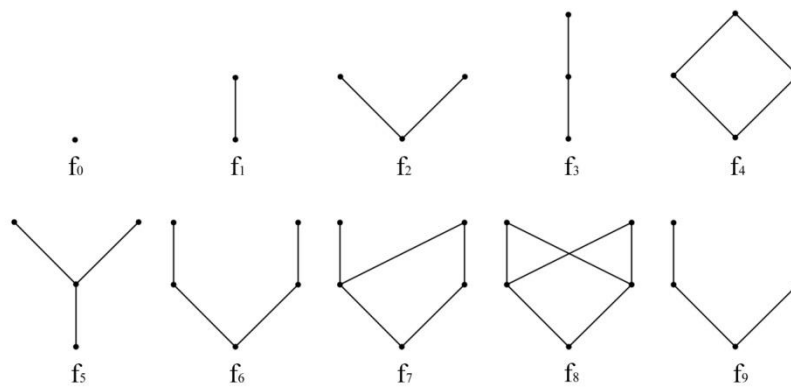


Рис. 1. Фреймы глубины 3 ширины 2

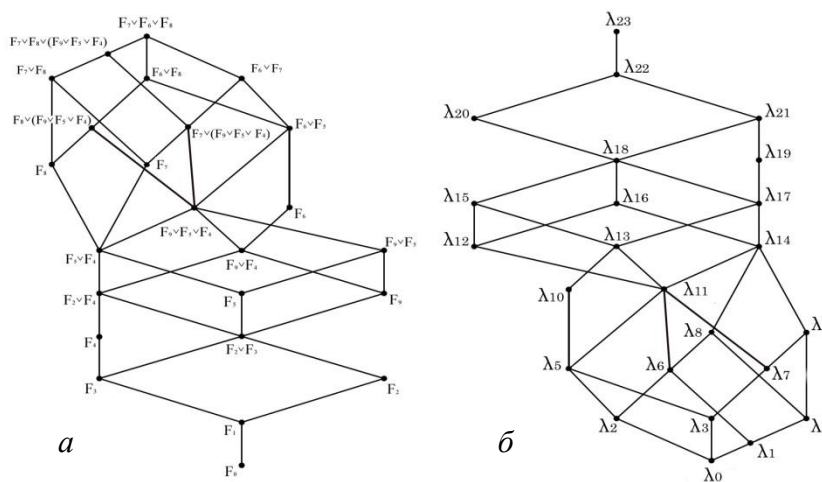


Рис. 2. Решетка замкнутых классов фреймов (а);
решетка соответствующих логик (б)

На втором этапе работы был определен перечень известных аксиом, общих для всех интуиционистских логик – это аксиоматическая система

Гейтинга: 9 аксиом классического пропозиционального исчисления, ослабленный закон исключенного третьего, а также правила вывода – *modus ponens* и правило подстановки. Индивидуальные же особенности конкретных фреймов должны быть описаны дополнительными аксиомами, как довольно общие особенности: ветвления, число точек в том или ином слое, ширина и глубина фрейма, так и более сложные, являющие собой композиции этих ограничений. В литературе представлены некоторые наиболее общие формулы, вводящие ограничения на тот или иной параметр: ограничение глубины, ширины фрейма, числа точек первого слоя и др. В частности, индуктивные формулы Нишимура от одной переменной, опровергающиеся на фреймах определенного вида из схемы Нишимура (рис. 3):

$$\begin{aligned}nf_w &= T, nf_0 = \perp, \\nf_1 &= p, nf_2 = \neg p, \\nf_{2n+3} &= nf_{2n+1} \vee nf_{2n+2}, \\nf_{2n+4} &= nf_{2n+3} \rightarrow nf_{2n+1}.\end{aligned}$$

1. Формула nf_{2n} опровергается на фрейме $f \Leftrightarrow$ среди открытых подфреймов и p -морфных образов фрейма f есть фрейм N_n .
2. Формула nf_{2n-1} опровергается на фрейме $f \Leftrightarrow$ среди открытых подфреймов и p -морфных образов фрейма f есть фрейм N_{n+1} или фрейм N_{n+2} .

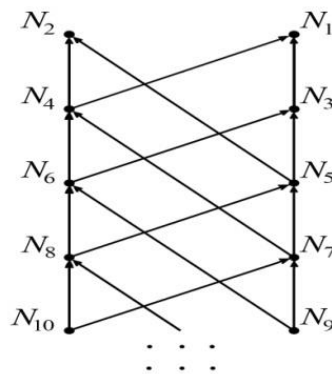


Рис. 3. Схема фреймов Нишимура с обозначениями

При помощи такого набора формул возможна полная аксиоматизация некоторых фреймов и, соответственно, порожденных ими классов (F_0, \dots, F_4) . Дальнейшая аксиоматизация других логик была невозможна без создания новых аксиом, описывающих конкретные фреймы. Поэтому нами были созданы некоторые новые формулы. В частности, была создана формула для фрейма F_5 , ограничивающая число точек второго слоя одной точкой:

$$spsl = (p \rightarrow q) \vee (q \rightarrow p) \vee \neg(p \wedge q).$$

Для доказательства истинности этой формулы было показано, что не существует интуиционистского означивания, при котором все три дизъюнктивных члена формулы не выполняются. Противоположно на проверяемых фреймах F_4, F_6, F_7, F_8 были построены означивания, при которых формула опровергается.

Тем самым, система аксиом для класса, порожденного фреймом F_5 , состоит из данной формулы, аксиом ширины, глубины и аксиом Гейтинга.

Для фрейма F_4 (рис. 4) были построены две формулы, по сути, заменяющие аксиому ширины в аксиоматической системе, построенной из известных аксиом.

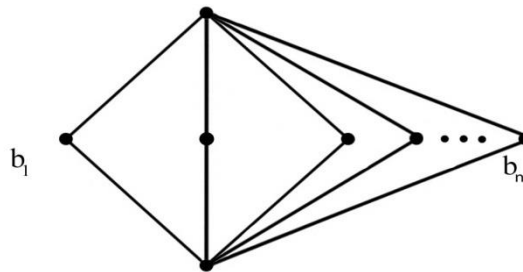


Рис. 4. Фрейм $f_{4,n}$

Первая – ограничивает двумя точками число точек второго слоя во фрейме F_4 , а также фреймах подобного вида (где n – число точек второго слоя):

$$sl_n = \bigwedge_{i=0}^n \neg(q_i \rightarrow p) \rightarrow \bigvee_{i=0, j=0, i \neq j}^n (q_i \rightarrow q_j).$$

Вторая, в отличие от $spsl$, «отличает» фрейм F_4 от F_5 :

$$antispsl = (p \rightarrow q) \vee (q \rightarrow p) \vee \neg \neg(p \wedge q).$$

Помимо этого, был осуществлен поиск формул, аксиоматизирующих некоторые другие логики, фреймы которых ранее не были нами построены. Их ширина превышает 2 (рис. 5). В частности фрейм F_{10} :

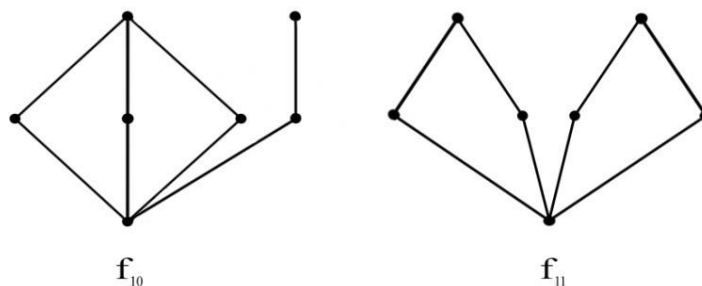


Рис. 5. Фреймы F_{10}, F_{11} глубины 3, ширины 4

Для данных фреймов одинаково истинен набор известных аксиом. Для полноты системы достаточно добавить формулу fsl_4 , истинную на фрейме F_{10} (рис. 10), но опровергающуюся на втором фрейме.

$$fsl_n = \bigwedge_{S_3[1,2,3,4]} (\bigvee_{i,j,k=S_3} (p_i \wedge p_j \rightarrow \neg p_k)) \rightarrow \bigvee_{i,j} (p_i \rightarrow p_j).$$

Далее была найдена формула для фрейма F_{12} , являющегося p -морфным образом рассмотренного фрейма F_{10} . Фрейм получен путем склейки двух точек:

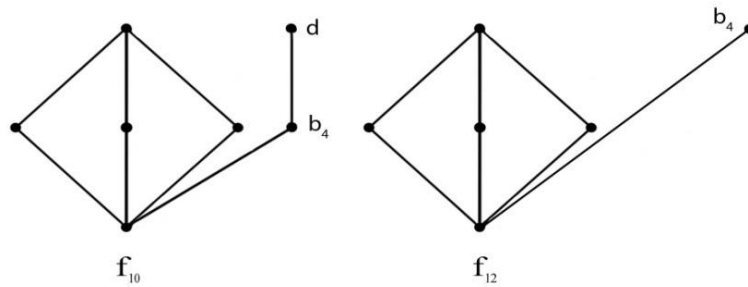


Рис. 6. Фрейм F_{10} и его p -морфный образ – фрейм F_{12} , полученный путем склейки точек b_4 и d

Формула отличает данный фрейм от фрейма F_{10} :

$$ttpc_4 = \bigvee_{i=1, j=1, i \neq j}^4 (q_i \rightarrow q_j) \vee \bigvee_{i=1}^4 (q_i \rightarrow (r \vee \neg r)).$$

Для фрейма F_{12} формула имеет индекс 4, но она также может быть обобщена для произвольного n , т. е. для фреймов схожего вида, различного числа точек второго слоя. В частности, для фрейма F_9 , входящего в изначальные 10 фреймов, ширина не более двух. Этой формулы с индексом 2, наряду с известными формулами и аксиомами Гейтинга, достаточно для полноты аксиоматической системы.

Итак, нами было реализовано построение решетки рассматриваемых классов фреймов и решетки соответствующих логик, описаны и построены полные системы аксиом семи логик, максимальной ширины 2, а также 3 логик большей ширины, созданы описанные аксиомы, недостающие для полноты аксиоматизации соответствующих рассмотренных логик.

Список литературы

1. Chagrov A.V., Zakharyashev M.V. *Modallogic* // Oxford: Oxford Press, 1997. 610 p.

**ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ
АКТИВНОЙ ПРИМЕСИ ЕФЗ
В АТМОСФЕРЕ Г. КРАСНОЯРСКА**

А.В. Белосохова
Научный руководитель В.Е. Распопов
Сибирский федеральный университет

В связи с предстоящим строительством вблизи г. Красноярск Енисейского ферросплавного завода, возникает вопрос о влиянии выбросов этого завода на экологически значимую зону города и ближайших населенных пунктов.

Размещение Енисейского ферросплавного завода предполагается на территории бывшего ООО «Красноярский завод тяжелого машиностроения» в Емельяновском районе на расстоянии 1,5 км от п. Придорожный, 3,5 км от д. Старцево, 5 км от с. Шуваево и порядка 10 км от г. Красноярск.

Предполагаемое воздействие на окружающую среду Енисейского ферросплавного завода: выбросы загрязняющих веществ (далее – ЗВ) в атмосферный воздух от предприятия составят 4207 т/год по 37 ингредиентам, в том числе:

- ЗВ 1 класса опасности: свинец и его неорганические соединения – 0,00004 т/год;
- ЗВ 2 класса опасности: марганец и его соединения – 184,7 т/год, оксид кальция – 26,4 т/год, триоксид диалюминия – 11,5 т/год;
- ЗВ 3 класса опасности: серы диоксид – 2695,0 т/год, азота диоксид 344,3 т/год, пыль неорганическая – 83,8 т/год, азота оксид – 9,3 т/год, сажа – 8,1 т/год, оксид магния – 6,4 т/год;
- ЗВ 4 класса опасности – оксид углерода – 815,7 т/год.

В работе с помощью двух математических моделей численно исследуется распространение агрегированной примеси в атмосфере.

Пусть $q(t, x, y, z)$, – функция значения которой в момент времени t в точке (x, y, z) трехмерного евклидова пространства E^3 совпадает со значениями концентрации некоторого вещества (примеси) в этой точке.

Сначала для расчета средних значений концентрации примеси в экологически значимой зоне в работе применяется гауссова модель распространения примеси (или модель Сеттона). Согласно этой модели, изменения концентрации примеси от непрерывного точечного источника примеси подчиняется нормальному закону распределения:

$$q(t, x, y, z) = \int_1^{t_k} \frac{Q e^{\left(\frac{(x-x_0-V_x t)^2}{(\sigma_x)^2 t} + \frac{(y-y_0)^2}{(\sigma_y)^2 t} + \frac{(z-z_0)^2}{(\sigma_z)^2 t} \right)}}{(\sqrt{2\pi t})^3 \sigma_x \sigma_y \sigma_z} dt, \quad (1)$$

где $q(t, x, y, z)$ – концентрация вещества; $4(x_0, y_0, z_0)$ – координаты источника примеси; Q – коэффициент, характеризующий мощность источника примеси; V_x – коэффициент, характеризующий скорость ветра; $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ – средние квадратичные отклонения частиц примеси в момент времени t соответственно вдоль координатных осей ОХ, ОУ, ОZ:

$$\sigma_x^2 = \frac{2}{h} \int_0^h K_x(z) dz; \quad \sigma_y^2 = \frac{2}{h} \int_0^h K_y(z) dz; \quad \sigma_z^2 = \frac{2}{h} \int_0^h K_z(z) dz, \quad (2)$$

где K_x, K_y, K_z – коэффициенты турбулентной диффузии вдоль координатных осей ОХ, ОУ, ОZ; h – высота приземного слоя.

Для проведения численных расчетов по формуле (1), покрываем расчетную область равномерной сеткой (x_i, y_j, z_k) с шагами $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ вдоль осей ОХ, ОУ, ОZ соответственно.

Средние квадратичные отклонения частиц примеси в момент времени t вдоль координатных осей ОХ, ОУ, ОZ, пользуясь формулами (2), можно записать в виде

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \frac{2}{h} \int_0^h K_0 V_{x1} z^n dz = \frac{2K_0 V_{x1} h^n}{n+1}, \quad K_0 \approx 0,1 \div 1, \quad n \approx 0,15; \quad (3)$$

$$\sigma_z^2 = \frac{2}{h} \int_0^h K_z(z) dz = \frac{2K_1 h^m}{m+1}, \quad K_1 \approx 0,1 \div 3, \quad m \approx 1. \quad (4)$$

где V_{x1} – коэффициент, характеризующий скорость ветра при $z=1$.

Определив по формулам (3), (4) во всех узлах сетки (x_i, y_j, z_k) вспомогательные параметры $(\sigma_x(z_k), \sigma_y(z_k), \sigma_z(z_k))$, аппроксимируем интеграл суммой:

$$q(t, x_i, y_j, z_k) = \sum_{l=1}^T \frac{Q e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{(x_i-x_0-V_x(z_k)\Delta t)^2}{(\sigma_x(z_k))^2 l \Delta t} + \frac{(y_j-y_0)^2}{(\sigma_y(z_k))^2 l \Delta t} + \frac{(z_k-z_0)^2}{(\sigma_z(z_k))^2 l \Delta t} \right)}}{(\sqrt{2\pi l \Delta t})^3 \sigma_x(z_k) \sigma_y(z_k) \sigma_z(z_k)} \Delta t, \quad (5)$$

где $V_x(z) = V_{x_1} \left(\frac{z}{z_1}\right)^n$, где $z_1 = 1$; $T = \left[\frac{t}{\Delta t}\right]$, где t – время действия соответствующего источника; Δt – шаг дискретизации по времени, $t > 0$.

Для реализации гауссовой модели рассеяния примеси в атмосфере была составлена компьютерная программа на языке C++. Полученные результаты расчетов представлены в виде таблиц, а также визуально отражены на карте г. Красноярска. Один из результатов расчетов представлен на рисунке.

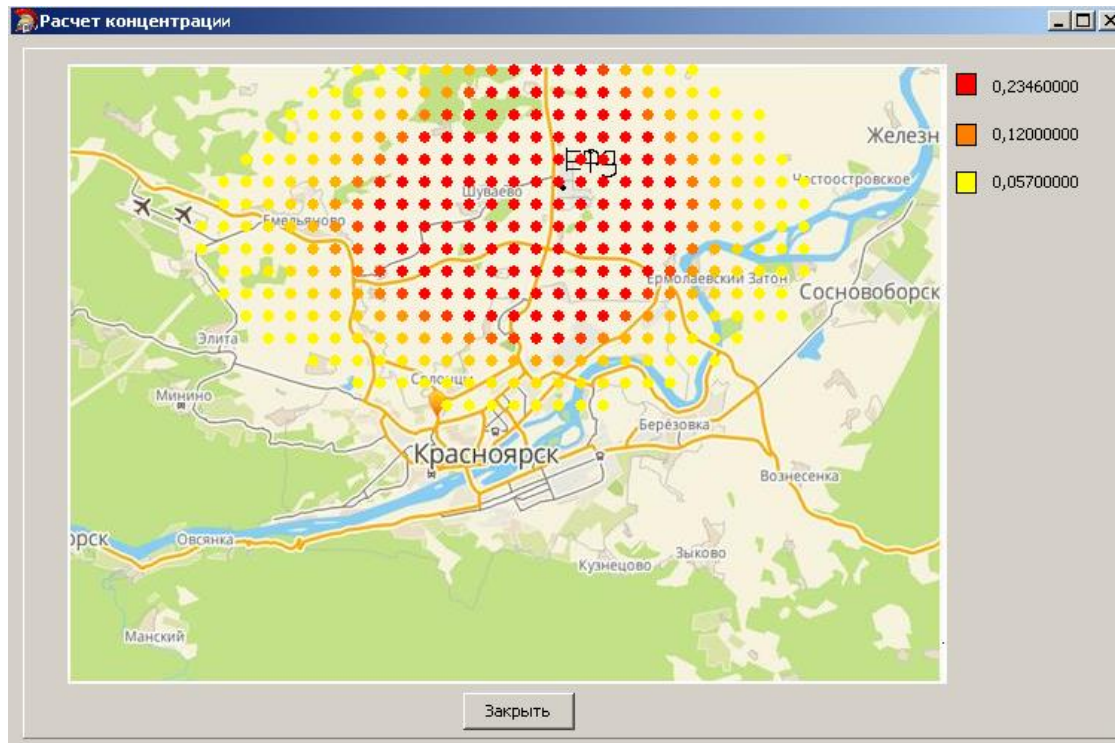


Рис. Пример визуального представления расчетов

Заметим, что гауссова модель рассеяния примеси дает результаты, хорошо согласующиеся с экспериментальными данными, но только для источников примеси, расположенных на небольшой высоте и действующих в течение небольшого промежутка времени. Поэтому наряду с приведенной моделью рассмотрена математическая модель, основанная на уравнении конвекции-диффузии:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + V_x \frac{\partial q}{\partial x} + V_y \frac{\partial q}{\partial y} + V_z \frac{\partial q}{\partial z} + \alpha q = \frac{\partial}{\partial x} K_x \frac{\partial q}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} K_y \frac{\partial q}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} K_z \frac{\partial q}{\partial z} + f(t, x, y, z), \quad (6)$$

с начальным $q_0(t_0, x, y, z) = \varphi(x, y, z)$ и граничными $K_z \frac{\partial q}{\partial z} = 0$ при $z = z_0$ условиями, где $V = \langle V_x, V_y, V_z \rangle$ – вектор скорости частиц примеси; α – ко-

эффицент, характеризующий химическую активность примеси; $f(t, x, y, z)$ – функция, характеризующая источник примеси.

Для численного решения уравнение (6) аппроксимируется схемой предиктор-корректор, которая имеет второй порядок аппроксимации по всем переменным и абсолютно устойчива.

Проведенные расчеты показывают, что велика вероятность формирования метеорологических условий, способствующих накоплению загрязняющих веществ в приземном слое атмосферы после строительства ЕФЗ. В этих условиях возникает риск повышения загрязнения атмосферного воздуха в г. Красноярске и близлежащих населенных пунктах.

УДК 517.9

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФУНКЦИЙ ИСТОЧНИКА СИСТЕМ УРАВНЕНИЙ СОСТАВНОГО ТИПА ДЛЯ НЕКОТОРЫХ НАЧАЛЬНО-КРАЕВЫХ ЗАДАЧ

В.Г. Копылова

Научный руководитель Ю.Я. Белов

Сибирский федеральный университет

В работе представлено решение задач идентификации функции источника одномерной системы двух уравнений в частных производных второго порядка, одно из которых является параболическим, а второе – эллиптическим. Рассмотрена система уравнений, полученная из исходной системы, в которой в эллиптическое уравнение добавлена производная по времени, содержащая малый параметр $\varepsilon > 0$. Исследованы задача Коши и вторая краевая задача. Изучению случая для первой краевой задачи посвящена работа [1]. Обратные задачи для эволюционных систем составного типа изучены в работах [2–5].

В полосе $G_{[0,T]} = \{(t, x) | 0 \leq t \leq T, x \in E_1\}$ рассматривается задача определения функций $(u^\varepsilon(t, x), v^\varepsilon(t, x), g_1^\varepsilon(t), g_2^\varepsilon(t))$, удовлетворяющих системе уравнений

$$\begin{cases} u_t^\varepsilon(t, x) + a_{11}(t)u^\varepsilon(t, x) + a_{12}v^\varepsilon(t, x) = \mu_1 u_{xx}^\varepsilon(t, x) + g_1^\varepsilon(t)f(t, x), \\ \varepsilon v_t^\varepsilon(t, x) + a_{21}(t)u^\varepsilon(t, x) + a_{22}v^\varepsilon(t, x) = \mu_2 v_{xx}^\varepsilon(t, x) + g_2^\varepsilon(t)F(t, x), \end{cases} \quad (1)$$

$\varepsilon - const, \varepsilon \in (0, 1]$,

начальным условиям

$$u^\varepsilon(0, x) = u_0(x), v^\varepsilon(0, x) = v_0(x), \quad (2)$$

и условиям переопределения

$$u^\varepsilon(t, x^0) = \varphi_1(t), \varphi_1 \in C^2[0, T], \quad (3)$$

$$v^\varepsilon(t, x^0) = \varphi_2(t), \varphi_2 \in C^2[0, T], \quad (4)$$

где $\varphi_1(t), \varphi_2(t)$ – заданные функции на $[0, T]$.

В (1) коэффициенты $\alpha_{ij}(t), i = 1, 2, j = 1, 2$, заданы на отрезке $[0, T]$, функции $f(t, x), F(t, x)$ заданы в $G_{[0, T]}$, $\mu_1, \mu_2 = \text{const} > 0$.

Пусть выполняются соотношения

$$|f(t, x^0)| \geq \delta_1 > 0, t \in [0, T], \delta_1 > 0 - \text{const}, \quad (5)$$

$$|F(t, x^0)| \geq \delta_2 > 0, t \in [0, T], \delta_2 > 0 - \text{const}. \quad (6)$$

Предположим выполнение следующих условий:

- условия согласования

$$u_0(x^0) = \varphi_1(0); \quad (7)$$

$$v_0(x^0) = \varphi_2(0); \quad (8)$$

- функции $\alpha_{ij}(t), i = 1, 2, j = 1, 2$ непрерывно дифференцируемы на отрезке $[0, T]$:

$$\alpha_{ij}(t) \in C^2[0, T], i = 1, 2, j = 1, 2; \quad (9)$$

- матрица

$$A(t) = \begin{pmatrix} a_{11}(t) & a_{12}(t) \\ a_{21}(t) & a_{22}(t) \end{pmatrix}$$

порождает симметрическую и коэрцитивную билинейную форму: $a(t, \xi, \chi) = (A(t)\xi, \chi)$:

$$a(t, \xi, \chi) = a(t, \chi, \xi), \forall \xi, \chi \in E_2, \\ a(t, \xi, \xi) \geq \kappa |\xi|^2, \forall \xi = (\xi_1, \xi_2) \in E_2, t \in [0, T], \kappa > 0 - \text{const}. \quad (10)$$

Относительно входных данных предполагаем, что они достаточно гладкие, имеют все непрерывные производные, входящие в следующие ниже соотношения и удовлетворяют им:

$$|a_{ij}(t)| \leq C, i = 1, 2, j = 1, 2, \quad (11)$$

$$\left| \frac{\partial^k}{\partial x^k} f(t, x) \right| + \left| \frac{\partial^k}{\partial x^k} F(t, x) \right| + \left| \frac{\partial^k}{\partial x^k} u_0(x) \right| + \left| \frac{\partial^k}{\partial x^k} v_0(x) \right| \leq C, k = 0, \dots, p + 6, \quad (12)$$

$$|\varphi(t)| + |\varphi'(t)| + |\varphi''(t)| \leq C, (t, x) \in G_{[0, T]}. \quad (13)$$

Предполагаем, что C – постоянная больше единицы, постоянная $p \geq 6$ – нечетное число.

Используя метод слабой аппроксимации и следуя работе [4], можно доказать следующую теорему.

Теорема 1. Пусть выполняются условия (5)–(13). Тогда существует и единственно решение $(u^\varepsilon(t, x), v^\varepsilon(t, x), g_1^\varepsilon(t), g_2^\varepsilon(t))$ задачи (1)–(4) в классе $Z(t)$

$$Z(T) = \{u^\varepsilon(t, x), v^\varepsilon(t, x), g_1^\varepsilon(t), g_2^\varepsilon(t) | u^\varepsilon(t, x) \in C_{t,x}^{1,p+4}(G_{[0,T]}), v^\varepsilon(t, x) \in C_{t,x}^{1,p+4}(G_{[0,T]}), g_1^\varepsilon(t) \in C([0, T]), g_2^\varepsilon(t) \in C([0, T])\}, \quad (14)$$

удовлетворяющее соотношениям

$$\sum_{k=0}^{p+4} \left(\left| \frac{\partial^k}{\partial x^k} u^\varepsilon(t, x) \right| + \left| \frac{\partial^k}{\partial x^k} v^\varepsilon(t, x) \right| \right) + \|g_1^\varepsilon(t)\|_{C^1[0, T]} + \|g_2^\varepsilon(t)\|_{C^1[0, -]} + \left| \frac{\partial}{\partial t} u^\varepsilon(t, x) \right| + \left| \frac{\partial}{\partial t} v^\varepsilon(t, x) \right| \leq C(\varepsilon), (t, x) \in G_{[0, T]}. \quad (15)$$

Предположение 1. Предположим, что входные данные $u_0(x), v_0(x), f(t, x), F(t, x)$ – периодические по переменной x функции с периодом $2l > 0$, точка $x^0 \in (0, l)$, и ряды

$$\begin{aligned} u_0 &= \sum_{i=0}^{\infty} \alpha_i \cos \frac{i\pi}{l} x, \\ v_0 &= \sum_{i=0}^{\infty} \beta_i \cos \frac{i\pi}{l} x, \\ f(t, x) &= \sum_{i=0}^{\infty} f_i(t) \cos \frac{i\pi}{l} x, \\ F(t, x) &= \sum_{i=0}^{\infty} F_i(t) \cos \frac{i\pi}{l} x \end{aligned}$$

сходятся равномерно вместе со своими производными по x до порядка $p + 4$ соответственно в $[0, l]$ и $\bar{Q}_T = [0, l] \times [0, T]$.

Доказана теорема.

Теорема 2. При выполнении предположения 1 и условий теоремы 1 при любом фиксированном $\varepsilon > 0$ компоненты $u^\varepsilon, v^\varepsilon$ решения $(u^\varepsilon, v^\varepsilon, g_1^\varepsilon, g_2^\varepsilon)$ задачи (1)–(4) являются периодическими функциями по переменной x с периодом $2l$ и удовлетворяют условиям

$$\frac{\partial^{2m+1} u^\varepsilon(t, 0)}{\partial x^{2m+1}} = \frac{\partial^{2m+1} u^\varepsilon(t, l)}{\partial x^{2m+1}} = \frac{\partial^{2m+1} v^\varepsilon(t, 0)}{\partial x^{2m+1}} = \frac{\partial^{2m+1} u^\varepsilon(t, l)}{\partial x^{2m+1}} = 0, \quad (16)$$

$$m = 0, 1, \dots, \frac{p}{2} + 1.$$

Замечание 1. Из (15) и системы (1) следует, что производные $\frac{\partial^m}{\partial t^m} \frac{\partial^k}{\partial x^k} u^\varepsilon(t, x), \frac{\partial^m}{\partial t^m} \frac{\partial^k}{\partial x^k} v^\varepsilon(t, x), 2m + k \leq p + 4$ существуют и непрерывны в $G_{[0, T]}$ и

$$\frac{\partial^m}{\partial t^m} \frac{\partial^k}{\partial x^k} u^\varepsilon(t, x) + \frac{\partial^m}{\partial t^m} \frac{\partial^k}{\partial x^k} v^\varepsilon(t, x) \leq C(\varepsilon), (t, x) \in G_{[0, T]}. \quad (17)$$

В результате работы были получены равномерные по $\varepsilon \in (0, 1]$ оценки

$$\|u_j^\varepsilon\|_{C(\bar{Q}_T)} + \|v_j^\varepsilon\|_{C(\bar{Q}_T)} \leq C, j = 0, \dots, p + 2, \quad (18)$$

$$\|u_j^{\varepsilon'}\|_{C(\bar{Q}_T)} + \|v_j^{\varepsilon'}\|_{C(\bar{Q}_T)} \leq C, j = 0, \dots, p. \quad (19)$$

В силу неравенств (18), (19) множества $u_j^\varepsilon, v_j^\varepsilon, j = 0, \dots, p + 2$ удовлетворяют условиям теоремы Арцела. Следовательно, существует подпоследовательность (u^μ, v^μ) последовательности векторов $(u^\varepsilon, v^\varepsilon)$ и вектор-функция (u, v) такие, что при $\mu \rightarrow 0$

$$u_j^\mu \rightarrow u_j, v_j^\mu \rightarrow v_j, \text{ в } C(\bar{Q}_T), j = 0, \dots, p. \quad (20)$$

Переходя к пределу при $\mu \rightarrow 0$ в системе (1) (при $\varepsilon = \mu$) и учитывая при этом оценку (19) (при $j = 0$), в силу (20) получим, что вектор (u, v) удовлетворяет в \bar{Q}_T системе уравнений

$$\begin{cases} u_t(t, x) + a_{11}(t)u(t, x) + a_{12}v(t, x) = \mu_1 u_{xx}(t, x) + g_1(t)f(t, x), \\ a_{21}(t)u(t, x) + a_{22}v(t, x) = \mu_2 v_{xx}(t, x) + g_2(t)F(t, x) \end{cases} \quad (21)$$

начальным условиям

$$u(0, x) = u_0(x), v(0, x) = v_0(x), x \in [0, l], \quad (22)$$

краевым условиям

$$u_x(t, 0) = v_x(t, 0) = u_x(t, l) = v_x(t, l) = 0, \quad (23)$$

и условиям переопределения

$$\begin{aligned} u(t, x^0) &= \varphi_1(t), \\ v(t, x^0) &= \varphi_2(t). \end{aligned} \quad (24) \quad (25)$$

Доказаны следующие теоремы.

Теорема 3. Пусть выполняются условия (3)–(13), (16), (17) и предположение 1. Тогда решение (u, v, g_1, g_2) задачи (21)–(25) существует и единственно в классе $X(T)$, где

$$\begin{aligned} X(T) = \\ \{u(t, x), v(t, x), g_1(t), g_2(t) | u(t, x) \in C_{t,x}^{1,p}(\bar{Q}_T), v(t, x) \in C_{t,x}^{1,p}(\bar{Q}_T), g_1(t) \in C([0, T]), g_2(t) \in C([0, T])\}. \end{aligned} \quad (26)$$

Теорема 4. Пусть выполняются условия теоремы 3. Тогда решение (u, v, g_1, g_2) задачи

$$\begin{cases} u_t(t, x) + a_{11}(t)u(t, x) + a_{12}v(t, x) = \mu_1 u_{xx}(t, x) + g_1(t)f(t, x), \\ a_{21}(t)u(t, x) + a_{22}v(t, x) = \mu_2 v_{xx}(t, x) + g_2(t)F(t, x), \end{cases}$$

$$u(0, x) = u_0(x), v(0, x) = v_0(x), x \in [0, l],$$

$$u(t, x^0) = \varphi_1(t), v(t, x^0) = \varphi_2(t),$$

существует и единственно в классе $X(T)$:

$$\begin{aligned} X(T) \\ = \left\{ u(t, x), v(t, x), g_1(t), g_2(t) | u(t, x) \in C_{t,x}^{1,p}(G_{[0,T]}), v(t, x) \in C_{t,x}^{1,p}(G_{[0,T]}), g_1(t) \in C([0, T]), g_2(t) \in C([0, T]) \right\}. \end{aligned}$$

При $\varepsilon \rightarrow 0$

$u_j^\varepsilon \rightarrow u_j, v_j^\varepsilon \rightarrow v_j$, равномерно в $G_{[0,T]}$, $j = 0, \dots, p$,

$g_1^\varepsilon \rightarrow g_1, g_2^\varepsilon \rightarrow g_2$, равномерно в $C([0, T])$.

$|u^\varepsilon(t, x) - u(t, x)| \leq \varepsilon^{\frac{1}{2}}C, (t, x) \in G_{[0,T]}$,

$\max_{[0,T]} |g_1^\varepsilon(t) - g_1(t)| \leq \varepsilon^{\frac{1}{2}}C$.

Список литературы

Belov Yu.Ya., Kopylova V.G. On some identification problem for source function to one semievolutionary system // Journal of Inverse and Ill-posed Problems. 20 (2012). № 5–6. P. 723–743.

Prilepko A.I., Orlovsky D.G., Vasin I.A. Methods for Solving Inverse Problems in Mathematical Physics // New York, Marcel Dekkar, Inc., 1999.

Белов Ю.Я. О задаче идентификации функции источника для одной полуэволюционной системы // Журнал Сибирского федерального университета. Серия: Математика и физика. 2010. Т. 3. С. 487–499.

Вячеславова П.Ю., Сорокин Р.В. Задача идентификации коэффициентов при младших членах в системе составного типа // Журнал Сибирского федерального университета. Серия: Математика и физика. 2009. Т. 2. С. 288–297.

Сорокин Р.В., Шипина Т.Н. О разрешимости одной обратной задачи для системы составного типа // Вычислительные технологии. 2003. С. 139–146.

Белов Ю.Я., Кантор С.А. Метод слабой аппроксимации. Красноярск: КрасГУ, 1990.

Соболев С.Л. Введение в теорию кубатурных формул. М.: Наука, 1974.

Яненко Н.Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск: Наука, 1967.

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГИБРИДНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ
К РЕШЕНИЮ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ
ДЛЯ УРАВНЕНИЯ НЕРАЗРЫВНОСТИ
МОДИФИЦИРОВАННЫМ МЕТОДОМ ТРАЕКТОРИЙ**

А.А. Ефремов

Научный руководитель Е.Д. Кареева

Сибирский федеральный университет

Уравнение неразрывности входит в состав многих математических моделей сплошной среды. Несмотря на то, что данная проблема находится под пристальным вниманием мирового математического сообщества уже очень долго, существующие сегодня явные численные методы ее решения накладывают сильные ограничения на шаг по времени.

Одним из возможных подходов к численному интегрированию уравнения неразрывности является метод траекторий. Использование этого метода дает явную по времени разностную схему, однако данная модификация метода налагает более мягкие ограничения на шаг по времени по сравнению с явными разностными схемами.

Данный метод позволяет вычислять значение ρ в уравнениях следующего вида:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = f(t, x, y).$$

Следующая разностная схема позволяет вычислить ρ :

$$\frac{1}{\tau} \left(\rho_{ij}^k - \frac{1}{h_x h_y} \int_{d\Omega_{ij}} \rho_h^{k-1} d\Omega_{ij} \right) = f_{ij}^k.$$

Предположим, что известно точное решение, а также функции скорости u и v :

$$\rho(t, x, y) = 1,1 + \sin(t * x * y), \quad N = 10 \cdot 2^n, \quad n = 0, \dots, 7, \quad \tau = \frac{h}{5}, \quad t \in [0, 1];$$

$$u(t, y, x) = 100 \cdot y(1 - y) \arctg(x);$$

$$v(t, x, y) = \arctg(x(1 - x)) \cdot y(1 - y) \frac{1+t}{10}.$$

Для того чтобы проверить модификацию метода траекторий на практике, была написана последовательная программа-решатель. Также, поскольку в явных разных схемах отсутствует зависимость по данным между временными слоями, данный метод заранее предполагает эффективную параллельную реализацию. С целью исследовать различные подходы к распараллеливанию с использованием гибридных вычислительных систем, были дополнительно написаны две параллельные реализации данного метода с использованием технологий OpenMP и NVIDIA CUDA. Также целью работы является оценка производительности при использовании различных технологий параллельного программирования.

Результаты сравнения производительности представлены на рисунке.

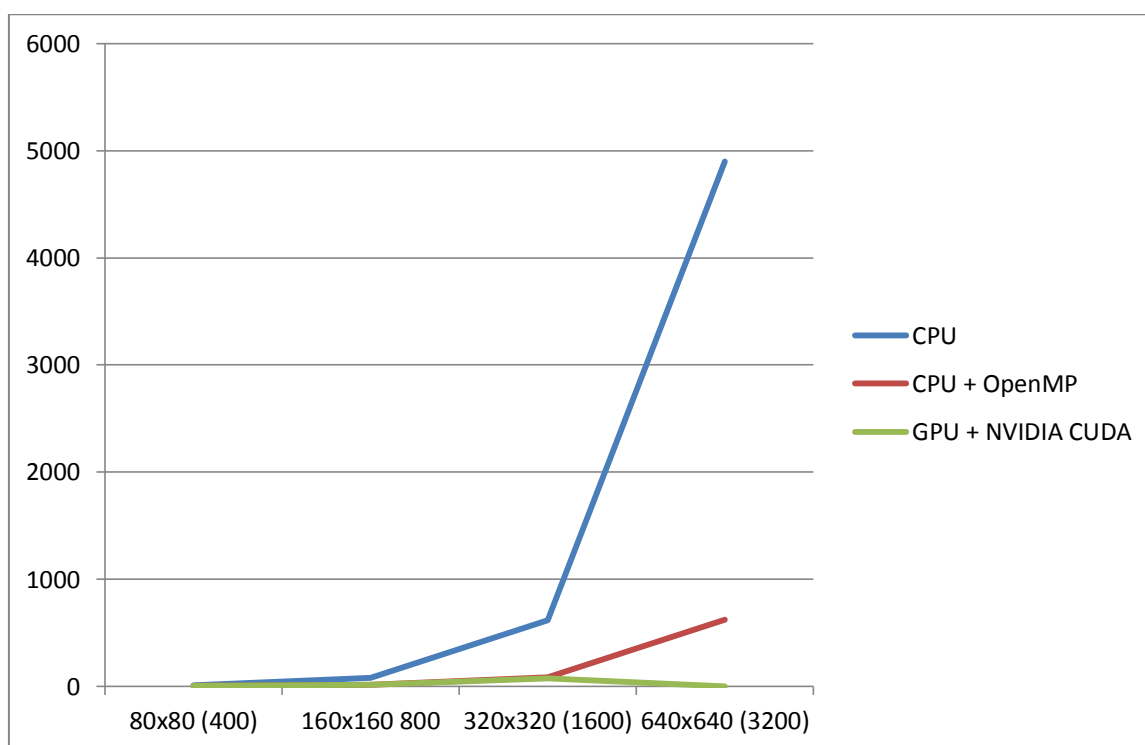


Рис. Сравнение времени расчетов CPU, CPU + OpenMP, GPU в секундах.
Оптимизированный вариант (-O3)

Таблица 1. Время расчетов в секундах

	CPU	CPU + OpenMP	GPU + NVIDIA CUDA
80×80 (400)	9,8	1,783	2,55
160×160 (800)	77,6	12,88	13,06
320×320 (1600)	616,9	85,54	74,02
640×640 (3200)	4900,0	622,47	*

Таблица 2. Ускорение расчетов с использованием различных техник распараллеливания

	CPU / OpenMP	OpenMP / GPU	CPU / GPU
80×80 (400)	5,5	0,698327031	3,847261
160×160 (800)	6,03	0,986316344	5,9476751
320×320 (1600)	7,2	1,155657914	8,3344895
640×640 (3200)	7,87	*	*

Символ ‘*’ в таблицах означает, что расчеты провести не удалось.

При создании параллельной версии программы на GPGPU возникли трудности с масштабируемостью. При запуске расчетных сеток размером более, чем 640 × 640 элементов, возникли проблемы с ограничениями GPGPU Nvidia Telsa C2050. В дальнейшем планируется доработать подход к распараллеливанию на GPGPU. В частности изменить функции создания сетки для CUDA ядра, а также вынести часть расчетов в дополнительные ядра.

Численные эксперименты проводились на высокопроизводительном вычислительном сервере Flagman RX240T8.2. Данный сервер расположен в ИВМ СО РАН. Ниже приведены основные характеристики сервера:

- процессоры: 2.93-3.33GHz Intel® Xeon® X5670 Westmere-EP SixCore w/HyperThreading 6.4GT/s QPI, 12MB Smart cache (2 шт.);
- установленная память – 40GB DDR-III PC3-10600 ECC Registered;
- GPGPU: nVidia® Tesla® C2050 PCI-Express ×16 3072 MB GDDR5 (8 шт.).

Графические ускорители Tesla C2050 обладают следующими характеристиками:

- количество CUDA ядер, шт: 448;
- пропускная способность, Гб/с: 144;
- объем видеопамати, Мб: 3072;
- шина видеопамати, бит: 512;
- теоретическая производительность (двойная точность), гигафлопс: 515,2.

Для реализации алгоритма использовалось следующее ПО:

- ОС: Ubuntu Linux 11.04;
- языки программирования: C/C++, CUDA C/C++;
- компиляторы: GNU GCC 4.5.2, NVCC release 5.0, ICPC 13.1.0;
- дополнительное ПО: CUDA GDB.

РАЗРАБОТКА ИГРЫ «БЫКИ И КОРОВЫ»

Л.Ф. Губайдулина, В.А. Дюфрейн
Научный руководитель И.В. Баранова

*Сибирский федеральный университет,
Общеобразовательное учреждение гимназия № 13 г. Красноярск*

В рамках научно-исследовательской работы было разработано программное приложение, реализующее игру «Быки и коровы». Целью создания программы являлась демонстрация умений и навыков, полученных в результате научно-исследовательской работы, заключающейся в изучении теории программирования и технологии разработки программных приложений, а также применении современных информационных технологий для решения практических задач обработки данных и математического моделирования.

Разработке программы предшествовало изучение основ языка программирования: основных типов данных; базовых конструкции языка программирования (следования, условий и циклов), структур данных и методов их обработки и реализации; алгоритмов поиска, обработки и сортировки данных, методов и технологии программирования. А также приобретение навыков работы в выбранной среде программирования (Delphi), разработки и реализации алгоритмов на языке программирования высокого уровня, применение изученных методов и технологий для решения прикладных задач.

Формулировка задачи

В рамках данной работы была поставлена цель – написать программу, реализующую логическую игру «Быки и коровы», рассчитанную над для двух игроков. В нашем случае в игре участвуют пользователь и компьютерный игрок. Компьютерный игрок загадывает число, состоящее из четырех неповторяющихся цифр (оно генерируется в начале игры). Игрок должен угадать число за меньшее количество попыток.

Игрок вводит число из четырех неповторяющихся цифр. Противник сообщает в ответ, сколько цифр угадано в заданном числе. Результат отгадывания выражается в условных единицах – **быках** и **коровах**.

Бык – цифра входит в число и стоит на своем месте.

Корова – цифра входит в число, но находится не на своем месте.

Пример 1. Пусть компьютер задумал число 5123. Игрок ввел число 1234. Результат: 3 коровы и 0 быков (т. к. цифры 1, 2, 3 входят в число, но ни одна из них не стоит на своем месте).

Пример 2. Пусть компьютер задумал число 3219. Игрок ввел число 2310. Результат: 2 коровы и 1 бык (т. е. цифры 2, 3 входят в число, но ни одна из них не стоит на своем месте, а 1 – стоит на своем месте).

В процессе игры необходимо вести статистику – сколько попыток сделал отгадывающий игрок (в нашем случае это человек). Игра заканчивается, когда число отгадано. В этом случае выводится загаданное число и количество попыток, за которое оно было угадано.

На данный момент известно несколько усложненных вариаций игры:

- загадывается число из 5 (или больше) цифр;
- загадывается последовательность из 4 цветных фишек, причем цвета могут повторяться (игра Mastermind – «Гениальный отгадчик»);
- усложненный вариант Mastermind, когда используется последовательность из 5, 6 или большего количества цветных фишек;
- загадывается слово, обычно из 5 букв (в именительном падеже единственном числе по правилам игры «Балда»), и задача противника – угадать его, используя в качестве попыток такие же корректные слова из словаря русского языка.

В нашей программе мы реализуем описанный выше классический вариант игры «Быки и коровы».

Проводится алгоритм нашей программы, выполняющей действия компьютерного игрока и проверку результатов отгадывания, выполненного человеческим игроком. Алгоритм выглядит следующим образом:

1. Генерируется случайное число с помощью генератора псевдослучайных чисел. Так как по правилам игры цифры в нем не должны повторяться, то мы генерируем четыре числа в пределах от 0 до 9 (включительно), соответственно для тысяч, сотен, десятков и единиц. Обязательно выполняется проверка на совпадение с предыдущими сгенерированными цифрами. (Кроме того, цифра для тысяч не должна быть равна 0). В переменную n , хранящую число попыток, задаем значение равное нулю.

2. Выводим для игрока сообщение на экран о том, что число загадано.

3. Просим ввести пользователя свой вариант.

4. Считываем число пользователя. Увеличиваем значение переменной n с числом попыток на 1 ($n = n + 1$).

5. Выполняем сравнение числа пользователя с загаданным числом. Для этого разбиваем его на цифры для тысяч, сотен, десятков и единиц.

6. Ищем быков. Парно цифры для тысяч, сотен, десятков и единиц из числа пользователя сравниваем с соответствующими разрядами загаданного числа. Количество совпадений заносим в переменную b – число быков.

7. Ищем коров. Причем делаем это для тех цифр из числа пользователя, которые не являются быками. Берем цифру и сравниваем по очереди со всеми цифрами загаданного числа. Количество совпадений заносим в переменную s – число коров. Повторяем эту процедуру для всех цифр, не являющихся быками.

8. Выводим на экран значения переменных b (число быков) и s (число коров).

9. Если $b = 4$, то выводим сообщение – «Вы отгадали число s n попыток. Это –» и пишем загаданное число. В противном случае, игра продолжается, и выполняется переход на пункт 3 алгоритма.

В дальнейшем предполагается реализовать данную игру для ситуации отгадывания числа компьютерным игроком (когда число загадывает человек, а компьютерный игрок пытается его угадать).

УДК 517.55

НЕКЛАССИЧЕСКИЕ ЛОГИЧЕСКИЕ ЭЛЕМЕНТЫ И КВАНТОВЫЕ КОМПЬЮТЕРЫ

А.С. Керп, А.С. Лукоткин

Научные руководители А.К. Цих, В.Р. Куликов

Сибирский федеральный университет

Введение

Квантовая информатика – новый раздел науки, возникший на стыке квантовой механики, алгоритмов и теории информации. В квантовой информатике изучаются общие принципы и законы, управляющие динамикой сложных квантовых систем. Квантовый компьютер – вычислительное устройство, работающее на основе принципов квантовой механики.

Идея построения квантового компьютера была предложена в 1980 г. советским математиком Ю.И. Маниным. Эту идею поддержали физики, в частности, П. Бениоф и Нобелевский лауреат Р. Фейнман.

Необходимость в квантовом компьютере возникает тогда, когда мы пытаемся исследовать методами физики сложные многочастичные системы, подобные биологическим.

На данное устройство возлагаются большие надежды, поэтому ведется активная деятельность по его созданию. После открытия квантовой физики человеку потребовался новый инструмент для исследований. И

именно квантовый компьютер стал современным устройством, позволяющим изучать различные явления и вычислять необходимые данные. Пока удалось построить только ограниченный компьютер, но этого хватило, чтобы убедиться в необходимости полноценного квантового компьютера.

Квантовый компьютер используют для вычисления неклассических алгоритмов, которые реализуются посредством неклассических логических элементов.

Логический элемент – устройство ЭВМ, выполняющее одну определенную операцию над входными сигналами согласно правилам алгебры логики (восходящим к Аристотелю). Например, логический элемент, отражающий переход к отрицанию, изображается следующей схемой (рис. 1).

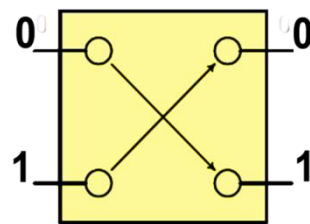


Рис. 1

Поскольку в логике отрицание высказывания образуется с помощью частицы НЕ, изображенный элемент будем обозначать символом НЕ.

В рамках действительного анализа нельзя построить логический элемент $\sqrt{НЕ}$, т. е. такой, для которого $\sqrt{НЕ} \times \sqrt{НЕ} = НЕ$, где под умножением подразумевается последовательное применения элемента. Иными словами, даже в рамках многозначной логики, основанной на классической теории вероятности, уравнение $X \times X = НЕ$ не разрешимо. Докажем это.

На рис. 2 представлена техническая схема, отражающая это уравнение.

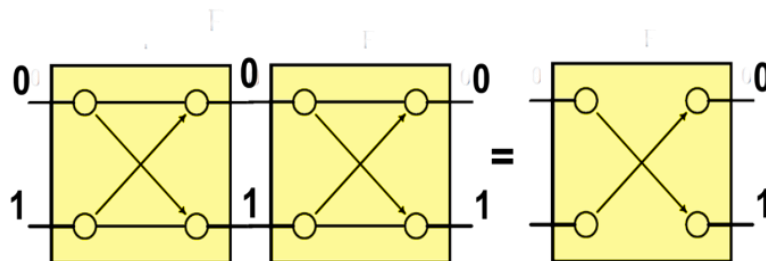


Рис. 2

Здесь слева подразумеваются две копии одного (неизвестного) логического элемента X .

Предполагается, что переходы $0 \rightarrow 0, 0 \rightarrow 1, 1 \rightarrow 0, 1 \rightarrow 1$ происходят с вероятностями $P_{00}, P_{01}, P_{10}, P_{11}$ (см. рис. 3).

Для элемента «НЕ» имеем

$$P_{00} = P_{11} = 0; P_{01} = P_{10} = 1.$$

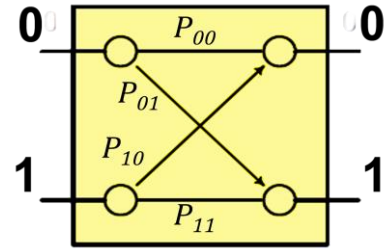


Рис. 3

Следовательно, для удовлетворения равенства $X \times X = НЕ$ получаем систему уравнений:

$$P_{00}P_{00} + P_{01}P_{10} = 0;$$

$$P_{00}P_{01} + P_{01}P_{11} = 1;$$

$$P_{10}P_{00} + P_{11}P_{10} = 1;$$

$$P_{11}P_{11} + P_{10}P_{01} = 0.$$

Поскольку $P_{ij} \geq 0$, получаем $P_{00} = P_{11} = 0$, тем самым $P_{00}P_{01} + P_{01}P_{11} = 1$ или $P_{10}P_{00} + P_{11}P_{10} = 1$ сводится к $0 = 1$. Таким образом, данная схема нереализуема для вещественных неотрицательных значений вероятностей P_{ij} .

Путь к реализации равенства подсказывает квантовая механика, в которой под амплитудой вероятностью перехода $i \rightarrow j$ подразумевает комплексное число c_{ij} , для которого $P_{ij} = |c_{ij}|^2$. Таким образом, если в приведенной системе уравнений заменить P_{ij} на комплексные числа c_{ij} , то тогда следует рассмотреть уравнения

$$P(0 \rightarrow 0) = |c_{00}c_{00} + c_{01}c_{10}|^2$$

$$P(0 \rightarrow 1) = |c_{00}c_{01} + c_{01}c_{11}|^2$$

$$P(1 \rightarrow 0) = |c_{10}c_{00} + c_{11}c_{10}|^2$$

$$P(1 \rightarrow 1) = |c_{11}c_{11} + c_{10}c_{01}|^2$$

Теперь рассмотрим систему уравнений:

$$\begin{cases} 0 = |c_{00}c_{00} + c_{01}c_{10}|^2 \\ 1 = |c_{00}c_{01} + c_{01}c_{11}|^2 \\ 1 = |c_{10}c_{00} + c_{11}c_{10}|^2 \\ 0 = |c_{11}c_{11} + c_{10}c_{01}|^2 \end{cases} \quad (*)$$

Некоторые примеры корней данной системы уравнений были представлены в книге Гуца [2]:

$$c_{00} = c_{11} = i/\sqrt{2}; c_{01} = e^{-i\alpha}/\sqrt{2}; c_{10} = e^{i\alpha}/\sqrt{2}.$$

Ранее нами была доказана теорема о полном решении системы (*):

Теорема 1. Все комплексные решения системы (*) параметризуются в следующем виде через 2 параметра $\alpha, \beta \in [0; 2\pi]$: $c_{00} = c_{11} = e^{i\alpha}/\sqrt{2}$, $c_{01} = e^{i\beta}/\sqrt{2}$, $c_{10} = e^{i(\pi+2\alpha-\beta)}/\sqrt{2}$.

Цель данной работы состоит в обобщении **теоремы 1**, т. е. в описании новых неклассических логических элементов.

В соответствии с поставленной целью, были рассмотрены следующие задачи:

1. Найти математический язык для реализации последовательных применений неклассического элемента X , т. е. X^2, X^3, \dots
2. Найти $\sqrt[n]{HE}, n \in \mathbb{N}$, т. е. указать решения логического уравнения $X^n = HE$.
3. Выяснить вопрос о всех решениях уравнения $X^n = HE$ для $n \in \mathbb{N}$.

По сути, задача о поиске логического элемента \sqrt{HE} свелась к нахождению матрицы, квадрат которой равен $HE = \begin{pmatrix} 0 & e^{i(\alpha-\beta)} \\ e^{i(\alpha+\beta)} & 0 \end{pmatrix}$, где $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$. Такой способ представления матрицы HE позволит нам записать равенство $X^2 = HE$ в виде матричного уравнения

$$\begin{pmatrix} c_{00} & c_{01} \\ c_{10} & c_{11} \end{pmatrix}^2 = \begin{pmatrix} c_{00}c_{00} + c_{01}c_{10} & c_{00}c_{01} + c_{01}c_{11} \\ c_{10}c_{00} + c_{11}c_{10} & c_{11}c_{11} + c_{10}c_{01} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & e^{i(\alpha-\beta)} \\ e^{i(\alpha+\beta)} & 0 \end{pmatrix}.$$

Первое утверждение нашего исследования составляет:

Лемма 1. Последовательное применение n раз неклассического элемента X соответствует возведению в n -ю степень комплексной матрицы $C = \begin{pmatrix} c_{00} & c_{01} \\ c_{10} & c_{11} \end{pmatrix}$, т. е. X^n соответствует C^n .

Основным результатом данной работы является:

Теорема 2. Решениями матричного уравнения $X^n = HE$ являются следующие матрицы:

$$X_{g,p} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} e^{i\frac{\alpha+\pi(2g+p)}{n}} (1 + e^{i\frac{\pi}{n}}) & \frac{1}{2} e^{i(\frac{\alpha+\pi(2g+p)}{n} - \beta - \pi p)} (1 - e^{i\frac{\pi}{n}}) \\ \frac{1}{2} e^{i(\frac{\alpha+\pi(2g+p)}{n} + \beta + \pi p)} (1 - e^{i\frac{\pi}{n}}) & \frac{1}{2} e^{i\frac{\alpha+\pi(2g+p)}{n}} (1 + e^{i\frac{\pi}{n}}) \end{pmatrix},$$

где $g = 0, \dots, n-1; p = 0, 1$.

При нечетных n появляется дополнительный набор решений:

$$X'_{g,p} = \begin{pmatrix} 0 & e^{i(\frac{\alpha+2\pi(2g+p)}{n}-\beta-\pi p)} \\ e^{i(\frac{\alpha+\pi(2g+p)}{n}+\beta+\pi p)} & 0 \end{pmatrix}.$$

Для доказательства **теоремы 2** мы задействуем следующие утверждения:

Лемма 2. Матрица $X = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}e^{i\frac{\alpha}{n}}(e^{i\frac{\pi}{n}} + 1) & \frac{1}{2}e^{i(\frac{\alpha}{n}-\beta)}(1 - e^{i\frac{\pi}{n}}) \\ \frac{1}{2}e^{i(\frac{\alpha}{n}+\beta)}(1 - e^{i\frac{\pi}{n}}) & \frac{1}{2}e^{i\frac{\alpha}{n}}(e^{i\frac{\pi}{n}} + 1) \end{pmatrix}$

удовлетворяет матричному уравнению $X^n = HE$.

Лемма 3. Матрица $X' = \begin{pmatrix} 0 & e^{i(\frac{\alpha}{n}-\beta)} \\ e^{i(\frac{\alpha}{n}+\beta)} & 0 \end{pmatrix}$ удовлетворяет матричному уравнению $X^n = HE$, при нечетных $n=2l+1$.

Доказательство лемм 2 и 3 основано на принципе математической индукции по степеням матриц X и X' .

Кроме того, если прибавить к показателям элементов матрицы HE числа, кратные $2\pi i$, то матрица HE не изменится. Однако подобный сдвиг изменит матрицы X и X' . Всевозможные сдвиги породят $2n$ различных матриц. Обозначим их $X_{g,p}$ и $X'_{g,p}$, где $g = 0, \dots, n-1$; $p = 0, 1$.

Полный текст доказательств лемм 1–3 мы здесь опускаем, однако можем сделать важный комментарий.

В случае $n = 2, 3, 4$ **теорема 2** предоставляет полный список решений логического уравнения $X^n = HE$. На основании этого наблюдения нами сформулирована

Гипотеза: Теорема 2 предоставляет полный список решений логического уравнения $X^n = HE$.

Список литературы

1. Мальцев А.И. Основы линейной алгебры. М.: Государственное издательство технико-теоретической литературы, 1956.

2. Гуц А.К. Комплексный анализ и информатика: учеб. пособие. Омск: Министерство образования Российской Федерации, Омский государственный университет; кафедра информационной безопасности, 2002. 115 с.

РАЗРАБОТКА САЙТА «ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ПРОСТРАНСТВА»

А.А. Никулина

Научный руководитель И.В. Баранова

*Сибирский федеральный университет,
Общеобразовательное учреждение лицей № 7 г. Красноярск*

В рамках научно-исследовательской работы был разработан сайт «Топологические пространства». Целью создания сайта является демонстрация умений и навыков, полученных в результате научно-исследовательской работы, заключающейся в изучении современных технологий разработки и сопровождения сайтов и web-приложений.

Разработке сайта предшествовало изучение основ языка гипертекстовой разметки HTML (синтаксиса языка, основных конструкций языка, структуры html-документа, основных содержательных и декларативных элементов языка); овладение навыками создания кода программы на языке HTML и ее реализации в среде программирования; изучение основных макетов верстки сайтов; приобретение навыков выбора макета; реализация способов навигации по сайту и ознакомление с основными правилами web-дизайна; задание свойств стилей в каскадных таблицах стилей CSS для управления цветом, выравниванием, размером, шрифтом, фоном и другими свойствами элемента html-документа, а также изучение основных возможностей редактора Adobe Dreamweaver и создание web-документов и их стилей с помощью данного редактора.

На сайте представлена информация о топологических типах поверхностей. Приведены понятия поверхности, топологического типа поверхности. Указаны основные характеристики поверхности. Рассматриваются односторонние и двусторонние поверхности. Приведена классификация поверхностей с точки зрения их топологического строения:

- замкнутые и открытые,
- ориентируемые и неориентируемые.

Подробно рассматриваются общий вид, свойства и способы задания следующих топологических объектов: лента Мебиуса, бутылка Клейна, тор, поверхность Кипренского, сфера Александра и ряд других. Также приводятся некоторые интересные факты, связанные с данными поверхностями.

Целевой аудиторией сайта является широкий круг пользователей: студенты математических и технических специальностей высших учебных заведений, школьники физико-математических классов общеобразовательных учреждений и все, интересующиеся математикой.

В состав сайта входят 12 web-документов, общий объем которых превышает 10 страниц обычного печатного текста. Сайт состоит из 10 крупных разделов, некоторые из которых включают в себя подразделы. Перечислим основные разделы сайта:

- 1) главная страница,
- 2) топологические поверхности,
- 3) лента Мебиуса,
- 4) тор,
- 5) бутылка Клейна,
- 6) поверхность Кипренского,
- 7) сфера Александра,
- 8) ожерелье Антуана,
- 9) галерея топологических объектов,
- 10) ссылки и литература.

На главной странице приводится информация о названии и назначении сайта. В разделе «Топологические поверхности» приводятся понятия поверхности, топологических поверхностей, односторонних и двусторонних поверхностей, указываются основные характеристики и приводится классификация поверхностей. В последующих разделах (лента Мебиуса, тор, бутылка Клейна, поверхность Кипренского, сфера Александра, ожерелье Антуана и т. д.) рассматриваются общий вид, свойства и способы задания соответствующих топологических объектов. В разделе галерея топологических объектов приводятся изображения различных интересных топологических объектов. В последнем разделе указаны ссылки на интересные и полезные сайты по топологии, а также список использованной литературы.

Сайт «Топологические пространства» был реализован на языке гипертекстовой разметки HTML. Верстка страниц сайта осуществлялась частично с помощью редактора Adobe Dreamweaver, частично – вручную.

В качестве инструмента для основы макета каждой страницы использовались таблицы разметки. Благодаря использованию таблиц с колонками относительной ширины, страницы расширяются или сжимаются в соответствии с размером дисплея пользователя и размером окна браузера. В качестве макета был выбран один из наиболее распространенных макетов разметки на основе таблиц – двухколоночный макет с плавающей шириной и с шапкой. В шапке находится логотип и название сайта. В левой колонке располагается навигационное меню, а правой – основная информация.

Навигация по сайту осуществляется с помощью меню, в котором расположены ссылки на соответствующие страницы сайта. Меню сайта выполняет одновременно две функции: служит для навигации по страни-

цам и позволяет пользователю ознакомиться с содержанием сайта. Оно существенно экономит время для поиска нужной информации и перехода к ней. В данном сайте используется вертикальное меню, находящееся в левой колонке таблицы разметки. В нем находятся ссылки на страницы сайта. Структура меню полностью идентична структуре разделов сайта, приведенной выше.

Одним из правил web-дизайна является то, что выбранный стиль сайта должен соответствовать содержанию. Разработанный сайт относится к научно-популярной категории, поэтому выбранная цветовая гамма значительно строже, чем у коммерческих сайтов. Вследствие категории сайта, а также из-за следования правилу эргономики были выбраны светлые цвета для фона сайта и темные для текста.

Все страницы сайта оформлены в едином стиле и цветовой гамме. Определены цвета фона, основного текста, шрифтов, гиперссылок, заголовков, абзацев и т. д. Для удобства работы была создана внешняя таблица стилей, в которой были прописаны все указанные свойства перечисленных элементов.

Сайт содержит большое множество иллюстраций и практических примеров.

УДК 519.68

**СИСТЕМА ПОДДЕРЖКИ ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЙ
МНОГОКРИТЕРИАЛЬНОГО ВЫБОРА
НА БАЗЕ КОЭВОЛЮЦИОННОГО ГЕНЕТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА**

И.А. Иванов

Научный руководитель Е.А. Сопов

*Сибирский государственный аэрокосмический университет
имени академика М.Ф. Решетнева*

Большое число практических задач поддержки принятия решений в различных областях науки и техники сводятся к решению задачи выбора на множестве альтернатив. Такие задачи возникают на всех этапах поддержки принятия решений: при построении аналитических моделей (выбор структуры и параметров модели), генерировании множества допустимых альтернатив, непосредственно при выборе наилучшей альтернативы в соответствии с некоторыми критериями. В реальных задачах число критериев, по которым оцениваются альтернативы, почти всегда больше одного.

Как минимум можно выделить следующие два критерия: критерий, связанный с достижением цели выбора (самый явный, очевидный – зависит от решаемой задачи) и экономический критерий, связанный с эффективностью решения задачи (учет ограниченных ресурсов как при решении задачи выбора, так и при решении исходной задачи, когда выбор сделан). Кроме того, возникает множество специфичных для частной задачи критериев: надежность, устойчивость, ограничения задачи и т. д.

Практические задачи оптимизации обладают такими свойствами как алгоритмическое задание функций, многоэкстремальность, сложная конфигурация допустимой области, наличие нескольких типов переменных, множества постоянства и т. д. Подобные задачи почти не решаются традиционными методами оптимизации. Проблема усугубляется с учетом требования равномерности покрытия множества Парето. Наиболее перспективным подходом к решению подобных задач являются методы интеллектуальных информационных технологий, к которым, в частности, относятся генетические алгоритмы (далее ГА).

В последние годы предложено множество различных генетических алгоритмов, показавших высокую эффективность при решении многих сложных задач оптимизации. Для решения задач многокритериальной оптимизации наибольшее признание в мировом научном сообществе получили такие алгоритмы как VEGA, FFGA, NPGA, NSGA2, SPEA.

Каждый из алгоритмов обладает своими преимуществами и недостатками. В частности, VEGA и FFGA обладают лучшей сходимостью, но не имеют механизмов обеспечения равномерности покрытия множества Парето. NPGA, NSGA и SPEA обеспечивают хорошее покрытие, но требуют больше вычислительных затрат, а механизмы поддержания разнообразия решений часто «выкидывают» решения за пределы области Парето. В целом, большинство исследователей отмечают алгоритм SPEA как наиболее универсальный.

Процесс настройки и контроля параметров конкретного ГА существенно влияет на эффективность решения задачи. Однако этот процесс слабо формализован и часто зависит от опыта и интуиции исследователя. В последние годы наблюдается тенденция развития эволюционных подходов, способных к самонастройке параметров. Одним из способов к построению самоорганизующихся (самонастраивающихся) процедур является использование коэволюционного подхода.

Использование коэволюционной схемы при решении многокритериальных задач позволит решить проблему конфигурирования алгоритма «под задачу». А поскольку различные алгоритмы обладают принципиально различными свойствами, то их совместная работа должна усилить использование индивидуальных сильных сторон и уменьшить влияния слабых. В

предложенном подходе в ходе работы поискового алгоритма адаптируются не только численные параметры алгоритма (адаптация алгоритма), но и происходит выбор конкретной конфигурации алгоритма, эффективной на текущем этапе поиска. Такой подход можно назвать самоконфигурируемым многокритериальным ГА.

Мы назвали такой алгоритм самоконфигурируемым коэволюционным многокритериальным генетическим алгоритмом или SelfCOMOGA (Self-configuring Co-evolutionary Multi-Objective Genetic Algorithm).

Общая схема коэволюционного алгоритма SelfCOMOGA имеет следующий вид:

Этап 1. Задание множества алгоритмов, участвующих в коэволюции.

Этап 2. Параллельная работа алгоритмов в течение заданного времени – периода адаптации.

Этап 3. Оценка эффективности индивидуальных алгоритмов в адаптационном периоде.

Этап 4. Перераспределение ресурсов и переход к очередному адаптационному периоду (перейти на этап 2).

Рассмотрим этапы подробнее. На первом этапе определяется множество конфигурации алгоритмов, включенных в коэволюцию. Можно выделить как минимум 3 стратегии:

– детерминированный выбор алгоритмов, свойства которых известны и можно использовать для решения задачи;

– включение всех возможных комбинаций алгоритмов и их параметров;

– случайный выбор некоторого числа алгоритмов из множества всех возможных комбинаций алгоритмов и их параметров.

Первый вариант требует привлечения знаний об алгоритмах и решаемой задаче, что не применимо для сложных задач, и противоречит идее самонастройки ГА. Второй подход – весьма затратный, т. к. число комбинаций может быть большим (сотни вариантов). Как показывают численные эксперименты, последняя стратегия обеспечивает приемлемую эффективность в среднем, и при этом нет необходимости привлекать дополнительные сведения об алгоритмах и их свойствах на задаче, а значит, этот вариант лучше всего обеспечивает концепцию самонастройки ГА.

Ключевым моментом любой коэволюционной схемы является оценка индивидуальных алгоритмов. Поскольку эффективность оценивается по Парето, нет возможности прямого сравнения алгоритмов и известные подходы не могут быть использованы. В различных работах предлагаются следующие основные критерии: близость найденного множества решений к истинному множеству Парето и равномерность распределения найденных решений. Очевидно, что для практических задач первый критерий теряет смысл, т. к. множество Парето неизвестно. Поэтому в данной работе

для оценки индивидуальных алгоритмов SMOGA используются следующие критерии, объединенные в 2 группы:

Первая группа – статические критерии (оценка по результатам только текущего периода адаптации) включает 2 критерия:

К1 – процент недоминируемых решений. Для вычисления создается общий пул решений из решений частных алгоритмов и проводится недоминируемая сортировка [8]. Далее определяется, какому алгоритму принадлежат недоминируемые решения.

К2 – равномерность распределения (разброс) недоминируемых решений. Для вычисления используется среднее значение по координатам (для множества Парето) или по критериям (для фронта Парето) дисперсии расстояний между индивидами.

Вторая группа – динамические критерии (оценка в сравнении с результатами предыдущих периодов адаптации) включает критерий:

К3 – улучшение недоминируемых решений. Для вычисления необходимо сравнить недоминируемые решения алгоритма на прошлом и текущем периоде адаптации. Если текущие недоминируемые решения доминируют прошлые недоминируемые, то произошло улучшение решения задачи, даже если процент недоминируемых решений уменьшился.

Последний этап – этап перераспределения ресурсов. Для этого определяются новые размеры популяций. Для этого все алгоритмы отдают алгоритму-победителю некоторый процент от своих размеров популяции. При этом каждый алгоритм имеет минимальный гарантированный ресурс, который не распределяется.

Для перераспределения ресурсов используется схема вероятностного отбора «замещение по ранговой селекции» – решения с высоким рангом после недоминируемой сортировки имеют большую вероятность быть переданными лучшим алгоритмам. С уменьшением ранга, вероятность отбора линейно падает, но шанс быть отобранным остается у всех решений. Критерии останова коэволюционного алгоритма аналогичны стандартным ГА: ограничение на вычислительный ресурс, отсутствие улучшений (стагнация) и др.

Было проведено исследование эффективности SMOG на 18 тестовых функциях. Результаты тестирования алгоритмов приведены в таблице. Тестирование алгоритма проводилось при следующих условиях. В коэволюцию включены 5 различных алгоритмов VEGA, FFGA, NPGA, NSGAII и SPEA, параметры которых выбирались случайно. Для базовых алгоритмов приведены оценки при лучших параметрах, найденных при индивидуальном тестировании. На каждой задаче для оценки эффективности проводились 100 независимых запусков алгоритмов. Частные результаты усреднялись. Статистика обрабатывалась с помощью метода дисперсионного анализа – непараметрической оценки Манна-Уитни. Различия результатов,

представленных в таблице, статистически значимы. В качестве критериев эффективности работы алгоритма выбраны следующие метрики: *generationaldistance (GD)*, *maximumspread (MS)*, *spacing (S)*.

Таблица. Результаты тестирования алгоритмов на задачах, для которых известен истинный фронт Парето

Алгоритм		SPEA	VEGA	FFGA	NPGA	NSGAI	COMOGA	MEAN
Задача	Критерий							
F2	GD	0,849	1,468	3,334	1,699	0,263	0,460	1,522
	MS	0,750	0,768	2,928	0,730	0,850	0,832	1,205
	S	1,289	0,446	0,096	0,400	0,525	1,483	0,551
F5	GD	0,339	0,888	1,753	0,833	0,196	0,240	0,802
	MS	0,850	0,755	1,919	0,730	0,887	0,870	1,028
	S	0,475	0,251	0,094	0,228	0,346	0,908	0,279
F8	GD	0,821	1,411	4,221	1,709	0,650	0,394	1,762
	MS	0,754	1,170	3,655	0,859	0,852	0,786	1,458
	S	0,383	0,266	0,109	0,330	0,192	1,488	0,256
UP4	GD	0,421	0,441	0,616	0,616	0,426	0,266	0,504
	MS	0,928	0,933	1,127	0,905	0,928	0,973	0,964
	S	0,368	0,612	0,218	0,279	0,340	0,464	0,363
UP7	GD	1,149	1,881	4,683	2,274	0,305	0,629	2,058
	MS	0,719	0,757	1,571	0,713	0,785	0,792	0,909
	S	1,459	0,444	0,092	0,358	0,556	1,735	0,582

Можно отметить, что на множестве задач в среднем эффективность SelfCOMOGA может оказаться хуже лучшего из индивидуальных алгоритмов, но всегда выше средней эффективности по индивидуальным алгоритмам.

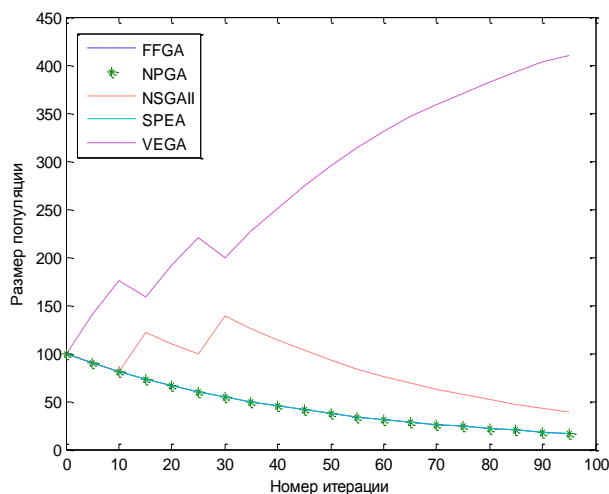


Рис. Динамика коэволюции для сложной задачи

При этом данный алгоритм не требует тщательной настройки параметров, что свойственно отдельно взятым алгоритмам.

На рисунке представлен пример динамики перераспределения ресурсов для условно сложной задачи.

Предложенный в работе подход позволяет эффективно решать сложные задачи многокритериальной оптимизации, обеспечивая репрезентативную аппроксимацию множества Па-

рето. Использование конкурентной коэволюции позволяет автоматизировать конфигурирование алгоритма под задачу.

В дальнейшем авторы планируют расширить область применения предложенного подхода для автоматизирования проектирования интеллектуальных информационных технологий в задачах интеллектуального анализа данных, в которых равномерность покрытия множества Парето обеспечивает разнообразие представлений моделей знаний.

УДК 735.29

ИССЛЕДОВАНИЕ МНОГОМЕРНЫХ ДАННЫХ МЕТОДАМИ ФАКТОРНОГО АНАЛИЗА

М.Н. Кучеров

Научный руководитель И.В. Баранова

Сибирский федеральный университет

This paper considers the concepts and application of factor analysis. In work are described the basic techniques of classical factor analysis: principal component and centroid methods. Also work contains the solution of the practical task of research multifactor statistics using foregoing methods.

В данной статье рассматривается понятие факторного анализа, его основные проблемы и методы. Также в работе решается практическая задача применения ряда методов факторного анализа для изучения многомерных статистических данных.

Факторный анализ – многомерный статистический метод, применяемый для изучения взаимосвязей между значениями переменных. Предполагается, что несколько измеряемых переменных коррелируют между собой. Эта ситуация возникает в том случае, когда они взаимно определяют друг друга или связь между этими переменными обуславливается какой-то третьей величиной, которую непосредственно измерить нельзя. Возникает вопрос, можно ли по данным переменным выделить величину, так называемый фактор, который объяснил бы наблюдаемые связи. Под термином **фактор** подразумевается математическая величина, получаемая на основе наблюдений.

Факторный анализ позволяет решить две важные проблемы исследователя: описать объект измерения всесторонне и компактно. С помощью факторного анализа возможно выявление скрытых переменных факторов,

отвечающих за наличие линейных статистических связей корреляций между наблюдаемыми переменными. В основе методики факторного анализа лежит анализ коэффициентов корреляции наблюдаемых переменных.

Схема решения и основные проблемы факторного анализа

Целью факторного анализа является получение из исходной матрицы данных Y размерности (n, m) матрицу P размерности (r, n) , где $r < n$.

Любой метод факторного анализа начинается с $Y = (y_{ij})$ – матрицы исходных данных. Здесь $i = 1, \dots, m$ – переменные, а $j = 1, \dots, n$ – индивидуумы (объекты). По ней вычисляется корреляционная матрица $R = (r_{ik})$, где $i, k = 1, \dots, m$ – коэффициенты корреляции соответствующих переменных. По главной диагонали корреляционной матрицы проставляются оценки общностей (сумм квадратов нагрузок факторов) и получают редуцированную корреляционную матрицу $R_h = (r_{ik}^h)$, $i, k = 1, \dots, m$ – остаточные коэффициенты корреляции. Это составляет проблему общности, которая заключается в установлении оценок общностей. Из матрицы R_h с помощью определенных способов извлекают факторы, получая в результате матрицу факторного отображения $A = (A_{ij})$, элементами которой являются факторные нагрузки. Здесь $i = 1, \dots, r$ – факторы, $j = 1, \dots, m$ – переменные. Столбцы матрицы A ортогональны и занимают произвольную позицию в отношении переменных, определяемую методом выделения факторов. Возможно большое число матриц A , которые будут одинаково хорошо воспроизводить R_h по равенству $R_h = A \cdot A'$. Из них должна быть выбрана одна, что составляет проблему вращения. Решение проблемы вращения одним из нескольких способов приводит к матрице $V = (v_{ij})$ – факторной матрице после поворота, $i = 1, \dots, r$ – факторы, $j = 1, \dots, m$ – переменные. Последняя проблема факторного анализа касается оценки значений факторов для каждого индивидуума путем нахождения $P = (p_{ij})$ – матрицы значений факторов, $i = 1, \dots, r$ – факторы, $j = 1, \dots, m$ – индивидуумы (объекты).

Метод главных компонент

При решении задачи измерения распределенных параметров u_n индивидуумов (или объектов), n точек сосредоточены в n -мерном пространстве с n осями в облаке вокруг общего центра тяжести. Это облако точек наблюдений в общем случае имеет овальную форму и называется эллипсоидом. В геометрическом плане метод главных факторов состоит в том, что:

1. Определяют самую длинную ось эллипсоида. Она является первой главной осью, которая должна пройти через центр тяжести.

2. Устанавливают подпространство (в данном случае плоскость), которое перпендикулярно к первой главной оси и которое проходит через центр тяжести. В этом подпространстве находится следующая по величине ось скопления точек и т. д., пока не будут определены последовательно все главные оси.

Центроидный метод

Синонимом названия «центроидный метод» является «метод центра тяжести». Это название объясняет принцип метода. Положение первой координатной оси должно быть определено так, чтобы она проходила через центр тяжести скопления точек. Факторное отображение можно рассматривать как размещение m точек-переменных в g -мерном пространстве, причем отдельные точки или векторы представляют переменные. Чтобы получить однозначное положение системы координат, условливаются, что первая ось должна проходить через центр тяжести скопления точек-переменных. Вторая ось выбирается перпендикулярно к первой, третья – перпендикулярно ко второй и т. д.

При применении метода главных факторов и центроидного метода возникает вопрос: когда должен быть закончен процесс выделения факторов? Общепризнанного метода определения числа факторов, подлежащих выделению, не существует. Наиболее известным является критерий Кайзераи Дикмана: факторы, вклады которых (сумма квадратов факторных нагрузок) в полную дисперсию меньше единицы, имеют долю дисперсии, меньшую единичной дисперсии переменных. Такие факторы не должны выделяться.

Применение методов факторного анализа для исследования многофакторных статистических данных

В работе была решена практическая задача, заключающаяся в исследовании медицинской статистики с помощью изученных методов факторного анализа. Статистика состояла из двух частей: в первой части были приведены показатели для пациентов с удачным исходом оперативного вмешательства, во второй – с неудачным. Состояние здоровья каждого пациента оценивалось 114 показателями, такими как: группа крови, резус, рост, вес, место проживания, возраст, курение, наличие заболеваний органов системы дыхания, кровеносной системы, перенесенных инфекций, хронических заболеваний, характеристики проведенного лечения и госпитализации (недостаточная квалификация персонала, неправильный диагноз, ошибки лечения, отсутствие профилактики) и т. д.

Для решения задачи статистика была разделена на 2 группы (в соответствии с исходом). Для каждой группы была составлена корреляци-

онная матрица. Для корреляционной матрицы найдены характеристические корни и векторы. Затем, с помощью умножения каждого собственного вектора на корень из соответствующего собственного числа, были получены векторы нагрузок. Из этих векторов была составлена матрица, в которой каждая строчка представляет собой фактор, ячейками которого являются нагрузки.

В первый фактор для группы пациентов с удачным исходом оперативного вмешательства были включены 8 переменных, среди которых наибольшую нагрузку имели показатели, связанные с наличием заболеваний кровеносной системы, перенесенных инфекций и хронических болезней. Для второй группы пациентов наибольшие нагрузки в первом факторе имеют показатели проведенного лечения и госпитализации (неправильный диагноз, несвоевременное обращение, отсутствие необходимого оборудования), а уже затем – наличие хронических болезней и перенесенных инфекций.

В результате исследования можно сделать вывод, что для улучшения исходов операций специалистам в области здравоохранения следует обратить наибольшее внимание на выявленные показатели проведенного лечения и госпитализации и принять меры по повышению квалификации медицинского персонала и закупкам необходимого оборудования.

Список литературы

1. Иберла. К. Факторный анализ. М.: Наука, 1972. 318 с.
2. Лоули Дж. Факторный анализ как статистический метод. М.: Наука, 1967. 136 с.
3. Осипов Г. Методы измерения в социологии. М.: Наука, 2003. 120 с.
4. Хартман Г. Современный факторный анализ. М.: Статистика, 1972. 484 с.
5. Guttman L. Multiple rectilinear prediction and the resolution into components // Psychometrika. 1940. № 5. P. 75–99.
6. Thurstone L.L. Multiple factor analysis. Chicago, 1961. 250 p.

ГЕНЕТИЧЕСКАЯ ИЗМЕНЧИВОСТЬ ПОПУЛЯЦИЙ ЛИСТВЕННИЦЫ СИБИРСКОЙ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ ISSR-PCR АНАЛИЗА

А.Н. Лисина

Научный руководитель И.Е. Ямских

Сибирский федеральный университет

Лиственница – самая распространенная лесообразующая порода России, являющаяся важнейшим компонентом бореальных лесов Сибири, имеющих огромное экономическое и экологическое значение. От состояния этих лесов зависит климат на всей планете. В Сибири лиственница занимает 52 % лесопокрытой площади. Широкое распространение лиственницы наглядно демонстрирует ее хорошую приспособленность к различным условиям среды и в то же время предполагает ее значительную видовую и внутривидовую генетическую дифференциацию (Абаимов, Милютин, 2005).

В исследованиях, связанных с молекулярным маркированием генома растений, хорошие результаты показывают методы полимеразной цепной реакции с ISSR, RAPD-праймерами. Эти методы отличаются относительной простотой. ISSR метод (Inter-Simple Sequence Repeats) анализирует анонимный полиморфизм ДНК, однако в отличие от RAPD, он хорошо воспроизводим. Для создания ISSR-маркеров не требуется предварительного знания нуклеотидной последовательности исследуемой ДНК. Метод может быть с успехом использован для выявления межвидовой и внутривидовой генетической изменчивости, идентификации видов, популяций, а в ряде случаев и для индивидуального генотипирования.

Целью данной работы было проведение анализа генетической структуры популяций лиственницы сибирской (*Larix sibirica* Ledeb.), произрастающих на юге Красноярского края и в республике Хакасия при помощи ISSR-маркеров.

Работа произведена в отделе генетики и селекции «Центра защиты леса Красноярского края». Объектом исследований служили 5 популяций лиственницы: L1 – Богучанская, L2 – Ермаковская, L3 – Шушенская, L4 – Усть-Бюрская, L5 – Черное озеро. Из каждой популяции было проанализировано по 30 деревьев. Выделение ДНК производили из 15–25 мг сухой растительной ткани с помощью набора Gen Pak PCR Core (Isogen Lab, Moscow, Russia). Далее из имеющегося набора праймеров (Mansouretal., 2009; Patersonetal, 2009) опытным путем выявили 5 (HB9,

НВ11, UBC827, 17899А, 17899 В), дающих воспроизводимый полиморфный результат. Данные праймеры могут быть рекомендованы для популяционно-генетических исследований лиственницы сибирской.

Амплификацию проводили в 10 мкл смеси (5 мкл Diluent + 2,5 мкл Primer + 2,5 мкл ДНК) на амплификаторе Eppendorf с использованием реактивов производства ООО «Лаборатория Изоген» и ООО «СибЭнзим». Разделение продуктов амплификации производилось в 1,5 % агарозном геле и 0,1 М ТБЕ-буфере при 250 В, 10 Вт, 220 мА в горизонтальной электрофорезной камере SE-2 компании ООО «Хеликон». После электрофореза гель окрашивали раствором 1 % бромидом этидия в течение 20 мин и фотографировали в проходящем УФ-излучении (рис. 1).

ISSR-PCR анализом выявлено 46 амплифицированных фрагментов ДНК, процент полиморфизма которых суммарно составляет 91,3 %, а генетическая изменчивость, определяемая с помощью индекса Шеннона, $I = 0,38$. Размер фрагментов варьирует от 200 до 800 тпн (рис. 1).

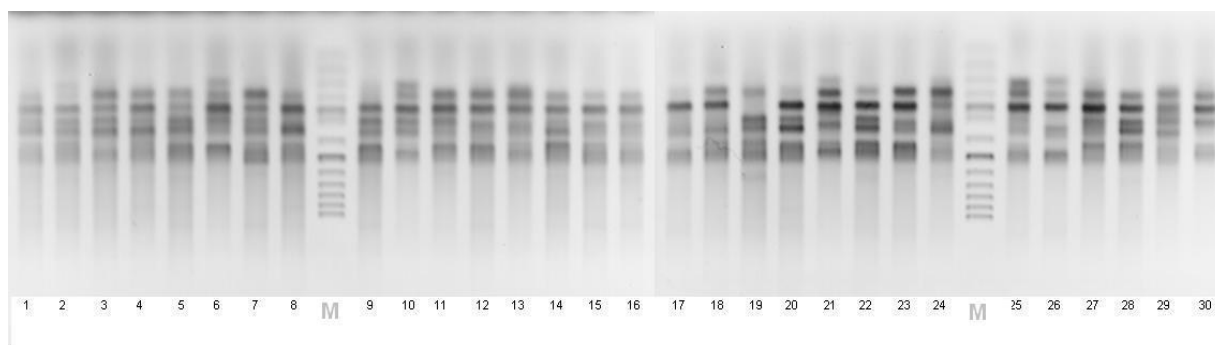


Рис. 1. Результат амплификации ДНК *Larix sibirica* (Богучанская популяция L1) с праймером UBC827: 1–30 – экземпляры лиственницы; М – маркер молекулярного веса

Уровень выявляемого внутривидового полиморфизма амплифицированных фрагментов в целом достаточно высок (58,7–71,74 %). Максимальные значения внутривидовой генетической изменчивости отмечены для Ермаковской популяции *Larix sibirica* L2 ($I = 0,36$). Также достаточно высокими показателями полиморфизма характеризуются Богучанская (L1) и Шушенская (L3) популяции, где значения индекса Шеннона составляют 0,32. Хакасские популяции лиственницы (L4, L5) характеризуются относительно низкими показателями генетической изменчивости. Аналогичные результаты получены и при использовании другого показателя – коэффициента генетического разнообразия Нея (1973).

Анализ результатов межвидовой изменчивости показал высокую степень генетического сходства популяций друг с другом. Значения коэффициентов генетического сходства М. Нея (1972) варьируют от 0,91

до 0,96, при этом генетическое расстояние между популяциями минимально (0,04–0,09).

Дендрограмма сходства популяций построена с помощью программы TFPGA (UPGMA-тест) с использованием коэффициента Рейнольда с соавторами (1983) (рис.2). Наибольшее сходство отмечено между Богучанской (L1) и Шушенской (L3) популяциями лиственницы. Обособленное положение на дендрограмме занимает популяция L5 (Черное озеро, Хакасия), что, на наш взгляд, связано не с генетической обособленностью, а с низким качеством выделенной ДНК.

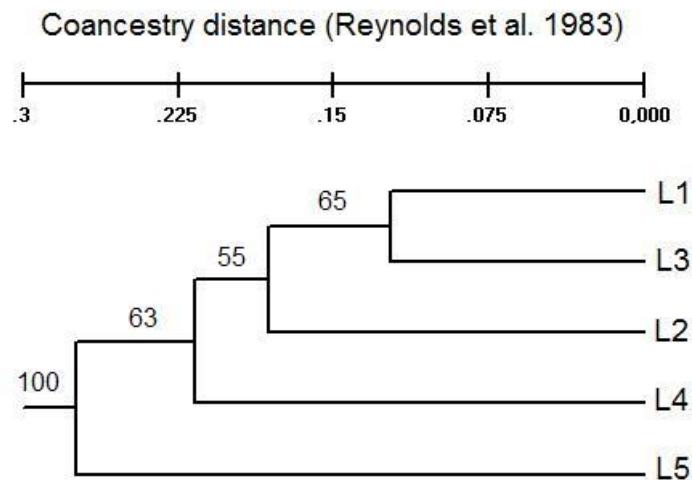


Рис. 2. Дендрограмма сходства популяций лиственницы сибирской на основе ISSR-анализа (UPGMA-тест): шкала сверху – генетические дистанции; на дендрограмме цифрами указаны значения бутстрепы (в %)

Научное исследование выполнено Сибирским федеральным университетом (проект «Генетические исследования лиственницы сибирской», № 4.4434.2011) в рамках Государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации на оказание услуг (выполнение работ).

МЕХАНИЗМЫ АНТИТРОМБОТИЧЕСКОГО ДЕЙСТВИЯ АСПИРИНА: ГЕНДЕРНЫЕ ОТЛИЧИЯ И СВЯЗЬ С ПАТОГЕНЕЗОМ JAK-2 ПОЗИТИВНЫХ МИЕЛОПРОЛИФЕРАТИВНЫХ ЗАБОЛЕВАНИЙ

М.А. Столяр

Научные руководители И.А. Ольховский, Н.М. Титова

*Сибирский федеральный университет,
Красноярский филиал Гематологического научного центра Минздрава России*

В течение последних десятилетий основная стратегия дезагрегационной терапии нацелена на торможение циклооксигеназы тромбоцитов ЦОГ-1 и тромбоксанового механизма их активации. Многочисленные клинические данные, подтверждающие высокую эффективность ацетилсалициловой кислоты (АСК), определили широкое использование препарата в стандартных режимах профилактики и лечения атеротромботических событий, в том числе при хронических миелопролиферативных заболеваниях (ХМПЗ). Вместе с тем обсуждается «аспириновый парадокс», демонстрирующий повышенную резистентность женщин к антитромботическому действию АСК.

Мутация янускиназы JAK2 у больных с Ph-негативным ХМПЗ определяет патогенез заболевания путем модуляции тромбопоэтин-индуцированного сигнального каскада. Такие пациенты часто страдают от развития тромбозов и могут госпитализироваться в стационар с неатерогенными инфарктами и ишемическими инсультами. С другой стороны, у пациентов с тромбоцитозом при ХМПЗ часто возникает приобретенная форма болезни Виллебранда, опосредующая серьезные геморрагические проявления. В связи с этим, крайне важен индивидуальный подход и адекватный подбор дозы АСК. Оптимальным решением, повышающим эффективность и безопасности терапии, могло бы стать проведение предварительного тестирования чувствительности пациентов к антитромбоцитарному действию АСК. Однако до сих пор потребность в надежных стандартизованных тестах определения индивидуальной чувствительности к препарату остается неудовлетворенной.

Ранее в наших исследованиях было показано, что показатель лаг-фазы импедансометрической агрегатограммы при индукции арахидоновой кислотой может служить основным параметром для выбора индивидуальной минимальной ингибирующей ЦОГ-1 концентрации АСК [1]. Было выявлено, что при сохраненной чувствительности ЦОГ-1 к АСК и ингибировании функционального ответа тромбоцитов на арахидоновую кислоту,

АДФ-индуцированная агрегация изменялась в широком диапазоне значений, демонстрируя связь с ЦОГ-1 – независимыми сигнальными путями [2]. В последние годы накапливаются данные об участии в эффектах АСК реакций, опосредованных NO и фактором транскрипции NF-κB, а также непосредственного ацетилирования отдельных факторов свертывания крови, однако сведения об их вкладе в механизм действия малых доз АСК и возможном клиническом значении малочисленны [3].

Цель настоящей работы: исследование механизмов влияния АСК на параметры тромбоцитарного и плазменного гемостаза у больных ХМПЗ.

Материалы и методы. Обследовано 25 пациентов с ХМПЗ, имеющих мутацию в гене JAK2 (rs77375493). Контрольную группу составили клинически здоровые добровольцы (57 человек) подписавшие информированное согласие и включенные в межцентровое исследование [4]. Тесты индуцированной агрегации тромбоцитов проводили на агрегометре Хронолог 700 методом импеданса в цельной крови, индукция осуществлялась АДФ в конечной концентрации 5 мкМ. Оценка агрегации проводилась в пробах до и после предварительной 15 мин инкубации цельной крови с АСК в конечной концентрации 0,1 мМ. Также в работе использовался «Регистратор тромбодинамики Т-2» – уникальный прибор комплексной оценки системы гемостаза максимально приближенной *in vivo* [5]. В измерительной кювете имитируется инициация и процесс роста сгустка при повреждении сосудистой стенки. Образцы цельной крови инкубировались с раствором АСК, затем получали свободную от тромбоцитов плазму и определяли параметры пространственного роста сгустка в опытном и контрольном образцах.

Результаты. У женщин по сравнению с мужчинами в контрольной группе впервые установлено статистически значимое увеличение всех параметров импедансометрической АДФ-индуцированной агрегометрии как до, так и после инкубации проб с АСК (рисунок). Различия сохраняются и в случае предварительного приема 125 мг АСК *per os*. При этом лаг-фаза при индукции агрегации тромбоцитарарахидононовой кислотой на фоне АСК свидетельствовала о полном ингибировании ЦОГ-1 как у мужчин, так и у женщин, демонстрируя различный вклад ЦОГ-1 независимых механизмов в АДФ-индуцированную агрегацию. Вместе с тем среди обследованных пациентов выраженного полового детерминизма выявлено не было. Развитие патологии нивелирует эти различия. Вероятно, существуют гормональные или иные, обусловленные половой принадлежностью, механизмы функциональной активации кровяных пластинок и их ответа на АСК. В организме как женщины, так и мужчины кровяным пластинкам принадлежит чрезвычайно важная гемостатическая роль, однако для нормальной реализации биологической функции

женскому организму требуется более активный агрегационный потенциал тромбоцитов. Вероятно, регуляция соотношения путей активации – это первичный механизм, делающий кровяные пластинки женщин более чувствительными к активационным сигналам аденилатов за счет независимого от активности ЦОГ-1 компонента. Очевидно, именно данный механизм может определять феномен ЦОГ-1 независимой аспиринорезистентности.

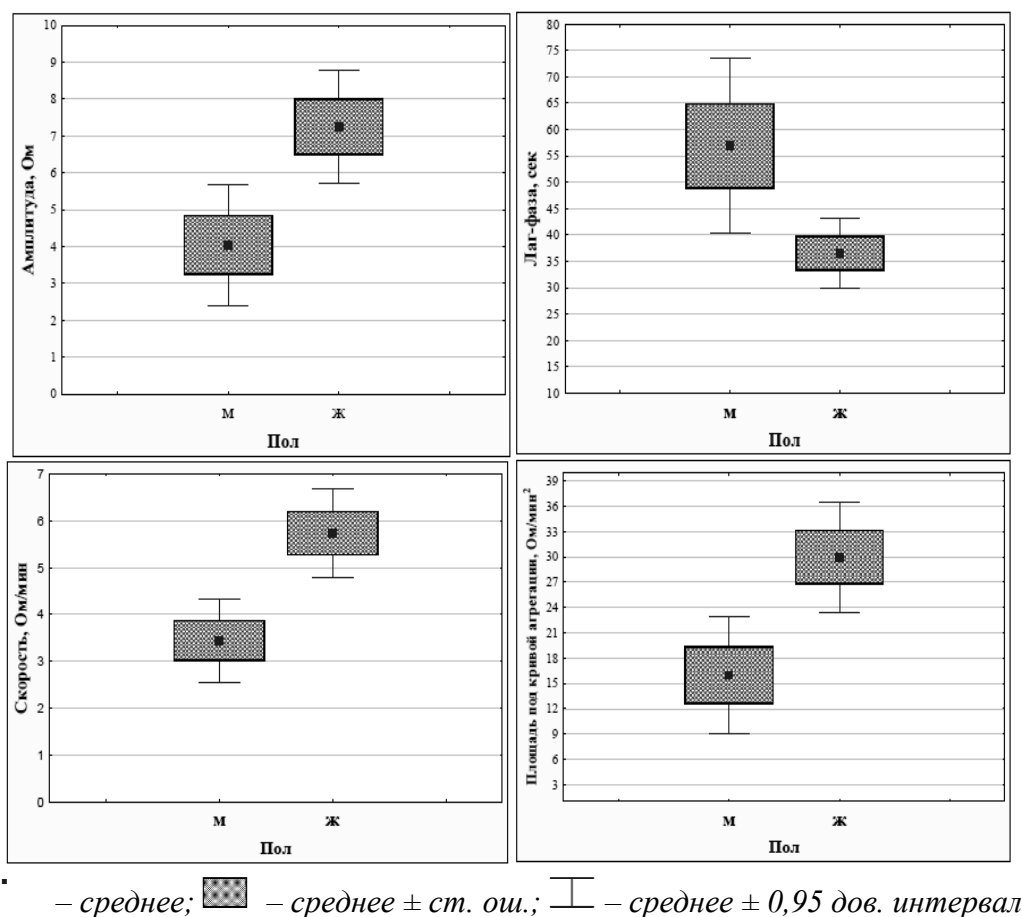


Рис. Параметры агрегации после инкубации проб цельной крови с АСК у обследованных мужчин и женщин ($p < 0,05$)

У пациентов с мутацией в гене JAK2 увеличены амплитуда, лаг-фаза и площадь агрегационной кривой по сравнению с контрольной группой ($p < 0,05$), что свидетельствует о качественном изменении тромбоцитов и перестройке путей внутриклеточной сигнализации. Выявленное отличие лаг-фазы сохраняется и после инкубации образцов с АСК, что, возможно, ассоциировано со структурными изменениями фермента ЦОГ-1 пролиферирующих клеточных клонов.

На базе ФГБУ ГНЦ Минздрава России, при поддержке ООО «ГемаКор» в сравнительном исследовании был выявлен эффект аспирина, заключающийся в повышении некоторых параметров тромбодинамики при тестировании образцов свободной от тромбоцитов плазмы после инкубации с АСК (таблица).

Таблица. Разница параметров тромбодинамики до и после инкубации пробы с АСК (n = 7)

Тлаг, мин	0,03	p > 0,05
Скорость начальная, мкм/мин	7,84	p < 0,05
Скорость стационарная, мкм/мин	3,47	p < 0,05
Размер, мкм	71,34	p < 0,05
Плотность, усл. ед	23,82	p > 0,05

Объясняется это вероятным ацетилированием тромбина, вследствие чего изменяется активность тромбин-антитромбинового комплекса и снижается активация протеина.

Полученные данные свидетельствуют о комплексном механизме действия АСК, не ограничивающимся только ЦОГ-зависимым ингибированием продукции тромбоксанов. Нарушение регуляции взаимосвязи тромбоцитарного и плазменного гемостаза *in vivo* очевидно служит одной из причин как аспиринорезистентности, так и повышенной чувствительности к препарату.

Выводы:

1. Выявлено значимое повышение параметров агрегатограммы у здоровых женщин по сравнению с мужчинами, что следует учитывать в формировании референсных интервалов агрегации, а также учитывать при назначении АСК.

2. У пациентов с мутацией JAK2 выявлено увеличение всех параметров агрегатограммы по сравнению со здоровыми лицами, свидетельствующее о перестройке сигнальных внутритромбоцитарных путей и необходимости назначения дозы АСК, контролируемой предиктивным лабораторным тестом.

3. Выявлено активационное действие АСК на плазменный гемостаз, что свидетельствует о наличии реципрокной регуляции плазменного и тромбоцитарного гемостаза после употребления АСК. Развитие повышенной прокоагуляционной активности АСК может быть еще одной причиной ЦОГ-1 независимой аспиринорезистентности.

Список литературы

1. Ольховский И.А., Столяр М.А. О методе определения чувствительности к ацетилсалициловой кислоте в импедансном тесте агрегации тромбоцитов // Тромбоз, гемостаз и реология. 2013.
2. Столяр М.А., Ольховский И.А. Определение аспирино-резистентности тромбоцитов *in vitro* по данным оптического и импедансометрического методов // Вестник Новосибирского гос. Ун-та. Серия: Биология, клиническая медицина. 2012. Т. 10. Вып. 5. С. 36–42.
3. Stepień E., Plicner D., Branicka A. Factors in influencing thrombin generation measured as thrombin-antithrombin complex and calibrated automated thrombogram method in patients with advanced coronary artery disease // *Polskie archiwum medycyny wewnętrznej*. 2007. Vol. 117. P. 1–8.
4. Ройтман Е.В., Лобанов Ю.Ф., Момот А.П. и др. Протокол ведения всероссийского регистра «Генетические факторы риска тромбоза у жителей, проживающих на территории РФ, клиническое фенотипирование и тромбопрофилактика тромбоэмболических осложнений в онтогенезе» // Тромбоз, гемостаз и реология. 2010. № 3. С. 30–78.
5. Зыкова У.В. Опыт использования технологии визуализации тромбообразования на приборе Thrombo Imager // Бюллетень лабораторной службы. 2011. № 14. С. 36–41.

УДК 735.29

СТРУКТУРА ЛОКАЛЬНОГО ПОЛЯРОНА В МОДЕЛИ ЭМЕРИ

П.А. Козлов, И.А. Макаров, Е.И. Шнейдер
Научный руководитель С.Г.Овчинников

*Сибирский федеральный университет,
Институт физики им. Л.В. Киренского
Сибирского отделения Российской академии наук,
Сибирский государственный аэрокосмический университет*

Несмотря на ряд очевидных успехов в исследовании высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) в семействе слоистых купратов, основной вопрос о механизме ВТСП остается открытым до нынешнего времени. Как следствие, отсутствует единая теория, адекватно описывающая в целом данный класс веществ, а не только их отдельные свойства. Характерными особенностями купратов, из-за которых выделили в отдельный класс сверхпроводников и подвигли к поиску новых механизмов куперов-

ского спаривания, стали: высокая температура сверхпроводящего перехода, d – тип симметрии параметра порядка и аномальные свойства нормального состояния.

В настоящее время в литературе существуют две крайние и игнорирующие друг друга точки зрения на природу ВТСП в купратах. Согласно первой, сильные электронные корреляции (СЭК) определяют электронные свойства и механизм спаривания. Согласно второй, сильное электрон-фононное взаимодействие (ЭФВ) и поляронные (биполяронные) эффекты могут объяснить основные свойства ВТСП купратов. Очевидно, что в ВТСП купратах присутствуют как эффекты СЭК, так и сильного ЭФВ. Проблема их одновременного учета является актуальной нерешенной задачей.

Учет ЭФВ в рамках обобщенного метода сильной связи (ГТВ), включающего СЭК, в работах [1,2] привел к выводу о том, что вклады в T_c магнитного и фононного механизмов спаривания-величины одного порядка. В этих работах ЭФВ учитывалось по теории возмущений в духе теории Бардина – Купера – Шриффера (БКШ), что неприменимо для сильного ЭФВ. Другая попытка объединить СЭК и сильное ЭФВ была предложена в работе [3], где модель Эмери с сильным ЭФВ рассматривается в рамках кластерной теории возмущений. Полученный гамильтониан разбивался на сумму внутрикластерных H_c и межкластерных H_{cc} слагаемых, проводилась точная диагонализация внутрикластерного гамильтониана H_c . В этом подходе многоэлектронные собственные состояния H_c являются состояниями локальных поляронов (с учетом смещений ионов кислорода внутри CuO_4 кластера). Учет межкластерных перескоков и исследование зонной структуры поляронов не был сделан в работе [3].

В настоящей работе мы строим X -операторы Хаббарда на локальных поляронных состояниях CuO_4 кластера, что дает возможность записать гамильтониан H_{cc} в виде эффективных перескоков в обобщенной многозонной модели Хаббарда. Тем самым, сильное ЭФВ включено в схему ГТВ. Мы начинаем построение нашей модели, используя трехзонную $p-d$ модель для описания электронной структуры, а также включаем фононную часть, описывающую две наиболее важные кислородные моды колебаний, а именно – дыхательную и изгибную, а также локальное и нелокальное ЭФВ. Мы выполняем каноническое преобразование для электронной и фононной частей, что позволяет решить проблему неортогональности молекулярных орбиталей соседних ячеек с общим анионом и в дальнейшем рассматривать ячейки с ортогональными волновыми функциями. Далее мы строим на полученных собственных поляронных состояниях X -операторы Хаббарда, и переписываем межъячеечную часть гамильтониана в терминах X -операторов Хаббарда. В результате полный гамильтониан взаимодей-

ствующих электронов и фононов вполярном представлении точно записывается как гамильтониан многоорбитальной модели Хаббарда. Мы начинаем с записи гамильтониана модели взаимодействующих электронов и фононов для двумерной квадратной решетки

$$H = \sum_i \{ \varepsilon_d + \sum_l [(-1)^{S_l} \lambda_d u_l + \lambda_a z_l] \} n_i^d + \sum_j \varepsilon_p n_j^p + \sum_i U_d n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + \sum_{i,l,\sigma} (-1)^{M_l} [t_{pd} - (-1)^{S_l} \lambda_{dp} u_l] (d_{i,\sigma}^\dagger p_{l,\sigma} + H.c) + \sum_{j,k,\sigma} (-1)^{N_{jk}} t_{pp} (p_{j,\sigma}^\dagger p_{k,\sigma} + H.c) + \frac{m}{2} \sum_j (\dot{u}_j^2 + \omega_b^2 u_j^2 + \dot{z}_j^2 + \omega_a^2 z_j^2). \quad 1$$

Здесь индекс i пробегает по всем атомам Cu \mathbf{r}_i тетрагональной решетки CuO₂ плоскости с примитивными векторами \mathbf{a} и \mathbf{b} , индексы j и k пробегает по всем атомам кислорода, а индекс l нумерует совокупность четырех атомов кислорода вокруг \mathbf{r}_i , находящихся в положениях $\mathbf{r}_i \pm \mathbf{a}/2$ и $\mathbf{r}_i \pm \mathbf{b}/2$. Операторы $d_{i,\sigma}^\dagger$ и $p_{i,\sigma}^\dagger$ ($d_{i,\sigma}$ и $p_{i,\sigma}$) рождения (уничтожения) дырок на $3d_{x^2-y^2}$ орбиталях на Cu и p_σ орбиталях на O, соответственно, $n_i^d = d_{i,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma}$ и $n_j^p = p_{i,\sigma}^\dagger p_{i,\sigma}$ операторы числа частиц со спинами $\sigma = \uparrow$ или \downarrow . Параметры ε_d и ε_p – собственные внутри ионные энергии на Cu и O, t_{pp} и t_{pd} – интегралы перескока между ближайшими соседними атомами O-O и Cu-O соответственно, U_d – внутриатомная энергия кулоновского отталкивания на меди. Числа M_l и $N_{jk} = 0$ или 1, согласно выбранным фазовым условиям. Введем бозонное представление для фононной части гамильтониана следующей стандартной подстановкой

$$u_l = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_b}} (e_l^\dagger + e_l) = \xi_d (e_l^\dagger + e_l), \quad (2a)$$

$$z_l = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_a}} (f_l^\dagger + f_l) = \xi_a (f_l^\dagger + f_l), \quad (2b)$$

где e и f – линейные операторы Бозе типа.

Тот вид, в котором мы записали наш Гамильтониан, неудобен для описания решетки состоящей из кластеров, потому что каждый ион кислорода принадлежит сразу двум кластерам и возникает проблема неортогональности состояний в соседних ячейках. Для устранения этой проблемы необходимо явно построить функции Ванье вместо молекулярных орбиталей. Данная процедура была предложена для трехзонной p - d модели в работах [4,5]. В результате Гамильтониан может быть записан в форме $H = H_c + H_{cc}$, где $H_c = \sum_i h_{i0}$ представляет из себя Гамильтониан невзаи-

модействующих кластеров, h_{i0} Гамильтониан i -ого кластера, а H_{cc} описывает межкластерное взаимодействие. В таком представлении большая часть ЭФВ и СЭК уже включена в H_c . Более того, внутрикластерные кулоновское и электрон-фононное взаимодействия рассматриваются на равных и точно, в отличие от более привычных адиабатического или антиадиабатического приближений.

Для базовой p - d модели электронной подсистемы, мы взяли «стандартный набор» параметров, т. е. $t_{pd} = 1,3$ эВ, $t_{pp} = 0,65$ эВ, $\varepsilon_p - \varepsilon_d = 3,5$ эВ, $U = U_d = 9$ эВ. Фононные энергии принимают значения $\hbar\omega_a = 0,1$ эВ и $\hbar\omega_b = 0,05$ эВ для дыхательной и изгибной мод, соответственно. Коэффициенты ЭФВ λ_d и λ_{dp} точно не известны, мы рассматриваем их в качестве эмпирических параметров. Расчетная сила связи, соединенная с дыхательной модой имеет значения порядка $\lambda_d \cong 3$ эВ/Å.

При анализе локальных состояний кластера поляронный характер системы проявляется в распределении веса фононных состояний в основном состоянии. Вероятность N -фононного состояния рассчитывается путем прямого суммирования

$$P(N) = \sum_{\mu} |\phi_{\mu,N}|^2. \quad (3)$$

Здесь $\phi_{\mu,N}$ – коэффициент полученный в ходе точной диагонализации. Для наглядности построим графики распределения статистического веса для основных состояний гильбертовых подпространств с одной и двумя дырками. На рис. 1 приведен случай для однодырочного сектора. С ростом параметра ЭФВ состояние меняет свой характер чисто электронного к ярко выраженному полярному (максимум распределения приходится на состояние с 2 фононами при $\lambda = 3$ эВ.Å).

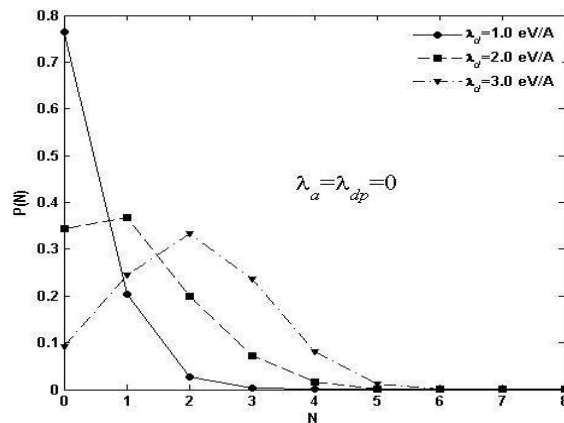


Рис. 1. Графики распределения плотности вероятности фононов для основного состояния (однодырочный сектор)

В случае двухдырочного сектора (рис. 2) в общем картина повторяется, но нужно заметить, что при аналогичных значениях параметра λ_d поляронный характер состояния выражен несколько слабее (максимум распределения при максимальном значении параметра ЭФВ приходится на состояние с 1 фононом).

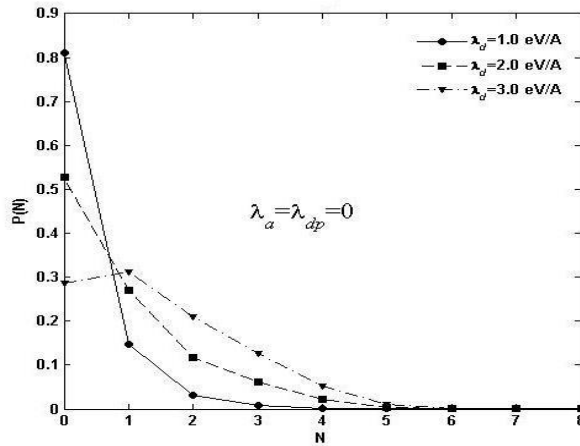


Рис. 2. Графики распределения плотности вероятности фононов для основного состояния (двухдырочный сектор)

На основе полученных собственных поляронных состояний мы строим X-операторы Хаббарда. В общем виде выражение для фермиевских операторов уничтожения дырок для нашей модели можно записать в следующем виде:

$$a_{f\sigma} = \sum_{ik} \gamma_{ik}^{1,a} X_f^{(0,k)(1\sigma,i)} + \sum_{ij} \gamma_{ij}^{2,a} X_f^{(1\bar{\sigma},i)(2,j)}, \quad (4)$$

где оператор $a_{f\sigma}$ принимает значение $d_{f\sigma}$ или $b_{f\sigma}$. Всю совокупность возбуждений с изменением числа фермионов можно разбить на две части, что видно из (4). Здесь первое слагаемое описывает все возможные переходы из однодырочного сектора в вакуумный, а второе, соответственно, из двухдырочного в однодырочный.

Далее выполняем такую же операцию для бозе-операторов. Общее выражение перехода от бозе к X-операторам записывается в следующем виде

$$A_f = \sum_{kk'} \gamma_{kk'}^{0,A} Z_f^{(0,k)(0,k')} + \sum_{ii'} \gamma_{ii'}^{1,A} Z_f^{(1\sigma,i)(1\sigma,i')} + \sum_{jj'} \gamma_{jj'}^{2,A} Z_f^{(2,j)(2,j')}. \quad (5)$$

Из-за конечного числа фононов, включаемых в рассмотрение, мы должны ввести следующее правило, при $k, i, j = N + 1$, $\gamma = 0$, которое исключит из рассмотрения состояния с большим числом фононов.

Операторам рождения/уничтожения бозе типа соответствуют возбуждения внутри секторов гильбертова пространства, не меняющие числа фермионов. Каждое слагаемое в (5) отвечает соответствующим переходам внутри вакуумного, однодырочного и двухдырочного секторов.

Переписываем гамильтониан полной модели электронов и фононов с сильными взаимодействиями в поляронном представлении. А именно:

$$H = \sum_n \varepsilon_n X_i^{nn} + \sum_{\alpha\beta} V_{ij}^{\alpha\beta} X_i^{+\alpha} X_j^{\beta}, \quad (6)$$

где ε_n – собственная энергия n-ого кластера; α и β корневые вектора построенные на собственных внутри ячеечных поляронных состояниях; X^+ , X – X-операторы Хаббарда, рождения и уничтожения соответственно.

Матрица $V_{ij}^{\alpha\beta}$ включает в себя межячеечное взаимодействие. Явное построение X-операторов Хаббарда, а также вычисление матрицы V, позволяют сделать в дальнейшем следующий шаг, на пути построения данной модели, а именно запись и решение уравнения движения и построение дисперсионных зависимостей электронной структуры.

Список литературы

1. Овчинников С.Г., Шнейдер Е.И. ЖЭТФ 128, 974. 2005.
2. Шнейдер Е.И., Овчинников С.Г. ЖЭТФ 136, 1177. 2009.
3. Piekarz P., Konior J., Jefferson J.H. Phys. Rev. B 59, 14697. 1999.
4. Shastry B.S., Phys. Rev. Lett. 63, 1288. 1989.
5. Jefferson J.H., Physica. B 165-166, 1013. 1990.

УДК 537.9

СИНТЕЗ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ОКСИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Н.С. Павловский

Научные руководители А.А. Дубровский, К.А. Шайхутдинов

Сибирский федеральный университет

В настоящее время для получения качественных монокристаллов в большинстве случаев используется два метода: метод раствора-расплава и метод бестигельной зонной плавки. Особенностью метода раствора-расплава является понижение температуры роста кристалла за счет при-

сутствия растворителя. Растворителями могут быть вода, многокомпонентные водные и неводные растворы, расплавы каких-либо химических соединений. Так как рост кристаллов осуществляется при температурах ниже температуры плавления, в выращенных такими методами кристаллах отсутствуют дефекты, характерные для кристаллов, выращенных методом Чохральского. К недостаткам можно отнести загрязнения монокристаллического образца элементами растворителя. К тому же при достижении высоких температур 1500–1700 °С начинает плавиться тигель, что тоже является недостатком данного метода.

Бестигельная зонная плавка – метод получения кристаллов из малого объема расплава, формально не использующий тигля или иного контейнера. Одна из наиболее перспективных модификаций бестигельной зонной плавки – метод оптической зонной плавки (рис. 1).

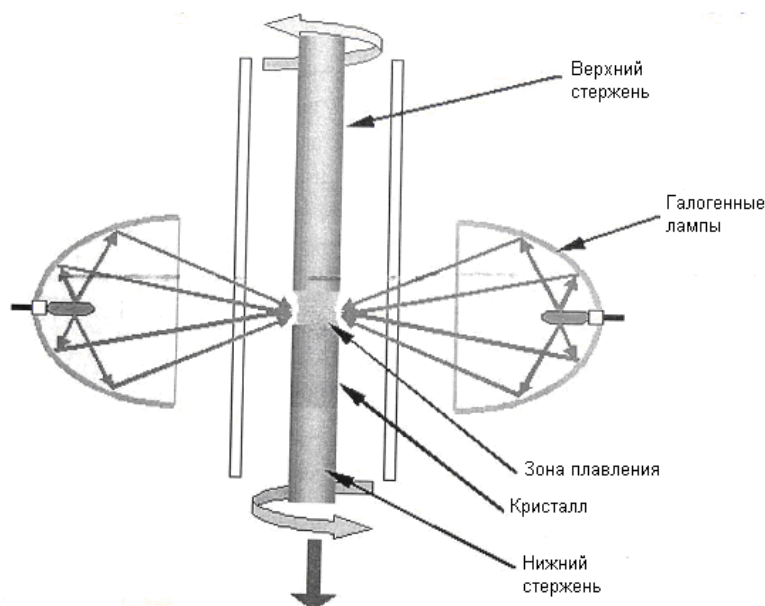


Рис. 1. Метод оптической зонной плавки

Суть метода заключается в следующем: два стержня из поликристалла, состав которого соответствует составу выращиваемого соединения, закрепляются внутри трубы из оптического кварцевого стекла таким образом, что один стержень располагается прямо под другим. Вокруг стержней устанавливаются зеркала сферической формы для фокусировки луча на нижнем конце верхнего стержня. При его последующем плавлении образуется капля жидкости, которая удерживается между верхним и нижним стержнями силами поверхностного натяжения. Стержни одновременно вращаются в разные стороны для лучшего перемешивания капли расплава, а также для поддержания ее температурной однородности. Луч, локально нагревающий верхний стержень постепенно поднимается выше, плавя его.

При этом полученный ранее расплав постепенно кристаллизуется на нижнем стержне. Если использовать для изготовления стержней реактивы особой чистоты (ОСЧ), то при отсутствии неконтролируемых примесей возможно вырастить идеальный монокристалл.

Используя четырехзеркальную печь оптической зонной плавки FZ – 4000-Н (Crystal system corporation, Japan), работающей в лаборатории СМП ИФ СО РАН, были синтезированы монокристаллические образцы следующих соединений: $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3$, $\text{La}_{0.75}\text{Ca}_{0.25}\text{MnO}_3$, MnGeO_3 , $(\text{La}_{1-x}\text{Nd}_x)_{1.4}\text{Sr}_{1.6}\text{Mn}_2\text{O}_7$, $\text{Sr}_3\text{Fe}_2\text{O}_7$, а также ряд других оксидных материалов. Особый интерес в данной работе представляет соединение $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3$ и серия $(\text{La}_{1-x}\text{Nd}_x)_{1.4}\text{Sr}_{1.6}\text{Mn}_2\text{O}_7$ с концентрациями $x = 0, 0.1, 0.3, 0.5$, поскольку в них проявляется эффект колоссального магнитосопротивления.

Были получены микрофотографии данных образцов с помощью электронного микроскопа Hitachi 5500 (Центр коллективного пользования КНЦ СО РАН), подтверждающие их монокристаллическую структуру (рис. 2). Также проведен элементный анализ рентгено-флюоресцентным методом, подтвердивший состав образца $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3$.

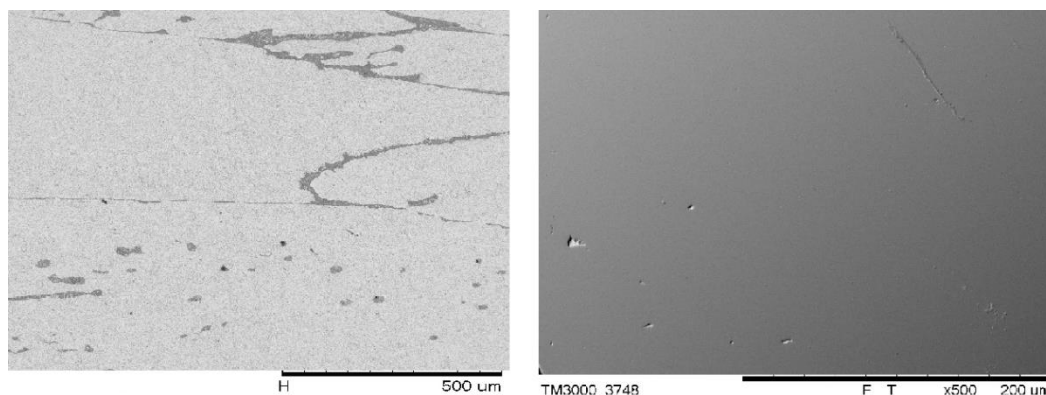


Рис. 2. Фотографии с электронного микроскопа:
 $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3$ – слева, $(\text{La}_{0.9}\text{Nd}_{0.1})_{1.4}\text{Sr}_{1.6}\text{Mn}_2\text{O}_7$ – справа

Из полученных монокристаллов были вырезаны и обработаны образцы, на которых проводились измерения зависимостей электросопротивления от температуры $R(T)$ и электросопротивления от приложенного магнитного поля $R(H)$. Измерения проводились на установке СТ-1 лаборатории СМП Института физики им. Л.В. Кириенского в диапазоне температур от 77.4 К (температура жидкого азота) до 300 К.

На рис. 3 приведена зависимость удельного электросопротивления $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3$ в нулевом приложенном магнитном поле и зависимости электросопротивления от приложенного магнитного поля при температурах равных 77.4, 245, 300 К. На этих графиках виден переход металл-диэлектрик в температуре ≈ 245 К и эффект отрицательного магнитосопротивления в данной температуре перехода металл-диэлектрик.

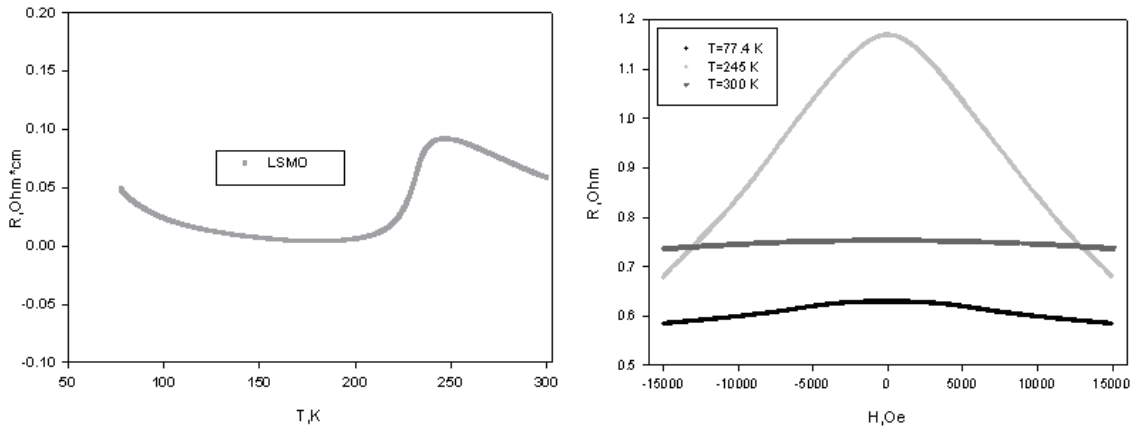


Рис. 3. $La_{0.8}Sr_{0.2}MnO_3$: зависимости $R(T)$ – слева, $R(H)$ – справа

На рис. 4 приведены зависимости удельного электросопротивления вдоль с – оси всех четырех образцов серии $(La_{1-x}Nd_x)_{1.4}Sr_{1.6}Mn_2O_7$ в приложенных магнитных полях 0 и 10 кОе. Из этих графиков можно сделать вывод о сильном влиянии неодима на физические свойства образцов. В концентрациях $x = 0, 0.1$ явно виден максимум сопротивления, тогда как в концентрациях $x = 0.3, 0.5$ при понижении температуры сопротивление резко возрастает до неизвестного предела.

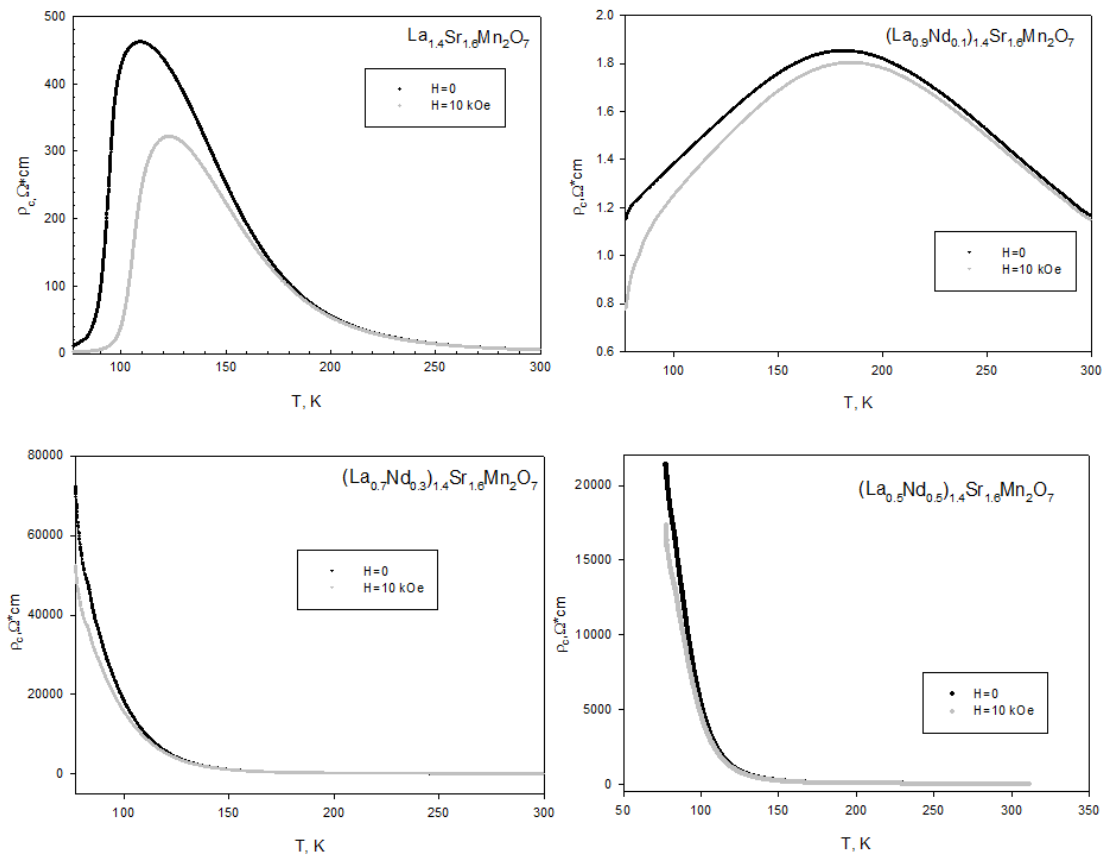


Рис.4. Зависимости $R(T)$ образцов серии $(La_{1-x}Nd_x)_{1.4}Sr_{1.6}Mn_2O_7$

На рис. 5 показаны зависимости электросопротивления от приложенного магнитного поля при температурах равных 77.4, 245, 300 К. На этих графиках видна сильная зависимость сопротивления от приложенного магнитного поля.

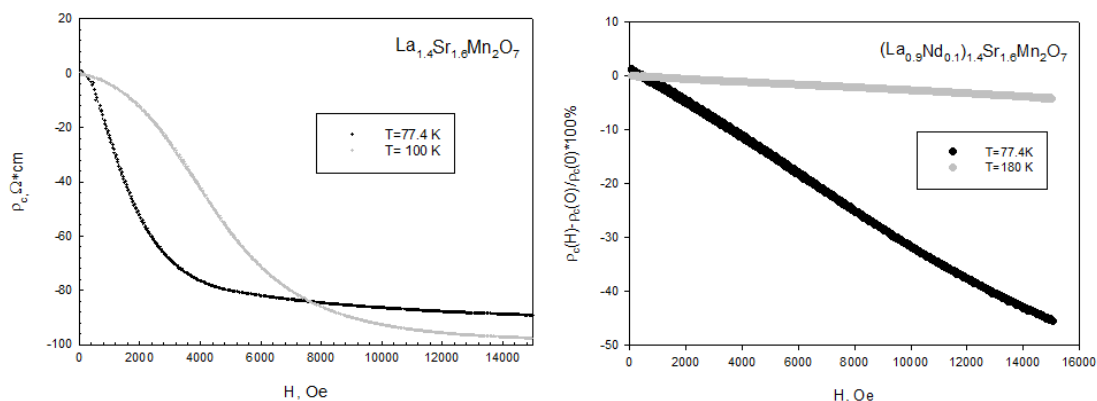


Рис. 5. Зависимости $R(H)$ образцов $(La_{1-x}Nd_x)_{1.4}Sr_{1.6}Mn_2O_7$

В ходе данной работы были выращены, подготовлены и исследованы образцы вышеперечисленных оксидных материалов. На основе полученных экспериментальных данных можно сделать вывод о хорошем качестве монокристаллов, выращенных методом оптической зонной плавки.

УДК 669.224

ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ ВОССТАНОВИТЕЛЯ НА СТЕПЕНЬ ИЗВЛЕЧЕНИЯ МЕТАЛЛА

Е.А.Каплина, И.Л. Гравдан, Н.С. Мирошников,
А.В. Груздев, Ш.Ш. Ширматов

Научные руководители Н.М. Вострикова, Р.Г. Еромасов

Сибирский федеральный университет

Металлические порошки – основа порошковой металлургии, технология которой начинается с их получения. Метод производства и природа соответствующего металла, сплава или металлоподобного соединения определяют химические, физические и технологические свойства получаемого металлического порошка.

Металлический порошок – совокупность частиц металла, сплава или металлоподобного соединения размерами до одного миллиметра, находящихся во взаимном контакте и не связанных между собой.

Часто свойства порошка одного и того же металла существенно изменяются в зависимости от метода производства. Порошки, идентичные по химическому составу, могут иметь разные физические характеристики и резко различаться по технологическим свойствам, что приводит к значительным изменениям условий дальнейшего превращения порошка в готовые изделия и влияет на их свойства. Разнообразие требований, предъявляемых к порошкам в зависимости от области их применения, а также свойства (природа) самих металлов объясняют существование большого числа различных методов производства металлических порошков.

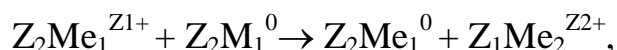
Общепринятым является условное деление этих методов на физико-химические и механические.

К физико-химическим методам относят технологические процессы производства порошков, связанные с глубокими физико-химическими превращениями исходного сырья. В результате получаемый порошок по химическому составу и структуре существенно отличается от исходного материала.

Механические методы обеспечивают превращение исходного материала в порошок без существенного изменения его химического состава. Чаще всего используют размол твердых материалов в мельницах различных конструкций и диспергирование расплавов.

Одним из основных физико-химических способов получения порошков с заданными свойствами является цементация.

Цементация – электрохимический процесс, который часто называют контактным восстановлением, или внутренним электролизом (металл с более отрицательным потенциалом вытесняет из раствора металл с более положительным потенциалом, переходя при этом в раствор). Электрохимическую реакцию между металлом цементатором и ионами вытесняемого металла в общем виде можно записать следующим образом:



где Z_1 и Z_2 -заряды ионов или валентности вытесняемого металла и металла-цементатора.

Для прохождения подобной реакции слева направо вытесняющий металл должен иметь более отрицательный электродный потенциал.

По мере выделения Me_1 его концентрация в растворе уменьшается и, следовательно, значение потенциала становится более отрицательным, а для цементирующего металла Me_2 – наоборот. Процесс вытеснения Me_1 из раствора будет протекать до установления равновесия, когда $\varphi_{Me_1} = \varphi_{Me_2}$.

При погружении в раствор с ионами вытесняемого металла одни из участков металла-цементатора становятся катодами и на них идет выделение

осаждаемого металла, а другие – анодами, где протекает процесс ионизации. Это связано с различием в уровнях энергии атомов, находящихся на поверхности металла-цементатора. Катодные участки возникают на местах поверхности с наиболее высоким электродным потенциалом. Так как катодные и анодные участки соединены, электроны от анодных участков перетекают к катодным, а внешней цепью такого короткозамкнутого элемента служит электролит (раствор соли Me_1 , в котором находится металл-цементатор Me_2). После возникновения катодных участков на них продолжается преимущественное осаждение Me_1 , т. к. это энергетически выгодней, поскольку не требует затраты энергии на образование зародышей новой фазы.

Процесс цементации металла из его раствора определяется двумя последовательными процессами:

- доставкой ионов вытесняемого металла к катодной поверхности металла-цементатора через двойной и диффузионный слой;
- электрохимическим превращением на границе электрод-раствор, протекающим через несколько промежуточных стадий (дегидратация иона, его сорбция, разряд иона на металле-цементаторе с образованием атома металла и пр.).

Скорость реакции замещения зависит от разницы электродных потенциалов. Чем она больше, тем выше скорость цементации. Однако существует ряд других факторов, оказывающих влияние на результат реакции:

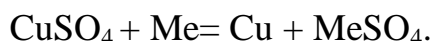
1. Цементирующий материал должен образовывать растворимое соединение с анионом, который связан с замещаемым металлом.
2. Металл-цементатор должен находиться в избытке. Это связано с тем, что реакция замещения проходит на поверхности, и чем больше эта поверхность, тем скорее и полнее протекает реакция.
3. В процессе реакции поверхность металла-цементатора может покрываться выделяемым из раствора металлом, вследствие чего она становится инертной. Поэтому раствор должен циркулировать. В некоторых случаях раствор подвергают действию ультразвука.
4. Повышение температуры не только улучшает условия диффузии, но и снижает энергию активации реакции, и процесс идет интенсивнее, переходя в диффузионную область.

Кроме основных реакций, в процессе цементации при определенных условиях наблюдается выделение водорода (разряд его ионов) и восстановление растворенного кислорода на катодных участках Me_2 . Эти побочные процессы ведут к дополнительным затратам цементирующего металла и растворению выделенного металла.

Цементирующий металл часто используют в форме порошка (цинковая пыль, порошки железа или никеля), качество которого весьма сильно влияет на процесс. Присутствие в порошке более электроотрицательных примесей,

хорошо растворимых в очищенном растворе, способствует реакции цементации. Примеси более электроположительных элементов затрудняют реакцию.

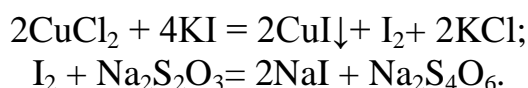
Целью данной работы являлось исследование влияния природы, крупности цементирующего металла на степень восстановления и качество полученных порошков. Исследование проводили на растворе сульфата меди (II) концентрацией 120 г/л и объемом 100 мл. Температуру процесса восстановления изменяли от 20 до 90 °С. Расход металла восстановителя составлял от 50 до 150 % по стехиометрии реакции:



В качестве восстановителей использовали порошки цинка и железа. Размер частиц железного порошка применяемого в процессе восстановления составляла: $-0,08$; $+0,08 \div -0,315$; $+0,315 \div -0,5$; $+0,5$ мм. Продолжительность процесса – 20 мин. В течение процесса контролировали изменения значений рН раствора и окислительно-восстановительного потенциала.

Полученные порошки металла отмывали в растворе соляной кислоты, затем водой и раствором хозяйственного мыла. Структура и крупность полученных порошков меди определялась с помощью микроскопа, а фазовый состав определяли рентгеноструктурным анализом.

Остаточная концентрация меди в растворе определялась иодометрическим титрованием, в основе которого протекают следующие реакции:



Остаточную концентрацию меди определяли по формуле:

$$m_{(\text{Cu})} = \frac{C_{\text{Y}} \left(\frac{1}{2} \text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \right) \cdot M_{\text{Y}}(\text{Cu}) \cdot V_{(\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3)}}{V_{(\text{Cu}^{+2})} \cdot 1000}, \text{ Г}$$

Установлено, что снижение крупности металла-цементатора приводит к увеличению массы получаемого порошка меди (рисунок).

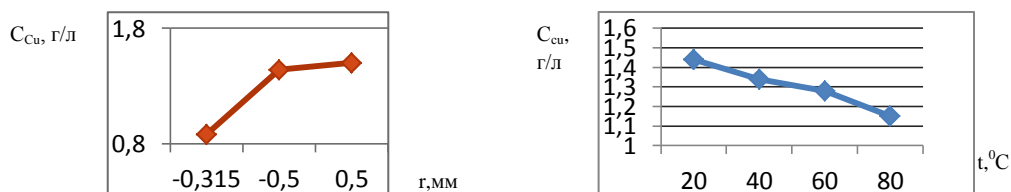


Рис. Зависимость крупности порошка железа (а) и температуры (б) на остаточную концентрацию меди в растворе

Повышение температуры процесса сопровождается повышением степени восстановления металла и уменьшению крупности порошков.

Увеличение расхода металла-цементатора повышает степень извлечения меди из раствора, но загрязняет полученный металл примесью металла-цементатора.

Список литературы

Осокин Е.Н., Артемьева О.А. Процессы порошковой металлургии: курс лекций. [Электронный ресурс]. Красноярск: ИПК СФУ, 2008. 21 с.

УДК 544.15

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИНГЛЕТ-ТРИПЛЕТНОГО ПЕРЕХОДА КЛАСТЕРА $[\text{Fe}_2\text{S}_2(\text{SCH}_3)_4]^{2-}$

А.О. Лыхин

Научный руководитель А.А. Кузубов

Сибирский федеральный университет

Комплексы переходных металлов могут существовать в различных спиновых состояниях, что играет важную роль в неорганической химии, а ввиду распространенности переходных металлов в биологических системах, и в бионеорганической химии тоже [1]. Изменение спинового состояния может быть использовано как для повышения реакционной способности соединения [2], так и для изменения механизма реакции с его участием [3]. Вместе с тем подобные химические реакции, протекающие с изменением спинового состояния, являются формально запрещенными [4]. Однако в случае комплексов переходных металлов запрет на квантовые переходы снимается за счет спин-орбитального взаимодействия, приводящего к смешению волновых функций различных спиновых состояний. Протекание спин-запрещенной реакции с одной стороны связано с достижением критической энергии в точке пересечения адиабатических поверхностей потенциальной энергии (ППЭ) двух различных состояний, с другой стороны с вероятностью неадиабатического перехода между ними. В этой связи ключевым этапом на пути определения констант скорости химических реакций квантово-химическими методами является построение пересечения конических ППЭ.

Целью данной работы явилось определение точки пересечения ППЭ синглетного и триплетного состояний окисленной формы кластера

$[\text{Fe}_2\text{S}_2(\text{SCH}_3)_4]^{2-}$, являющегося аналогом активного центра белка ферредоксина, а также установление его электронной структуры.

Ферредоксин относится к одному из наиболее распространенных и универсальных переносчиков электронов в биологических системах. Механизм электронного переноса представляется чрезвычайно важным ввиду понимания фундаментальных вопросов разработки новых синтетических катализаторов [5]. Активный центр ферредоксина представлен ромбическим кластером $[\text{Fe}_2\text{S}_2]$, который посредством терминальных атомов серы связан с цистеиновыми фрагментами, формирующими тетраэдрическое окружение вокруг каждого атома железа. В модели активного центра белка цистеиновые остатки были заменены на тиометильные группы.

На основании квантово-химических расчетов приведенной модели в рамках теории функционала плотности были рассмотрены пять наиболее энергетически выгодных структур окисленной формы кластера $[\text{Fe}_2\text{S}_2(\text{SCH}_3)_4]^{2-}$, отличающихся величинами двугранных углов $\text{Fe}-\text{Fe}-\text{S}_t-\text{C}$, где S_t – терминальные атомы серы. Моделирование конформеров проводилось в квантово-химическом пакете GAMESS [6] с использованием обменно-корреляционного функционала PBE [7] в базисном наборе def2-TZVP [8]. Оптимизация конформеров выполнялась без наложения ограничений по симметрии до достижения стандартного критерия сходимости. Подробно были рассмотрены конформеры в синглетном в триплетном спиновом состоянии. Отличия между конформерами связаны с различным положением тиометильных групп. Фрагмент кластера $[\text{Fe}_2\text{S}_2]$ имеет плоское строение. Выход атома серы из плоскости трех атомов не превышает 4° (рис. 1).

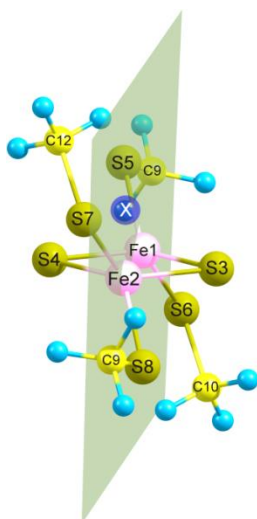


Рис. 1. Строение кластера $[\text{Fe}_2\text{S}_2(\text{SCH}_3)_4]^{2-}$

Наиболее выгодными конформерами в синглетном спиновом состоянии являются конформеры D1 и E1, различия между которыми заключаются в зеркальном отражении тиометильных групп при атоме Fe1 относительно

плоскости σ . В случае триплетного состояния самой низкой энергией обладает конформер С3. При оптимизации синглетного состояния структуры С3 был получен конформер Х1 близкий по энергии к D1 и E1 и вместе с тем имеющий геометрию наиболее близкую к исходной структуре С3 (рис. 3).

Распределение спиновой плотности на атомах железа для конформеров в синглетном состоянии свидетельствует об антиферромагнитном упорядочении спинов, при котором неспаренные электроны с одинаковым спином локализованы на разных атомах железа. Рассчитанные спиновые плотности для Fe1 и Fe2 в синглетном состоянии равны по абсолютным значениям и противоположны по знаку (рис. 2).

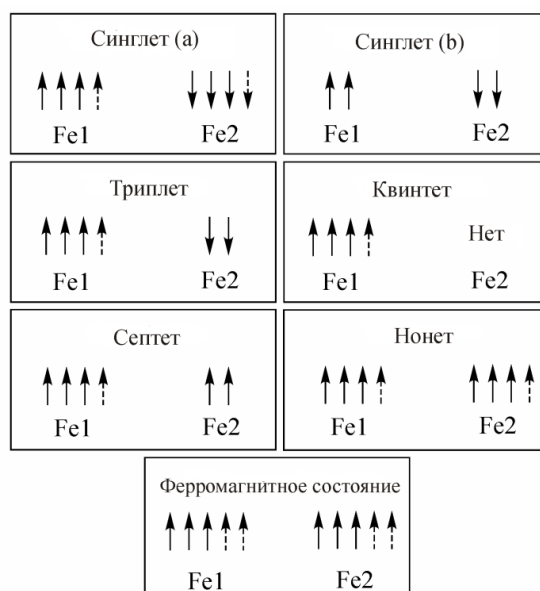


Рис. 2. Спиновая заселенность атомов железа кластера $[Fe_2S_2(SCH_3)_4]^{2-}$. Пунктирными стрелками обозначены неспаренные делокализованные электроны

Величина квадрата вектора спинового момента для оптимизированных конформеров в синглетном состоянии свидетельствует о наличии двух возможных решений волновой функции системы связанных с различной спиновой заселенностью атомов железа. Высокие значения $S^2 = 4.0$ наблюдаются для наиболее энергетически выгодных конформеров, находящихся в синглетном состоянии (X1, D1, E1). На рис. 2 приведена диаграмма спиновой заселенности атомов железа, согласно которой структурам с S^2 равным 4.0 и 2.2 соответствуют состояния «а» и «б». В синглетном состоянии типа «а» наблюдается делокализация одного α электрона по Fe1 и связанным с ним терминальным атомам серы. В свою очередь один β электрон распределен по Fe2 и оставшимся терминальным атомам серы. В синглетном состоянии типа «б» делокализация неспаренных электронов отсутствует. При увеличении мультиплетности системы делокализация неспа-

ренных электронов связана в равной степени, как с терминальными, так и с мостиковыми атомами серы. Для состояний с $M = 9$ и $M = 1$ из-за вкладов делокализованных электронов обоих центров Fe1 и Fe2 спиновая заселенность мостиковых атомов становится выше терминальных.

Различия в строении между конформерами C3 ($S = 1$) и X1 ($S = 0$) состоят в том, что внешние атомы серы одного из атомов железа выходят из плоскости σ , при сохранении положения метильных групп (рис. 3). Таким образом, триплет-синглетный переход с изменением геометрии, осуществляется смещением внешних атомов серы, связанных с одним центром. Путь перехода между конформерами C3 и X1 был разделен на 10 промежуточных геометрий. Плавное изменение положений атомов при переходе от одной структуры к другой достигалось путем интерполяции геометрических параметров системы во внутренних координатах [9].

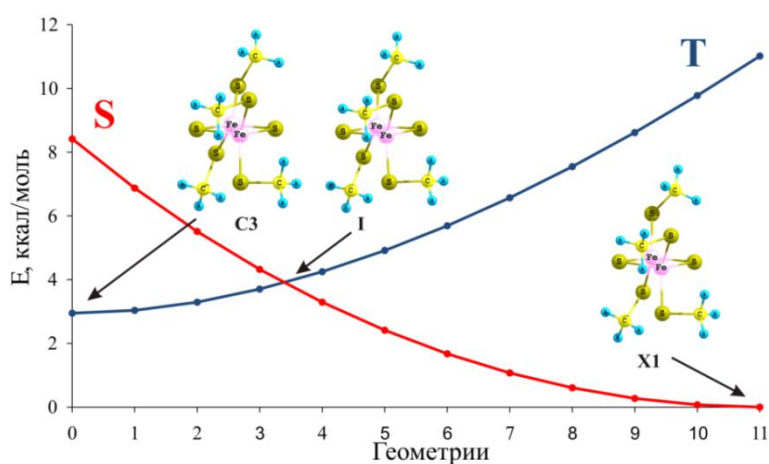


Рис. 3. Триплет-синглетный переход

Геометрия, соответствующая пересечению кривых, использовалась в качестве исходной при поиске минимума энергии на пересечении синглетной и триплетной поверхностей потенциальной энергии. Поиск минимума проводился при помощи процедуры MEX пакета GAMESS. Разница между энергией конформера C3 в триплетном спиновом состоянии и переходным состоянием составила 0,95 ккал/моль. Положение точки пересечения диабатических ППЭ согласуется с принципом Хэммонда и свидетельствует о малой реорганизации кластера необходимой для достижения переходного состояния.

Для уточнения электронной конфигурации кластера в синглетном и триплетном спиновых состояниях были проведены расчеты методом многоконfigurационного самосогласованного поля с полным активным пространством, включающим 10 орбиталей и 10 d-электронов атомов железа (рис. 4).

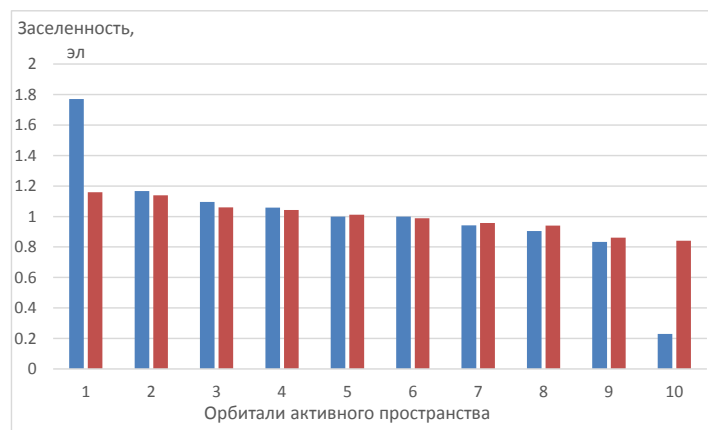


Рис. 4. Заселенность орбиталей активного пространства; синим – триплетное состояние, красным – синглетное состояние

В соответствии с заселенностью орбиталей активного пространства определено, что в синглетном состоянии кластер является антиферромагнетиком, а в триплетном – ферромагнетиком. Нижняя по энергии орбиталь активного пространства триплета дважды занята, верхняя орбиталь – вакантна, в то время как остальные орбитали содержат неспаренные электроны. Электронная структура кластера при движении вдоль координаты реакции в синглетном и триплетном состояниях меняется незначительно.

Таким образом, воздействуя на геометрические параметры модельного кластера активного центра ферредоксина $[\text{Fe}_2\text{S}_2(\text{SCH}_3)_4]^{2-}$, в частности положения лигандов, можно инициировать квантовые переходы с изменением мультиплетности системы.

Список литературы

1. Schröder D., Shaik S., Schwarz H. Acc. Chem. Res. 2000. Vol. 33. P. 139–145.
2. Xue G., Hont R. D., Münck E., Que L. Nature Chem. 2010. Vol. 2. P. 400–405.
3. Cui G., Sun Z., Fang W. J. Phys. Chem. A. 2011. – Vol. 115. № 36. P. 10146–10153.
4. Harvey J.N. Phys. Chem. Chem. Phys. 2007. Vol. 9. P. 331–343.
5. Niu S., Ichiye T. Molecular Simulation. 2011. Vol. 37. № 7. P. 572–590.
6. Schmidt M.W. et al. Journal of Computational Chemistry. 1993. Vol. 14. P. 1347–1363.
7. Perdew J. P., Burke J., Ernzerhof M. Phys. Rev. Letters. 1996. Vol. 77. P. 3865–3868.
8. Weigend F., Ahlrichs R. Phys. Chem. Chem. Phys. 2005. Vol. 7. P. 3297–3305.
9. Bode B.M., Gordon M.S. J. Mol. Graphics Mod. 1998. Vol. 16. P. 133–138.

Научное издание

МОЛОДЕЖЬ И НАУКА

**Материалы IX Всероссийской
научно-технической конференции
студентов, аспирантов и молодых ученых,
посвященной 385-летию со дня основания г. Красноярска**

В трех томах

Том 2

Ответственный за выпуск
Краев Олег Альбертович

Корректор С.В. Хазаржан
Компьютерная верстка А.А. Быковой

Подготовлено к публикации ИЦ БИК СФУ

Подписано в печать 25.07.2013 г. Формат 60×84/16.

Бумага офсетная. Печать плоская

Усл. печ. л. 5,8. Уч.-изд. л. 4,06.

Тираж 100 экз. Заказ 2825.

Издательский центр
Библиотечно-издательского комплекса
Сибирского федерального университета
660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79
Тел/факс (391)206-21-49. E-mail rio@sfu-kras.ru
<http://rio.sfu-kras.ru>

Отпечатано Полиграфическим центром
Библиотечно-издательского комплекса
Сибирского федерального университета
660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 82а
Тел/факс (391)206-26-67, 206-26-49
E-mail: print_sfu@mail.ru; <http://lib.sfu-kras.ru>