

МАТЕМАТИКА И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ



РОСАТОМ



РФЯЦ-ВНИИЭФ



X

Всероссийская молодежная
научно-инновационная
школа «Математика
и математическое
моделирование»
12 – 14 апреля 2016 г.

Саров
2016



УДК 5
ББК 30-1
В 60

МАТЕМАТИКА И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ.

Сборник материалов X всероссийской молодежной научно – инновационной школы. Саров, 2016. - 248 с.

Настоящая книга является сборником материалов, представленных на X Всероссийской молодежной научно - инновационной школе «Математика и математическое моделирование», проведенной СарФТИ НИЯУ МИФИ с 12 по 14 апреля 2016 г.

Материалы докладов подготовлены студентами, аспирантами, научными сотрудниками и преподавателями вузов РФ, специалистами и учеными РФЯЦ - ВНИИЭФ, академических институтов, научных организаций. Материалы докладов охватывают широкий круг вопросов, связанных с современными проблемами теоретической математики и физики, математическим моделированием физических и химических процессов и явлений, информационными технологиями в математическом моделировании, безопасности информационно - технических систем, использованием математических методов в экономике, социологии и проблеме нераспространения ядерных материалов и вооружений.

Для студентов, аспирантов, инженерно-технических и научных работников, специализирующихся в областях математики и математического моделирования.

Ответственный за выпуск -
руководитель СарФТИ НИЯУ МИФИ, к.ф.- м.н. Сироткина А.Г.
Дизайн и верстка Тарасов В.А.

*Материалы докладов издаются в авторской редакции
Материалы получены до 01.04.2016
Отпечатано: ООО «Интерконтакт»,
г. Саров, ул. Герцена, 46, оф. 101.
Подписано в печать 05.04.2016. Формат 60x84 1/16.
Печ.л. 10,21. Тираж 120 экз. Заказ № 351*

*Саровский физико - технический институт НИЯУ МИФИ
607186, Саров, ул.Духова, 6, www.sarfti.ru
Организационный комитет: т. (83130)3-92-77, e-mail: eelomteva@mephi.ru*

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЯДЕРНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ МИФИ
САРОВСКИЙ ФИЗИКО – ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ НИЯУ МИФИ

МАТЕМАТИКА И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
X ВСЕРОССИЙСКОЙ МОЛОДЕЖНОЙ
НАУЧНО – ИННОВАЦИОННОЙ ШКОЛЫ

12 – 14 апреля 2016г.

Саров

Секция

**БЕЗОПАСНОСТЬ
ИНФОРМАЦИОННЫХ И
ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

Председатель жюри –

Фомченко В.Н., д.т.н., Главный конструктор ФГУП «РФЯЦ ВНИИЭФ», профессор кафедры радиофизики и электроники СарФТИ НИЯУ МИФИ

Члены жюри –

Астайкин А.И., д.т.н., профессор, главный научный сотрудник ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», заведующий кафедрой радиофизики и электроники СарФТИ НИЯУ МИФИ

Мартынов А.П., д.т.н., профессор, начальник отдела ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», профессор, заместитель заведующего кафедрой радиофизики и электроники СарФТИ НИЯУ МИФИ

Гончаров С.Н., к.т.н., доцент, начальник лаборатории ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», доцент кафедры ОТДиЭ СарФТИ НИЯУ МИФИ

Николаев Д.Б., к.т.н., доцент, в.н.с. ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», доцент кафедры радиофизики и электроники СарФТИ НИЯУ МИФИ

АНАЛИЗ ВОЗМОЖНОСТИ ПОСТРОЕНИЯ ГИБРИДНЫХ ЗАЩИЩЕННЫХ СИСТЕМ ДЛЯ НАДЕЖНОЙ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ПЕРЕДАЧИ ДАННЫХ В КВАНТОВЫХ КАНАЛАХ СВЯЗИ

АСТАЙКИН В.О.¹, НИКОЛАЕВ Д.Б.¹, КАЗАКОВ Д.А.²,
ШИШКОВ В.Ю.³

¹САРФТИ НИЯУ МИФИ

²ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

³МОСКОВСКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
(ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ)

На сегодняшний день компьютерная безопасность занимает очень важное и актуальное место в вычислительных технологиях. Поэтому необходимо обеспечивать безопасность в сфере передачи данных. Степень надежности криптозащиты определяет безопасность информации. Совмещение принципов квантового плотного кодирования и квантовой природы канала передачи информации позволяют осуществить высокоэффективные методы сохранения данных пользователей. При этом следует отметить, что, несмотря на свою новизну, квантовые системы обладают рядом уязвимостей, а протоколы имеют свои пробелы с точки зрения обеспечения безопасности.

Большинство существующих квантово-криптографических протоколов используют в качестве параметра тип поляризации фотонов. При этом, имеется возможность измерения неизвестного состояния фотона путем измерения самого типа поляризации. Данная методология следует из того, что на выходе согласно эффекту испускания активного вещества будут находиться фотоны именно с одинаковым типом поляризации.

Проводимые исследования показали, что для построения систем криптостойкой квантовой передачи информации можно применять гибридные быстродействующие алгоритмы защиты информации, которые используют комбинированные криптоалгоритмические и стеганографические решения, позволяющие обеспечить защиту данных, в том числе и на уровне системного и прикладного программного обеспечения, на уровне принципиально нового познания квантовых процессов.

В докладе рассмотрены вопросы методологии создания гибридных быстродействующих алгоритмов защиты информации для систем криптостойкой квантовой передачи данных.

Литература

1. Вербовецкий А.А. Основы проектирования цифровых оптоэлектронных систем связи. – М.: Радио и связь. – 2000. – 160 с.: ил.

2. Маккавеев В. // Компоненты и технологии. 2006. №2.
3. Нолле Т. В ожидании быстрой оптики // Журнал сетевых решений/LAN . 2001. №4. с. 112.
4. Слепов Н. Оптическое мультиплексирование с разделением по длине волны // Сети. 1999. №4. с. 24.
5. Фриман Р. Волоконно-оптические системы связи. М.: Техносфера. 2003.

АНАЛИЗ ВОПРОСОВ МОНИТОРИНГА ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫХ КАНАЛОВ СВЯЗИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СОВРЕМЕННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Башлаков М.В.¹, Голихин М.В.¹, Рыжов А.А.¹, Мартынов А.П.²

¹ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

²САРФТИ НИЯУ МИФИ

В существующих системах контроля и управления (мониторинга) высокотехнологичной продукцией велико влияние «человеческого фактора» на достоверность и легитимность собираемых данных о состоянии изделий и процессов. Кроме этого, существуют большие потери времени на подготовительные, отчетные операции и низкий уровень оперативности и качества управления.

Следует отметить, что основой обеспечения постоянной готовности высокотехнологичной продукции к использованию по назначению является проведение в установленные сроки контроля ее технического состояния с последующим полным и качественным выполнением работ по техническому обслуживанию и ремонту в соответствии с требованиями нормативно-технической документации и техническим состоянием конкретных приборов и устройств, а также сбор и обработка информации по результатам их эксплуатации. Принципиальные недостатки, присущие принятой в настоящее время схеме организации работ, а именно: организационно-временная разобщенность процессов мониторинга и управления техническим состоянием конкретных приборов и устройств и информационная недостаточность (в части полноты, актуальности и достоверности) собираемых сведений не позволяют получать и использовать в «реальном времени» ряд важных характеристик изделий, в том числе, показателей эксплуатационной и ремонтной технологичности, метрик организационно-деловых процессов, стоимости отдельных работ и др., что, в конечном итоге, приводит к снижению качества обслуживания, уровня готовности парка высокотехнологичной аппаратуры и повышению финансовых затрат.

В качестве базы для построения для построения системы мониторинга последовательных каналов связи может быть использован информа-

ционно-технический аналог, представленный в виде взаимосвязанных интерфейсом командных пулов, управляемых потоком данных. В соответствии с принципами монолитности исполнения и многофункциональности памяти обработку данных следует проводить непосредственно в локальных пулах команд путем выполнения последовательных операций чтения – модификации – записи.

В результате проведения исследований разработана методика информационно-технического развития систем мониторинга последовательных каналов связи, отличающаяся использованием адаптируемых экспертных оценок, интеллектуальных механизмов управления для минимизации соотношения «затраты/эффективность», а также предложен программно-аппаратный комплекс мониторинга последовательных каналов связи, отличающийся учетом достоверности передачи данных и анализом потенциального ущерба от реализации внешних воздействий.

Литература

1. Грибунин В.Г., Мартынов А.П., Николаев Д.Б., Фомченко В.Н. Криптография и безопасность цифровых систем: Учебное пособие / Под ред. А.И. Астайкина. Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2011, 411 с.
2. Немченко И.А., Гончаров С.Н., Николаев Д.Б. «Разработка тестового комплекса для обеспечения контроля управляющих параметров электронных устройств». Сборник докладов 13-ой Всероссийской научно-практической конференции «Актуальные проблемы защиты и безопасности», г. Санкт-Петербург, 2010г.

АНАЛИЗ СОВРЕМЕННЫХ УГРОЗ ИНФОРМАЦИОННОЙ БЕЗОПАСНОСТИ ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ

Булгакова А.О.¹, Николаев Д.Б.¹, Беликов А.Е.²

¹САРФТИ НИЯУ МИФИ

²ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

Информационная безопасность страны является составной частью ее национальной безопасности. Она призвана обеспечить информационный суверенитет государства и способствовать успешному проведению экономических преобразований, укреплению политической стабильности общества.

Кардинальное реформирование социально-экономических отношений в нашей стране, интегрирование в мировое экономическое сообщество в значительной степени повысило роль информационных ресурсов

нашего государства. На этом фоне актуальный характер носят вопросы обеспечения информационной безопасности Российской Федерации как неотъемлемого элемента национальной безопасности, а защита информации является одной из приоритетных государственных задач.

Производство и управление, оборона и связь, транспорт и энергетика, банковское дело, финансы, наука и образование, средства массовой информации всё больше зависят от интенсивности информационного обмена, полноты, своевременности, достоверности и безопасности информации. В связи с этим проблема безопасности информации стала предметом острой озабоченности руководителей органов государственной власти, организаций и предприятий независимо от их организационно-правовых форм и форм собственности.

Любое фундаментальное техническое или технологическое новшество, предоставляя возможности для решения одних социальных проблем и открывая широкие перспективы их развития, всегда вызывает обострение других или порождает новые, ранее неизвестные проблемы, становится для общества источником новых потенциальных опасностей, опасных технологий. К таким технологиям, наряду с транспортом и энергетикой, относится и информатизация общества.

Бурное развитие средств вычислительной техники открыло перед человечеством небывалые возможности по автоматизации умственного труда и привело к созданию большого числа разного рода автоматизированных информационно-телекоммуникационных и управляющих систем, к возникновению принципиально новых, информационных технологий. Неправомерное искажение или фальсификация, уничтожение или разглашение определенной части информации, равно как и дезорганизация процессов ее обработки и передачи в информационно-управляющих системах наносят серьезный материальный и моральный урон многим субъектам (государству, юридическим и физическим лицам), участвующим в процессах автоматизированного информационного взаимодействия. Интересы этих субъектов, как правило, заключаются в том, чтобы определенная часть информации была бы постоянно легко доступна и, в то же время, надежно защищена от неправомерного ее использования, нежелательного разглашения, фальсификации, незаконного тиражирования или уничтожения.

В докладе проведен анализ современных угроз информационной безопасности технических систем и технологических решений применительно к вопросам сращивания государственных и криминальных структур в информационной сфере, получения криминальными структурами доступа к конфиденциальной информации, усиления влияния организованной преступности на жизнь общества, снижения степени защищенности законных интересов граждан, общества и государства в информационной сфере.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОПРОСОВ ИДЕНТИФИКАЦИИ НА ОСНОВЕ МЕТОДА ВЫДЕЛЕНИЯ РЕЧЕВОГО БАЗИСА

Васильев Р.А., Николаев Д.Б.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Наиболее широкое применение в биометрической идентификации получили следующие параметры человека: особенности геометрии лица, отпечатки пальца, геометрия ладони рук, сетчатка и радужная оболочка глаза, голосовые характеристики, особенности подписи и клавиатурный подчерк. В некоторых случаях применение биометрических характеристик человека осложнено. Геометрии лица свойственна низкая уникальность, для анализа сетчатки и радужной оболочки глаза требуется дорогостоящее оборудование. Параметрам клавиатурного подчерка и подписи свойственна низкая стабильность и зависимость от эмоционального состояния человека. При применении сканеров отпечатков пальцев и геометрии ладони рук возможны вопросы чистоты контактных площадок и соблюдения санитарных норм.

Свести к минимуму недостатки указанных выше методов биометрической идентификации пользователей позволит разработка нового бесконтактного метода с использованием биометрических характеристик.

К подобному методу биометрической идентификации пользователей информационных систем относится идентификация по голосу, позволяющая получать и передавать в удостоверяющий центр биометрические данные без применения специализированных и дорогостоящих съемников биометрической информации: достаточно иметь телефон или микрофон, подключенный к компьютеру.

В большинстве существующих систем идентификации по голосу отсутствует настройка алгоритмов под изменяющиеся условия применения (уровень шума, фонемы речи конкретного человека, ошибки идентификации и т.д.), для осуществления процедуры идентификации используется спектральный анализ входного звукового сигнала и эталонного сигнала, записанного в базу, тем самым существует привязка к эталонным фразам.

Поэтому актуальной становится задача создания нового метода и алгоритма идентификации голосового сообщения по индивидуальным характеристикам голоса без представленных недостатков, позволяющая производить текстонезависимую идентификацию в условиях малой обучающей выборки, а также создать систему идентификации дикторов по голосу, реализующую данную модель и позволяющей её тестировать.

Новизна метода идентификации заключается в кластеризации голосовых эталонов диктора, при этом звуковой сигнал сегментируется на элементарные речевые единицы (речевой базис). Далее все сегменты

последовательно сравниваются с порогом по длительности и спектру, и в случае недостаточной длины и несоответствия спектра, текущий сегмент отбрасывается, переходя к следующему сегменту. После отбора таким образом элементарных речевых единиц, они проверяются на соответствие уже существующим в базе данных фреймам путем расчета вероятности информационного рассогласования между самим сегментом и эталонной реализацией фрейма. Элементарные речевые единицы относятся к тому фрейму, где вероятность информационного рассогласования минимальна, при условии, что она не превышает некоторого априорно установленного порога, после этого формируется кластер эталонов диктора. В противном случае формируем новый фрейм, который будет содержать единственный элемент – эту элементарную речевую единицу.

ПРИМЕНЕНИЕ РЕЧЕВОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ В СИСТЕМАХ РАЗГРАНИЧЕНИЯ ДОСТУПА

Васильев Р.А., Николаев Д.Б.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

В последние годы для идентификации личности человека наиболее перспективным считается применение биометрических технологий, особенно в системах разграничения доступа, при проведении финансовых операций, при запросах информации ограниченного доступа по телефону, при управлении различными устройствами, в криминалистике и т.д. Применение биометрических технологий обладает рядом существенных преимуществ перед традиционными средствами идентификации, например надёжность идентификации и удобство использования. Свести к минимуму недостатки указанных выше методов биометрической идентификации пользователей позволит разработка нового бесконтактного метода с использованием биометрических речевых характеристик.

Для реализации разграничения доступа с использованием речевых идентификационных признаков может быть использован программный комплекс с расширенным функционалом для идентификации дикторов. Варианты применения данной информационной системы можно привести из самых различных областей. Это может быть, например, задача идентификации диктора по голосу, как для отдельного диктора, так и для группы дикторов, в зависимости от возраста, пола, национальности, эмоционального состояния. В качестве прикладной задачи можно привести удаленную идентификацию диктора при передаче речевого сигнала по каналам связи при низком качестве речи и высоком уровне помех.

В основу программного комплекса разграничения доступа с использованием речевых идентификационных признаков положен алгоритм идентификации, использующий в своей основе метод накопления полезной информации по результатам сравнения двух фонетических баз данных: тестируемой и эталонной (точнее, одной из эталонных) на множестве их элементарных речевых единиц. Указанный принцип широко применяется во многих системах при обработке информации на фоне помех, в частности, в радиолокационных системах. Основываясь на данном принципе был разработан новый метод статистического анализа фонем диктора для решения задачи идентификации по голосу.

В радиолокационных системах совокупность участков одной и той же дальности в различных азимутальных позициях зоны обзора составляет кольцо дальности, в котором и происходит накопление импульсных сигналов, что соответствует логике разработанной кластерной модели речевых единиц, где присутствует информационный центр множества реализаций фонем диктора и представлено информативное описание свойств речевой единицы.

Новизна и инновационность разработанного комплекса идентификации по голосу заключается в независимости от языка, национальности, возраста, пола, эмоционального состояния и здоровья диктора. Для идентификации требуется парольная фраза длиной всего 3-5 секунд, что позволяет существенно экономить время при прохождении этой процедуры и полностью ее автоматизировать. Динамически меняющаяся парольная фраза, которую предлагают произнести пользователю (например определенную последовательность цифр) позволяет надежность систем разграничения доступа и защиты информации.

Полученные результаты применимы как в системах защиты информации от несанкционированного доступа, использующие параметры голоса для идентификации пользователей, так и в системах разграничения доступа в помещения с голосовой идентификацией.

АНАЛИЗ ВОПРОСОВ ПОСТРОЕНИЯ ПРОГРАММНЫХ СИСТЕМ ОБРАБОТКИ РАЗНОРОДНЫХ ДАННЫХ

Емельянов А. А., Николаев Д. Б.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Информационным и аналитическим службам предприятий в своей работе приходится сталкиваться с самыми разнообразными источниками информации. Технология обработки информации из различных источников обеспечивает автоматизированный ввод (включающий тематический анализ текста, обработку, хранение и поиск) и получение статистических сводок и дайджестов.

На сегодняшний день основным методом аналитической обработки информационных массивов данных остается ключевой поиск данных. Интеллектуальность этой операции повышается за счет автоматического ранжирования найденных данных с использованием достаточно простых методов определения их значимости, учета идентификационных признаков.

Однако для решения современных аналитических задач, особенно учитывая огромный объем исходной информации, этого явно недостаточно.

Следует заметить, что проблема работы с огромным количеством информации имеет два аспекта: один – это автоматический сбор информации (на что, собственно, и ориентированы упомянутая выше система и аналоги), а другой – автоматический разбор поступившей информации, проведенный на основе анализа идентификационных признаков.

Существующие подходы к анализу данных можно разбить на два класса. К первому классу предлагается отнести быстрые алгоритмы, не зависящие от базовых параметров информационных массивов, которые используют статистические методы. Второй класс образуют достаточно изощренные, дающие хороший результат, но сравнительно медленные подходы, зависящие от базовых параметров информационных массивов и в большинстве своем основанные на лингвистических методах.

Не вызывает сомнения, что наиболее эффективным будет подход, сочетающий в себе быстроту и независимость от языка алгоритмов первого класса с высоким качеством обработки второго.

Вообще говоря, сегмент аналитических систем, ориентированных на математический и статистический анализ различных количественных и качественных показателей, развивается на рынке программного обеспечения уже давно. Однако до полного решения задачи анализа огромного объема информации еще достаточно далеко.

В докладе рассматривается универсальный разборщик форматов, который дает возможность полностью автоматизировать ввод электронных информационных потоков из гетерогенных источников с приведением информации к единому внутреннему представлению, а также свести к минимуму рутинную работу по вводу нерегулярных данных. Важное обстоятельство – гибкость предложенной технологии тематической фильтрации. Диапазоны достоверных оценок релевантности данных заданным базовым параметрам также должны быть доступны эксперту в качестве инструмента анализа или самообучения системы на свежих данных.

Эффективность информационно-аналитических систем такого класса может быть повышена благодаря развитию и внедрению методов искусственного интеллекта в применении к анализу данных, в частности, методов автоматического семантического анализа данных, понимания смысла

МОДЕЛИРОВАНИЕ МОДУЛЯЦИОННОГО МЕТОДА ПРИЕМА ИНФОРМАТИВНЫХ СИГНАЛОВ ПОБОЧНОГО ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

ЕВСТИФЕЕВ А.А.¹, ЕРОШЕВ В.И.¹, КАЗАКОВ А.А.¹,
НИКОЛАЕВ Д.Б.², МАРТЫНОВ А.П.²

¹ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

²САРФТИ НИЯУ МИФИ

При обработке конфиденциальной информации техническими системами, существует угроза ее перехвата по каналу побочного электромагнитного излучения (ПЭМИ). Подобные излучения могут обнаруживаться на довольно значительных расстояниях и использоваться злоумышленниками, пытающимися получить доступ к конфиденциальной информации. Специалистам по защите информации нормативно-методическая документация предписывает проведение измерений с помощью пикового (квазипикового) детектора. При высоком уровне внешних помех измерения с помощью данного типа детектора дают большую ошибку.

Основная трудность при приеме слабых сигналов связана с необходимостью их выделения на фоне внешних помех и собственных шумов, создаваемых каскадами приемника. В практике радиоизмерений для оценки мощности предельно слабых радиосигналов широкое применение получили радиометрические измерители – радиометры, но они находят ограниченное практическое применение в силу нестабильности их характеристик. Выходом является использование модуляционного радиометра, который отличается наличием модулятора на входе. Модулятор осуществляет периодическое, с частотой модуляции, подключение к входу радиотракта антенны или генератору шума с известной мощностью. Такой подход позволяет уменьшить влияние нестабильности характеристик каскадов приемника на результаты измерений.

В данной работе проведено моделирование алгоритма работы модуляционного радиометра. Анализ полученных данных показал эффективность возможного обнаружения сигналов ПЭМИ при высоком уровне внешних помех. Так же результаты моделирования показали возможность использования модуляционного радиометра в качестве индикатора минимального уровня внешних шумов, при котором возможна безопасная работа ТС.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОПРОСОВ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ЦИФРОВЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ ДЛЯ ПЕРЕДАЧИ ПО КАНАЛАМ СВЯЗИ С ЗАДАННЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ

КАЗАКОВ Д.А.¹, НИКОЛАЕВА И.А.²

¹ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

²САРФТИ НИЯУ МИФИ

Кодирование информации – это процесс формирования определенного представления информации. В более узком смысле под термином «кодирование» часто понимают переход от одной формы представления информации к другой, более удобной для хранения, передачи или обработки. Компьютер может обрабатывать только информацию, представленную в числовой форме. Аналогично на компьютере можно обрабатывать текстовую информацию. При вводе в компьютер каждая буква кодируется определенным числом, а при выводе на внешние устройства для восприятия человеком по этим числам строятся изображения букв. Соответствие между набором букв и числами называется кодировкой символов.

Современные технические системы, ограниченные базовым набором функциональных узлов, определенных в соответствии с регламентирующими перечнями, предполагает использование эффективных алгоритмов кодирования, частично устраняющих аппаратную зависимость от базисного набора элементов и повышающих параметры разрабатываемых систем обработки информации.

В настоящей статье излагаются математические результаты, связанные с наиболее простым методом кодирования – побуквенным кодированием, так же рассмотрена проблема распознавания взаимной однозначности алфавитного кодирования и затронут вопрос нейроподобных сетей на основе топологических преобразований цифровых последовательностей в рамках компьютерного моделирования для распознавания речевых команд.

Согласно рассматриваемому подходу система распознавания взаимной однозначности алфавитного кодирования реализуется в виде единой иерархической адаптивной системы. Адаптивные свойства системы базируются на специальных механизмах сетей, а обучающим фактором являются присутствующие в данных скрытые закономерностей и информационная избыточность. Начальная настройка системы производится на наборе известных данных (речевых команд), составляющих обучающую выборку входных векторов. Адаптивная система производит классификацию векторов речевых команд. Процесс адаптации заключается в сравнении очередного вектора характеристик с

функциональными параметрами прототипов, в результате чего входной вектор либо будет отнесен к одному из известных классов (по критерию близости к функциональным параметрам одного из прототипов), либо будет произведено расширение классификации за счет добавления нового речевого прототипа с параметрами предъявленного вектора.

Таким образом, рассмотренный подход позволяет проводить распознавание взаимной однозначности алфавитного кодирования с использованием адаптивной системы, реализующей методику многокритериального выбора решений для определения показателей анализа основных характеристик речевых команд.

АНАЛИТИЧЕСКОЕ УПРАВЛЕНИЕ КРИПТОГРАФИЧЕСКИМИ СИСТЕМАМИ ПУТЕМ ДИНАМИЧЕСКОГО ИЗМЕНЕНИЯ БАЗИСНЫХ ПАРАМЕТРОВ

КАЗАКОВ Д.А.¹, КАЗАКОВ С.С.¹, НИКОЛАЕВА И.А.²

¹ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

²САРФТИ НИЯУ МИФИ

При выработке подходов к решению проблемы информационной безопасности следует всегда исходить из того, что защита информации не является самоцелью. Конечной целью создания системы защиты информации является защита всех категорий субъектов, прямо или косвенно участвующих в процессах информационного взаимодействия, от нанесения им ощутимого материального, морального или иного ущерба в результате случайных или преднамеренных воздействий на информацию и системы ее обработки и передачи.

Практическая задача обеспечения информационной безопасности состоит в разработке модели аналитического управления системами защиты информации (криптографическими системами), которая на основе научно-методического аппарата, позволяла бы решать задачи создания, использования и управления криптографическими системами путем динамического изменения базисных параметров.

Основной задачей построения модели аналитического управления криптографическими системами является научное обеспечение процесса создания системы информационной безопасности за счет правильной оценки эффективности принимаемых решений и выбора рационального варианта ее технической реализации.

Специфическими особенностями решения задачи управления криптографическими системами путем динамического изменения базисных параметров являются:

- ◆ неполнота и неопределенность исходной информации о составе информационных систем и характерных угрозах;

- ◆ многокритериальность задачи, связанная с необходимостью учета большого числа частных показателей (требований) криптографических систем;
- ◆ наличие как количественных, так и качественных показателей, которые необходимо учитывать при решении задач разработки и внедрения криптографических систем;
- ◆ невозможность применения классических методов оптимизации.

Предложенная модель управления криптографическими системами путем динамического изменения базисных параметров позволяет не только жестко отслеживать взаимные связи между элементами криптографических систем, но может выступать в роли руководства по созданию криптографических систем.

Таким образом, для построения модели аналитического управления криптографическими системами, предложен подход имитационного моделирования динамически изменяющихся базисных параметров. Статистические данные, автоматически накапливаемые функциональными блоками модели, могут быть использованы для сравнения характеристик криптографических систем защиты информации, рассчитанных теоретически, с результатами имитационного моделирования.

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТРОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК УНИВЕРСАЛЬНОГО ТЕСТЕРА НА ОСНОВЕ МИКРОКОНТРОЛЛЕРА

КАЩЕЕВ В.М.¹, РОДИОНОВА Т.В.¹, СМЯРНОВ М.К.¹, ЛЕВЦОВА В.А.²

¹САРФТИ НИЯУ МИФИ

²ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

Доклад посвящен исследованию метрологических характеристик измерительного прибора «Транзистор Тестер - М», который позволяет быстро распознавать типы электрорадиоизделий (ЭРИ) и оценивать основные параметры транзисторов, резисторов, конденсаторов, катушек индуктивности, диодов, тиристоров, симисторов, светодиодов, диодных сборок и т.д. Данный прибор за считанные секунды автоматически определяет назначение выводов с указанием их расположения. Результаты тестирования выводятся на графический ЖК дисплей с подсветкой.

В измерительном приборе «Транзистор Тестер - М» используется современный микроконтроллер ATME1.

Прибор предназначен для измерения таких характеристик, как:

- ◆ коэффициент усиления по току (H_{fe}) для биполярных транзисторов,
- ◆ порогового напряжения (V_{th}),
- ◆ тока насыщения (I_{Dss}),

- ◆ сопротивления открытого канала сток-исток (R_{dson}) для полевых транзисторов с p-n переходом и МДП,
- ◆ прямых тока и напряжения, а также утечки тока для диодов.

Несмотря на свою простоту, данный прибор обеспечивает достаточно хорошие метрологические характеристики и позволяет производить оперативную оценку параметров и характеристик широкой номенклатуры ЭРИ.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СТРУКТУРИРОВАННЫХ ИНФОРМАЦИОННЫХ МАССИВОВ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ИСПОЛНЯЕМЫХ МОДУЛЕЙ УПРАВЛЕНИЯ И КОНТРОЛЯ

Козлов Д. А.¹, Николаев Д. Б.¹, Шишков С.Ю.¹, Точилин А.В.²

¹САРФТИ НИЯУ МИФИ

²ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

Усложнение требований к системам управления, совершенствование принципов их построения, настоятельная необходимость учитывать большое (и все возрастающее) число ограничений, обстоятельств и условий научно-технического, экономического, производственного и технологического характера влечет за собой необходимость совершенствовать традиционные методы проектирования и вести поиск новых методов проектирования. Указанная область исследований является частью национального приоритетного направления развития науки и техники.

Проектирование сложных технических систем подразумевает оптимизацию подходов к управлению этими системами, а также формирование адаптивных алгоритмов управления на основе структурированного языка записи синтаксиса программы управления, формализованного для модификации условий ветвления и точек перехода управляющих команд в графе исполнения.

Анализ существующих генераторов семантических структур показал, что сами коды управляющих инструкций находятся в строгой зависимости от начального базиса, инициализирующего управляющий код. Таким образом, варианты динамического изменения кода легко уловить с помощью лексического анализа, поскольку инициализирующая последовательность определяет всю остальную цепочку синтаксических элементов. К этому следует добавить лишь соответствие данных в тех местах, где они зависят от входной информации случайным образом. Однако, эта задача упрощается, структурированностью вида инструкций, то есть фиксированным положением аргумента в определенном месте кода.

Таким образом, существует возможность создания модифицируемого алгоритма управления в процессе функционирования системы, в

котором динамическое изменение кода происходит на уровне избираемых видов операций или меняется выбор регистров и констант. При этом зависимость между предшествующими и последующими операциями довольно легко установить, если у управляющей программы есть заданный граф синтаксиса.

В докладе рассмотрены вопросы создания адаптивных алгоритмов управления на основе структурированного языка записи синтаксиса программы управления. Для повышения эффективности и оптимизации построения алгоритмов управления, возможно применение эвристических подходов, которые могли бы выдавать суждения о значениях заданных регистров в конце этапа создания конкретного участка кода. Подобный анализатор можно построить на основе синтаксического анализа.

Литература

1. Грибунин В.Г., Костюков В.Е., Мартынов А.П., Николаев Д.Б., Фомченко В.Н. Современные методы обеспечения безопасности информации в атомной энергетике. Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2014. – 636 с. – ил.

2. Журавлёв Ю.И., Флёров Ю.А., Вялый М.Н. Дискретный анализ. Основы высшей алгебры. 2-е изд. М.: МЗ Пресс, 2007. – 224 с.

АППАРАТНО-ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ПРОТОТИПИРОВАНИЯ ПОЛУЗАКАЗНЫХ БИС

Латыпов Т.И.¹, Ведерников В.Л.², Биктимиров З.Н.²,
Хлестков С.М.²

¹САРФТИ НИЯУ МИФИ

²ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

Повышение эксплуатационных характеристик продукции радиоэлектронной промышленности путем уменьшения массы, габаритов при одновременном расширении функционала конечного продукта может быть достигнуто путем системной интеграции и создания монолитных решений.

Учитывая реальное положение дел в отечественной радиоэлектронной промышленности и специфику требований, предъявляемых к специализированной радиоэлектронной аппаратуре, выпуск которой, как правило, ограничен сравнительно небольшими партиями (сериями), использование заказных интегральных схем большой и сверхбольшой степени интеграции является экономически нецелесообразным. В данном случае выходом может стать применение полузаказных микросхем на основе базовых матричных кристаллов (БМК), то есть стандартных

заготовок, производимых по стандартной технологии массового производства БИС.

Разработанный авторами данного доклада аппаратно-программный комплекс прототипирования полузаказных БИС адаптирован под реалии отечественной радиоэлектронной промышленности. Используемые в комплексе информационно-логистические решения позволяют создавать законченные логические модели полузаказных БИС путем их предварительного прототипирования на базе ПЛИС, в рамках методологию проектирования ПЛИС-БМК.

МНОГОЭЛЕМЕНТНАЯ СЕТЬ БЕЗОПАСНОГО ОБМЕНА С ФУНКЦИЕЙ СИНЕРГЕТИЧЕСКОГО РЕЗЕРВИРОВАНИЯ

Коткова С.С.¹, Николаев Д.Б.¹, Чащихин С.С.²

¹СарФТИ НИЯУ МИФИ

²МИНИСТЕРСТВО ОБОРОНЫ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Основной проблемой безопасности сети является быстрое и бурное развитие сетевых технологий: то, что 5 лет считалось престижным и целесообразным, неожиданно становится устаревшим и неперспективным. Следствием из этого, является слабая стандартизация технологий, что дает нарушителям огромные возможности для их деятельности.

Следующая проблема по значимости – баланс скорости и безопасности. Существуют два основных подхода. Первый – скорость обслуживания невелика, но сеть гарантирует пользователю соблюдение некоторой защищенности. При втором подходе сеть старается по возможности быстро обслужить пользователя, но ничего при этом не гарантирует.

Действительно сложно говорить о приемлемой скорости, если необходимо соблюдение как минимум:

- ◆ сохранности данных и защиту их от искажений;
- ◆ непротиворечивость данных;
- ◆ высокой вероятностью доставки пакета узлу назначения без искажений.;
- ◆ защиты данных от несанкционированного доступа;
- ◆ управляемости сети.

В настоящее время в области систем управления сетями много нерешенных проблем. Явно недостаточно действительно удобных, компактных и многопротокольных средств управления сетью. Большинство существующих средств вовсе не управляют сетью, а всего лишь осуществляют наблюдение за ее работой. Они следят за сетью, но не выполняют активных действий, если с сетью что-то произошло или может произойти. Мало масштабируемых систем, способных обслуживать как сети масштаба отдела, так и сети масштаба предприятия, - очень мно-

гие системы управляют только отдельными элементами сети и не анализируют способность сети выполнять качественную передачу данных между конечными пользователями сети.

Наблюдение за работой виртуальных сетей также создает проблемы для традиционных систем управления. При создании карты сети, включающей виртуальные сети, необходимо отображать как физическую структуру сети, так и ее логическую структуру, соответствующую связям отдельных узлов виртуальной сети. При этом по желанию администратора система управления должна уметь отображать соответствие логических и физических связей в сети, то есть на одном физическом канале должны отображаться все или отдельные пути виртуальных сетей. К сожалению, многие системы управления либо вообще не отображают виртуальные сети, либо делают это очень неудобным для пользователя способом, что вынуждает обращаться к менеджерам компаний-производителей для решения этой задачи.

В докладе рассмотрены вопросы построения разнородных многоэлементных сетей безопасного обмена с функцией синергетического резервирования. Вопросы синергетического резервирования с использованием метода пошаговой локализации ресурсов рассмотрены с учетом построения сетей информационного обмена, обладающих высокой степенью виртуализации.

АППАРАТНЫЙ ГЕНЕРАТОР СЛУЧАЙНЫХ БИНАРНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ С ЕМКОСТНЫМ ИСТОЧНИКОМ ЭНТРОПИИ

Латыпов Т.И.¹, Хлестков С.М.², Матвеевко А.С.²,
Маланцев А.Г.²

¹САРФТИ НИЯУ МИФИ

²ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

Генерация случайных бинарных последовательностей – является обязательной задачей при реализации современных криптосистем.

Решение данной задачи обуславливает применение генераторов случайных бинарных последовательностей, общее предназначение которых состоит в получении уникального, равновероятного набора из единиц и нулей.

Интегрированные в компиляторы, детерминированные генераторы, не подходят для криптографических приложений, поскольку генерируемые ими бинарные последовательности подчиняются заданным законам распределения.

Большинство простых арифметических генераторов хотя и обладают большой скоростью, но страдают от многих серьёзных недостатков:

- ◆ слишком короткий период/периоды;
- ◆ последовательные значения не являются независимыми;
- ◆ некоторые биты «менее случайны», чем другие;
- ◆ неравномерное одномерное распределение;
- ◆ обратимость.

Авторами данного доклада был разработан аппаратный генератор случайных бинарных последовательностей с ёмкостным источником энтропии.

Анализ случайных бинарных последовательностей проводился следующим образом:

- ◆ получена последовательность длиной более 1 000 000 бит;
- ◆ проведена оценка частоты появления единиц и нулей;
- ◆ проведён анализ частотного распределения битовых многограмм, включая покерный тест последовательности;
- ◆ проведён анализ зависимости скорости генерации битовых последовательностей от различных комбинаций параметров ёмкостного источника энтропии.

КОНСТРУИРОВАНИЕ ИНФОРМАЦИОННОЙ ИЗМЕРИТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ РАДИАЦИОННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Левцова В.А.¹, Кошкин В.В.¹, Овсов А.В.¹, Смирнов М.К.²

¹ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

²СарФТИ НИЯУ МИФИ

Применение и развитие измерительной техники всегда было обусловлено потребностями производства, торговли и других сфер человеческой деятельности. Контрольно-измерительные операции давно стали неотъемлемой частью технологических процессов и в значительной степени определяют качество выпускаемой продукции. Прогресс измерительной техники неразрывно связан с научно-техническим прогрессом. Новые научные и технические задачи приводят и к новым измерительным задачам, для решения которых нужны новые средства измерений (СИ), а новые научные и технические результаты влияют на уровень измерительной техники.

Доклад посвящен разработке дистанционной измерительной системы для радиационного эксперимента. В ходе работы была разработана принципиальная схема устройства и собран лабораторный макет, на котором была отработана методика проведения дистанционных измере-

ний. Также была разработана конструкция корпуса устройства и проведены основные конструкторские расчеты (расчет элементов печатного рисунка, расчет частоты собственных колебаний, расчёт надёжности блоков и расчёт массогабаритных показателей). Данное устройство было использовано при проведении радиационных испытаний модулей вторичного электропитания СПН и СПНМ.

РАЗРАБОТКА КОМПЛЕКСА ДЛЯ ОПЕРАТИВНОГО ПРОТОКОЛИРОВАНИЯ ДАННЫХ

НЕСКОРОДЬЕВ А.Ю.¹, АНАШКИН А.Н.¹, ЕРОШЕВ В.И.¹,
КОНОВ В.А.¹, УМАРОВ А.А.¹, ЕВСТИФЕЕВ А.А.²

¹ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

²САРФТИ НИЯУ МИФИ

Целью данной работы является разработка комплекса для оперативного протоколирования данных для записи хранения и использования данных, полученных от систем различного рода, который в дальнейшем планируется использовать на предприятии ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ».

В результате работы была предложена структурная и функциональная схема комплекса для оперативного протоколирования данных, а так же алгоритм работы комплекса для оперативного протоколирования данных, разработано программное обеспечение, осуществляющее сжатие входных данных и запись их в РПЗУ, с последующим считыванием этих данных по запросу пользователя.

Комплекс для оперативного протоколирования данных сначала создает необходимые для работы ресурсы, после чего задаются параметры для протоколирования. Комплекс для оперативного протоколирования данных после исполнения определенной операции проверяет необходимость ее протоколирования и при необходимости выполняет протоколирование. Семантика операции записи в память определяется в некоторой степени генератором случайных чисел, но существуют направляющие параметры, вроде числа строк, которые нужно сгенерировать. Логика работы записи гарантирует, что после записи ячейка блокирует сама себя и гарантирует корректность и неизменность конечного записанного значения.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОПРОСОВ СУПЕРПОЗИЦИОННОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ ПРИ АНАЛИЗЕ КОНФИГУРАЦИИ СИСТЕМЫ

Орлов А.В.¹, Николаев Д.Б.¹, Точилин А.В.², Чащихин С.С.³

¹СарФТИ НИЯУ МИФИ

²ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

Анализ существующих методов идентификации показал, что не один из подходов не может быть применен напрямую для решения задачи идентификации группы разнородных объектов, управляемых посредством создания в управляющей системе адаптируемой виртуальной модели. В данной ситуации оптимальным является разработка собственного метода идентификации, удовлетворяющего заданным требованиям.

В процессе разработки метод идентификации было решено разделить на две составные части, органично вписывающиеся в процесс проектирования и эксплуатации. Первая часть предназначена для формирования необходимой ключевой информации для обеспечения безопасной взаимосвязи управляющей системы и объектов управления в процессе идентификации, а вторая – непосредственно для реализации протокола взаимодействия.

Таким образом, механизм идентификации включают в себя два этапа:

1) формирование необходимых ключевых параметров с использованием метода асинхронного изменения ключевого параметра для организации последующего процесса идентификации;

2) обеспечения идентификационной взаимосвязи управляющей системы и объектов управления с использованием метода суперпозиционной идентификации.

В основу метода асинхронного изменения ключевого параметра положен метод фрагментации, представляющий собой комплекс программно-аппаратных мер, основанный на использовании $(n-1, n)$ -пороговой схемы, где n – количество носителей информации. Данный метод не допускает получения полной информации о криптографических преобразованиях при отсутствии хотя бы одного элемента хранения. Применение совокупности программно-аппаратных мер позволило эффективно решить задачу комбинирования технических мер защиты и алгоритмов противодействия несанкционированному доступу.

Метод суперпозиционной идентификации предполагает использование оптимизированного по числу раундов протокола, отличающегося своей адаптивностью к функциям преобразования информации, применяемым в тракте прохождения и преобразования. Протокол предполагает выработку специального контрольного значения уникального для

каждого объекта управления и наложение (суперпозицию) на него псевдослучайного значения, вырабатываемого с использованием генератора псевдослучайных значений. При этом параметры для формирования контрольного значения разделены, то есть контрольное значение в явном виде в управляющей системе не представлено. Объект управления в свою очередь в силу специфики своего расположения и невозможности несанкционированного доступа содержит образ контрольного значения, восстанавливаемого при получении запроса на идентификацию. При помощи данного значения из запроса на идентификацию извлекается псевдослучайное значение, на которое осуществляется наложение (суперпозиция) идентифицирующего признака.

Литература

1. Грибунин В.Г., Костюков В.Е., Мартынов А.П., Николаев Д.Б., Фомченко В.Н. Современные методы обеспечения безопасности информации в атомной энергетике. Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2014. – 636 с. – ил.

АНАЛИЗ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПОКРЫТИЯ КОДА ПРИ ДИНАМИЧЕСКОМ УПРАВЛЕНИИ ПРОГРАММНЫМ ОБЕСПЕЧЕНИЕМ

Соколов П.С.¹, Колтаков С.Н.¹, Скоробогатый А.А.¹,
Николаев Д.Б.²

¹МИНИСТЕРСТВО ОБОРОНЫ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

²САРФТИ НИЯУ МИФИ

Анализ программного обеспечения, проводимый во время его выполнения на программно-аппаратных средствах с целью определения процента покрытия кода (максимального числа возможных вариантов (маршрутов) исполнения программы), проводится на разных уровнях исполнения программного кода. В ходе такого анализа требуется подача на вход программного обеспечения достаточного количества входных данных, чтобы получить более полное покрытие кода. Однако в результате часть программного кода может быть не исполнена по ряду причин, которые необходимо выяснять, с целью определения возможностей по изменению зафиксированных ранее маршрутов выполнения программы. Для решения указанной проблемы конкретизируем задачу покрытия кода.

На самом нижнем уровне исполнения программного обеспечения центральное процессорное устройство выполняет инструкции – коман-

ды, определенные для конкретного процессора. Совокупность используемых инструкций зависит от архитектуры процессора. Например, хорошо известная архитектура IA-32/x86 - это полный набор команд (Complex Instruction Set Computer (CISC)), использующий более 500 инструкций, включая основные математические операции и манипуляции с памятью. В отличие от нее архитектура с сокращенным набором команд (Reduced Instruction Set Computer (RISC)), работающая, например, на микропроцессорах SPARC, использует менее 200 инструкций. В общем случае, программное обеспечение содержит от десятков тысяч до миллионов инструкций. Каждое взаимодействие с программным обеспечением вызывает выполнение огромного количества инструкций.

Существует два основных подхода к исследованию покрытия кода:

- получение информации из логов и использование дебаггера для фиксации точной причины ошибки;
- исследования в текущем времени выполнения программы и активное отслеживание выполнения инструкций во время пользовательских запросов.

В некоторые дебаггеры включены модули со следующими функциями, позволяющие аналитику отслеживать все исполняемые инструкции. Недостатком таких модулей является большой объем требуемых для выполнения ресурсов.

При написании программы одним из основных методов анализа является вставка в код инструкций печати при появлении ошибки; этот метод позволяет разработчику найти место возникновения ошибки и определить, какой функциональный блок в момент ошибки выполнялся. Для поставленной задачи необходимо вставлять инструкции на нижнем уровне исполнения программы, что является трудоемким процессом.

Таким образом, в докладе рассмотрен процесс мониторинга и записи существующих инструкций, выполняющихся при обработке наблюдаемых аналитиком запросов. Организация такого процесса позволяет сужать поиск при выявлении проблемных участков кода программного обеспечения.

Литература

1. Саттон М., Грин А., Амини П. - Fuzzing-Исследование уязвимостей методом грубой силы. Символ-Плюс. 2009 г.
2. Касперски К. Рокко Е. – Искусство дизассемблирования. БХВ- Петербург. – 2008 г.

СПОСОБ ИСПРАВЛЕНИЯ ОШИБОК ПРИ ПЕРЕДАЧЕ ИНФОРМАЦИИ БИИМПУЛЬСНЫМ КОДОМ МАНЧЕСТЕР-II И УСТРОЙСТВО ЕГО ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ

РЫЖОВ А.А.¹, ТОЧИЛИН А.В.¹, МАРТЫНОВ А.П.²,
ГОНЧАРОВ С.Н.², МАРУНИН М.В.²

¹ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

²САРФТИ НИЯУ МИФИ

В процессе обмена между устройствами может возникнуть различные сбои при обработке и передаче информации, в результате чего нарушится корректная работа. Такие сбои могут произойти как при обрыве канала связи и сбое работы программного обеспечения, так и в результате подмены циркулирующей информации на заведомо ложную. Актуальным является разработка способа исправления ошибок при передаче информации биимпульсным кодом Манчестер II.

Способ исправления ошибок при передаче информации биимпульсным кодом Манчестер II заключается в том, что предварительно данные, передаваемые указанным кодом, разбивают на N частей, для каждой из которых формируют код Хэмминга, затем вычисляют контрольную сумму передаваемых данных и контрольную сумму набора полученных кодов Хэмминга, далее формируют кодограмму, включающую передаваемые данные, набор кодов Хэмминга и контрольные суммы передаваемых данных и набора кодов Хэмминга, затем вычисляют контрольную сумму кодограммы и формируют посылку из кодограммы и контрольной суммы кодограммы, при получении посылки вычисляют контрольную сумму выделенной из посылки кодограммы и сравнивают ее с полученной контрольной суммой кодограммы, если данные контрольные суммы кодограммы не совпадают, то из полученной посылки выделяют передаваемые данные и вычисляют их контрольную сумму и сравнивают ее с контрольной суммой передаваемых данных, выделенной из полученной посылки, в случае их несовпадения из посылки выделяют набор кодов Хэмминга, вычисляют его контрольную сумму и сравнивают с выделенной из посылки контрольной суммой набора кодов Хэмминга, при их совпадении выделяют из посылки набор кодов Хэмминга, с помощью которых исправляют ошибки полученных данных.

Формирование посылки указанного вида позволяет осуществлять своевременное выявление недостоверных кодограмм, что приводит к повышению скорости информационного обмена. А разбиение передаваемых данных на N частей и формирование проверочных битов кода Хэмминга для каждой из них позволяет исправлять ошибки за одну итерацию передачи данных. Все это в совокупности позволяет повысить эффективность и надежность передачи данных во время обмена информацией.

Литература

1. Петров Г.А. Правовые основы деятельности по защите информации от несанкционированного доступа // Системы обработки информации и управления. Н.Новгород: НГТУ, 2000. Вып. 6. С.109-112.
2. Хранилов В.П. Исследование операторов нормирования в задаче выбора оптимального варианта конфигурации вычислительной системы // Системы обработки информации и управления. Н.Новгород: НГТУ, 2000. Вып. 6. С.65-71.
3. Бусленко Н.П. Моделирование сложных систем.–М.:Наука,1978.–400 с.

ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ АНАЛИЗА ПРОГРАММНЫХ МОДУЛЕЙ МЕТОДОМ ГРАФИЧЕСКОЙ ИНТЕРПРЕТАЦИИ

Соколов П.С.¹, Колтаков С.Н.¹, Скоробогатый А.А.¹,
Николаев Д.Б.²

¹МИНИСТЕРСТВО ОБОРОНЫ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

²САРФТИ НИЯУ МИФИ

Для решения широкого спектра задач по защите информации значительное влияние уделяется вопросам криптографической стойкости алгоритмов преобразования, гарантированного обеспечения целостности данных и возможности модульного программного применения на различных платформах.

Существуют множество разнообразных криптографических алгоритмов преобразования информации, которые гарантируют достаточно высокую степень защиту данных. Различные криптографические алгоритмы объединяются в криптографические программные модули, из которых формируются криптографические программные средства. При этом существует вероятность возникновения проблемы совместимости криптографических программных модулей.

Для мониторинга инструкций криптографических программных модулей используется принцип бинарной визуализации, который используется при создании графов вызова после дизассемблирования бинарных кодов. Граф вызова представляется совокупностью узлов – функций программного обеспечения и ребер - вызовов между функциями.

После дизассемблирования существует недостаток в символической информации, что приводит к разыменованию большинства функций. В данном случае каждый базовый блок представляется узлом, а команды перехода между блоками - ребрами графа. Под понятием базового

блока в данном случае принимается совокупность инструкций, причем каждая инструкция в блоке заведомо выполняется по порядку, если выполнена первая инструкция блока.

После определения процесса построения базовых блоков, определяются начальные действия аналитика по поиску базисного набора критериев.

Для определения критерия необходимо определить следующие показатели:

- ◆ количество инструкций в исследуемой функции (процедуре);
- ◆ количество подфункций;
- ◆ количество базовых блоков;
- ◆ принадлежность инструкций стандартным библиотекам;
- ◆ какие инструкции написаны вручную;
- ◆ какие строчки кода транслируют каждую отдельно взятую инструкцию;
- ◆ какие инструкции и данные доступны для воздействия из файла данных.

Для определения указанных показателей используются инструменты на основе дизассемблера. Используя листинг дизассемблера по инструкциям и функциям и применяя алгоритм, основанный на базовых блоках, строится список базовых блоков, содержащихся в каждой функции.

Поскольку базовый блок представляет собой набор инструкций, в котором все инструкции заведомо выполняются, потребуется установка меток перед каждым блоком и отслеживание этих меток при выполнении программного обеспечения (функций). Таким образом, отслеживается максимально возможное число инструкций и как следствие обеспечивается максимальная имитация работы программного обеспечения.

Литература

1. Саттон М., Грин А., Амини П. - Fuzzing-Исследование уязвимостей методом грубой силы. Символ-Плюс. 2009 г.
4. Касперски К. Рокко Е. – Искусство дизассемблирования. БХВ-Петербург. – 2008 г.

АНАЛИЗ ХАРАКТЕРИСТИК ГЕТЕРОГЕННЫХ ПСЕВДОСЛУЧАЙНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ И ИХ СТАТИСТИЧЕСКИХ ТЕСТИРОВАНИЙ

СПЛЮХИН Д.В.¹, ДАНИЛКИН М.В.¹, МАРТЫНОВ А.А.²,
НИКОЛАЕВ Д.Б.²

¹ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

²САРФТИ НИЯУ МИФИ

Проблема защиты информации является одной из наиболее значительных для предприятий оборонно-промышленного комплекса, связанных с разработкой сложных высокотехнологических систем управления. Это обусловлено спецификой и характером работы оборонных предприятий. В настоящее время интерес к вопросам защиты информации вырос, что связано с возрастанием роли информационных ресурсов в конкурентной борьбе, расширением использования сетей, а, следовательно, и возможностью несанкционированного доступа к хранимой и передаваемой информации. Развитие средств, методов и форм автоматизации процессов хранения и обработки информации делают информацию гораздо более уязвимой, поскольку она может быть незаконно изменена, похищена или уничтожена.

В настоящее время, с учетом использования программных средств для разработки и обеспечения функционирования аппаратно-программных средств, обеспечение информационной безопасности автоматизированных систем становится не менее актуальным. Такие вопросы как: формирование доверенной программной среды, строгое соответствие разработанных программ требуемым алгоритмам обработки информации, корректность и достоверность результатов работы систем в различных аппаратных средах, надежность работы программного обеспечения, обеспечение защиты автоматизированных систем от внесения в него непреднамеренных и целенаправленных изменений и многие другие вопросы уже получают свое отражение при анализе и оценке программных и аппаратно-программных средств защиты информации. Важную роль при оценке программных средств играют средства формирования тестовых последовательностей, начальных заполнений, определяющих качество и заданные свойства информационной составляющей программного средства. Основой для формирования последовательностей являются генераторы псевдослучайных последовательностей.

На начальном этапе проведен анализ современных тенденций построения генераторов псевдослучайных сигналов, их базовых характеристик, влияющих на функции распределения информационных ресурсов информационных систем, который показал и дал обоснование

основным методикам разработки генераторов псевдослучайных последовательностей. В данной работе рассмотрены вопросы генерации псевдослучайных последовательностей, методики тестирования псевдослучайных последовательностей и разработано программно-математического обеспечения для исследования базовых характеристик, влияющих на функции распределения информационных массивов. Также проведены теоретическое и экспериментальное исследования генераторов псевдослучайных процессов, их структурных, вероятностных и корреляционных свойств, определены условия оценки их качества в зависимости от размерности тестируемых информационных массивов.

В ходе работ и исследований разработано программное обеспечение модульного типа для осуществления анализа исследуемых данных информационных массивов, которое отвечает высоким требованиям по универсальности применения, эффективности и безопасности.

АНАЛИЗ НОВЕЙШИХ ТРЕБОВАНИЙ ФСТЭК И ОБЩИЕ РЕШЕНИЯ СУЩЕСТВУЮЩИХ ПРОБЛЕМ ЗАЩИТЫ ИНФОРМАЦИОННЫХ СИСТЕМ

Сплюхин Д.В.¹, Николаев Д.Б.²

¹ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

²СарФТИ НИЯУ МИФИ

В начале 2016 года, выступая на ежегодной коллегии Федеральной службы безопасности РФ, Президент страны Владимир Путин потребовал усилить уровень защиты информационно-коммуникационных ресурсов государственных органов РФ. Как отметил Президент, необходимо усиливать защиту информационно-коммуникационных ресурсов: в первую очередь защиту сайтов, используемых для нужд обороны и безопасности страны, а также обеспечение устойчивой работы экономической и финансовой системы. В прошлом году на российские официальные государственные сайты и информационные системы было осуществлено более 24 млн. кибератак. Также пресечена деятельность 1,6 тысяч интернет-ресурсов террористической и экстремистской направленности.

Решением возникающих проблем юридической поддержки безопасности информационных систем в нашей стране зачастую занимается ФСТЭК. В скором времени ФСТЭК подготовит интересный документ - методику анализа уязвимостей и недеklarированных возможностей программного обеспечения. Это давно назревший документ, который позволит проводить анализ на отсутствие недеklarированных возможностей даже при отсутствии исходных кодов устаревшего программ-

ного обеспечения или программного обеспечения, происходящего из других государств.

Из списка ФСТЭК требований к средствам защиты информации исчезли требования к средствам разграничения доступа (управление доступом остается), средствам ограничения программной среды и средствам контроля целостности. При этом добавились требования к средствам мониторинга событий безопасности («SIEM»). Требования безопасности информации, предъявляемые к операционным системам, а так же к системам управления базами данных (разработаны, планируются к утверждению в 2016 году) являются дополнением к выпуску требований, закрывающих все меры защиты, упомянутые в 17/21/31-м приказах ФСТЭК, которые могут быть закрыты именно техническими решениями. Также ФСТЭК планомерно добивается того, чтобы заявители на сертификацию средств защиты информации включали в документацию на свою продукцию требования по порядку обновления и информирования потребителей об обновлении и способах его получения.

К общим решениям существующих проблем защиты информационных систем следует отнести утверждение двух новых Государственных стандартов (ГОСТ Р 56545-2015 и ГОСТ Р 56546-2015) по классификации и описанию уязвимостей, также разработку двух Государственных стандартов - по безопасности технологий виртуализации и по безопасной разработке программного обеспечения (SDL). После утверждения первого стандарта ФСТЭК будет принимать требования к средствам защиты виртуализации. Подготовлены к направлению в Росстандарт еще два Государственных стандарта - по разработке профилей защиты и заданий по безопасности и по анализу уязвимостей. Последний, в свою очередь, состоит из двух частей - по использованию доступных источников для идентификации потенциальных уязвимостей и по тестированию на проникновение.

Каждый год происходят серьезные изменения законов, требований и стандартов, требуется следовать актуализированным требованиям по защите информации для быстрого и качественного выявления инцидентов информационной безопасности, устранения атак злоумышленников, а также сохранения в тайне конфиденциальной информации. Данный вопрос является актуальным, так как проблема безопасности информации затрагивает все широко используемые сферы деятельности.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ТРАНСПОРТАЦИИ ИНФОРМАЦИИ В СЕТЯХ РАЗЛИЧНОЙ СТЕПЕНИ РАЗВЕТВЛЕННОСТИ

ТАРАСОВ А.М., НИКОЛАЕВ Д.Б

СарФТИ НИЯУ МИФИ

В настоящее время задачам безопасной связи внутри групп с динамическим составом участников уделяется повышенное внимание благодаря повсеместному использованию технологий электронно-вычислительных сетей. Возможно, в скором времени применение новых протоколов распределения ключей, не содержащих недостатков классических протоколов аутентификации, станет повсеместной практикой.

Одним из основных способов безопасного хранения, использования и передачи конфиденциальной информации является применение к сохраняемым данным методов и средств криптографической защиты информации. Для корректной реализации средств криптографической защиты информации необходимо разработать методологические подходы к построению систем обеспечения безопасности, представляющие собой комплекс моделей, описывающих процессы, протекающие в комплексной системе защиты информации. Для решения этой задачи необходимо выполнить декомпозицию комплексной системы защиты информации, обеспечивающей возможность использования адаптивных элементов для повышения надежности и эффективности системы в целом и ее составных частей. В процессе проведения работы получены результаты исследования вопросов построения адаптивных алгоритмов обеспечения безопасности для современных разноуровневых телекоммуникационных систем кластерного типа. Осуществлено моделирование процессов, протекающих в комплексной системе защиты информации. Определены показатели технологической безопасности подобных систем. Разработаны предложения по адаптивному алгоритмическому обеспечению безопасности технических систем в части повышения их эффективности и надежности.

В работе приведены результаты фундаментальных поисковых исследований сплит-эффектов для безопасной транспортировки информационной составляющей в современных разноуровневых телекоммуникационных системах кластерного типа. На заключительном этапе исследований предложена концепция построения многокомпонентной модульной структуры безопасного информационного взаимодействия с функцией метауровневой защищенности.

Направления дальнейших исследований связаны с разработкой частных показателей качества для конкретных типов средств обеспечения

безопасности информации, а также разработкой типового списка угроз информационной безопасности, типовых политик безопасности информации для автоматизированных систем управления.

Литература

1. Грибунин В.Г., Чудовский В.В. Комплексная система защиты информации на предприятии. М.: Академия, 2009 г. 416 с.

2. Грибунин В.Г., Мартынов А.П., Николаев Д.Б., Фомченко В.Н. Криптография и безопасность цифровых систем: Учебное пособие / Под ред. А.И. Астайкина. Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2011, 411 с.

3. Николаев Д.Б., Курочкин А.А., Мартынов А.П., Фомченко В.Н., Грибунин В.Г., Сапожников С.А. Модели нарушителей для криптографических средств защиты информации, Аннотации докладов IV научной конференции Волжского регионального центра РАН «Современные методы проектирования и отработки ракетно-артиллерийского вооружения». – Саров: ФГУП РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2001.

4. Шаньгин В.Ф. Защита информации и информационная безопасность. Часть I. Основы информационной безопасности. Симметричные криптосистемы: Учебное пособие для ВУЗов. – М.: МИЭТ.-1999.- 140 с.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ИНСТРУМЕНТАРИЯ ОПЕРАЦИОННЫХ СИСТЕМ ОС «WINDOWS» И ОС «LINUX» В ОБЛАСТИ ИНФОРМАЦИОННОЙ БЕЗОПАСНОСТИ

ТЕРЕНТЬЕВА Е.Е.¹, НИКОЛАЕВ Д.Б.², КАЛИМУЛЛИН В.Г.³

¹ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

²САРФТИ НИЯУ МИФИ

³ФГУП «ПРИБОРОСТРОИТЕЛЬНЫЙ ЗАВОД»

В настоящее время России взяла курс на импортозамещение в сфере информационных технологий, то есть на замену продукции зарубежных разработчиков, в частности Windows во главе с компанией Microsoft, на операционные системы (ОС) на базе дистрибутивов Linux.

В докладе рассмотрена возможность перехода от операционной системы MS Windows к GNU/Linux без понижения защищённости данных и без увеличения уязвимости.

Открытость и кроссплатформенность – главные определяющие для операционных систем, основанных на ядре Linux, что делает их непригодными для масштабной жизнедеятельности вредоносных программных кодов. Количество вирусов под GNU/Linux исчисляется несколькими десятками, так как открытость ядра позволила закрыть большинство уязвимостей в ядре системы. Число вредоносных программ, включая

вирусы, трояны и прочие вредоносные программы, написанных под Linux, выросло в последние годы, однако открытая модель разработки приводит к тому, что большинство данных программ в настоящее время неработоспособно – уязвимости, которыми они пользовались, закрыты.

Для Microsoft Windows создано очень большое число вирусов. Для борьбы с ними используется специальное программное обеспечение – антивирусы. Вирусы бывают разных видов: от сравнительно безобидных до деструктивных. Администратор не может получить системные привилегии, которые получают некоторые вирусы благодаря уязвимостям Windows, как следствие бывает невозможно вручную нейтрализовать действие вируса, он невидим для антивирусных программ.

Целью исследования является анализ современных технологий защиты информации в аспекте их применения в программно-аппаратных средствах, реализуемых в современных операционных системах. Результаты работы могут быть использованы в современных вычислительных и телекоммуникационных системах для построения, тестирования и технической эксплуатации защищенных информационных систем.

Литература

1. Крысин А. Информационная безопасность. Практическое руководство. Киев 2003 – 320с.
2. Советов Б.Я. Информационные технологии: Учебник для вузов. Москва:Высш. шк., 2003 – 263с.
3. Брюс Шнайер. Прикладная криптография. Протоколы, алгоритмы. Электронная версия в формате PDF.
4. Винокуров А. Алгоритм шифрования ГОСТ28147-89. Журнал “Монитор”, 1995.
5. Основы информационной безопасности/ Галатенко В.А. Под редакцией члена корреспондента РАН В.Б. Бетелина/ М.: ИНТУИТ.РУ “Интернет-Университет Информационных Технологий”, 2003. – 280 с.
6. Молдовян Н.А. Практикум по криптосистемам с открытым ключом. Санкт-Петербург, 2007 – 304с.
7. Нильс Фергюсон, Брюс Шнайер. Практическая криптография. Москва, 2005–421с.

РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ОТЛОЖЕННОГО АНАЛИЗА СИГНАЛОВ

УМАРОВ А.А.¹, ЕРОШЕВ В.И.¹, НЕСКОРОДЬЕВ А.Ю.¹,
ЕВСТИФЕЕВ А.А.²

¹ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

²САРФТИ НИЯУ МИФИ

Измерения электромагнитного поля для оценки защищённости информации от утечки по каналу ПЭМИ должны выполняться с использованием специального селективного измерительного средства — обычно спектроанализатора или измерительного ЭМС-приёмника. Согласно действующим методическим подходам, измерительное средство должно иметь возможность развёртки сигналов во временной области для непосредственного измерения уровня сигнала и шума. Во многих современных цифровых спектроанализаторах и ЭМС приёмниках есть осциллографический режим «Zero Span», позволяющий отображать временную развёртку сигнала, измеряемого на заданной центральной частоте в выбранной полосе пропускания. Режим «Zero Span» имеет ограничение на количество точек одной развёртки, в результате чего возникают следующие практические трудности при работе с цифровым измерительным средством в ручном режиме:

1. если невозможно синхронизировать время начала временной развёртки измерительного средства и время появления сигнала, то становится практически трудно записать осциллограмму сигнала;

2. зачастую невозможно уместить длительное непрерывное событие, состоящее из множества коротких сигналов или их деталей, в одну развёртку.

Решением проблемы является использование спектроанализаторов и ЭМС-приёмников, оснащённых функцией записи точек развёртки сигнала в память, либо специальных устройств записи сигналов. В настоящее время подобные устройства имеют очень высокую стоимость, часто их поставка не представляется возможной.

Последовательная запись кривых развёрток в память может быть также реализована посредством дистанционного управления измерительным средством в автоматическом режиме. При этом управление и хранение данных осуществляется с помощью ПК, а передача команд управления происходит по специальному кабелю, что делает данный способ записи сигналов значительно менее затратным и более доступным. В данной работе разработано ПО, позволяющее проводить последовательную запись развёрток с приёмников, поддерживающих стандарт SCPI. Данное ПО может быть использовано для реализации метода отложенного анализа сигналов.

Секция

**МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В
ПРОБЛЕМЕ НЕРАСПРОСТРАНЕНИЯ
ЯДЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ И
ВООРУЖЕНИЙ**

Председатель жюри –

Чернышев А.К., д.ф.-м.н., заместитель научного руководителя ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», председатель кадровой секции НТС ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», декан физико-технического факультета СарФТИ НИЯУ МИФИ

Члены жюри –

Алексеев В.В., к.ф.-м.н., доцент, заместитель руководителя по УР СарФТИ НИЯК МИФИ

Борисенок В.А., д.ф.-м.н., доцент, заместитель руководителя по НР СарФТИ НИЯУ МИФИ

Мисатюк Е.В., к.ю.н., старший преподаватель кафедры ЭТФиБУ СарФТИ НИЯУ МИФИ

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ НЕЧЕТКОЙ ЛОГИКИ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА НЕРАСПРОСТРАНЕНИЯ ЯДЕРНОГО ОРУЖИЯ

ВЕРЕЩАГА А.Н.¹, ЧЕРНЫШЕВ А.К.²

¹СарФТИ НИЯУ МИФИ,

²ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

Распространение ядерного оружия может рассматриваться как процесс, определяемый внутренними и внешними событиями, в которые вовлечена конкретная страна.

Три группы причин, по нашему мнению, оказывают влияние на состояние «ядерного выбора» страны: группа технологических причин, группа внешних факторов и группа внутренних факторов, каждая из которых определяется рядом параметров [1, 3].

Таким образом, в качестве выходного параметра, характеризующего решение страны о разработке ядерного оружия, может рассматриваться индекс нераспространения. В свою очередь, индекс нераспространения зависит от перечисленных выше факторов: технологической детерминанты, внешней и внутренней детерминанты, каждая из которых зависит от существенных для нее параметров.

Каждый из параметров, входящих в число определяющих для перечисленных факторов, может быть представлен в виде индекса. Большинство индексов (индекс национального потенциала, индекс милитаризации, индекс миролюбия, индекс глобализации, индекс политического режима и пр.) ежегодно формируется соответствующими международными институтами и является доступным.

Перечисленные переменные были представлены в виде лингвистических переменных, состоящих из нескольких термов, каждый из которых был представлен в виде функций принадлежности, сформированных путем кластеризации.

Связь нечетких переменных была реализована на основе блоков логического вывода, ставящих в соответствие выходной переменной текущие значения определяющих переменных.

Таким образом, значения индексов, характеризующих состояние страны на какой-то календарный год, позволяют в результате использования разработанной модели оценить степень стремления страны к разработке ядерного оружия либо состояние ядерно-оружейной программы, имеющейся у страны.

Модель была успешно верифицирована на известных исторических фактах для более чем 25 стран, в число которых входили ядерно-оружейные и пороговые страны, для периода 1945-2010 гг. [2].

Предлагаемая нечетко-логическая модель может быть применена для прогнозирования процесса распространения ядерного оружия. Этот же инструмент может быть использован для моделирования процессов «что будет, если...» в области проблем распространения. Переменные, лежащие в основе модели, могут рассматриваться в качестве рычагов, позволяющих планировать действия, связанные с сокращением угрозы распространения, и количественно оценивать масштаб и результативность подобных усилий [3].

Литература

1. А.Н.Верещага, А.К.Чернышев. Применение методов нечеткой логики для моделирования процесса нераспространения ядерного оружия. ВАНТ, серия «Математическое моделирование физических процессов», 2013 г., №4
2. А.Н.Верещага, А.К.Чернышев. Ретроспективный анализ индекса ядерного распространения некоторых стран на основе использования нечетко-логической модели процесса распространения ядерного оружия. Доклад на XIII российско-китайского семинара по стратегической стабильности и контролю над вооружениями. КНР, Мянъян, 2014 г.
3. А.Н.Верещага, А.К.Чернышев. Моделирование распространения ядерного оружия и возможности его глубокого сокращения на основе применения метода нечеткой логики. Монография. ИПК РФЯЦ-ВНИИ-ЭФ. 2016 г.

СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ РЕЖИМА ЯДЕРНОГО НЕРАСПРОСТРАНЕНИЯ

КАРАВАШКИНА Е.В., МЕДВЕДЕВА Н.С.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Доклад посвящён истории становления и современному состоянию режима ядерного нераспространения. Представлено определение понятия международно-правового режима нераспространения ядерного оружия как совокупности международных норм договорного и обычно-правового характера, направленных на ограничение числа членов «ядерного клуба» рамками, установленных п.3 ст. IX Договора о нераспространении ядерного оружия. Рассматриваются современные проблемы и вызовы международно-правовому режиму ядерного нераспространения. Особо подчёркивается роль МАГАТЭ в обеспечении контроля за нераспространением ядерного оружия, в частности, контроля за соблюдением Договора о нераспространении ядерного оружия.

Авторы обосновывают положение о том, что, проблема распространения оружия массового уничтожения постепенно набирает конфликтный и взрывоопасный потенциал. Созданный в 60-70-х годах прошлого века режим ядерного нераспространения в настоящее время переживает небывалый кризис с неясными перспективами.

Литература

1. Богатуров А.Д., Косолапов Н.А., Хрусталёв М.А. Очерки теории и политического анализа международных отношений. М., 2002.
2. Бойко В. И. Ядерные технологии и вызовы XXI века: учебное пособие / В. И. Бойко, Ф. П. Кошелёв, Г. М. Пшакин, О. В. Селиванникова; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2009.
3. Киссинджер Г. Нужна ли Америке внешняя политика? М., 2002.
4. Кулагин В.М. Международная безопасность. Учебное пособие. М. 2006.
5. Лебедева М.М. Мировая политика. М., 2006.
6. Мировая политика и международные отношения/Под ред. С. А. Ланцова, В. А. Ачкасова. СПб, 2005.
7. Мировая политика: теория, методология, прикладной анализ. М., 2005.
8. Примаков Е.М. Мир после 11 сентября. М. 2002.
9. Системная история международных отношений. В 4 т. М., 2000-2004.
10. Современные международные отношения и мировая политика. М., 2004.
11. Теория международных отношений. Хрестоматия. М., 2002.
12. Тимербаев Р. М. Россия и ядерное нераспространение. 1945-1968. М.: Наука, 1999.
13. Тэтчер М. Искусство управления государством. Стратегии для меняющегося мира/Пер. с англ. М., 2003.
14. Цыганков П.А. Теория международных отношений. М., 2004.
15. Ядерное нераспространение // Под ред. В.А.Орлова, Н.Н. Сокова. М., 2000.

ПРЕДОТВРАЩЕНИЕ УГРОЗЫ ЯДЕРНОГО ТЕРРОРИЗМА

Михайлюк А.С., Захарова М.А.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

В докладе рассматриваются проблемы ядерной безопасности и угрозы ядерного терроризма. В этой связи представлены основные опре-

деления, понятия и международные нормативные правовые акты, регулирующие противодействие ядерному терроризму. Подчеркивается, что при принципиальной общности понимания угрозы ядерного терроризма, в подходах Российской Федерации и США к решению проблемы профилактики ядерного терроризма сохраняются и некоторые различия. Российская сторона видит ее решение через усиление международных стандартов охраны ядерных объектов, включая хранение расщепляющихся материалов, а Соединенные Штаты – через постепенную интернационализацию замкнутого ядерного топливного цикла, а в перспективе и путем коренной реформы МАГАТЭ. Рассматриваются и анализируются меры предотвращения ядерного терроризма.

Авторы обосновывают положение о том, что в умелых руках достижения человечества могут принести немало благ, радости и счастья, открыть новые миры, возвести «человека разумного» на новую ступень эволюции, сделать его более могущественным, влиятельным, подарить новые возможности, доселе неведомые. Вместе с тем, при неграмотном, эгоистичном обращении в алчных порывах те новые достижения, открытия могут просто погубить не только отдельные группы населения, но и целые страны, и даже нашу планету. Для противодействия ядерному терроризму необходимы совместные усилия на уровне государств, прежде всего, стран «большой восьмерки». Ядерная угроза, угроза ядерного терроризма - это не выдумки, а вполне вероятное будущее, если отношение международного сообщества к этим угрозам будет недостаточно ответственным.

ИСТОРИЯ И СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ РЕЖИМА ЯДЕРНОГО НЕРАСПРОСТРАНЕНИЯ

НЕМЦЕВА А.В., РОСЧИХМАРОВА Ю.Д., МИСАТЮК Е.В.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

В докладе рассматривается вопрос о становлении режима ядерного нераспространения с начала ядерной эры в 1945 году по настоящее время; представлена структура и положения Договора о нераспространении ядерного оружия (ДНЯО), действующие на настоящий момент времени; рассмотрены проблемы ДНЯО в современной системе международных отношений, представлены участники ДНЯО, а также неприєднавшиеся страны.

Авторы обосновывают положение о том, что, рассматривая путь развития ДНЯО и оценивая его современное состояние, можно выявить проблемы ДНЯО в современной системе международных отношений и выработать некоторые предложения по усовершенствованию данного договора.

СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ И ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В МИРЕ

ЮРКОВА Е.Д., ЛЕБЕДЕВ И.М., СТРАХОВ А.В.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

В докладе рассматривается современное состояние и перспективы развития атомной энергетики и ядерных технологий в мире. В этой связи представлена ядерная политика членов «ядерного клуба», направления и темпы развития атомной энергетики России, роль ядерной энергетики в структуре мирового энергетического производства, история создания и перспективы развития ядерных технологий. Подчеркивается, что атомная энергетика - это практически единственная отрасль российской экономики, которая развивается не на ресурсо-ориентированной основе, а с помощью научных технологий, создания новых производств и новых методов.

Авторы обосновывают положение что, несмотря на то, что после аварии на атомной станции Фукусима в 2011 году многие развитые страны заявили о своем желании отказаться от применения атомной энергии, эксперты пока не видят альтернативы АЭС. Для стран, которые бедны углеводородными ресурсами, атомная энергия является как раз одной из возможностей восполнить нехватку энергоносителей, причем по адекватным ценам.

Литература

1. А.Т.Комов, А.С.Куликов. О некоторых проблемах подготовки бакалавров по новому федеральному государственному образовательному стандарту // Современные проблемы науки и образования. М. 2009, №2. – с. 36-38.
2. В.Г.Асмолов, А.В.Зродников, М.И.Солонин. Инновационное развитие атомной энергетики России. Материалы заседания Научно – технического Совета Росатома. М.: ЦНИИАТОМИНФОРМ, 2006. – с. 6-14.
3. Technology Road Map for Generation 4 Nuclear Energy Systems // Generation 4 International Forum, GIF-002-00. Issued by US DOE and Generation 4 International Forum, USA. - 2002.
4. П.Л.Кириллов. Сверхкритические параметры – будущее реакторов с водным теплоносителем и АЭС // Обзор. Атомная техника за рубежом. 2001, №6. с. 3 – 8.
5. В.Н.Блинков, Б.А.Габараев, О.И.Мелихов, С.Л.Соловьев. Нерешенные проблемы тепло- и массообмена водоохлаждаемых реакторных установок со сверхкритическими параметрами теплоносителя. Препринт НИКИЭТ ЕТ-08/76. М, 2008. – 85с.

ЧЕРНОБЫЛЬ: ОЦЕНКА ПОСЛЕДСТВИЙ ЯДЕРНОЙ АВАРИИ

БЕРЕЗОВСКИЙ А.Ю., АЛЕХАНОВ А.В., КОВАЛЁВА Е.В.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Доклад посвящён катастрофе на Чернобыльской атомной электростанции в 1986 году. В этой связи представлено описание атомной станции, история её строительства. Описаны основные принципы работы АЭС. Рассмотрены основные причины аварии, процесс распространения радиации и основные направления работ по ликвидации последствий катастрофического разрушения реактора. Подчёркивается, что значительная часть площадей водосбора Днепра, Припяти подверглись интенсивному радиоактивному загрязнению. Нижние участки Припяти, Днепра и верхняя часть Киевского водохранилища вошли в 30-ти километровую зону отселения. Приведена оценка уровня аварии по Международной шкале ядерных событий, разработанной МАГАТЭ в 1988 году и в настоящее время применяющейся в целях единообразия оценки чрезвычайных случаев, связанных с аварийными и радиационными выбросами в окружающую среду, на всех установках, связанных с атомной промышленностью. Отмечено, что Чернобыльская авария остается единственной аварией 7 уровня по Международной шкале ядерных событий. Этот уровень характеризуется как «Большая авария с масштабными последствиями для здоровья людей и окружающей среды». Представлены медицинские аспекты аварии. Отмечено, что после аварии был составлен регистр всех лиц, которые так или иначе могли ощутить на себе влияние аварии на Чернобыльской АЭС, и в него всего вошло свыше 660 тысяч человек.

Авторы обосновывают положение о том, что Чернобыльская катастрофа очень негативно сказалась на развитии атомной отрасли и ядерных технологий в России и потребовала концентрации значительных усилий в области обеспечения ядерной и радиационной безопасности.

Литература

1. Игнатенко. Е. И. Чернобыль: события и уроки. М., 1989г.
2. Чернобыль. Вопросы и ответы. Справочник. М., 1990г.
3. Атомная энергетика. История и современность. М., Наука. 1991г.

МЕЖДУНАРОДНЫЙ РЕЖИМ ЯДЕРНОГО НЕРАСПРОСТРАНЕНИЯ

Бикмухаметов А.Р., Пучкова С.А., Глазова М.А.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

В докладе рассматривается история установления и выполнения международного режима ядерного нераспространения. В этой связи представлены предпосылки установления международного режима ядерного нераспространения; рассмотрен Договор о нераспространении ядерного оружия, описаны цели и задачи работы Международного агентства по атомной энергетике, а также описаны безъядерные зоны, которые ООН считает одним из действенных методов борьбы с ядерной угрозой. Подчеркивается, что, несмотря на то, что ООН считает их одним из действенных методов борьбы с ядерной угрозой, безъядерные зоны до сих пор остаются «серой зоной» международного права. Дело в том, что государства-участники, как правило, не определяют отношения к таким вопросам, как, например, транзит ядерного оружия через их территории или появления в воздушном пространстве военных самолетов дружественных держав, оснащенных ядерным оружием.

Авторы обосновывают положение о том, что режим нераспространения направлен на обеспечение стабильности и безопасности в мире.

Литература

1. Договор о нераспространении ядерного оружия. Одобрен резолюцией 2373 (XXII) Генеральной Ассамблеи ООН от 12 июня 1968 года.

СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ И ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В МИРЕ

Гущин Д.А., Зоткин С.П.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Доклад посвящён современному состоянию и перспективам развития атомной энергетики и ядерных технологий в мире. В этой связи рассматривается состояние атомной отрасли в мире, представлены следующие группы стран: «лидеры роста» (Китай, Индия, Россия); «стабильные рынки» (Канада, Италия, Япония, Ю. Корея, Англия, США); «европейские рынки» (Финляндия и Франция); «перспективные рын-

ки» (Бразилия, ЮАР, Украина, ОАЭ); «малоактивные рынки» (ФРГ, Нидерланды, Румыния, Испания, Швеция, Швейцария). Определены предпосылки для развития атомной отрасли и атомных технологий для государства. Рассмотрены состояние и перспективы развития атомной отрасли в России.

Авторы обосновывают положение о том, что, несмотря на то, что массовая эксплуатация АЭС происходит на пике развития стран индустриального типа, но спадает, когда такие страны переходят на постиндустриальный тип развития по одним и тем же причинам: негативное мнение общественности, дороговизна эксплуатации, это не значит, что атомная энергетика лишится права существовать. Она перейдет на новый уровень по количеству, качеству и безопасности производства, а распространение атомных технологий в с/х, медицине и промышленности должно только ускориться.

ЯДЕРНЫЙ ТЕРРОРИЗМ

ДЕГТЯРЕВ А.В.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

В докладе рассматриваются проблемы, связанные с ядерным терроризмом. В этой связи определено понятие «ядерный терроризм», виды ядерного терроризма, описано какими способами террористы могут завладеть ядерным оружием и меры, предпринимаемые мировым сообществом по предотвращению угрозы ядерного терроризма. Представлен основополагающий документ в сфере обеспечения ядерной безопасности мирового сообщества - Международная конвенция о борьбе с актами ядерного терроризма, открытая для подписания 14 сентября 2005 г., вступившая в силу 7 июля 2007 г.

Автор обосновывает положение о том, что, после вступления Конвенции в силу принятие государствами-участниками мер, направленных на предупреждение и пресечение актов ядерного терроризма, перестало быть только вопросом их внутренней политики. В настоящее время в соответствии с Конвенцией государства-участники обязуются оказывать друг другу максимальную помощь в связи с расследованиями, уголовным преследованием или процедурами выдачи, предпринятыми в отношении преступлений ядерного терроризма, включая содействие в получении имеющихся у них доказательств, необходимых для разбирательства.

МЕЖДУНАРОДНЫЙ РЕЖИМ ЯДЕРНОГО НЕРАСПРОСТРАНЕНИЯ

ЕРЁМКИНА М.С.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

В докладе рассматривается международный режим ядерного нераспространения. Подчёркивается, что ядерное оружие по-прежнему одно из самых опасных видов вооружений в мире. И не смотря на то, что его разработка и использование стоит под жестким международным контролем, возможность появления такого оружия в политически нестабильном регионе или государства по-прежнему сохраняется. В связи с этим, рассмотрен основополагающий документ международного режима ядерного нераспространения - Договор о нераспространении ядерного оружия, разработанный Комитетом по разоружению ООН, чтобы препятствовать расширению круга стран, обладающих ядерным оружием и обеспечить необходимый международный контроль за выполнением государствами взятых на себя по Договору обязательств. Приведены функции и задачи органов международного контроля; проанализированы основные направления развития сотрудничества в области ядерной безопасности.

Автор обосновывает положение о том, что Договор создал широкие возможности для мирного использования атомной энергии.

Литература

2. Договор о нераспространении ядерного оружия. Одобрен резолюцией 2373 (XXII) Генеральной Ассамблеи ООН от 12 июня 1968 года.
3. Корнышева А. Согласие МАГАТЭ //Коммерсант. 27.09.2005.

СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ И ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В МИРЕ

КИЧЕМАСОВ Н.Х., ХАЙРОВ М.Ю., ШИШКАНОВ Д.А.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Доклад посвящён современному состоянию и перспективам развития атомной энергетики и ядерных технологий в мире. В этой связи рассматривается современное состояние атомной энергетики. Подчёркивается, что ядерная энергетика по-прежнему открывает реальные возможности

странам, которые придают большое значение энергетической безопасности и охране окружающей среды и стремятся добиться невысокого и стабильного уровня расходов на производство электроэнергии. Представлены преимущества атомной энергетики и перспективы её развития после аварии на АЭС «Фукусима-1». Рассмотрено состояние российской атомной отрасли, которая является одной из передовых в мире по уровню научно-технических разработок в области проектирования реакторов, ядерного топлива, опыту эксплуатации атомных станций, квалификации персонала АЭС. Россия обладает наиболее совершенными в мире обогатительными технологиями, а проекты атомных электростанций с водо-водяными энергетическими реакторами (ВВЭР) доказали свою надежность в процессе тысячи реакторо-лет безаварийной работы.

Авторы обосновывают положение о необходимости дальнейшего продвижения ядерных технологий, тем самым, стимулируя научно-технические инновации, повышая уровень производства оборудования и делая упор на достижение экономического роста стран в будущем.

Литература

1. Энергетическая стратегия России на период до 2030 года. Расп. Правительства РФ от 13 ноября 2009 г. №1715-р.
2. Белая книга ядерной энергетики /Под общ. ред. проф. Е.О. Адамова: Первое издание. М: ГУП НИКИЭТ, 1998.
3. Современное состояние и перспективы развития энергетики мира /Д.Б.Вольфберг, Теплоэнергетика. 1999. №5. с. 2-7.
4. Современное состояние и перспективы развития энергетики мира /Д.Б.Вольфберг, Теплоэнергетика. 1998. №9. с. 24-28.

ПРОТИВОДЕЙСТВИЕ АТОМНОМУ ТЕРРОРИЗМУ

КОЗЛОВА С.П., ПЕТРОВА М.М., ЕРУНОВА В.А.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

В докладе рассматриваются проблемы, связанные с ядерным терроризмом. В этой связи представлено определение понятия «ядерный терроризм». Подчеркивается, что пока ядерный терроризм существует лишь гипотетически, поскольку теракты подобного вида не осуществлялись в действительности. Тем не менее, попытки заполучить ядерное оружие с целью шантажа властей уже были. Описаны некоторые случаи таких попыток. Подчеркивается, что в настоящее время ведущие государства мира оценивают ядерный терроризм как серьезную угрозу. В связи с этим, представлены сценарии возможных ядерных терактов в зависимости от применяемых средств, описаны террористические ор-

ганизации, в отношении которых достоверно установлено наличие замысла на приобретение ядерного оружия, представлены мнения специалистов о том, насколько реальна самодельная ядерная бомба.

Авторы обосновывают положение о том, что, для противодействия ядерному терроризму необходимы совместные усилия на уровне государств. Необходимо уменьшить количество объектов, на которых хранятся ядерные боеприпасы и делящиеся материалы, до практического минимума и обезопасить все ядерные объекты от любых возможных угроз со стороны террористов и криминалитета. Вместе с тем, необходимо понимать, что ядерный терроризм представляет собой составную часть более широкого явления. Ядерное оружие необходимо руководству террористических организаций как средство для эскалации конфликта и достижения победы в «конфликте цивилизаций».

Литература

1. Договор о нераспространении ядерного оружия. Одобрен резолюцией 2373 (XXII) Генеральной Ассамблеи ООН от 12 июня 1968 года.

2. Резолюции Совета Безопасности ООН № 1373, 1540, и 1887 (Резолюция № 1373 принята Советом Безопасности на его 4385-м заседании, 28 сентября 2001 года; Резолюция № 1540 принята СБ 28 апреля 2004 года; Резолюция № 1887 принята СБ на его 6191-м заседании 24 сентября 2009)

3. Конвенция о физической защите от ядерного материала (13 апреля 2005 года) Глобальная инициатива по борьбе с актами ядерного терроризма.

28 СЕНТЯБРЯ ДЕНЬ РАБОТНИКОВ АТОМНОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

Кокуркина К.А., Рыбин Д.А., Кособоков Д.Г.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

В докладе раскрывается история создания и развития атомной промышленности в России, объясняются причины учреждения в 2005 году профессионального праздника всех работников атомной промышленности РФ - Дня работника атомной промышленности, который отмечается ежегодно 28 сентября. Отмечается, что с самого начала своего существования атомщики СССР не хотели замыкаться только на оборонной тематике. Они умели заглядывать в будущее, быть на шаг впереди, искать иные возможности для использования атомной энергии. Еще в 1946 году, когда в стране гигантскими темпами шло создание атомного оружия, советские физики сделали предположение о возмож-

ном мирном использовании атомной энергии, в частности, в энергетике, транспортной отрасли и в здравоохранении. В этой связи рассматривается сама дата этого праздника, которая выбрана не случайно, так как именно в этот день, 28 сентября 1942 года Государственный комитет обороны СССР выпустил распоряжение «Об организации работ по урану». Таким образом, 28 сентября можно по праву назвать днём рождения атомной энергетики в СССР и России и началом правового регулирования в области использования атомной энергии.

Авторы обосновывают положение о том, что для России развитие атомных технологий стало главной инновацией XX века, послужило мощным толчком для освоения космоса, энергетики, развития лазерных технологий, информационных систем, медицины. Сегодня технологии, так или иначе выросшие из Атомного проекта, окружают нас повсеместно.

МЕЖДУНАРОДНЫЕ И НАЦИОНАЛЬНЫЕ ЗАКОНОДАТЕЛЬНЫЕ ОСНОВЫ ЯДЕРНОЙ И РАДИАЦИОННОЙ БЕЗОПАСНОСТИ

ЛАРЬКИНА О.С., ЛЕМЯСЕВА О.В.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Доклад посвящён международным и национальным законодательным основам ядерной и радиационной безопасности. В этой связи рассматриваются следующие нормативные правовые акты: Конвенция об установлении контроля по соблюдению режима безопасности в области ядерной энергии (1957 г.), Венская Конвенция о гражданской ответственности за ядерный ущерб (1963г.), Конвенция о физической защите ядерного материала (1979 г.), Конвенция об оперативном оповещении о ядерной аварии (1986 г.), Конвенция о помощи в случае ядерной аварии или радиационной аварийной ситуации (1986 г.), Конвенция о ядерной безопасности (1994 г.), Федеральный закон РФ №3-ФЗ «О радиационной безопасности населения», Федеральный закон №347-ФЗ «О внесении изменений в отдельные законодательные акты Российской Федерации в целях регулирования безопасности в области использования атомной энергии» и ряд соглашений между Правительством РФ и Правительствами различных стран о сотрудничестве в мирном использовании атомной энергии (1994 - 2009 гг). Авторами подчёркивается, что в странах с развитой атомной промышленностью, ядерной энергетикой, существует система государственного регулирования общественных отношений при использовании атомной энергии, проблем обеспечения безопасности атомных электростанций, радиационной защиты населения, защиты окружающей среды. Эта система «атомного права» по-

стоянно совершенствуется, дополняется новыми законоположениями и нормативами.

Авторы обосновывают положение о том, что международные договоры образуют правовую основу межгосударственных отношений, содействуют поддержанию всеобщего мира и безопасности, развитию международного сотрудничества в соответствии с целями и принципами Устава ООН. Международным договорам принадлежит важная роль в защите основных прав и свобод человека, а также в обеспечении законных интересов государств.

Литература

1. Владимиров В.А., Измалков В.И., Измалков А.В. Оценка риска и управление техногенной безопасностью. М., 2002.

2. Камаев А.В. Концепция риска и сравнительная оценка воздействия ТЭС и АЭС // Информационный бюллетень «Безопасность. Экология. Радиация». Обнинск, 1992. Вып. 2.

5. Конвенция об установлении контроля по соблюдению режима безопасности в области ядерной энергии (Париж, 20.12.1957) принята постановлением Правительства РФ от 03.04.1996 № 377.

6. Венская Конвенция о гражданской ответственности за ядерный ущерб (Вена, 21.05.1963) ратифицирована Федеральным законом от 21.03.2005 № 23-ФЗ.

7. Конвенция о физической защите ядерного материала (Вена, 26.10.1979) ратифицирована Указом Президиума ВС СССР от 04.05.1983 № 9236-Х.

8. Конвенция об оперативном оповещении о ядерной аварии (Вена, 26.09.1986 г.) ратифицирована Указом Президиума ВС СССР от 14.11.1986 № 6035-ХI.

9. Конвенция о помощи в случае ядерной аварии или радиационной аварийной ситуации (Вена, 26.09.1986) ратифицирована Указом Президиума ВС СССР от 14.11.1986 № 6035-ХI.

ГОСУДАРСТВЕННАЯ ПОЛИТИКА РОССИИ В ОБЛАСТИ НЕРАСПРОСТРАНЕНИЯ ЯДЕРНОГО ОРУЖИЯ И СРЕДСТВ ЕГО ДОСТАВКИ

Липенкова Л.И.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Доклад посвящён государственной политике Российской Федерации в области нераспространения ядерного оружия и средств его доставки. Рассматриваются правовые основы решения проблем нераспростране-

ния ядерного оружия и основные направления государственной политики Российской Федерации в этой сфере. Подчёркивается, что распространение ядерного оружия, а также ракетных средств его доставки относятся к числу важных факторов, определяющих характер угроз национальной безопасности Российской Федерации с учетом ее географического положения и протяженности границ. Эта тема в последнее время приобрела еще большую актуальность в связи с опасностью использования террористами отдельных элементов оружия массового уничтожения.

Автор обосновывает положение о том, что Россия, как инициатор разработки Договора о нераспространении ядерного оружия (ДНЯО), привержена курсу на его укрепление и универсализацию, верна своим обязательствам, вытекающим из Договора, и ведет последовательную работу по привлечению в ДНЯО стран, остающихся за его рамками, в качестве неядерных государств.

Литература

1. «О Стратегии национальной безопасности Российской Федерации» (указ Президента РФ от 31.12.2015 N 683)
2. Концепция внешней политики Российской Федерации (утв. Президентом РФ 12.07.2008 N Пр-1440).
3. Военная доктрина Российской Федерации (утв. Президентом РФ 25.12.2014 N Пр-2976).
4. Договор о нераспространении ядерного оружия (Одобен резолюцией 2373 (XXII) Генеральной Ассамблеи от 12 июня 1968 года).

28 СЕНТЯБРЯ ДЕНЬ РАБОТНИКОВ АТОМНОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

ЛОБАЧЁВА М.А., ВАВИЛОВА Т.А.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

В докладе раскрывается история создания и развития атомной индустрии в мире, объясняются причины интенсивного развития атомной энергетики, атомного флота и других направлений использования атомной энергии, представлена история возникновения гонки вооружения. Делается вывод о том, что дефицит энергии – это война, и война гораздо более страшная, чем организованные боевые столкновения регулярных армий. Рассматривается вопрос о профессиональном празднике всех работников атомной промышленности РФ «Дне работников атомной промышленности», который отмечается ежегодно 28 сентября. В этой связи рассматривается сама дата для проведения этого праздника, которая выбрана не случайно, так как 28 сентября можно по праву

назвать днём рождения атомной промышленности в СССР и России и началом правового регулирования в области использования атомной энергии. В этот день, 28 сентября 1942 года Государственный комитет обороны СССР выпустил распоряжение «Об организации работ по урану». Таким образом, 28 сентября можно по праву назвать днём рождения атомной энергетики в СССР и России и началом правового регулирования в области использования атомной энергии.

Авторы обосновывают положение об исключительной значимости атомной индустрии для отечественной экономики, и то, что напряженная работа сотрудников предприятий атомной отрасли России по праву заслуживает своего профессионального праздника.

Литература

1. Ядерная энергетика. Проблемы и перспективы. Экспертные оценки. Под ред. А.П. Александрова и др.. Изд. ИАЭ им. И.В. Курчатова, М. 1989г. 489с
2. Бойко В.И., Кошелев Ф.П. Ядерные технологии в различных сферах человеческой деятельности Томск, Изд-во ТПУ, 2006, 342 с
3. Кесслер Г. Ядерная энергетика М., Энергоатомиздат, 1986, 264 с.
4. Ядерная и термоядерная энергетика будущего/Под ред. Чуянова В.А. - М.: Энергоатомиздат, 1987. - 192с.
5. Ядерный след/ Губарев В.С., Камиока И., Лаговский И.К. и др.; сост. Малкин Г. - М.: ИздАТ, 1992. - 256с.

ПРОТИВОДЕЙСТВИЕ ЯДЕРНОМУ ТЕРРОРИЗМУ

Мальшев А., Пронин И.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

В докладе подчеркивается, что создание ядерного оружия, его распространение и накопление больших запасов в ряде государств сопровождалось появлением нового феномена тоталитарной угрозы мировому сообществу, имя которому - ядерный терроризм. В этой связи представлены основные определения и понятия терроризма. Подчеркивается, что феномен ядерного терроризма в своих конкретных проявлениях весьма сложен и многообразен. Наибольшую опасность для политической и экономической системы того или иного государства или группы государств представляет хищение ядерных боеприпасов и угроза их применения. Описаны биологические основы действия ионизирующего излучения на организм человека. Представлены некоторые направления защиты от ядерного терроризма: работа правоохранительных и специальных служб по нейтрализации террористических

групп; система заранее подготовленных мер по ограничению ущерба и ликвидации последствий возможных ядерных происшествий; система физической защиты. Как пример, рассмотрена организация системы безопасности АЭС.

Авторы обосновывают положение о том, что, несмотря на многочисленные механизмы, созданные для борьбы с этой угрозой, ядерный терроризм остается реальной и насущной угрозой. Остается ряд серьезных проблем, требующих неустанного внимания и действий со стороны Соединенных Штатов, России и других ответственных государств. Эти проблемы включают в себя остающиеся в некоторых странах уязвимости режима физической ядерной безопасности и незаконный оборот ядерных материалов, источников радиации и различных компонентов.

Литература

1. Доклад «Совместная американо-российская оценка угрозы ядерного терроризма», Белферовский центр науки и международных отношений и Институт США и Канады, май 2011.
2. В. Белоус, «Ядерный терроризм: попытки уже были».
3. В. Новиков, «Ядерный терроризм: блеф или реальность?».

СОСТОЯНИЕ И РАЗВИТИЕ СТРАТЕГИЧЕСКИХ ЯДЕРНЫХ СИЛ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Мишин А.А., Мисатюк Е.В.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

В докладе исследуется вопрос о состоянии и развитии стратегических ядерных сил Российской Федерации. В настоящее время одной из основных задач Российской Федерации по сдерживанию и предотвращению военных конфликтов является «поддержание потенциала ядерного сдерживания на достаточном уровне». Ядерное оружие, как это определено в обновленной Военной доктрине Российской Федерации, утвержденной Президентом России В.В. Путиным 25 декабря 2014 г., «будет оставаться важным фактором предотвращения ядерных военных конфликтов и военных конфликтов с применением обычных средств поражения (крупномасштабной войны, региональной войны)»

Авторы обосновывают положение о том, что с учетом складывающейся негативной ситуации в экономике России, когда намеченные программы строительства и развития стратегических ядерных сил могут быть подвергнуты существенной корректировке, представляется весь-

ма важным сохранить необходимые объемы финансирования для выполнения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ (НИОКР) по созданию перспективных образцов стратегических наступательных вооружений.

ИСТОРИЯ И СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ РЕЖИМА ЯДЕРНОГО НЕРАСПРОСТРАНЕНИЯ

Чередниченко И.Е.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Доклад посвящён истории и современному состоянию режима ядерного нераспространения. В этой связи рассматриваются виды оружия массового уничтожения, история создания и развития режима ядерного нераспространения. Подчёркивается, что основным международным актом, регулирующим наличие у той или иной страны ядерного оружия, является Договор о нераспространении ядерного оружия. Представлена история подписания этого многостороннего международного акта и краткое содержание его основных статей. Рассмотрены составные элементы режима нераспространения, который был создан и продолжает существовать на основе этого договора. Представлены государства, которые, кроме «старых» ядерных держав, обладают ядерным оружием: Индия, КНДР, Израиль, Иран, ЮАР. Рассмотрены латентные ядерные государства, которые воздерживаются, в силу политической и военной нецелесообразности, от перехода в разряд ядерных государств (Аргентина, Бразилия, Тайвань, Республика Корея, Саудовская Аравия, Япония и другие) и государства, ставшие неядерными в своем историческом развитии в области разработки ядерного оружия или отказа от него (Украина, Белоруссия, Казахстан).

Автор обосновывает положение о необходимости модификации Договора о нераспространении ядерного оружия в соответствии с современными требованиями. Мир меняется, и любые договорённости не могут оставаться догмой и должны идти в ногу со временем.

Литература

1. Договор о нераспространении ядерного оружия, одобрен Генеральной Ассамблеей ООН 12 июня 1968.
2. Резолюция Совета Безопасности ООН от 19 июня 1968.
3. Договор о создании в Центральной Азии зоны, свободной от ядерного оружия (Семипалатинск, 08.08. 2008).
4. Договор о всеобъемлющем запрещении ядерных, открыт для подписания 24 сентября 1996 г. в Нью-Йорке.

ПРОБЛЕМЫ ПЕРЕДАЧИ ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Мурылев В.В., Сычёв А.А.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Доклад посвящён проблеме передачи ядерных технологий. В этой связи представлено пояснение того, что означает термин «ядерная технология». Подчёркивается, что проблема передачи ядерных технологий возникла еще при создании атомной бомбы и остаётся актуальной до сих пор.

Авторы обосновывают положение о том, что в настоящее время Договор о нераспространении ядерного оружия представляет собой наиболее всеобъемлющее соглашение по контролю передачи ядерных технологий. Договор является многосторонним международным актом, разработанным Комитетом по разоружению ООН с целью поставить прочную преграду на пути расширения круга стран, обладающих ядерным оружием, обеспечить необходимый международный контроль за выполнением государствами взятых на себя по Договору обязательств. Цель - ограничить возможность возникновения вооружённого конфликта с применением такого оружия; создать широкие возможности для мирного использования атомной энергии.

ПРОТИВОДЕЙСТВИЕ ЯДЕРНОМУ ТЕРРОРИЗМУ

Становов А.А., Решетняк А.Д., Майоров В.А.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

В докладе рассматриваются проблемы, связанные с противодействием ядерному терроризму. В этой связи определено понятие «ядерный терроризм». Рассмотрены сценарии возможных ядерных терактов в зависимости от применяемых средств: применение кустарно изготовленного ядерного взрывного устройства; кража, захват, покупка на черном рынке ядерного взрывного устройства из арсеналов стран, обладающих таким оружием; несанкционированный запуск баллистической ракеты с наземного или морского носителя ядерного оружия. Помимо, собственно, ядерного (то есть связанного с подрывом ядерного боеприпаса), в докладе описан радиологический терроризм, в котором, в отличие от ядерного терроризма, основным поражающим фактором является не ядерный взрыв, а радиоактивное загрязнение окружающей среды. Представлен образ потенциального ядерного террориста.

Авторы обосновывают положение о необходимости финансирования обеспечения эффективного противодействия ядерному терроризму, напоминая о том, что финансовая и социально-политическая цена ликвидации последствий проведенного акта ядерного терроризма может значительно превысить стоимость превентивных мер защиты.

МЕЖДУНАРОДНЫЙ РЕЖИМ АТОМНОГО НЕРАСПРОСТРАНЕНИЯ

ТРУСОВ М.А., КУЗЬМИН А.С., ПРАВДЫНЮК А.В.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Доклад посвящён международному режиму ядерного нераспространения. Утверждается, что краеугольным камнем международно-правового режима нераспространения ядерного оружия является Договор о нераспространении ядерного оружия 1967г. (ДНЯО). Подчёркивается, что недостатком этого режима было то, что страны-участницы сами определяли, какие объекты поставить под гарантии МАГАТЭ. Это открывало возможность для нарушения Договора, поскольку любое государство могло скрыть наличие у него инфраструктуры по созданию ядерного оружия, и проверить его МАГАТЭ не имело права. В результате в 1996 г. в рамках МАГАТЭ была достигнута договоренность по модельному дополнительному протоколу к соглашениям о гарантиях. Инспекторы МАГАТЭ получали право на посещение объектов, не задекларированных принимающей стороной в качестве ядерных. Это существенно расширило возможности Агентства по верификации соблюдения ДНЯО. Другой сложной проблемой является придание ДНЯО универсального характера. За его пределами остаются 4 государства – Индия, Израиль, Пакистан и КНДР. Все эти страны являются ядерными, хотя это и не признается Договором, поскольку три из них произвели ядерные испытания уже после того, как документ вступил в силу, а Израиль вообще не признает (но и не отвергает) наличия у него ядерного оружия.

Авторы обосновывают положение о том, что в настоящее время, несмотря на существующие проблемы, международный режим ядерного нераспространения по охвату представляет собой наиболее всеобъемлющее соглашение по контролю над вооружениями.

ПРОБЛЕМЫ ПЕРЕДАЧИ ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

ШАВРОВ Е.Д., ТИМОНИН Д.А.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

В докладе рассматриваются проблемы, связанные с передачей ядерных технологий. В этой связи представлено определение понятия «ядерная технология». Подчёркивается, что Договор о нераспространении ядерного оружия (ДНЯО) 1968 г. и усилия Международного агентства по атомной энергии (МАГАТЭ) не смогли предотвратить расползание ядерных технологий. Если в середине 1960-х гг. ядерные арсеналы были у пяти государств, то в настоящее время они есть уже у девяти стран. Реальной стала возможность попадания ядерного оружия в руки террористов. Угроза его применения в региональном и даже глобальном масштабе представляется более вероятной, чем в годы холодной войны. Подчеркивается, что на сегодняшний день адекватных механизмов контроля ядерного рынка не существует. Частично проблема решается путем ужесточения экспортных ограничений за счет расширения списка технологий и материалов, на которые распространяются экспортные ограничения. Полный запрет на поставку ядерных технологий и материалов в какую-либо страну не решает проблему нераспространения, а может только заставить эту страну обратиться к черному рынку, поэтому ужесточение контроля в этой сфере вовсе не тождественно усилению его эффективности. Серьезным вызовом для международной безопасности является политика отдельных государств по целенаправленному приобретению ядерного оружия, что включает скрытые незаконные действия, противоречащие положениям ДНЯО. Подчеркивается, что в большинстве случаев проблема заключается не в переключении ядерных материалов и технологий с мирного производства на военные цели на объектах, поставленных под гарантии МАГАТЭ, а незаконный оборот ядерных материалов и технологий и незаявленная деятельность по обогащению урана и переработке плутония.

Авторы обосновывают положение о том, что, одна из основных причин вышеуказанных рисков для международной безопасности кроется в отсутствии правовой базы для обеспечения соблюдения странами членами ДНЯО своих обязательств и механизмов принуждения к не нарушению режима ДНЯО, если необходимо, то и посредством санкций и других принудительных мер. Также требуется укрепление гарантийной деятельности МАГАТЭ в том, что касается осуществления инспекций, научно-технической и материально-финансовой базы.

Секция

**СОВРЕМЕННЫЕ ПРОГРАММНЫЕ
КОМПЛЕКСЫ И СИСТЕМЫ В
МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ**

Председатель жюри –

Холушкин В.С., к.ф.-м.н., доцент, декан ФИТиЭ, заведующий кафедрой ВИТ СарФТИ НИЯУ МИФИ

Члены жюри –

Голубев А.И., д.ф.-м.н., профессор, главный научный сотрудник ИТМФ ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ».

Дерюгин Ю.Н., д.ф.-м.н., доцент, начальник отдела ИТМФ ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», профессор кафедры прикладной математики СарФТИ НИЯУ МИФИ

Дружинин В.В., д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой высшей математики СарФТИ НИЯУ МИФИ

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБЪЕКТА УПРАВЛЕНИЯ В КОМПЬЮТЕРНОМ ТРЕНАЖЕРЕ

АЛЕКСЕЕВ О.В.

Тулский государственный университет

В настоящее время большое внимание уделяется профессиональной подготовке операторов сложных систем [1].

Цель предлагаемой разработки – создание компьютерного психофизиологического тренажера нового типа, реализующего сопровождение человеком-оператором динамического объекта, описываемого системой дифференциальных уравнений достаточно высокого порядка (восьмого и выше).

Объект подчиняется командам, формируемым оператором при помощи манипулятора, однако устойчивое нахождение объекта в заданной зоне может быть обеспечено только в случае опережающих действий оператора. Экран ПК отображает в одной и той же системе координат (СК) положение объекта, курсор манипулятора, пропорционально отклонению которого от центра СК формируется команда управления объектом, и границы зоны допустимого отклонения объекта. Оператор следит за движущимся по определенному закону объектом, который в зависимости от сложности задачи может испытывать детерминированные или случайные посторонние воздействия. При резком отклонении объекта оператор должен среагировать и дать необходимую команду, чтобы объект не вышел из допустимой зоны отклонений (рис. 1).

Блок команд может формировать как безынерционную команду (пропорциональную отклонению курсора), так и динамическую - с учетом производных и интегралов от величины отклонения курсора, а также предусматриваются ограничения, зоны нечувствительности и другие нелинейности.

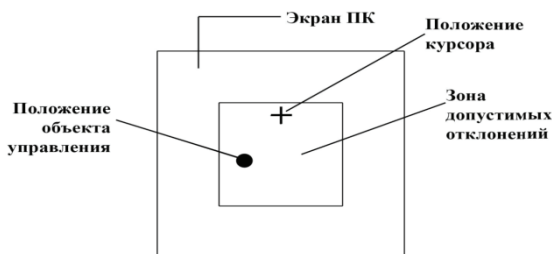


Рис. 1. СХЕМАТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ОКНА ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ

Система дифференциальных уравнений преобразуется в разностные уравнения, решаемые с шагом дискретизации команды, получаемой с манипулятора. Частота дискретизации выбирается на порядок выше частоты собственных колебаний объекта управления и программно задается таймером. Быстродействие модели позволяет работать в реальном времени.

Важным отличием от известных образцов является то, что в ходе тренировки фиксируется в развертке по времени не только траектория объекта, но и траектория курсора, то есть величина команды, подаваемой оператором. Анализируя полученные кривые и зная результат работы, испытуемый наглядно видит свои ошибки.

Предлагаемый психофизиологический тренажер позволяет последовательно усложнять задачу тренировки в соответствии с достигнутым уровнем и вырабатывать навыки управления в условиях помех сложными объектами, в том числе и с переменными во времени характеристиками.

Литература

1. Борисов В.Г., Васильев С.Н., Данилова С.К. Технология разработки компьютерных тренажеров операторов управления подводными морскими объектами // Известия ЮФУ. Таганрог: Изд-во ТТИ ЮФУ, 2011. - Вып. № 3. – Том 116. – С. 6 – 11.

РАЗРАБОТКА МОБИЛЬНОГО ПРИЛОЖЕНИЯ LEARN ENGLISH ДЛЯ ПОПОЛНЕНИЯ СЛОВАРНОГО ЗАПАСА МЕТОДОМ АУДИАЛЬНО-ВИЗУАЛЬНЫХ АССОЦИАЦИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ СОЗНАТЕЛЬНОГО ВНИМАНИЯ

Шиков С.А., Алексеев Е.Г., Ивлиев С.Н.

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет имени Н.П. Огарева

Достаточно часто встречается ситуация, когда человек может читать и писать на иностранном языке, но очень плохо воспринимает речь на слух. Предлагаемый проект посвящен разработке мобильного приложения, в котором пользователь, ориентируясь на услышанное слово, должен подобрать ему соответствие из ряда картинок. Таким образом, тренируется навык аудирования, который является первичным в процессе коммуникации на языке.

Актуальность предлагаемого проекта связана с необходимостью освоения значительной частью населения Российской Федерации навыков коммуникации на английском и других иностранных языках.

Мобильное приложение Learn Language предназначено для изучения английского языка, в последующем приложение можно легко настроить под изучение других языков. Количество одновременно отображаемых визуальных образов - 4-8. В приложение встроена система сбора статистики и расчета текущего рейтинга запоминания слова. Текущее количество слов в словаре составляет 5000. Слова озвучены носителями языка (американский диалект) и группируются на основе частотного словаря.

Начало использования математических моделей в учебном процессе можно датировать 1885г., когда Г. Эббингауз построил «кривую забывания», описывающую связь между временем сохранения и процентом сохранившегося в памяти материала, которая была обнаружена им в его экспериментах [1], а также работами А. Шукарева [2], 1907 г. Авторами разработана система повтора слов, базирующаяся на результатах данных исследований. Для регулирования сложности процесса обучения используется гибкая система настройки подсказок пользователю (подсказка на родном языке, на иностранном языке и т.д.). Прогресс обучения и пользовательские настройки хранятся на web-сервере.

Литература

1. Averell, Lee; Heathcote, Andrew (2011). «The form of the forgetting curve and the fate of memories». *Journal of Mathematical Psychology* 55: 25–35
2. Проблемы теории познания в их приложениях к вопросам естествознания и в разработке его методами / А. Н. Шукарев. - Изд. 2-е, стер. - Москва: КомКнига, 2007.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГОЭФФЕКТИВНЫХ СВЕТОВЫХ ПРИБОРОВ

Байнев В. В.

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет имени Н.П. Огарева

На современном этапе светотехнического производства все большее применение находят различные компьютерные технологии, в частности, трехмерное компьютерное моделирование. Теперь световой прибор (СП) нужно не только спроектировать, но и исследовать его характеристики сначала на виртуальной модели, а уже затем наладить само производство. Очевидно, что такой подход значительно упрощает процесс в связи с сокращением затрат на изготовление большого количества опытных образцов.

Одной из важнейших характеристик, которые определяют качество и назначение СП, является его светораспределение. В общем случае его расчет сводится к трассировке световых лучей (рис. 1), испущенных источниками света. Суммарный световой поток определяется типом и мощностью источников света. Форма фотометрического тела в большей степени зависит от геометрии СП.

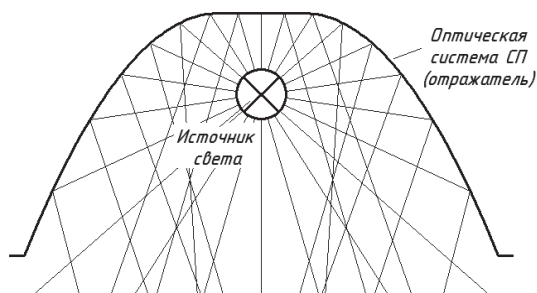


Рис. 1. ПРОГРАММНАЯ ТРАССИРОВКА ЛУЧЕЙ ЧЕРЕЗ ОПТИЧЕСКУЮ СИСТЕМУ СП

Найти способ для аналитического расчета характеристик специализированного СП особой формы достаточно сложно. В связи с этим целью работы стала разработка такой модели геометрии, которая позволяла бы задавать форму СП для дальнейшего проектирования и обеспечивала бы быстрый и точный светотехнический расчет.

Для решения поставленной задачи был использован так называемый прием, суть которого заключается в том, чтобы разделить каждую деталь СП на такие части, каждую из которых можно описать какой-либо элементарной формой: плоскость, конус, сфера, тор, параболоид вращения и др. Они легко задаются аналитическими выражениями, и вычисление точки пересечения луча с поверхностью сводится к решению системы из нескольких уравнений.

В компьютерной графике для моделирования трехмерных объектов используются триангуляционные сетки. Такой способ моделирования позволяет очень тонко настраивать ее форму, задавая координаты вершин напрямую. Получается, что проектировать модели СП проще с помощью триангуляционных сеток, а исследовать – с помощью аналитически задаваемых поверхностей.

В связи с этим главной задачей стала разработка алгоритма преобразования одного способа задания в другой, или аппроксимации. Для этого сначала указывается степень приближения, затем алгоритм начинает эвристический анализ, основанный на последовательном наложении стандартных форм на поверхность сетки. По окончании расчета предлагается один или несколько вариантов разбиения, удовлетворяющих заданной точности. Пользователь может выбрать наиболее подходящий и подкорректировать результат. В данном алгоритме для разде-

ления модели на составляющие части был использован метод опорных векторов. В большинстве реальных случаев большую часть сетки удаётся аппроксимировать аналитическими поверхностями, дающими существенный выигрыш в скорости дальнейших расчетов. Оставшуюся часть выгоднее вовсе не аппроксимировать и оставлять в том же виде.

ГЕНЕРАТОР ЗАМКНУТОЙ ПОВЕРХНОСТНОЙ ТРИАНГУЛЯЦИОННОЙ СЕТКИ В КОМПЛЕКСЕ ПРОГРАММ ЛОГОС

Голомидов Ф.О., Никитин В.А., Панов А.И.,
Соколов С.С., Шурыгин А.В.

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», ИТМФ

В настоящее время во ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» разработан комплекс программ инженерного анализа ЛОГОС[1], предназначенный для подготовки, проведения и анализа результатов компьютерного моделирования задач прочности и аэро-гидродинамики. Для подготовки начальных данных для расчетных методик, входящих в состав пакета программ (ПП) ЛОГОС, используется интегрированный в состав ЛОГОС пре-пост-процессор ЛОГОС-ПреПост.

При подготовке математических моделей задач аэродинамики и гидродинамики используется генератор многогранных дискретных моделей, входящий в состав ЛОГОС-ПреПост, который работает исключительно с исходной поверхностной триангуляционной сеткой. Поэтому, крайне важно, чтобы эта исходная сетка была корректной. Наличие несогласованностей (дефектов) в исходной триангуляции делают невозможным дальнейшее построение объемной сетки.

Таким образом, существует высокая потребность в создании автоматических средств подготовки корректной замкнутой начальной триангуляционной сетки для последующего перестроения поверхностных и построения объемных сеток. Развитие таких средств позволит существенно сократить время подготовки 3D моделей к построению объемных сеток.

В рамках данной работы было разработано средство, обеспечивающее возможность быстрой автоматической генерации корректных, замкнутых поверхностных сеток по исходной поверхностной сетке, содержащей различные несогласованности, дефекты в виде зазоров, пересечений, наложений треугольников и т.д.

Можно выделить четыре основных этапа при генерации замкнутой поверхностной триангуляционной сетки:

1. Формирование начальной внешней оболочки методом построения адаптивной декартовой объемной сетки;

2. Извлечение поверхностной сетки из граней поверхностных ячеек объемной сетки;
3. Проецирование точек поверхностной сетки на поверхность исходной геометрической модели;
4. Оптимизация полученной поверхностной сетки.

Литература

1. Козелков А.С., Дерюгин Ю.Н., Зеленский Д.К., Полищук С.Н., Лашкин С.В., Жучков Р.Н., Глазунов В.А., Яцевич С.В., Курулин В.В.. Многофункциональный пакет программ ЛОГОС: физико-математические модели расчета задач аэро-, гидродинамики и тепломассопереноса. Препринт №111.Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2013, 67 с.

ДЕТЕКТИРОВАНИЕ ОБРАЗОВ В СИСТЕМАХ КОМПЬЮТЕРНОГО ЗРЕНИЯ

Дюпин В. Н., Фролкина А. В., Доронин В.А., Кузьмин В.В., Корнилова А.Ю.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Компьютерное зрение (машинное зрение) — совокупность программно-технических средств, обеспечивающих считывание в цифровой форме видеоизображений, их обработку и выдачу результата в форме, пригодной для его практического применения в реальном масштабе времени. [1]

Ключевой задачей направления компьютерного зрения является задача “обучения и распознавания образов” (ОРО) с точки зрения компьютера имеет высокую сложность, сопоставимую с задачей создания искусственного интеллекта (ИИ). Сложность задачи ОРО в первую очередь обусловлена проблемой накопления опыта, включающей принципы формирования базы знаний, обучения системы компьютерного зрения (СКЗ), реализации алгоритмов поиска координат центра, границ и масштаба объектов. Следует учесть, что человек в задаче ОРО всегда учитывает окружение (контекст) объекта – множество объектов, расположенных вблизи исследуемого образа. [2]

Детектирование образов – одна из ключевых задач ОРО, заключающаяся в обнаружении объектов на изображении.

Рассмотрим задачу детектирования образов в видео-потоке (множестве изображений поступающих на вход СКЗ с постоянной частотой). Каждое изображение будем считать конечной двумерной матрицей с постоянной размерностью, элементами которой являются кортежи

(r,g,b), где r,g,b – градации интенсивности красного, зеленого и синего цвета (целые числа из диапазона [0-255]).

Тривиальным решением операции сегментации является операция вычитание фона соседних изображений видео-потока. Результатом этого вычитания являются области смещенных объектов. Следует учесть, что при таком подходе неподвижные объекты воспринимаются, как фон и не учитываются в процессе детектирования.

Поиск контуров объектов удобно вычислять с помощью метода Difference of Gaussians (DoG), заключающегося в поиске наиболее контрастных границ фрагментов реального мира.

Каждый найденный объект изображения заносится в базу знаний СКЗ, проходя предварительно процедуру валидации – проверки уникальности объекта. В качестве критерия оценки подобия найденного объекта с уже имеющимися объектами в базе знаний удобно использовать PSNR (Peak signal-to-noise ratio) – пиковое отношение сигнал/шум. Это отношение вычисляется по формуле:

$$PSNR = 10 \lg \frac{M^2}{MSE}$$

где M – максимальное значение интенсивности пикселей (элементов матрицы изображения), а MSE – среднеквадратичное отклонение интенсивности пиксела.

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - y_i)^2$$

где N – количество пикселей, а x_i и y_i – значение интенсивности i-го пиксела изображения X и Y соответственно. [3]

Литература

1. Компьютерное зрение [Электронный ресурс]. – Режим доступа: [https://ru.wikipedia.org/wiki/Компьютерное зрение](https://ru.wikipedia.org/wiki/Компьютерное_зрение) (дата обращения: 01.02.16)
2. Крайнов А. Компьютерное зрение. Лекция для Малого ШАДа Яндекса [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://video.yandex.ru/users/ya-events/view/1266> (дата обращения: 10.02.16)
3. Пиковое отношение сигнала к шуму [Электронный ресурс]. – Режим доступа: [https://ru.wikipedia.org/wiki/Пиковое отношение сигнала к шуму](https://ru.wikipedia.org/wiki/Пиковое_отношение_сигнала_к_шуму) (дата обращения: 12.02.16)

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СИСТЕМ ОТСЛЕЖИВАНИЯ ОШИБОК ПРИМЕНИТЕЛЬНО К РАЗРАБОТКЕ АСУ ТП

Ескова Е.А., Тюндюна А.А

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Разработка автоматизированной системы управления технологическим процессом (АСУ ТП) представляет собой сложный и трудоемкий процесс, в котором задействованы различные технологии. В процессе разработки возникают ошибки, которые необходимо отслеживать и исправлять. Для этой цели существуют системы отслеживания ошибок.

В работе представлен краткий обзор наиболее популярных систем отслеживания ошибок, применяемых к АСУ ТП. Определен перечень критериев для выбора системы отслеживания ошибок, применительно к жизненному циклу разработки АСУ ТП. Каждая система проанализирована и протестирована на соответствие критериям выбора. Выбрана наиболее подходящая для АСУ ТП система. Произведено внедрение системы в жизненный цикл разработки АСУ ТП.

РАЗВИТИЕ МОДЕЛЕЙ ГИДРОГЕОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ В ПАКЕТЕ ПРОГРАММ НИМФА

ГОРЕВ И.В., ЖУРАВЛЕВА М.В.

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», ИТМФ

Важнейшей проблемой дальнейшего развития атомной отрасли страны является обеспечение безопасного обращения с радиационно-опасными отходами. В этой связи актуальным вопросом, имеющим значительный общественный резонанс, является получение достоверной информации о воздействии ЯРОО и хранилищ РАО на грунты, грунтовые и поверхностные воды.

Основным методом, позволяющим получить количественные пространственно-временные характеристики воздействия ЯРОО на природные среды и, в частности, на недра, является компьютерное моделирование процесса движения подземных вод (геофильтрации) и связанного с ним подземного массопереноса (геомиграции).

Одним из классов задач, решаемых с помощью ПК «НИМФА», являются т.н. гидрогеоэкологические задачи, предусматривающие расчеты грунтовых и приповерхностных водных потоков и переноса с ними природных и техногенных загрязнений (процессов геофильтрации и геомиграции).

Данная работа посвящена разработке и реализации, в рамках пакета программ НИМФА, ряда программных блоков, направленных на развитие функциональных возможностей комплекса. В рамках данного проекта были разработаны новые и развиты имеющихся модели геологических объектов для решения задач однофазной многокомпонентной фильтрации.

Для обеспечения выполнения современных требований к достоверности результатов моделирования, был выполнен сравнительный анализ модельных полей напоров на базе результатов фильтрационного моделирования площадки №6 ФГУП «РФЯЦ ВНИИЭФ». Проведены расчеты на регулярных (нерегулярных) сетках, построенных в рамках программных комплексов НИМФА и MODFLOW, использован современный метод применения многоуровневой аппроксимации В-сплайнами в программах обработки результатов решения гидрогеологических задач, с целью получения погрешностей, относительно результатов данных расчетов.

ПРИМЕНЕНИЕ ВИХРЕРАЗРЕШАЮЩИХ МОДЕЛЕЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ В ЗАДАЧАХ ЕСТЕСТВЕННОЙ И ВЫНУЖДЕННОЙ КОНВЕКЦИИ С ПРЕОБЛАДАНИЕМ ГРАВИТАЦИОННЫХ СИЛ

Крутякова О.Л., Курулин В.В.

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

Вихреразрешающие подходы к моделированию турбулентности (метод крупных вихрей LES [1], а также гибридные подходы DES[2] и зонный RANS-LES[3]) позволяют получать хорошие результаты для любых типов течений, а также обеспечивать детальной информацией о структуре течения. Однако практика их использования в настоящее время ограничивается серьезными проблемами: недостаток вычислительных ресурсов для решения задач с большими числами Рейнольдса, отсутствие эффективных численных схем, имеющие необходимые низкодиссипативные свойства, сложность в получении итогового результата. В докладе представлены результаты исследования, направленного на разработку эффективного численного алгоритма для использования вихреразрешающих подходов применительно к промышленно-ориентированным задачам. В частности представлена низкодиссипативная численная схема BCD [4] совместно с алгоритмом повышения устойчивости счета [5], которые вкпе позволяют получать устойчивое численное решение задачи. Представлена технология поэтапного решения промышленно-ориентированных задач, средствами пакета программ ЛОГОС.

В качестве промышленно-ориентированных рассматривается класс задач, где существенным является учет сил гравитации. Такие задачи характерны для атомной энергетики. В докладе для таких задач выделены два подкласса: задачи с вынужденной конвекцией (течение в тройниковом соединении квадратного сечения), задачи с естественной конвекцией (моделирование конвекции в замкнутом кубе и задача конвективного течения в установке СОРО и BALI). По каждой задаче представлен детальный анализ эффективности работы представленных алгоритмов. Полученные результаты задач сравниваются с известными экспериментальными либо численными результатами других авторов.

Работы, представленные в докладе, выполнены при финансовой поддержке РФФИ в рамках проекта № 16-31-00080.

Литература

1. Снегирев А. Ю. Высокопроизводительные вычисления в физике. Численное моделирование турбулентных течений. - Санкт-Петербург: Издательство Политехнического Университета, 2009.

2. Козелков А.С., Курулин В.В., Тятюшкина Е.С., Пучкова О.Л. Моделирование турбулентных течений вязкой несжимаемой жидкости на неструктурированных сетках с использованием модели отсоединенных вихрей // Матем. моделирование.– 2014. – Т. 26, № 8. – С. 81-96.

3. Курулин В.В., Козелков А.С., Тятюшкина Е.С., Пучкова О.Л. Зонный RANS-LES подход на основе алгебраической модели рейнольдсовых напряжений // Известия РАН. Механика жидкости и газа. – 2015. № 5. С. 24-33.

4. Курулин В.В., Козелков А.С. Численная схема для моделирования турбулентных течений несжимаемой жидкости с использованием вихреразрешающих подходов // Журнал вычислительной математики и мат. физики.– 2015. – Т. 55, № 7. – С. 135-146.

5. Курулин В.В. Моделирование турбулентных течений вихреразрешающими подходами на неструктурированных сетках // Автореферат диссертации на соискание степени к.ф.-м.н., Саров 2015.

РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ МЕТОДОМ СГЛАЖЕННЫХ ЧАСТИЦ SPH

Полицук С.Н., ЛАЗАРЕВ А. А., ТИХОМИРОВ Б.П.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Метод гладких (сглаженных) частиц, известный в зарубежной литературе как SPH-метод (SmoothedParticleHydrodynamics), был предложен в 1977 году независимо Люси [1] и Джинголдоном и Моноганом [2]. Метод имеет широкое практическое применение при решении задач грави-

тационной газовой динамики [3,4], задач астероидной тематики [5,6], упругопластики и детонации пористых тел [7,8].

Метод SPH является лагранжевым бессеточным численным методом. Сплошная среда заменяется дискретной системой расположенных в пространстве частиц. Уравнения сплошной среды записываются для каждой частицы, взаимодействующей с остальными частицами пространства. В основе метода заложен интерполяционный принцип, который позволяет выражать значение некоторой функции в произвольной точке, зная ее значения в наборе соседних точек. При этом ключевым является использование сглаживающего ядра для аппроксимации значения некоторой функции и производных сглаживающего ядра для аппроксимации производных функции.

В работе рассматривается аппроксимация уравнения лучистой теплопроводности по неявной разностной схеме с применением метода SPH. Для линеаризации уравнения используется метод Ньютона. Рассмотрены различные способы усреднения коэффициента теплопроводности на границе взаимодействия частиц. Проведено решение нескольких задач: распространение излучения от мгновенного и от постоянно действующего точечных источников, распространение тепловой волны в трехслойной системе под углом к границам вещества.

Численные расчеты проводились в рамках комплекса MPC [9], предназначенного для решения двумерных и трехмерных задач газовой динамики с теплопроводностью.

Литература

1. Lucy L. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis // *Astronom. J.* 1977. Vol. 82 P.1013.
2. Gingold R.A., Monaghan J.J. Smoothed Particle Hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 1977. Vol. 181. P. 375-389.
3. Алиев А.В., Тарнавский Г.А. Иерархический SPH-метод для математического моделирования в гравитационной газовой динамике. // *Сибирские электронные математические известия*, том 4, стр. 376-434 . 2007.
4. Алиев А.В. Применение метода сглаженных частиц для решения задач физической газовой динамики. // *Вычислительные методы и программирование*, 2008. том 9, 40-47.
5. Блажевич Ю.В., Иванов В.Д., Петров И.Б., Петвиашвили И.В.. Моделирование высокоскоростного соударения методом гладких частиц // *Математическое моделирование*. Том 11. № 1. 1999.
6. Петров И.Б., Миряха В.А., Санников А.В., Шевцов А.В. Численное моделирование стадии разрушения метеорита в плотных слоях атмосферы в упругопластическом приближении // *Компьютерные исследования и моделирование*. 2013. Том 5. № 6. С. 957-967.

7. Паршиков А.Н.. Применение решения задачи Римана в методе частиц // Журнал Вычислительной математики и математической физики, 1999, том 39, №7, с. 1216-1225.

8. Паршиков А.Н. Численный метод SPH, использующий соотношения распада разрывов, и его применение в механике деформируемых гетерогенных сред. Докторская диссертация, ОИВТ РАН, 2013.

МОДУЛЯРНО-СИСТОЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ДЛЯ МАССОВЫХ АРИФМЕТИЧЕСКИХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Осинин И.П.

Вятский государственный университет

На сегодняшний день мощности новых суперкомпьютеров наращиваются постоянно. Высокопроизводительные вычисления применяются для обеспечения растущих запросов науки, техники, экономики, веб-сервисов, энергетики, геофизики и многих других. Решением задачи повышения скорости вычислений при приемлемых аппаратных затратах является построение таких арифметических устройств, операционная часть которых представляет собой универсальное вычислительное пространство, перестраиваемое для выполнения параллельно-конвейерной обработки различных арифметических операций.

Разработанное и запатентованное [1] вычислительное устройство представляет собой модулярно-систолическую структуру для массовых арифметических вычислений с фиксированной точкой. Высокая производительность, в отличие от известных универсальных процессоров, достигается за счет применения систолических структур, функционирующих в базе непозиционной модулярной системы счисления, что позволяет:

- ◆ распараллеливать арифметические операции на уровне остатков непозиционной системы счисления;
- ◆ производить параллельно-конвейерную обработку каждого модуля в однородной вычислительной среде;
- ◆ заменять операции умножение и деление нацело операцией сложение.

Кроме того, предложенные технические решения позволяют организовать динамическую реконфигурацию числа ядер процессора для наращивания разрядности обрабатываемых данных, что бывает необходимо для повышения точности вычислений.

Текущая реализация в виде IP-блока софт-процессора подтверждает реализуемость архитектурных особенностей [2]. В перспективе такой процессор может быть создан не только в качестве дополнения системы на кристалле, но и как самостоятельное устройство. Например, в

виде арифметического ускорителя, подключаемого к компьютеру с традиционной архитектурой, либо в качестве центрального процессора на базе СБИС.

Литература

1. Осинин И.П., Князьков В.С. Ячейка однородной вычислительной среды, однородная вычислительная среда и устройство для конвейерных арифметических вычислений по заданному модулю // Патент 2477513 РФ. МПК G06F7/72. опубл. 10.03.2013г. Бюл. №7.

2. Осинин И.П., Князьков В.С. Организация параллельно-конвейерной СБИС-структуры с реконфигурируемой микроядерной архитектурой // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Серия: Технические науки. 2013. №3. С. 74–83.

ПРИНЦИПЫ МОДУЛЯРНО – ЛОГАРИФМИЧЕСКОЙ АРИФМЕТИКИ

МАКАРОВ С.А.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Мы настолько привыкли к традиционному счету в позиционной системе счисления (ПСС), что даже не задумываемся над возможностью построения иных систем вычислений. В позиционной системе счисления значение каждого числового знака в записи числа зависит от его позиции. Однако существуют и так называемые «непозиционные системы счисления», к одной из которых относится «система остаточных классов» (СОК), являющаяся основой модулярной арифметики. В СОК числа представляются как остатки по заданной системе модулей. Остатки обладают меньшей разрядностью, и основные арифметические операции над ними могут производиться параллельно и независимо друг от друга. Таким образом, устройства, функционирующие на основе СОК, позволяют распараллелить процесс вычислений, как на программном, так и на аппаратном уровне. Научные работы Червякова Н.И., Акушского И.Я., Akio Sasaki, Garner H., Omondi A. посвящены этому направлению [1].

Основным препятствием для широкого применения системы остаточных классов в вычислительной технике является сложность выполнения немодульных операций, например, деление числа на степень двойки, что значительно затрудняет представление чисел с плавающей точкой. С другой стороны, представление чисел с плавающей точкой по стандарту IEEE-754 обладает рядом недостатков, например, погрешность представления числа увеличивается с возрастанием этого числа,

необходимость денормализации и нормализации чисел в процессе выполнения арифметических операций. Как альтернативу представления чисел с плавающей точкой предлагается использовать логарифмическую систему счисления (ЛСС), где отсутствует нормализация и денормализация, что избавляет от ошибок округления. Так же в ЛСС умножение и деление заменяется сложением и вычитанием, что позволяет уйти от необходимости округления чисел, попутно многократно ускоряется выполнение этих операций [2]. Основополагающий вклад внесли ученые Coleman J., Arnold M. [3].

Таким образом, представляя числа в СОК и работая с ними в ЛСС можно достичь высокой скорости вычислений с плавающей точкой за счет распараллеливания арифметических операций на уровне остатков в СОК и заменяя операции умножение и деление вещественных чисел операциями сложение и вычитание, благодаря свойствам логарифмов. Однако в настоящее время, нет законченных прототипов устройств работающих на основе модулярно-логарифмической арифметики. Поэтому разработка подобных устройств актуальна.

Литература

1. Червяков Н.И. Модулярные параллельные вычислительные структуры нейропроцессорных систем. Москва: Изд-во Физматлит, 2003. 288 с.
2. J.N. Coleman and E.I. Chester , A 32-Bit Logarithmic Arithmetic Unit and Its Performance Compared to Floating-Point
3. Coleman J.N., Chester E.I. Arithmetic on the European Logarithmic Microprocessor // IEEE Transactions on Computers. 2000. Vol. 49, No. 7. P. 702–715.

МАТРИЧНЫЕ СБИС–СТРУКТУРЫ НА БАЗЕ МНОГОУРОВНЕВОЙ СИСТЕМЫ ОСТАТОЧНЫХ КЛАССОВ

СИМАКОВ В.Ю.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

В настоящее время, интенсивно ведутся научные исследования в области микроархитектуры процессоров нового поколения. Немаловажной задачей, является создание энергоэффективного арифметического устройства. Одним из путей решения данной задачи является совершенствование устройства на архитектурном уровне. Система остаточных классов (СОК) позволяет существенно улучшить параметры вычислительных машин по сравнению с машинами, построенными на той же технологической базе, но в позиционной системе счисления, а также получить новые, более прогрессивные конструктивные и струк-

турные решения [1]. Используя СОК, можно соблюдать баланс между увеличением производительности (за счет распараллеливания счета по малоразрядным остаткам) и минимизацией аппаратных затрат (за счет того, что аппаратура для всех остатков аналогична).

В литературе [1-3] показано, что в настоящее время, ведутся исследования в области создания арифметических устройств на модулярной арифметике. Разрабатываются библиотеки для автоматического синтеза аппаратуры на уровне транзисторов.

Существуют патенты устройств, например, [4], в которых заранее определен тип арифметической операции и набор модулей, но нет библиотеки, которая предоставила бы разработчику интерфейс для управления балансом между скоростью и аппаратными затратами.

Развитие современной микроэлектронной базы, в частности широкое применение сверхбольших интегральных схем, дало толчок к исследованию возможности применения матричных методов обработки информации. Матричные арифметические устройства выполняют заданные операции по модулю с высокой скоростью, которая определяется временем срабатывания одного транзистора в отличие от традиционных аналогов. Существенным недостатком матричных методов обработки информации, применяемых в позиционных системах счисления, является большое количество необходимого оборудования (n^2 от входной разрядности) [2]. Одним из вариантов решения данной проблемы является применение многоуровневой системы остаточных классов, где каждый остаток исходной СОК (первый уровень) можно закодировать в СОК с меньшими остатками (второй уровень). Например, остаток первого уровня 103 можно представить кортежем (1,3,5) в СОК второго уровня с меньшими основаниями 3, 5 и 7.

Таким образом, модулярное представление в сочетании с матричным методом предоставляет возможность создать библиотеку синтеза аппаратных арифметических устройств с возможностью управления балансом между скоростью и аппаратными затратами.

Литература

1. Модулярные параллельные вычислительные структуры нейроморфных систем / Н.И. Червяков, П.А. Сахнюк, А.В. Шапошников, С.А. Ряднов; под ред. Н.И. Червякова. – М.: Физматлит, 2003. – 288 с.
2. Вариант синтеза процессора в системе остаточных классов // РИ, №2, 2003. С. 94-96.
3. Червяков Н.И., Авербух В.М., Бабенко М.Г., Ляхов П.А., Гладков А.В., Галочкин А.В. Приближенный метод выполнения немодульных операций в системе остаточных классов. // *Фундаментальные исследования*, №6, 2012. С. 189-193.
4. Патент 2299461 Российская Федерация, МПК G06F7/72. Умножитель по модулю / В.И. Петренко, Ю.В. Кузьминов; опубл. 20.05.2007г., Бюл. №14.

ПРИМЕНЕНИЕ СУПЕРКОМПЬЮТЕРОВ ПРИ РЕШЕНИИ ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧ

МАКЕЙКИН Е.Г., МАКАЕВА И.В., КАЩЕЕВ Ю.Н.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Суперкомпьютер – это специализированная вычислительная машина, значительно превосходящая по своим техническим параметрам и скорости вычислений большинство существующих в мире компьютеров. О чем собственно и говорит приставка «Супер» (Super в переводе с английского означает: сверх, над). Любая компьютерная система состоит из трех основных компонентов:

- ◆ центрального процессора;
- ◆ блока памяти;
- ◆ вторичной системы хранения информации.

Суперкомпьютерные технологии становятся ключевым фактором научно-технического и экономического развития национальных экономик [1].

Высокопроизводительные суперкомпьютеры в настоящее время рассматриваются как стратегический вычислительный ресурс для выполнения инженерного математического моделирования, сложных научно-технических расчетов и решения наукоемких задач по созданию высокотехнологичной конкурентоспособной продукции без проведения дорогостоящих натуральных экспериментов.

Широкое внедрение суперкомпьютерное математическое моделирование получило при решении научных и инженерных задач в различных секторах экономики:

- ◆ в автомобилестроении;
- ◆ в авиационной промышленности;
- ◆ в ядерной энергетике;
- ◆ в фармакологии;
- ◆ при разведке и добыче углеводородов;
- ◆ в наноиндустрии и в других очень важных отраслях национальных экономик.

В докладе подробно раскрыто понятие «суперкомпьютер», ареал его использования, а также показаны самые мощные «суперкомпьютеры» мира.

Литература

1. Эффективность применения высокопроизводительных суперкомпьютеров в реальной экономике. URL: http://www20042010.iwep.kz/index.php?option=com_content&task=view&id=21&itemid=39 (дата обращения: 17.02.2016).

СИНТЕЗ УПРАВЛЕНИЯ ПРИ ОГРАНИЧЕНИЯХ НА ФАЗОВЫЕ И УПРАВЛЯЮЩИЕ ПЕРЕМЕННЫЕ НА ОСНОВЕ ЛИНЕЙНЫХ МАТРИЧНЫХ НЕРАВЕНСТВ

НИКОЛАЕВА О.Ю.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Одной из актуальных проблем теории управления всегда являлся учет возможных ограничений на фазовые переменные объекта и на управление. В данном докладе рассматривается новый подход к синтезу линейных законов управления, который основан на линейных матричных неравенствах. Для заданной системы, где введены функционалы и критерий качества, задача оптимального многоцелевого управления с интегральными и фазовыми ограничениями, рассматриваемая в данной работе, заключается в нахождении линейного управления по обратной связи в виде $u = x$. Рассматривая вспомогательную задачу, метод решения которой основан на функциях Ляпунова, мы сводим первоначальную задачу синтеза субоптимального многоцелевого управления к решению линейных матричных неравенств.

Теория линейных матричных неравенств в настоящий момент позволяет для широкого класса динамических систем построить законы управления, обеспечивающие асимптотическую устойчивость и оптимальность переходного процесса. Эффективные алгоритмы, реализованные в современных пакетах прикладных программ (в данной работе используется пакет MATLAB), позволяют справиться с решением матричных неравенств.

Для иллюстрации основной идеи этого метода в данном докладе рассматривается ограниченное линейно-квадратичное управление перевернутым маятником, а также задача из теории противоударной защиты объекта (Баландин, Болотник, и Пилкей 2001)

о минимизации максимального смещения предмета при ограничениях, наложенных на максимальное ускорение объекта.

Литература

1. Balandin D. V., Kogan M. M. LMI based multi-objective control under multiple integral and output constraints // International Journal of Control, February 2010, Vol. 83.
2. Баландин Д.В., Коган М.М. Синтез законов управления на основе линейных матричных неравенств. М.: Физматлит, 2007

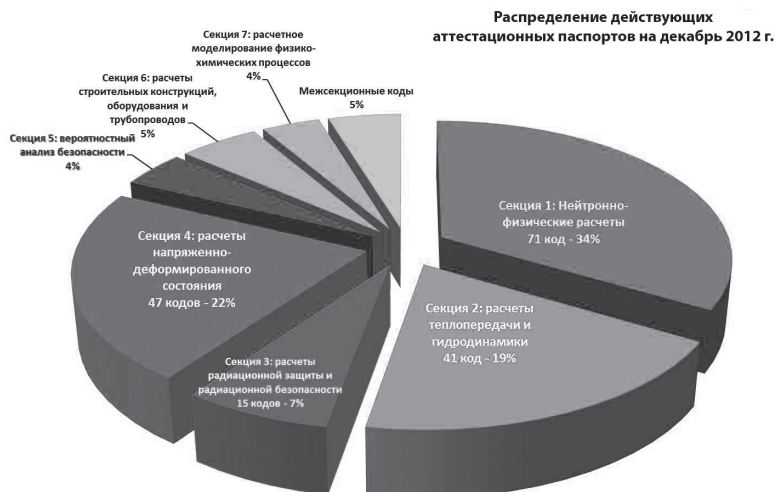
СРАВНИТЕЛЬНЫХ АНАЛИЗ ОТЕЧЕСТВЕННЫХ И ЗАРУБЕЖНЫХ ПРОГРАММНЫХ КОДОВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ РАСЧЕТОВ В РАЗЛИЧНЫХ ОБЛАСТЯХ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

Прошкина Е.Я., Тихомиров Г.В., Сальдииков И.С., Богданова Е.В.

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

На базе кафедры №5 НИЯУ МИФИ существует Центр Тестовых Задач для верификации программ моделирования физических процессов в инновационных ядерных реакторах. Центр проводит процедуру проверки программных кодов на пригодность их для расчетов современных и инновационных ядерных реакторах.

В 1991 году при Научно-техническом центре по ядерной и радиационной безопасности (НТЦ ЯРБ) [1] был создан Совет по аттестации программных средств при Ростехнадзоре РФ. Секции Совета по аттестации ПС:



Моя работа заключалась в сравнении российских программ с зарубежными по секции «Нейтронно-физические расчеты», «Расчеты радиационной защиты и радиационной безопасности», «Расчеты напряженно-деформированного состояния» и «Расчеты теплопередачи и гидравлики».

У Российских программ есть ряд существенных недостатков:

- ◆ «Кустарное» исполнение (код работает только в руках авторов).

- ◆ Малый охват пользователей (одна – две группы пользователей кроме авторов).
- ◆ Плохое описание кода.
- ◆ Недостаточный уровень технической поддержки(нет курсов обучения и рекламных материалов).
- ◆ Обилие программ, использующихся в различных организациях.

Поиск аналогов осуществлялся с помощью ресурса www.oecd-nea.org[2]. Это сайт Агентства по ядерной энергии при Организации экономического сотрудничества и развития, в которое входит НИЯУ МИФИ. Поэтому МИФИ обладает правом заказать программы, представленные на ресурсе.

Литература

1. Научно-технический центр по ядерной и радиационной безопасности [Электронный ресурс]. URL:<http://www.secnrs.ru>(дата обращения 20.02.2016).

2. Агентство по ядерной энергии [Электронный ресурс]. URL: www.oecd-nea.org (дата обращения 20.02.2016).

АЛГОРИТМЫ ДИНАМИЧЕСКОЙ БАЛАНСИРОВКИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ НАГРУЗКИ ДЛЯ МНОГОМЕРНЫХ РАСЧЕТОВ В МЕТОДИКЕ ТИМ

Половникова Т.Н., А.А. Воропинов

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

Методика ТИМ [1,2] предназначена для решения многомерных нестационарных задач механики сплошных сред на неструктурированных лагранжевых сетках произвольного вида.

Эффективное выполнение счетных программ на многопроцессорных машинах с распределенной памятью требует декомпозиции данных по процессам таким образом, чтобы распределение вычислительной нагрузки было равномерным, а количество межпроцессных обменов минимальным.

Опыт проведения расчетов показал, что основной проблемой является не получение изначально плохой декомпозиции, а постепенное ухудшение ее качества в процессе проведения расчета.

Алгоритмы балансировки для сеточных методик можно классифицировать следующим образом:

- ◆ Статическая балансировка (на этапе декомпозиции учитываются весовые функции).

- ◆ Квази-динамическая балансировка (передекомпозиция в процессе счета).
- ◆ Динамическая балансировка (путем передачи ячеек между параобластями внутри математической области).

Набор критериев для проведения динамической балансировки вычислительной нагрузки состоит из двух частей:

1. Критерии анализа необходимости выполнения операции улучшения качества декомпозиции:

- ◆ Разбалансированность по вычислительной нагрузке.
- ◆ Параобласть близка к перебитию (по типу «песочные часы»).

2. Критерии выбора ячеек для переброски.

- ◆ Ячейка из заданного списка.
- ◆ Неоптимальное отношение по количеству внутренних и граничных ребер (2D) и внутренних и граничных граней (3D).
- ◆ Неоптимальное отношение по длине внутренних и граничных ребер (2D) и по площади внутренних и граничных граней (3D).
- ◆ Ячейка максимального веса.
- ◆ Ряд критериев, вырабатываемых программами поддержания качества сетки.

Применение алгоритмов динамической балансировки вычислительной нагрузки позволяет ускорить счет и эффективно загрузить процессорное поле, выделенное на задачу.

В дальнейшем планируется провести исследование на серии сложных расчётов для выбора оптимального набора параметров, подходящего для решения широкого класса прикладных задач.

Литература

1. Соколов С.С., Панов А.И., Воропинов А.А., и др. Методика ТИМ расчета трехмерных задач механики сплошных сред на неструктурированных многогранных лагранжевых сетках // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2005. Вып 3. С. 37-52.

2. Соколов С.С., Воропинов А.А., Новиков И.Г., и др. Методика ТИМ-2D для расчета задач механики сплошной среды на нерегулярных многоугольных сетках с произвольным количеством связей в узлах // Там же. 2006. Вып. 4. С. 29-43.

УРОВЕНЬ ГАШЕНИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ПРИ НЕИЗВЕСТНЫХ НАЧАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ СИСТЕМЫ

Прыткова А.С.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Данная работа посвящена современным вопросам H_∞ -управления. Во многих задачах управления начальное состояние объекта может быть ненулевым и в общем случае неизвестно. Задача H_∞ -оптимального управления линейной системой с учетом ненулевых начальных условий является обобщением хорошо известной в теории управления задачи H_∞ -оптимального управления, в которой начальные условия полагаются нулевыми. В классической задаче H_∞ -управления определяется закон управления, обеспечивающий минимальное значение уровня гашения внешнего возмущения. При этом предполагается, что в начальный момент объект находится в покое, т.е. его начальное состояние нулевое. Ненулевое начальное условие вызывает начальное возмущение объекта. Для оптимального гашения начального возмущения в отсутствие внешнего возмущения был определен так называемый - оптимальный закон управления, который минимизирует уровень гашения начального возмущения. Когда действуют оба возмущения, представляет интерес синтезировать закон управления, который был бы наилучшим в смысле гашения как внешнего, так и начального возмущений. Для синтеза управления применяется аппарат линейных матричных неравенств.

Рассматривается задача отыскания уровня гашения возмущений на примере линейного осциллятора, уравнение которого сводится к матричному виду. После чего встает вопрос о разрешимости линейных матричных неравенств. Решение задачи реализуется в пакете прикладных программ MATLAB, который обеспечивает эффективное решение системы линейных матричных неравенств.

Литература

1. Balandin D. V., Kogan M. M. LMI-based H_∞ -optimal control with transients// International Journal of Control, August 2010, Vol. 83, No. 2, P. 1664-1673.
2. Баландин Д.В., Коган М.М. Обобщенное H_∞ -оптимальное управление как компромисс между H_∞ -оптимальным и γ -оптимальным управлениями. // Автоматика и телемеханика. 2009. С.1-23.
3. Баландин Д.В., Коган М.М. Синтез законов управления на основе линейных матричных неравенств. М.: Физматлит, 2007.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗОТОПНОГО СОСТАВА АКТИВНОЙ ЗОНЫ БЫСТРОГО РЕАКТОРА В ЗАМКНУТОМ ЯДЕРНОМ ТОПЛИВНОМ ЦИКЛЕ

Сальдиков И.С., Тихомиров Г.В.

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

В стратегии развития Российской Федерации заложена задача использования быстрых реакторов в замкнутом ядерном топливном цикле. В данный момент в Российской Федерации полным ходом идет реализация проекта ПРОРЫВ по созданию быстрого реактора БН-1200 и БРЕСТ-ОД-300. Этот проект служит демонстрации возможности замыкания ядерного топливного цикла с использованием плутония.

Для поддержки проекта ПРОРЫВ был создан специальный программный код REPRORYV (Recyclefor PRORYV), который моделирует процесс загрузки, переработки и перегрузки ТВС в активных зонах быстрых реакторов типа БН-600, БН-800 и БН-1200 [1,2] и других перспективных быстрых реакторов.

Для расчёта каждого шага по выгоранию топлива используется стороннее программное средство, задача которого заключается в расчете нейтронно-физических характеристик (нейтронный поток, сечения и концентрации нуклидов) на каждом конкретном шаге по выгоранию. В качестве такой программы может выступать любой продукт, отвечающий требованиям по поиску нужных функционалов. Таким образом, REPRORYV реализует модульность: можно использовать для нахождения нейтронно-физических характеристик как прецизионные программы, так и коды, использующие приближенные методы, но производящие более быстрые вычисления. Эта концепция позволяет быстро оценить эффективность того или иного сценария формирования начальной загрузки и только после этого проводить более точные расчёты.

На данный момент реализована схема, использующая российский диффузионный код JARFR. Этот код использовался для создания проекта быстрого российского реактора БН-800, который уже запущен в РФ.

Литература

1. V.M. Poplavsky, A.M. Tsiboulia, Yu.S. Khomyakov, V.I. Matveev, V.A. Eliseev, A.G. Tsikunov, B.A. Vasiliev, S.B. Belov, M.R. Farakshin. Core design and fuel cycle of advanced fast reactor with sodium coolant. International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles (FR09) - Challenges and Opportunities - December 7 - 11, 2009, Kyoto, Japan.

2. B.A. Vasilyeva, S.F. Shepeleva, M.R. Ashirmetovb, V.M. Poplavskyc. BN-1200 Reactor Power Unit Design Development. International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles: Safe Technologies and Sustainable Scenarios (FR13). Paris, France, 4-7 March 2013.

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ДВУХФАЗНОЙ ЗАДАЧИ СТЕФАНА В МОДУЛЕ РАСЧЕТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ КОМПЛЕКСА ПРОГРАММ ЛОГОС

Тришин Р.А., Глазунов В.А.

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

В докладе рассматривается численное моделирование задач теплопереноса с учетом фазового превращения веществ. Как правило, для моделирования процессов плавления и кристаллизации чистых веществ используется классическая модель Стефана, которая характеризуется непрерывностью температуры на границе раздела фаз и сопровождается поглощением или выделением дополнительной энергии. Существуют два основных класса методов, описывающие фазовый переход. К первому классу относятся методы с явным выделением границы раздела фаз – в них положение границы фазового перехода отслеживается на каждый момент времени. Ко второму классу относятся методы сквозного счета – в них граница явным образом не участвует, а учет фазового перехода выполняется за счёт изменения термодинамических характеристик элементарного объёма, подверженного фазовому переходу. Каждый из описанных классов методов имеет свои достоинства и недостатки, а также свою область применения.

В докладе представлены результаты работы по реализации в модуле расчёта теплопроводности комплекса программ ЛОГОС двух методов из каждого класса: метод сглаженных коэффициентов и метод динамических сеток. В методе сглаженных коэффициентов фазовые превращения моделируются введением/поглощением в окрестности фазового перехода дополнительной энергии с помощью δ -функции, входящей в выражение для теплоёмкости. Метод динамических сеток основан предварительном определении граней, которые являются фронтом фазового перехода. В зависимости от баланса тепловых потоков на выделенных гранях рассчитывается скорость движения фронта и изменяется его положение за счет перестроения сетки.

В докладе приводятся основные уравнения для каждого из методов, кратко описан численный метод решения уравнений и результаты тестовых расчётов. В качестве тестовых задач выбраны одномерные задачи Стефана для бруса квадратного сечения и цилиндра, которые имеют аналитическое решение, а также двумерная задача, имеющая экспе-

риментальные данные. Исследуется точность численного решения при различных параметрах: тип сетки (регулярная/нерегулярная), размер ячеек, величина шага по времени, ширина фронта фазового перехода.

АЛГОРИТМЫ ПОСТРОЕНИЯ ТРЕХМЕРНЫХ НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТОК НА ОСНОВЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ СЕТКИ ДЛЯ МЕТОДИКИ ТИМ

ШМЕЛЁВА А.К., ВОРОПИНОВ А.А.

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

При решении трёхмерных задач механики сплошной среды в областях сложной формы начальная геометрия часто задаётся в виде поверхностной сетки. При этом возмущения в системе часто задаются в виде граничных условий. В связи с этим наиболее важно построение качественной расчётной сетки, особенно вблизи границ. В данной работе описаны два подхода к построению трёхмерных неструктурированных сеток на основе поверхностной сетки, реализованные в рамках методики ТИМ [1].

Первый подход – послойное построение сетки вблизи границы. Каждый последующий слой строится на основе предыдущего. Корректность построения каждого слоя проверяется путём поиска самопересечений текущей поверхностной сетки. Отступ не является постоянным, а определяется для каждого узла, что изначально позволяет добиться лучшего качества сетки.

Второй подход базируется на диаграмме Вороного[2] и призван построить качественную расчётную сетку внутри всей области. Непосредственное построение сетки диаграммы Вороного возможно только в выпуклой области. Чтобы реализовать учёт не выпуклых границ для любой односвязной области вначале построение сетки проводится в обрамляющем заданную геометрию прямоугольном параллелепипеде, а затем удаляется часть сетки, лежащая снаружи относительно заданной геометрии. Построение такой сетки отличается от других алгоритмов главным образом тем, что здесь вначале определяется положение всех центров будущих ячеек и только затем ведётся построение самой сетки, ячейки которой всегда выпуклые многогранники. Поэтому такая особенность диаграммы Вороного освобождает от необходимости анализа формы ячеек и их коррекции в дальнейшей. Однако главным становится вопрос о способе определения положения центров будущих ячеек, тогда как для послойных сеток достаточно знать только отступ, чтобы построить ячейки последующего слоя. Для корректного описания границ будущей сетки центры диаграммы Вороного расставляются по обе стороны от граней поверхностной сетки, также возможно добавле-

ние центров на изломах поверхности. Внутренние центры генерируются с помощью распределений, далее происходит отсев центров, лежащих вне рассматриваемой области или препятствующих описанию границы. Ряд дополнительных алгоритмов предназначены для учета изломов исходной геометрии, разномасштабности граней поверхностной сетки, тонких элементов геометрии, неплоских граней поверхности и т.д.

Кроме этого, после удаления слоя внешних ячеек, проводится процедура отсечений ячеек на изломах, чтобы привести их в соответствие с изломами исходной поверхности.

В качестве результатов в работе приводятся примеры построения сеток для поверхностей различной сложности.

Литература

1. Соколов С.С., Панов А.И., Воропинов А.А., и др. Методика ТИМ расчёта трёхмерных задач механики сплошных сред на неструктурированных многогранных лагранжевых сетках // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2005. №3. С. 37-52.
2. Вороной Г.Ф. Собрание сочинений. Т. 2. - Киев: Изд-во АН УССР, 1952.

СЕКЦИЯ

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ
ПРОЦЕССОВ И ЯВЛЕНИЙ**

Председатель жюри –

Батьков Ю.В., к.ф.-м.н., доцент,
зав.кафедрой ОТДиЭ СарФТИ
НИЯУ МИФИ

Члены жюри –

Трунин И.Р., к.ф.-м.н., веду-
щий научный сотрудник ФГУП
«РФЯЦ-ВНИИЭФ», доцент кафе-
дры ТиЭМ СарФТИ НИЯУ МИФИ

Речкин В.Н., к.т.н., начальник
лаборатории ФГУП «РФЯЦ-ВНИ-
ИЭФ», доцент кафедры ТиЭМ
СарФТИ НИЯУ МИФИ

Бухарев Ю.Н., д.т.н., профес-
сор кафедры ОТДиЭ СарФТИ
НИЯУ МИФИ

ОПЫТ ПРИМЕНЕНИЯ ПП ЛОГОС–ПРОЧНОСТЬ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ САРФТИ НИЯУ МИФИ

ЖАВОРОНКОВА Н.А., БУХАРЕВ Ю.Н., ЧЕМБАРОВ А.И.,
КОВАЛЕНКО И.В., ЛИПЕНКОВА Е.И., ИВАШОВ А.Э., ТОНОВА В.Ю.,
ФЕДОСЕЕВ А.В., ЕРОФЕЕВ К.В.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

С 2009г. в РФЯЦ-ВНИИЭФ разрабатывается пакет программ ЛОГОС-ПРОЧНОСТЬ для численного решения широкого круга задач газодинамики и механики деформируемого твёрдого тела на много-процессорных вычислительных ресурсах. Основными направлениями развития пакета программ является разработка программных средств для решения задач определения напряженно-деформированного состояния конструкций в условиях квазистатического термосилового и динамического нагружения. Данный пакет программ успешно «внедряется» в расчетную практику отечественных предприятий основных отраслей промышленности для проектирования новых перспективных изделий. В связи с этим в учебную практику студентов СарФТИ НИЯУ МИФИ, обучающихся по специальности 15.04.03, введены практические и лабораторные занятия по освоению ПП ЛОГОС-ПРОЧНОСТЬ.

В настоящей работе представлены результаты решения тестовых задач статического, модального и гармонического анализов, решаемые студентами на основе ПП ЛОГОС-ПРОЧНОСТЬ на практических и лабораторных работах.

РЕЗУЛЬТАТЫ ВЕРИФИКАЦИИ ПП ЛОГОС НА ЗАДАЧАХ АНАЛИЗА СОБСТВЕННЫХ ЧАСТОТ И ФОРМ КОЛЕБАНИЙ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ОБОЛОЧЕК

Речкин В.Н., Сидоренко Е.И.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

В настоящее время в РФЯЦ-ВНИИЭФ в тесном сотрудничестве с рядом других предприятий и институтов ведется разработка отечественного импортозамещающего пакета программ (ПП) ЛОГОС для решения широкого круга задач газодинамики и механики деформируемого твердого тела [1,2]. ПП ЛОГОС успешно «внедряется» в расчетную практику отечественных предприятий основных отраслей промышленности для проектирования новых перспективных изделий и в образовательную деятельность некоторых ВУЗов. В связи с этим сегодня представляют

определенный интерес и являются актуальными результаты решения на его основе любых верификационных и валидационных задач.

В данной работе представляются результаты верификации ПП ЛОГОС на задачах по определению основных собственных частот и форм колебаний цилиндрических оболочек, так как они широко применяются в современных технических сооружениях, конструкциях и во многих случаях определяют их низшие собственные частоты колебаний. Результаты численного решения задач сравниваются с экспериментальными данными, приведенными в [3]. Выполняется анализ точности и сходимости численных решений. С целью исследования сходимости результатов решение каждой задачи выполнено на трёх расчетных моделях различной размерности, подготовленных путём последовательного автоматизированного сгущения расчётных сеток.

Литература

1. Дерюгин Ю.Н., Козелков А.С., Спиридонов В.Ф., Циберев К.В., Шагалиев Р.М. Многофункциональный высокопараллельный пакет программ ЛОГОС для решения задач тепломассопереноса и прочности // Сборник тезисов докладов Санкт-Петербургского научного форума «Наука и общество», Санкт-Петербург, 2012г.
2. Авдеев П.В., Артамонов М.В., Борляев В.В., Дьянов Д.Ю. и др. Пакет программ ЛОГОС. Функциональные возможности для решения задач прочности / Сборник докладов XIII-го международного семинара «Супервычисления и математическое моделирование», Саров, 2011г.
3. Будак В.Д., Григоренко А.Я., Хоришко В.В., Борисенко М.Ю. Исследование свободных колебаний цилиндрических оболочек постоянной и переменной толщины с помощью метода голографической интерферометрии // Прикладная механика. Том 50, №.1. 2014г. С. 101-109.

РАСЧЕТЫ ПАРАМЕТРОВ ПРОБИТИЯ АЛЮМИНИЕВЫХ ПЛАСТИН СФЕРИЧЕСКИМИ УДАРНИКАМИ СО СКОРОСТЯМИ ОТ 1 ДО 8 КМ/С С ПОМОЩЬЮ ПАКЕТА ПРОГРАММ «ЛОГОС» И СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ ДАННЫМИ

Сулоев И.А., Полюхов А.Ю., Хуторной П.В., Бухарев Ю.Н.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

При анализе безопасности и живучести технических устройств (например, космических аппаратов), подвергающихся воздействию высокоскоростных частиц твёрдых тел, весьма актуальной является достоверная оценка размеров пробоин в защитных экранах, их зависимости от скорости удара, для чего необходимы экспериментальные исследо-

вания и математическое моделирование соответствующих задач.

В работе представлены постановка задач и результаты численного 3D моделирования с помощью разрабатываемого в РФЯЦ-ВНИИЭФ пакета программ (ПП) «ЛОГОС» [1] серии задач пробития алюминиевых (сплав Д-16) пластин толщиной $h = 1,61$ мм и $h = 0,82$ мм сферическими ударниками диаметром $d = 3,2$ мм, выполненными из того же материала, со скоростями V_0 от 1 до 8 км/с по нормали к поверхности пластин. Размеры ударников, толщины пластин, основные величины скоростей V_0 (12 значений от 1,56 до 7,85 км/с) были приняты такими же, как в экспериментах работы [2] с ударниками и пластинами из алюминиевого сплава 2024 (его аналогом является сплав Д-16).

Задачи решались по реализованному в ПП «ЛОГОС» методикам: сглаженных частиц SPH (во всём скоростном диапазоне) и лагранжевой методике (при $V_0 \leq 3,1$ км/с). Использовались уравнения состояния Грюнайзена и модель упрочнения материалов «эластик-пластик-гидро». Для учёта эффектов разупрочнения материалов при давлении $P > 90$ ГПа ($V_0 > 7$ км/с) и эрозионного разрушения корректировались соответствующие исходные параметры модели.

В результате расчётов получена совокупность данных по динамике развития отверстий в пластинах в зависимости от скорости удара, по формоизменению и фрагментации ударников и элементов пластин в зоне удара, развитию запреградного осколочного потока. Анализ полученных результатов в сопоставлении с опытными данными показал, что в целом расчётные и экспериментальные данные удовлетворительно согласуются. Показана также близость расчётных значений диаметров отверстий в пластинах к предложенной в [2] линейной полумпирической зависимости от скорости V_0 . При этом лучшее согласие с опытными данными получено для $\text{hotn} = h/d = 0,504$ (максимальное отклонения менее 7% для двух расчётных методик); в этом случае близки между собой и результаты расчётов по двум использованным методикам при $V_0 \leq 3,1$ км/с. При $\text{hotn} = 0,256$ получены несколько большие предельные отклонения.

Наряду с этим, отмечается, что в целях более эффективного применения ПП «ЛОГОС» для решения задач высокоскоростных ударов необходимо введение в него моделей поведения материалов, учитывающих термическое разупрочнение, а также расширение типов применяемых критериев разрушения

Литература

1. Д.Ю. Дьянов, А.В. Казанцев, Циберев и др. Пакет программ «ЛОГОС». Функциональные возможности для решения связанных задач прочности и гидродинамики сглаженных частиц. Доклад на XV Международной конференции «Супервычисления и математическое моделирование». 13-17 октября 2014 г. Саров.

2. Дж. Геринг. Теория соударения с тонкими мишенями и экранами в сопоставлении с экспериментальными данными. Высокоскоростные ударные явления. Пер. с англ. Изд-во «МИР», Москва, 1973. С. 112-163.

МОЛЕКУЛЯРНО ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТАТИЧЕСКОГО И УДАРНО-ВОЛНОВОГО СЖАТИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ: ГЕКСОГЕН, ТАТБ И CL-20

Губин С.А.¹, Маклашова И.В.¹, Селезнев А.А.^{1,2},
Козлова С.А.¹

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»,
²ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

Моделирование свойств монокристаллов ВВ проводилось в программном пакете LAMMPS [1], предназначенном для молекулярно-динамического моделирования свойств материалов.

В работе была проведена верификация модифицированного реакционного силового поля ReaxFF-Ig [2], в котором учитывается Ван-дер-Ваальсовое взаимодействие атомов, что позволяет более точно описать прочностные характеристики молекулярных кристаллов. С помощью ReaxFF-Ig можно рассчитывать, как характеристики исходного ВВ, так и кинетику разложения ВВ при детонации. На примере сопоставления экспериментальных и расчетных изотерм сжатия для монокристаллов ВВ гексоген, ТАТБ и CL-20 показано, что силовое поле ReaxFF-Ig позволяет с хорошей точностью воспроизвести экспериментальные результаты [3-7] изотермического сжатия в широкой области давления.

Было проведено гидростатическое изотермическое сжатие монокристаллов и получены зависимости давления от степени сжатия при постоянной температуре $T=300$ К в диапазоне давлений $P=0.05-40$ ГПа.

В работе методом Гюгониостата проведено молекулярно-динамическое моделирование ударно-волнового гидростатического сжатия монокристаллов гексогена, ТАТБ и CL-20. По результатам расчетов, в широком диапазоне давлений $P=1-40$ ГПа были получены зависимости давления в ударной волне от степени сжатия монокристаллов исследуемых энергоемких соединений и зависимости температуры от давления УВ.

Результаты данной работы хорошо согласуются с экспериментальными и расчетными данными подобных работ.

Литература

1. Plimpton S., Thompson A., Crozier P., Kohlmeyer A. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [Электронный ресурс] URL: <http://lammps.sandia.gov/>

2. Liu L., Liu Y., Zybin S.V., Sun H., and Goddard W.A., «ReaxFF-Ig: Correction of the ReaxFF Reactive Force Field for London Dispersion, with Applications to the Equations of State for Energetic Materials,» // The Journal of Physical Chemistry, 2011. pp. 11016-11022.
3. Yoo C.S., Cynn H., Howard W.M., and Holmes N. Eleventh International Detonation Symposium // EQUATIONS OF STATE OF UNREACTED HIGH EXPLOSIVES AT HIGH PRESSURES. Colorado. 1998. pp. 951-957.
4. Olinger B., Roof B., and Cady H. Proceeding of International Symposium on High Dynamic Pressures // Commissariat a l'Energie Atomique. Paris. 1978. P. 3.
5. Olinger B., Cady H. 6th Symposium (International) on Detonation Coronado. 1976. P. 224.
6. Stevens L.L., Velisavljevic N., Hooks D.E., and Dattelbaum D.M., «Hydrostatic compression curve for triamino-trinitrobenzene (TATB) determined to 13.0 GPa with powder X-ray diffraction,» // Propel. Explosiv. Pyrotech., No. 33, 2008. P. 286.
7. Gump J.C., Peiris S.M. Proceedings of the Thirteenth International Detonation Symposium // Phase Stability of Epsilon HNIW (CL-20) at High-Pressure and Temperature. Norfolk. 2007. Vol. VA. pp. 1045–1050.

МЕТОДЫ ТЕСТИРОВАНИЯ ПРОГРАММ ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ В ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ КОМПЛЕКСАХ ПРОГРАММ

Данилов А.С.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

В докладе приведена классификация уравнений состояния (УРС), используемых для замыкания систем уравнений механики сплошной среды:

- ◆ по области описываемых состояний – локальные, широкодиапазонные;
- ◆ по форме представления – табличные, таблично-аналитические, аналитические;
- ◆ по типу веществ – чистые элементы, сплавы, химические соединения, смеси, минералы, конденсированные вещества, газы.

При создании новых уравнений состояния, их реализации в виде программ расчета термодинамических функций необходимо проводить тестирование как программы УРС, так и области применимости УРС для использования в составе прикладных программ. Для реализации процедур тестирования был разработан прототип специализированной программы.

В ходе проведенной работы была разработана программа тестирования УРС, позволяющая на задаваемых пользователем сетках кон-

трольных точек термодинамических переменных проверять следующие условия:

- ◆ условия Бете-Вейля;
- ◆ условие термодинамической согласованности.
- ◆ Также в программе реализованы:
 - ◆ проверка согласованности результатов расчетов, полученных с использованием разных входных переменных;
 - ◆ проверка согласованности результатов расчетов при смене системы единиц задачи;
 - ◆ проверка правильности расчета производных термодинамических функций.

РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДИКИ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ТРЕХМЕРНОЙ ЗАДАЧИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ДЛЯ ТЕЛ С ПОДВИЖНЫМИ ГРАНИЦАМИ

СЕРЯКОВ Ю.Д., ГЛАЗУНОВ В.А.

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

В докладе рассматривается задача распространения тепла в твердотельной конструкции. В процессе решения область моделирования начинает перемещаться, при этом сохраняя топологию. Для корректного описания процессов теплопереноса в этом случае необходимо соответствующим образом модифицировать уравнение теплопроводности.

Для этого в модуле “ЛОГОС ТЕПЛО”, который является частью пакета программ ЛОГОС и предназначен для решения задач теплопереноса, была реализована методика численного решения уравнения теплопроводности для тел с движущимися границами.

В докладе приводится основное уравнение сохранения энергии в движущемся элементарном объеме, граничные и начальные условия для задачи, расписана неявная аппроксимация интегрального уравнения сохранения энергии, формулы для вычисления диффузионных и конвективных тепловых потоков.

Тестирование реализованного алгоритма проведено на задачах определения распределения температуры в брусе квадратного сечения и в полом цилиндра. В случае установившегося температурного поля при движении только внутренней границы эти задачи имеют аналитическое решение, что позволило оценить точность реализованного метода. Исследовалась точность полученного решения при различных граничных условиях, при увеличении числа счѐтных ячеек в задаче, а также при использовании регулярных и нерегулярных типов сеточной аппроксимации.

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИМЕНЕНИЯ ОГРАНИЧИТЕЛЕЙ ГРАДИЕНТА ПРИ РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ–СТОКСА НА ПРОИЗВОЛЬНЫХ НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТКАХ

Глазунова Е.В., Козелков А.С., Лашкин С.В., Курулин В.В.

ФГУП «РЯЦ-ВНИИЭФ», ИТМФ

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ - проект № 16-01-00267.

Большая часть практически важных задач реализуется в областях сложной геометрической формы. В таких областях построить блочно-структурированную сетку возможно, но достаточно трудоемко. Построение произвольных неструктурированных сеток автоматическим способом подразумевает гораздо меньшие трудозатраты, однако требует адаптации существующих методов численного решения уравнений гидродинамики, а также налагают дополнительные требования к реализации схем повышенной разрешающей способности. Реализация таких схем связана с улучшением свойств диссипативности и дисперсии при аппроксимации конвективных и диффузионных потоков, что может достигаться использованием монотонизирующих ограничителей, зависящих от локальных свойств решения.

В представленной работе анализируется применение ограничителей градиента на произвольных неструктурированных сетках применительно к конечно-объемным методам дискретизации уравнений Навье-Стокса с помощью алгоритма SIMPLE, реализованного в пакете программ ЛОГОС [1,2]. Рассматривается влияние ограничителей на точность получаемых результатов с использованием градиентных конвективных схем второго порядка [3,4], в том числе их влияние на точность вычисления градиента итерационным алгоритмом Грина-Гаусса. Приводятся расчеты сжимаемых и несжимаемых течений на сетках различной топологии [5]. Даются рекомендации по оптимальному использованию ограничителей при численном решении задач алгоритмом SIMPLE.

Литература

1. Сафронов А.В., Дерюгин Ю.Н., Жучков Р.Н., Зеленский Д.К., Саразов А.В., Козелков А.С., Кудимов Н.Ф., Липницкий Ю.М., Панасенко А.В. Результаты валидации многофункционального пакета программ ЛОГОС при решении задач аэрогазодинамики старта и полета ракет-носителей // Матем. моделирование. 2014. Т. 26. № 9. С. 83-95.
2. Волков К.Н., Дерюгин Ю.Н., Козелков А.С., Емельянов В.Н., Тетерина И.В. Разностные схемы в задачах газовой динамики на неструктурированных сетках – Москва: Физматлит, 2014. 416 с., ISBN 978-5-9221-1609-1.

3. Козелков А.С., Курулин В.В. Численная схема для моделирования турбулентных течений несжимаемой жидкости с использованием вихре-разрешающих подходов // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2015. Т. 55. № 7. С. 135-146.
4. Козелков А.С., Куркин А.А., Крутякова О.Л., Курулин В.В., Тятюшкина Е.С. Зонный RANS–LES подход на основе алгебраической модели рейнольдсовых напряжений // Известия РАН Механика жидкости и газа. №5. 2015. С. 24-33.
5. Козелков А.С., Курулин В.В., Пучкова О.Л., Тятюшкина Е. С. Моделирование турбулентных течений вязкой несжимаемой жидкости на неструктурированных сетках с использованием модели отсоединенных вихрей // Журнал Математическое Моделирование. Т. 26. №8. 2014.С. 81–96.

НЕЯВНЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ–СТОКСА ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕЧЕНИЙ В АНИЗОТРОПНЫХ ПОРИСТЫХ СРЕДАХ

Гиниятуллин Р.Р., Козелков А.С., Лашкин С.В.

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», ИТМФ

Моделирование течений в пористых средах основывается на уравнениях Навье–Стокса, которые дополняются соотношениями для учета пористого сопротивления [1]. Простейшим эмпирическим законом, описывающим течение в пористой среде, является закон Дарси, устанавливающий линейную связь между фильтрационной скоростью жидкости и градиентом давления для малых скоростей. Расширение диапазона скоростей осуществляется введением квадратичной зависимости градиента давления от скорости и приводит уравнениям Бринкмана–Форхгеймера [1]. Опыт применения этих уравнений продемонстрировал хорошую точность в описании течений в пористых средах [1]. К настоящему времени накоплен обширный опыт решения модифицированных уравнений Навье–Стокса методом конечных объемов [2], в том числе известным алгоритмом SIMPLE. Классическая формулировка алгоритма SIMPLE подразумевает расщепление по физическим процессам и только явную аппроксимацию внедиагональных компонент тензоров сопротивления, что замедляет решение. Ускорение сходимости возможно за счет использования совмещенного алгоритма решения скоростей и давления [3,4]. В настоящей работе представлена модификация классического алгоритма SIMPLE, основанная на полностью неявной связи скорости и давления, которая применяется для решения уравнений Бринкмана–Форхгеймера в анизотропном пористом теле и сравнивается с классическим алгоритмом SIMPLE. Совмещенный алгоритм решения скоростей и давления, а так же алгоритм SIMPLE, реализованы

в пакете программ инженерного анализа ЛОГОС, в настоящее время внедренном на промышленные предприятия РФ [5,6]. На тестовых задачах показана работоспособность реализованной методики и ускорение вычислений при использовании совмещенного решателя, в особенности для задач с анизотропным сопротивлением пористого тела.

Литература

1. V. A. F. Costa, L. A. Oliveira, B. R. Baligan A. C. M. Sousa, «Simulation of coupled flows in adjacent porous and open domains using a control-volume finite-element method», Numerical Heat Transfer, № 45, pp. 675-697, 2004.
2. Ferziger J.H. и Peric M., «Computational methods for fluid dynamics», rev. ed., Berlin; New York; Barcelona; Hong Kong; London; Milan; Paris; Tokyo.: Springer, 2002.
3. M. Darwish, I. Sraj и F. Moukalled, «A coupled finite volume solver for the solution of incompressible flows on unstructured grids», Journal of Computational Physics, vol. 228, pp. 180-201, 2009.
4. Козелков А.С., Курулин В.В., Тятюшкина Е.С., Пучкова О.Л., Лашкин С.В. Реализация метода расчета вязкой несжимаемой жидкости с использованием многосеточного метода на основе алгоритма SIMPLE в пакете программ ЛОГОС, журнал ВАИТ, сер. Математическое моделирование физических процессов, 2013, вып.4, стр. 44-56.
5. V.B. Betelin, R.M.Shagaliev, S.V.Aksenov, I.M.Belyakov, Yu.N.Deryugin, A.S. Kozelkov, D.A.Korchazhkin, V.F.Nikitin, A.V.Sarazov, D.K.Zelenskiy, Mathematical simulation of hydrogen–oxygen combustion in rocket engines using LOGOS code // Acta Astronautica 96(2014) p. 53–64.
6. Дерюгин Ю.Н., Емельянов В.Н., Волков К.Н., Карпенко А.Г., Козелков А.С., Смирнов П.Г., Тетерина И.В., Реализация параллельных вычислений на графических процессорах в пакете вычислительной газовой динамики ЛОГОС // Вычислительные методы и программирование, Том: 14, Номер: 1, Год: 2013, Стр. 334-342.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТАНИЯ УДАРНИКОВ ПРОДУКТАМИ ВЗРЫВА В ИНИЦИИРУЮЩИХ СИСТЕМАХ

Скляр А.В.^{1,2}, Устимкин П.А.¹

¹ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

²СарФТИ НИЯУ МИФИ

Для создания инициирующего импульса во взрывных устройствах используются различные конструкционные схемы. Влияние параметров, определяющих надёжность срабатывания изделия, в настоящее время изучается экспериментальными и расчетными методами.

В данной работе рассмотрена расчётно-теоретическая модель метания ударников для инициирования малочувствительного взрывчатого вещества. Для описания поведения конденсированного взрывчатого вещества использовалось уравнение состояния в форме JWL, поведение конструкционных материалов описывалось с помощью ударно-волновых и прочностных характеристик материалов [1,2].

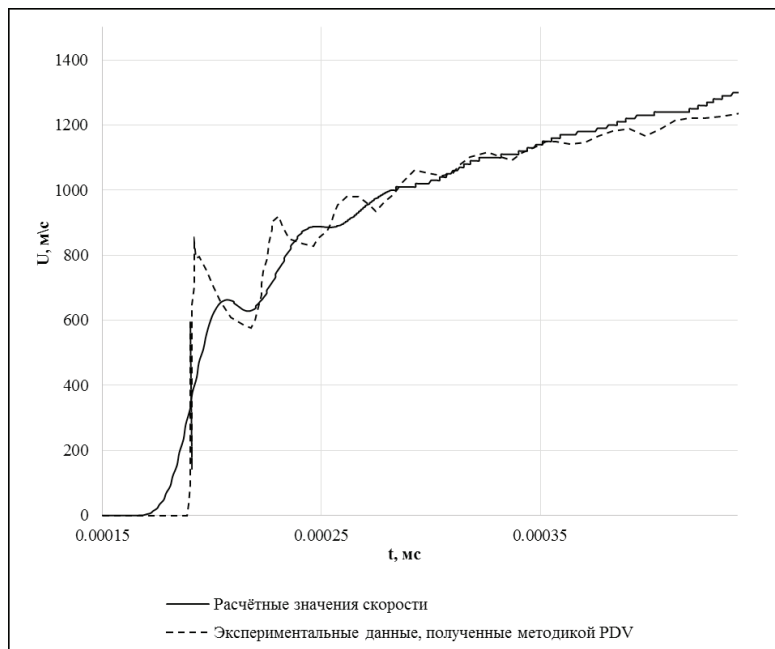


Рис. 1. Сравнение результатов измерения скорости ударника при помощи экспериментального метода PDV и результатов расчётной методики.

В процессе численного моделирования варьировались различные параметры системы: высота втулки, содержащей взрывчатое вещество, глубина утопания ударника при прессовании его во втулку, толщина ударника и его материал. Результаты расчета позволили определить влияние технологического зазора между ударником и втулкой на скорость метания ударника.

Для верификации построенной расчетной модели, проведено сравнение зависимости скорости ударника от времени, полученной на основе расчётов и экспериментальной зависимости, полученной методом PDV. Получено хорошее совпадение результатов численного моделирования и результатов эксперимента.

Литература

1. P. A. Urtiew, B. Hayes. Parametric study of the Dynamic JWL – EOS for detonation products. ФГВ №4. 1991. с. 126-127.
2. Е. И. Забабахин. Некоторые вопросы газодинамики взрыва. Снежинск, 1997.

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ
ИНИЦИИРОВАНИЯ ПИРОТЕХНИЧЕСКОГО СОСТАВА
МОСТИКОМ НАКАЛИВАНИЯ**

Липенкова Е.И.¹, Устимкин П.А.², Селезенев А.А.²

¹СарФТИ НИЯУ МИФИ,

²ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

Для исследования процесса зажигания состава КБ была разработана математическая модель, позволяющая моделировать процессы разогрева мостика и пиротехнического состава. Проведен численный анализ условий инициирования пиротехнического состава в электровоспламенителе, в котором использовался нихромовый мостик накаливания диаметром 20 мкм и пиротехнический состав КБ. Расчеты проведены в широком диапазоне изменения тока задействования. Определены факторы, повышающие надежность задействования электровоспламенителя.

Установлено, что при пропускании постоянного тока амплитудой 2,4 А по мостику диаметром 20 мкм температура плавления достигается через ~0,122 мс. Проведенное сравнение расчетных и экспериментальных результатов показывает, что в опытах по разогреву мостика в окружении инертной среды, обрыв мостика происходил при температуре плавления нихрома, сразу после осуществления фазового перехода.

Для определения момента зажигания в настоящей работе использовался критерий нулевого градиента температуры на поверхности мостика в момент зажигания [1,2]. По результатам численного моделирования определен момент зажигания $t=0,117$ мс.

Для определения времени достижения температуры плавления и времени зажигания проведены расчеты для токов: 0,9; 1,4; 2,0; 2,4. Проведено сравнение экспериментальных и расчетных значений времени зажигания состава КБ мостином накаливания диаметром 20 мкм. Получена расчетная зависимость времени достижения температуры плавления нихрома (1663 К) в зависимости от величины тока, протекающего по мостику.

Как следует из полученных результатов, при значениях тока >2 А зажигание состава КБ от мостика, диаметром 20 мкм происходит при тем-

пературе мостика вблизи температуры плавления нихрома (равной или больше). Соответственно, фактор возможного обрыва мостика, вследствие его перегорания за счет выделения джоулевого тепла, необходимо учитывать при оценке надёжности инициирования горения состава КБ нихромовым мостиком диаметром 20 мкм при пропускании через него тока более 2 А.

Литература

1. Зельдович, Я.Б. – Математическая теория горения и взрыва / Я.Б. Зельдович, Г.И. Баренблатт, В.Б. Либрович, Г.М. Махвиладзе – М.: Наука, 1980. – 478с.
2. Франк-Каменецкий, Д.А. – Диффузия и теплопередача в химической кинетике / Д.А. Франк-Каменецкий – М.: Наука, 1987.

ЧИСЛО РЕЗОНАНСНЫХ ЧАСТОТ РЕАКТИВНЫХ ДВУХПОЛЮСНИКОВ ЛЮБОЙ КОНФИГУРАЦИИ

Волков С.С., Ивлева Л.А., Ивлева Е.В., Пузевич Н.Л.

Рязанское высшее воздушно-десантное командное училище

В работе поставлена цель получить расчетные формулы для определения числа резонансов реактивных двухполюсников любой сложности. Предложено правило определения числа резонансов реактивных двухполюсников в зависимости от числа реактивных элементов, числа контуров, образованных только емкостями или индуктивностями, числа узлов, в которые сходятся ветви содержащие индуктивности и емкости.

В литературе не известно правило определения точного числа резонансов реактивных двухполюсников. Отмечается лишь, что число резонансов не превышает числа реактивных элементов без единицы [1]. В статье приводится формула, позволяющая точно определить число резонансных частот реактивных двухполюсников любой конфигурации.

Как известно, изображение входного сопротивления определяется отношением двух полиномов. Для реактивных двухполюсников степень полинома числителя (m) на единицу отличается от степени полинома знаменателя (n). Все нули и полюсы входной функции реактивного двухполюсника находятся на мнимой оси. Один нуль или полюс находится в начале координат. Остальные нули, так же как и полюсы, образуют сопряженные пары. Каждой из этих сопряженных пар соответствует резонанс напряжения или тока. Для реактивного двухполюсника любой конфигурации число резонансных частот N на единицу меньше порядка схемы p .

Известно [2], что порядок схемы зависит не только от ее конфигурации, но и от места включения источника питания. Однако для двухполюсников, место приложения источника в которых строго определено, можно точно определить порядок схемы p по структуре:

$$P = \lambda - K_L - K_C - \beta_L - \beta_C, \quad (1)$$

где λ - число реактивных элементов схемы; K_L и K_C - числа контуров, образованных соответственно только индуктивностями или только емкостями; β_L - число узлов, в которых сходятся ветви, каждая из которых содержит индуктивности; β_C - число узлов, в которых сходятся ветви, каждая из которых содержит емкость.

Следовательно, число резонансных частот любого реактивного двухполюсника определяется по формуле

$$N = \lambda - K_L - K_C - \beta_L - \beta_C - 1. \quad (2)$$

Для подтверждения правильности полученной формулы приводится пример расчета числа резонансов для конкретной схемы двухполюсника, содержащей 15 реактивных элементов. Построены графики зависимости входного сопротивления от частоты, зависимости модуля входного сопротивления от частоты и график этой же зависимости с учетом малых потерь в элементах схемы.

Показана идентичность математического аппарата резонансов переменного тока в двухполюсниках и волны Де Бройля и функций Блоха в периодической структуре твердого тела. Приведен новый вывод функции волны Дебройля с помощью математического формализма из функции синусоиды с временным аргументом с заменой временной фазы пространственной фазой с использованием формул Дебройля и фазовой скорости волнового процесса. На основе идентичности математического формализма разных физических явлений предполагается возможное наличие резонансов волновых функций свободных электронов в металле, обусловленных частотно-фазовыми структурными особенностями кристаллической решетки. Такие резонансы могут отражать пространственную локализацию – волны, как преимущественную вероятностную пространственную локализацию электронов проводимости в металле.

Литература

1. Гоноровский И.С. Денин М.П. Радиотехнические цепи и сигналы. – Учебное пособие, 5-е изд. М.: Радио и связь, 1994, 480 с.
2. Янхинсон Б.И. , Каплинский А.Б. , Богатырев О.М. О порядке дифференциального уравнения переходного процесса в сложных электрических цепях. / Электричество. 1964, №8

ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПЕРЕДАЧИ СИЛЫ В СИСТЕМЕ «ГЕНЕРАТОР-ЛИНИЯ-ДВИГАТЕЛЬ»

Волков С.С.¹, Пузевич Н.Л.¹, Сучугов Б.Н.¹,
Дмитриев В.В.¹, Николин С.В.²

¹Рязанское высшее воздушно-десантное командное училище

²Рязанский государственный радиотехнический университет

Целью работы являлось построение физической модели передачи силы от вала электрического генератора до вала электрического двигателя по цепи «генератор-линия-двигатель». В литературе этот вопрос рассмотрен отдельными фрагментами: образование эдс в генераторе, передача электромагнитной энергии по линии электропередачи и образование сил в двигателе на силовом и энергетическом языках. При этом возникает вопрос справедливости законов Ньютона для рассматриваемой системы, в частности, равенства сил действия и противодействия в стационарном режиме и динамики изменения сил по всей цепи от вала генератора до вала двигателя.

В существующих фрагментах, из которых может быть сложена модель передачи действия «генератор-линия-двигатель», используются разные формы описания и разные теории, использующие силовую динамику и энергетические состояния, что не позволяет составить модель на едином физико-математическом языке. В генераторе результат силового взаимодействия магнитного поля индуктора (магнита) с магнитным полем электронов представляется изменением потенциальной энергии электронов в проводниках обмотки якоря. Далее передача действия рассматривается как изменение энергии полей в классической электродинамике или изменение энергетических состояний электронов в квантовых моделях. По классической электродинамике передача энергии по линии представляется как распространение поля в направлении вектора Пойнтинга в пространстве над проводами линии, а протекание тока по проводам рассматривается как вредный процесс резистивных потерь энергии в проводнике. При этом величина вектора Пойнтинга зависит от величины вектора магнитного поля электронов проводимости, то есть от резистивных потерь в проводах. Имеются модели формирования эдс в генераторе тоже над проводниками якоря. В квантовой физике для описания протекания электронного тока по проводникам используются изменения энергетических состояний электронов около уровня Ферми. При этом понятие «сила» не используется вообще вследствие отсутствия силовых взаимодействий в микромире как физического явления. Переход из макромира как движения проводника якоря в магнитном поле индуктора в микромир движения электронов в проводнике од-

новременно является переходом от языка классической физики с силовой динамикой Ньютона к языку квантовой физики с энергетическими состояниями электронов с бестраекторными и бессиловыми переходами-скачками между ними. Формальной трудностью применения динамики Ньютона для описания процесса образования эдс, то есть процесса действия сторонней макросилы на микрообъект-электрон является неясность природы этой силы. В генераторе постоянного тока макросилой магнитного поля, действующей на электрон проводимости, является сила Лоренца. Так как сила Лоренца перпендикулярна проводнику и соответственно к траектории движения электрона вдоль проводника якоря, то она исключается из рассмотрения как электродвижущая сила. Попытки объяснения образования эдс с использованием представлений теории относительности не привели к успеху, но при этом вывели магнитное поле из состава материальных объектов в субъективный фактор, зависящий от наблюдателя. Отсутствие логической последовательности ввода силы из макромира в проводник к электронам привело не только к отказу от силовых описаний поведения электронов проводимости, но и от силовых взаимодействий как физического явления в микромире в целом. Однако переход с силового на энергетический язык описание образования эдс нуждается в обосновании. В этом процессе силовое действие имеется, а противодействие отсутствует. Использование понятия «потенциал» вызывает вопросы о природе этого потенциала. Образование зарядовых потенциалов имеет большую временную инерцию, а вихревые поля действуют на электроны через посредство индуцируемых магнитных полей. В обоих случаях энергетические состояния изменяются вследствие воздействия силы. Таким образом, отсутствие модели передачи силы от вала генератора до вала двигателя и большое число противоречий в известных моделях действия генератора, линии и двигателя по отдельности вызывают необходимость построения единой физической модели с учетом непрерывности передачи силы по всей цепи.

В данной работе построена физическая модель, учитывающая преобразование механической силы на валу генератора в силу движения электронов по проводникам якоря, в силу движения электронов проводимости проводников линии, в силу движения электронов якоря двигателя и в силу взаимодействия магнитного поля электронов проводников якоря с магнитным полем индуктора, являющейся силой вращения якоря двигателя, а соответственно, силой механического момента на валу двигателя. В работе по-новому рассмотрены механизмы ввода силы в проводники к электронам и вывода ее из проводников на механические устройства. Построена модель образования электродвижущей силы. В разработанной модели рассматривается установившийся процесс равенства силы действия на вал генератора и силы сопротивления на вал двигателя. С учетом справедливости

концепции корпускулярно-волнового дуализма в данной работе непрерывная передача силы от генератора к двигателю описывается на основе классической электродинамики и только корпускулярной формы описания электрических процессов без использования элементов теории относительности и волновой механики. На примере генератора постоянного тока образование эдс рассматривается как процесс передачи силы магнитного поля неподвижного индуктора генератора магнитному полю каждого электрона проводимости обмотки якоря в отдельности. При этом электрон рассматривается как заряженная частица с постоянным электрическим полем и вихревым магнитным полем в плоскости, перпендикулярной направлению движения электрона, и величиной напряженности, зависящей от скорости движения электрона. Спиновое магнитное поле в модели не используется. Отличительной особенностью взаимодействия внешнего магнитного поля с магнитным полем электрона является то, что механическая сила действия на электрон, находящийся в проводнике якоря и движимый вместе с проводником по окружности, преобразуется в силу, действующую на электрон проводимости перпендикулярно движению в направлении вдоль проводника, что создает ток в проводнике. Эта есть сила Лоренца, и она не совершает работу до тех пор, пока не будет силы сопротивления току. Так как магнитное поле электрона жестко связано с электроном, а величина его и, значит, сила движения зависят от скорости движения, то при наличии силы сопротивления в стационарном процессе она должна быть равной силе движения. И чем больше сила сопротивления, тем больше сила движения проводника с электроном. Электрон своей «конструкцией» поворачивает силу движения на 90 градусов. Работу совершает действительно не сила Лоренца, а механическая сила, движущая электрон вместе с проводником ротора по окружности вращения. Аналогичная модель вывода силы тока из проводника в силу механического вращения ротора (якоря) двигателя постоянного тока. Передача силы по линии имеет две особенности. По существующей модели передача электромагнитной энергии над проводом формально можно еще рассматривать для переменного электромагнитного процесса. Для постоянного тока вектор Пойнтинга может иметь только какой-то условный смысл, так как формально вывод уравнения Пойнтинга построен с использованием производных, равных для постоянного тока нулю, а физически магнитное поле проводника с постоянным током напрямую не взаимосвязан с напряженностью поля между проводниками линии, имеющий к тому же емкостной характер. Для объяснения передачи силы по линии рассмотрена модель прямого кулоновского взаимодействия электронных орбиталей электронов проводимости с участием атомных остовов.

АКУСТИЧЕСКИЕ СИГНАЛЫ КАК ДИАГНОСТИЧЕСКИЙ ПАРАМЕТР ДЛЯ АНАЛИЗА ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ТЕХНИЧЕСКОГО ОБОРУДОВАНИЯ

ДРОБЫШЕВ В.В.

НТИ НИЯУ МИФИ

1. Повышение надежности оборудования с целью предотвращения аварийных ситуаций и продления срока эксплуатации машин и механизмов в настоящее время является наиболее актуальной задачей, решение которой возможно не только повышением эксплуатационных свойств оборудования, но и применением дополнительных средств диагностики.

2. Пассивный акустический метод предусматривает регистрацию упругих волн, возникающих в объекте диагностики и характеризующих физический процесс, протекающий в нем.

3. С точки зрения акустической диагностики важным является то обстоятельство, что акустические сигналы некоторых источников можно с достаточной степенью точности описать детерминированными периодическими функциями, сигналы других источников носят случайный характер.

4. В акустическом методе контроля качества для обнаружения местоположения и размера дефектов используются звуковые волны.

5. Применение низко- и высокочастотных методов определяется в основном величиной затухания упругих волн в материалах объекта контроля.

6. В шумодиагностическом методе анализируется спектр шумов, образующихся при работе объекта контроля, и устанавливаются возможные отклонения от режима нормальной работы.

7. Пассивный метод – шумодиагностический – относится к низкочастотным, так как вибрации и шумы – это звуковые низкочастотные колебания.

8. Шумодиагностические методы служат для диагностики работающих механизмов.

10. Подшипники качения являются самым распространённым и наиболее уязвимым элементом любого роторного механизма.

11. Для повышения ресурса надёжности оборудования, сокращения затрат, связанных с ремонтом простоями, необходима система точного диагностирования текущего технического состояния подшипников качения.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОТКАЗА ТОРЦОВОЙ ФРЕЗЫ

Бородин Д.С.

НТИ НИЯУ МИФИ

В работе [1] изложены физические причины, характер и механизм отказов режущих лезвий, работающий независимо друг от друга. Отказ лезвий, работающих в подобном режиме определяется совокупностью только внешних факторов – характером нагрузки, состоянием станка и технологической системы в целом. При работе многолезвийного инструмента разрушения отдельных лезвий не являются взаимонезависимыми. Так, при поломке одного из них на лезвие, расположенный за сломанным, нагрузка возрастет, так как ему приходится срезать сечение в двое большей толщины. Алгоритм расчета. Порядок выполнения расчетов, на основании которых определяется математическое ожидание и распределение фрез по времени безотказной работы в зависимости от числа лезвий и нагрузки S следующий:

1. Датчик случайных чисел создает Z величин X , распределенных по нормальному закону $M(x)=0$ и $\sigma=1$, по которым рассчитываются $A_1=A+\sigma^*x_1$, распределенных также по нормальному закону; этим моделируется процесс оснащения фрезы СПМ, случайно распределенными по стойкости;

2. Определяют время работы до отказа Z лезвий τ_i , исходя из предположения, что все лезвия нагружены одинаково:

$$\tau_i = e^{(A_i - B_i * \ln S * q)} S$$

– обобщенный параметр (производство энтропии); q - доля рассеиваемой энергии; A_i, B_i - постоянные коэффициенты

3. Из полученных значений стойкости τ выбирают $\tau_i = \min \tau_i$, т.е. время до отказа первого, самого “слабого” по стойкости лезвия. После этого на лезвие $j+1$, стоящее за сломанным, нагрузка увеличивается от S до $S=2q*S$. Стойкость этого лезвия снижется и время до его отказа определяется в соответствии с принципом линейного суммирования повреждений:

$$\tau_{j+1} = \tau_i + \tau_{j+1} * \left(\frac{1 - e^{(A_{j+1} - Bq) \ln(S * C_0)}}{\tau_{j+1}} \right),$$

j - режим нагружения; C_0 – число сломанных подряд лезвий.

4. После «исправления» стойкости $\tau_{(j+1)}$ из оставшихся Z лезвий опять выбирают наименьшее значение, соответствующее времени отказа второго “слабого” лезвия. Расчет заканчивается при обнаружении сломанных подряд трех последовательно стоящих лезвий, поскольку учетверенная $S=4q^*S$ и более высокая нагрузка в абсолютном большинстве случаев приводит к быстрому отказу оставшихся лезвий.

5. Повторяя многократно расчет для фрез, находят средние значения стойкости T и распределение фрез по стойкости. Это позволяет с заданной вероятностью определить искомый период стойкости любого многолезвийного инструмента.

$$T_{cp} = e^{\frac{\sum_{i=1}^n \ln T}{n}}, \quad D = e^{\sqrt{\sum_{i=1}^n (\ln T_i - \ln T_{cp})^2}}$$

Литература

1. Подураев В.Н., Закураев В.В., Карякин В.С. Прогнозирование стойкости режущего инструмента // Вестник машиностроения .1993 N1. С.30-36

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ РЕШЕНИЕМ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ

ЛАПТЕВ А. П., ПРИБЫТОВ В. Д., ВЕБЕР В. А., ВЕБЕР А. Е.

ТТИ НИЯУ МИФИ

Для изучения объектов и процессов окружающего нас мира достаточно часто используются методы математического моделирования. Построенные математические модели является весомой технологией изучения окружающего мира. Однако построенная модель не может отразить все тонкости того или иного процесса или явления. При построении математической модели какой-то фактор принимается главным, остальные же являются второстепенными и ими пренебрегают. Поэтому можно говорить о построении некоего идеализированного математического образа реального процесса, происходящего в окружающем мире. Построение идеализированной модели мотивируется тем, что фундаментальные законы справедливы именно при максимальной идеализации.

Самым эффективным математическим методом изучения явлений является моделирование в виде дифференциальных уравнений. При построении такой модели нет необходимости знать о явлении в целом. Это упрощает задачу, т.к. решение такой задачи сводится к решению линейной задачи. Как правило, при моделировании дифференциальные уравнения содержат некие коэффициенты непосредственно связанные с окружающей средой, в которой протекают данные процессы. На практике часто встречаются ситуации, когда объект исследования труднодоступен или недоступен совсем. Поэтому вышеупомянутые коэффициенты являются неизвестными функциями.

Прямые задачи являются констатирующими, по значениям исходных показателей рассчитываются результирующие. Обратные задачи предназначены для поиска значений исходных показателей, которые

обеспечат желаемое значение результирующего. Обратные задачи обладают отрицательными особенностями. Во-первых, обратные задачи не линейны. Во-вторых, для обеспечения единственности необходимым условием является избыточность экспериментальной информации. В-третьих, обратная задача относится к классу некорректных задач и ее решение неустойчиво. При решении обратных задач значения входных и выходных переменных считаются известными, как правило, из экспериментов. Таким образом, обратная задача превращается в задачу параметрической идентификации: необходимо определить структуру, тип уравнений, значения параметров-коэффициентов уравнений.

Эксперимент, проводимый для получения математической модели при решении обратной задачи многофакторный. Основная трудность решения обратных задач связана с необходимостью проверки ее на корректность.

Целью исследования является проверка корректности обратной задачи при получении математической модели p - n перехода, как двухпараметрового объекта.

В работе исследовано влияние температуры и освещенности как физических факторов на вольт - амперные характеристики перехода. Работая с лабораторной установкой, проведены измерения вольт - амперных характеристик диода при изменении температуры. Написаны программные модули в графической среде разработки приложений LabVIEW, автоматизирующие процессы выполнения измерений, обработки результатов, построения графиков. Получены параметрические зависимости, связывающие параметры окружающей среды температуры и освещенности с измерительной точкой напряжения на переходе и протекающего тока.

ВЕКТОРНЫЙ МЕТОД РАСПРОСТРАНЯЮЩИХСЯ ПУЧКОВ И ЕГО СКАЛЯРНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ В РАСЧЕТЕ ПРОПУСКАНИЯ ВОЛОКОН С ФОТОННОЙ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНОЙ

Пластун А.С., Конюхов А.И.

Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

Спектральная избирательность фотонно-кристаллических волокон (ФКВ) открывает большие перспективы их использования в спектроскопии. ФКВ имеют низкие потери на изгиб, хорошую пропускную способность, позволяют управлять дисперсией.

В ФКВ является достаточно высокий уровень потерь. Для расчёта пропускания ФКВ традиционно используются методы, нацеленные на нахождение характеристик основной моды или некоторых отдельных мод. При таком подходе не учитывается влияние высших мод.

В данной работе был использован метод, основанный на преобразовании Фурье для поперечного распределения полей и показателя преломления. [1] При расчёте изменения поля вдоль направления распространения использовалась «широкоугольная» схема, которая корректно учитывает фазовую задержку поля. Такой метод позволяет рассчитать пропускание волокна при его возбуждении лазерным пучком заданной формы. Поскольку ограничения на форму поля отсутствуют, возможно моделирование совместного возбуждения как основной так и высших мод волокна.

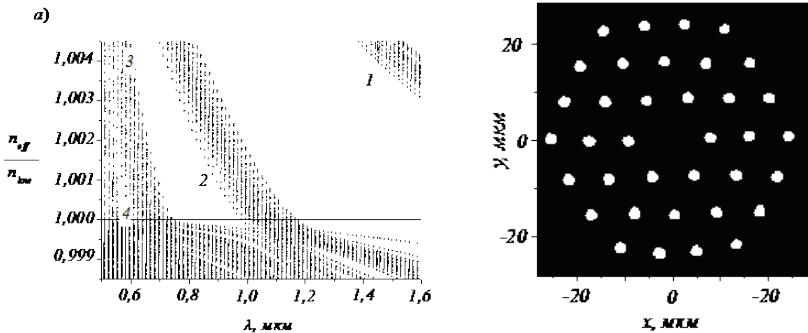


Рис. 1. а) Дисперсионная диаграмма ФКВ с дефектами
б) Поперечный профиль ФКВ

На рис 1 а,б показан поперечный профиль ФКВ с дефектами ступуртуры и его дисперсионная диаграмма. На рис. 2 показаны потери на излучение ФКВ. Метод распространяющихся пучков моделирует физическую ситуацию возбуждения мод начальным полем. При этом возбуждается как основная “дефектная” мода фотонной запрещённой зоны, так и моды, распространяющиеся в стержнях, окружающих волноводную сердцевину.

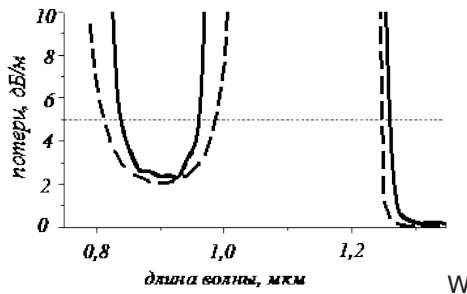


Рис. 2 Потери ФКВ, рассчитанные для основной моды ФКВ (пунктирный график) и полного поля (сплошной график). Пунктирная линия показывает уровень 5 дБ/м.

Литература

1. Benson TM, Hu BB, Vukovic A, Sewell P. «What is the fu-ture for beam propagation methods?» Proceedings SPIE, Photonics North 2004; 5579: pp.351-358.

СПОСОБ НАСТРОЙКИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ФИЛЬТРА

Епонешников И.С.

Тульский государственный университет

Самонастраивающийся фильтр, работающий по методу ФАПЧ - фазовой автоподстройки частоты (известному из радиотехники), успешно применяется и в области низких частот при исследовании биоэлектрической активности – электроэнцефалограммы (ЭЭГ) [1].

Традиционно для настройки фильтра используются два сигнала – на входе и выходе полосового фильтра [2]. Определяется (детектируется) разность фаз сигналов, знак которой определяет направление изменения резонансной частоты полосового фильтра.

Для обеспечения устойчивости процесса настройки коэффициент передачи в такой системе выбирается в зависимости от полосы пропускания фильтра и не может быть слишком большим.

Быстродействие системы ограничивает также показанная в [3] особенность изменения фазы сигнала в цифровой реализации полосового фильтра.

В связи с указанными обстоятельствами возникает идея отказаться от ФАПЧ и использовать периодометрический метод настройки. Поскольку полосовой фильтр может считаться линейной системой, частота синусоидального входного сигнала останется такой же и на выходе. Измерение при помощи счетчиков его периода позволит точно определить, на какую частоту следует настроить фильтр.

Возникающий при скачкообразном изменении резонансной частоты переходный процесс занимает минимальное время, и в целом процесс настройки будет не более продолжительным, чем в исходном варианте. Возможно даже улучшение характеристик, поскольку входной сигнал фильтра содержит шумы и помехи, замедляющие процесс настройки при фазовом детектировании.

Математическое моделирование было проведено с двумя видами полосовых фильтров – второго и четвертого порядка.

Для оценки инерционности процесса установления фазы выходного сигнала при математическом моделировании на входы двух одинаковых полосовых фильтров подаются сигналы: на первый – сигнал UB1

синусоидальной формы, на второй - сигнал U_{B2} косинусоидальной формы.

Определяется фазовый сдвиг

$$\varphi(t) = \arctg \frac{U_1(t)}{U_2(t)} - \arctg \frac{U_{B1}(t)}{U_{B2}(t)},$$

где: U_1, U_2 – выходные сигналы полосовых фильтров.

Фактически переменная φ представляет собой угол между двумя вращающимися векторами входного и выходного сигналов на некоторой гипотетической плоскости.

Полученные при различных величинах скачка частоты настройки графики изменения $\varphi(t)$ носят колебательный характер и несимметричны при изменении частоты в сторону уменьшения и увеличения.

Литература

1. Способ диагностики вызванного потенциала мозга и устройство для его осуществления (патент РФ № 2502466) / Индюхин А.А., Индюхин А.Ф., Коржук Н.Л., Хадарцев А.А., Жеребцова В.А. Публикация патента: 27.12.2013
2. Миляева В.В, Ларина И.В, Щевцова Т.А., Думчев А.И. Алгоритмы и модели в неврологической диагностике // Актуальные вопросы биомедицинской инженерии: сборник материалов IV Всероссийской научной конференции для молодых ученых, студентов школьников. 20 октября – 15 декабря 2014 г. – Саратов: ООО «Издательский центр «Наука», 2014. – С. 17 – 20.
3. Индюхин А.А. Скрининговая система диагностики неврологических нарушений на основе самонастраивающегося фильтра. Дисс. ... канд. техн. наук. – Курск, 2013.

ОЦЕНКА ВРЕМЕНИ ВСТУПЛЕНИЯ ВОЛНЫ ПО ИЗМЕРЕНИЯМ УРОВНЯ МОРЯ

ИВАНЧЕНКО О.В.

ИАТЭ НИЯУ МИФИ

Одной из функций системы информационной поддержки дежурного океанолога является оперативная автоматическая регистрация и определение времени вступления волны цунами за счет обработки поступающих в центр цунами записей уровня моря от автоматических измерителей. Запись уровня моря является последовательностью средних за минуту значений уровня моря с шагом в одну минуту. В значение уровня моря входит приливная составляющая, ветровое волнение и составляющая, вызванная волной цунами.

Традиционно оценка времени вступления волны рассматривается в рамках задачи о выделении сигнала на фоне шума [1]. Однако, разработанные в рамках такого подхода алгоритмы обработки записи уровня моря обнаруживают ряд недостатков [2]. В частности, критерий определения опасной ситуации (пороговое значение скорости изменения уровня - 5 см/мин) неоднократно приводил к ложным сигналам. Простое увеличение порога, с одной стороны, не решает данную проблему, а с другой – может привести к пропуску заметного цунами. Запись уровня моря является нерегулярной последовательностью значений, и ее нельзя описать аналитически. Рассматривать её как реализацию случайного процесса некорректно, поскольку каждое цунами является крайне редким и индивидуальным событием. Таким образом, необходима разработка более гибких процедур обработки данных измерений уровня моря для регистрации и определения времени вступления волны цунами.

В докладе предлагается подход к задаче оценки времени вступления волны цунами по данным измерений уровня моря, основанный на применении методов нечеткой математики (теории нечетких множеств) к анализу дискретных временных рядов [3,4]. Излагается разработанный алгоритм оценки, имитирующий действия, которые осуществляет океанолог (эксперт) при визуальной оценке времени вступления волны цунами. Сначала он мысленно просматривает изображенную в виде кривой на графике запись уровня моря и выделяет на фоне приливной составляющей слабо изменяющиеся фрагменты, а также фрагменты с более резкими и длительными изменениями. Затем, после такого выделения, осуществляется анализ фрагментов с резкими изменениями.

Разработанный алгоритм оценки времени вступления волны цунами по данным измерений уровня моря предназначен для использования в автоматическом режиме. Настройка процедуры (выбор параметров) может осуществляться в режиме обучения индивидуально для каждого автоматизированного поста и каждого пользователя на основе анализа имеющихся записей цунами.

Литература

1. Куликов Е.А. Измерение уровня океана и прогноз цунами // Метеорология и гидрология. 1990. № 6. С.61-68.
2. Ивельская Т.Н., Шевченко Г.В. Результаты опытной эксплуатации автоматических постов наблюдения за уровнем моря в портах Корсаков и Холмск // Проблемы комплексного геофизического мониторинга Дальнего Востока России. Труды Второй региональной научно-технической конференции. Петропавловск-Камчатский. 11-17 октября 2009 г. / Отв. ред. В.Н. Чебров. Петропавловск-Камчатский: ГС РАН, 2010. 392 с. ISBN 978-5-903258-10-9, с.264-268
3. Агаян С.М. Дискретный математический анализ и нечеткая логика в геофизических приложениях: дис. на соискание ученой степени д-ра физ.-мат. наук. РАН Геофизический центр РАН, Москва, 2005.

4. Богоутдинов Ш.Р. Алгоритмы нечеткой логики при интерпретации геолого-геофизических данных: дис. на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук. Институт физики Земли им. О. Ю. Шмидта РАН, Москва, 2007.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА ВЧ ИНЖЕКТОРА РЕЗОНАНСНОГО УСКОРИТЕЛЯ ЭЛЕКТРОНОВ БЕТА-8

Беляев А.Н.¹, Опекунов А.М.²

¹ СарФТИ НИЯУ МИФИ

² ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

В РФЯЦ-ВНИИЭФ создается резонансный ускоритель электронов БЕТА-8 [1] на основе коаксиального полуволнового резонатора (тип колебаний T₁, частота 100 МГц), с широким диапазоном выходной энергии электронного пучка от 1 до 8 МэВ со средней мощностью до 300 кВт.

Из-за высокой проектной средней мощности пучка, необходимо минимизировать или полностью исключить потери электронов на стенках резонатора и в каналах транспортировки пучка. По этой причине, была необходимость провести расчеты динамических параметров электронного пучка системы инжекции, тем самым, по возможности, исключить потери тока на начальных этапах.

ВЧ инжектор [2], разработанный в ИЯФ им. Будкера, и система магнитной транспортировки пучка являются основными элементами системы инжекции. ВЧ инжектор предназначен для инжекции электронов в непрерывном режиме с энергией

(50–100) кэВ, средним током до 40 мА и частотой следования сгустков (0.01–100) МГц в ускоряющую область ВЧ поля коаксиального резонатора ускорителя БЕТА-8.

Цель работы заключалась в создании физико-математической модели, адекватно описывающей характеристики электронного пучка, генерируемого ВЧ инжектором, и сравнение с экспериментальными данными характеристик электронных сгустков. С помощью численного моделирования проведены расчеты динамических параметров пучка как на этапе формирования электронных сгустков, так и этапе транспортировки пучка до входа в резонатор ускорителя.

В работе приведены результаты численных расчетов динамики электронных сгустков с учетом объемного заряда на выходе системы инжекции пучка. Для подтверждения правильности выбранной физико-математической модели, лежащей в основе численных расчетов, проведены испытания ВЧ инжектора с пучком. Испытания показали хорошее совпадение расчетных и измеренных параметров, результаты которых также приведены.

Литература

1. N.V. Zavyalov, S.A. Zhelezov, S.T. Nazarenko, V.V. Porkhaev et al. A CW electron accelerator. The planned design and electrophysical characteristics. // Problems of atomic science and technology. 2006. №2 Series: Nuclear Physics Investigations (46). P. 8-10.
2. V. Volkov, V.S. Arbutov, K.N. Chernov, G. Kurkin et al. CW 100 keV electron RF injector for 40 mA average beam current. // RUPAC14. 2014.

ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ ОДНОМЕРНЫХ МАГНИТНЫХ СИСТЕМ

КОЗАБАРАНОВ Р.В., КУДАСОВ Ю.Б.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Гейзенберговские магнитные цепочки являются одной из базовых моделей магнетизма и изучаются более 80 лет [1]. В последнее время были синтезированы соединения с одномерными и квазиодномерными магнитными структурами [2].

В данной работе предложен новый вариационный метод для определения основного состояния одномерных гейзенберговских систем. Модель Гейзенберга для одномерной анизотропной цепочки с переменным магнитным полем (различное направление для 2-ух подрешеток) сводится к модели бесспиновых фермионов с парным взаимодействием частиц на соседних узлах при помощи преобразования Йордана-Вигнера [3]. Затем используется вариационный метод с нелокальной пробной волновой функцией гутцвиллеровского типа, разработанной ранее [4]. Полученная энергия основного состояния хорошо согласуется с известными результатами [3]. В отличие от метода среднего поля [3] отсутствует расходимость. Данный метод может быть обобщен на более сложные одномерные системы, например лестничного типа.

Литература:

1. D. C. Mattis, The many-body problem. An encyclopedia of exactly solved models in one dimensions, World scientific publishing, Singapore, 1993, pp. 673.
2. L. Bogani, A. Vindigni, R. Sessolia D. Gatteschi, Journal of Materials Chemistry, v. 18, 2008, pp. 4750–4758.
3. S. Paul, A.K. Ghosh, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, v. 362, 2014, pp. 193-203.
4. Ю. Б. Кудасов, УФН, т. 173, 2003, с. 121-144.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПЕРЕКРЕЩИВАЮЩИХСЯ УЗ–ПУЧКОВ В ДОПЛЕРОВСКОМ МЕТОДЕ ИЗМЕРЕНИЯ СКОРОСТИ ЖИДКОСТИ

Орлов А.С., Диденкулов И.Н., Мартыанов А.И., Прончатов-Рубцов Н.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И.Лобачевского

Ультразвуковой эхолокационный метод измерения скоростей течения широко применяется в расходомерах жидкости и в медицинской диагностике. В частности, с его помощью измеряют течение крови в артериях, где скорости составляют десятки см/с. При этом частоты ультразвука составляют 3-5 МГц. Для более медленных течений характерных для малых вен и капилляров, где скорости потока составляют порядка 1 мм/с, необходимо использовать более высокие частоты. Однако это существенно ограничивает глубину эхолокации, так как затухание ультразвука растет с частотой. В данной работе рассматривается линейный и нелинейный акустические методы диагностики медленных течений жидкости, основанные на использовании перекрещивающихся пучков. Приведены экспериментальные результаты, демонстрирующие возможности метода.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (№14-12-00882).

ПРОВЕРКА ОТЛИЧИЯ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НАПРЯЖЕННОСТИ ИЗЛУЧЕНИЯ СЛУЧАЙНОГО ВОЛОКОННОГО ЛАЗЕРА ОТ ГАУССОВА ВИДА В МОДЕЛИ ВОЛНОВОЙ КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ

Огородников Л.Л.¹, Лебедев В.В.^{1,2}, Вергелес С.С.^{1,2}

¹*Московский физико-технический институт
(государственный университет),*

²*Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН*

В последнее время большой интерес вызывает моделирование процессов в активно развивающейся области физики, связанной со случайными волоконными лазерами. Их создание и вопросы физико-математического моделирования имеют большое значение для различных телекоммуникационных средств связи и распределенных сенсорных систем [1].

В случайном волоконном лазере в качестве активной среды используют волоконный активный элемент (например, фосфоросиликат), а механизм обратной связи (так называемая случайно распределенная

обратная связь) определяется рэлеевским рассеянием света на естественных неоднородностях показателя преломления [1],[2],[3]. Данные особенности конструкции случайного волоконного лазера приводят к заметным преимуществам, связанных со снятием принципиальных ограничений по дальности трансляции информации, возможностью достаточно просто перестраиваться по частоте, достаточно высоким качеством пучка по сравнению с обычными случайными лазерами [4], отсутствием технических трудностей при юстировке зеркал и т.п.

В [5] построена волновая кинетическая теория для активных циклических слабонелинейных волновых систем, которая может быть использована для описания работы случайных волоконных лазеров. В частности, были установлены спектры излучения при разных мощностях порога генерации, зависимость интенсивности излучения от частоты и зависимость ширины спектра от выходной мощности, которые хорошо описывают имеющиеся экспериментальные результаты [5]. При этом в [5] было использовано предположение о том, что функция распределения напряженности выходящего из случайного волоконного лазера излучения имеет гауссов вид. Однако, в силу нелинейности процессов, в частности, квадратичной зависимости показателя преломления от напряженности электрического поля (эффект Керра), имеющих место в механизме формирования излучения в данном лазере, функция распределения напряженности может иметь отличие от гауссова вида. Значимость этого отличия можно определить путем использования теоремы Вика, согласно которой, если распределение действительной случайной величины X гауссово, то выполняется равенство:

$$\langle X^{2n} \rangle = \frac{(2n)!}{2^n * n!} \langle X^2 \rangle^n, \quad n \in N$$

Целью данной работы является вычисление корреляционного момента четвертого порядка $I^{(4)}$ поля ψ ($I^{(4)} = \langle |\psi^4| \rangle$) и сравнение его с квадратом интенсивности выходного излучения I ($I = \langle |\psi|^2 \rangle$). Решение поставленной задачи позволит сделать оценку степени применимости волновой кинетической теории [5].

Литература:

1. Turitsyn S.K. et.al. "Random distributed feedback lasers", Physics Reports, 2014.
2. Звелто О. "Принципы лазеров", 4-е изд., СПб.: Издательство «Лань», 2008.
3. Turitsyn S.K. et.al. "Random distributed feedback fibre lasers", Nature Photonics, 2010.
4. Wiersma D.S. "The physics and applications of random lasers", Nature Physics 4, 359-367, 2008.
5. Churkin D.V., Kolokolov I.V. et.al. "Wave kinetics of random fibre lasers", Nature Communications, 2, 2015.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И РАСЧЕТНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ СТАБИЛИЗАЦИИ ПОЛЕТА ПЛОСКОГО УДАРНИКА

БАШУРИН В.П.¹, ГУК Д.Е.², КТИТОРОВ Л.В.¹, ЛАЗАРЕВА А.¹,
МАКАРОВ С.А.², МЕШКОВ Е.Е.²

¹ИТЦ «Система Саров»

²СарФТИ НИЯУ МИФИ

В экспериментах [1] тонкий (1 мм) плоский ударник из оргстекла уско-
рялся в цилиндрическом канале диаметром 35 мм на базе полета более
60 мм до скорости выше 200 м/с давлением продуктов детонации смеси
ацетилена с кислородом. В этих экспериментах скорость ударника ре-
гистрировалась методом PDV [2].

В наших экспериментах в подобной постановке разгон ударника и его
удар по слою воды толщиной 10 мм регистрировался скоростной каме-
рой СФР в варианте лупы времени. В этих экспериментах наблюдался
высокий уровень симметрии выхода УВ на свободную границу слоя
воды. Это предполагает существование механизмов стабилизации по-
лета ударника

Для выяснения природы этих механизмов была проведена серия
двумерных модельных расчетов разгона плоского ударника в канале
продуктами взрыва с последующим выходом ударника в атмосферу. В
расчетах исследовалась устойчивость полета плоского недеформиру-
емого ударника по отношению к малым отклонениям плоскости удар-
ника от нормали к оси канала. Для газодинамического моделирования
полета ударника использовался программный пакет Star-CCM+ (версия
9.04.011).

Литература

М.В. Асташкин, В.К. Баранов, А.Б. Георгиевская, Д.Н. Замыс-
лов, Е.Е. Мешков, М.А.Наумов, С.Н. Степушкин. Лабораторное компак-
тное устройство для разгона тонких ударников до скоростей более 200
м/с. //Сб.тезисов XIV научно-технической конференции «Молодежь в
науке», Саров, октябрь 2015г, с.33.

O.T.Strand, D.R.Goosman, C.Martinez. Compact system for high-
speed Velocimetry using heterodyne technique // Rev. Sci. Instrum, 77, 2006,
p. 083108-1 – 083108-8.

КОНСТРУИРОВАНИЕ ВЕТРО- И ГИДРОГЕНЕРАТОРОВ НА ОСНОВЕ ПРИНЦИПА КУМУЛЯЦИИ ЭНЕРГИИ ПОТОКА

БАШУРИН В.П., КТИТОРОВ Л.В. , ЛАЗАРЕВА А.С., ПЛЕТЕНЕВ Ф.А

ИТЦ “Система Саров”

Направленный поток воды или воздуха может быть использован в ветро- или гидрогенераторе для выработки энергии. Эффективность ГЭС определяется максимальным потоком кинетической энергии на лопатках турбины, поэтому наличие высокоскоростного потока воды или воздуха играет ключевую роль при создании эффективно работающей турбины. В проведенных исследованиях изучалась возможность увеличения потока кинетической энергии течения в системе направляющих крыловидных профилей.

Значительно большее количество энергии можно собрать в ограниченном объеме между внутренними крыловидными профилями, используя несколько ускоряющих систем, вложенных одна в другую (рис. 1, а)

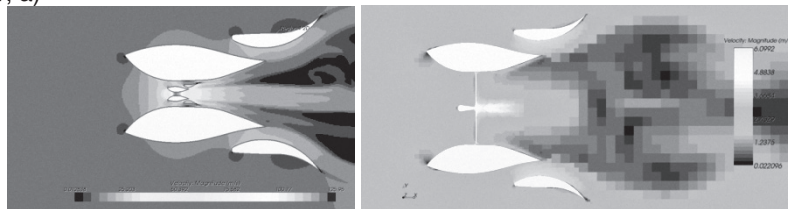


Рис 1.

А, СЛЕВА - ПРИМЕР ДВУМЕРНОГО РАСЧЕТА ДВУХКАСКАДНОЙ УСКОРИТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ В STAR-CCM+;

Б, СПРАВА – ТРЕХМЕРНАЯ РАСЧЕТНАЯ МОДЕЛЬ ГИДРОГЕНЕРАТОРА С ТУРБИНОЙ.

В расчетах также установлено существенное увеличение снимаемой мощности при установке ротора турбины в зоне кумуляции за счет увеличения скорости набегающего потока (рис. 1, б).

Для изучения ускорения потока проведены несколько серий расчетов (рис. 1), подтвержденных экспериментами и теоретическими оценками [1- 5].

Литература:

1. В.П.Башурин, Р.И.Каныгин, Е. Ю.Кошелева, Е.Е.Мешков, И.А.Новикова, Ф.А.Плетенев, А.А.Щепелев. Доклад на четырнадцатой международной школе-семинаре “Модели и методы Аэродинамики ”Евпатория, 4 -13 июня 2014 г.

2. Bashurin, V. P., Budnikov, V. P., Fedorenko, Ya. V., Klevtsov, V.A., Ktitorov, L.V., Lazareva A.S., Meshkov, E.E., Novikova, I.N., Pletenev, V.A., Yanbaev, G.M., HydrodynamicTestBench, TechnicalPhysics, 2015, Vol. 60, No. 7, pp. 1093–1095.
3. Bashurin, V. P., Budnikov, V. P., Fedorenko, Ya. V., Klevtsov, V.A., Ktitorov, L.V., Lazareva A.S., Meshkov, E.E., Novikova, I.N., Pletenev, V.A., Yanbaev, G.M., Free Flow Speed Increase in a System of Guiding Surfaces. Proceedings of the Turbulent Mixing and Beyond Workshop. Mixing in Rapidly Changing Environment, 04-09 August 2014.
4. Башурин В.П., Будников И.Н., Клевцов В.А., Ктиторов Л.В., Лазарева А.С., Мешков Е.Е., Новикова И.А., Плетенев Ф.А., Федоренко Я.В., Янбаев Г.М., Доклад на международной конференции «Успехи механики сплошных сред». 28-е сентября- 04-е октября 2014 г. Владивосток, Россия.
5. Башурин В.П., Будников И.Н., Клевцов В.А., Ктиторов Л.В., Лазарева А.С., Мешков Е.Е., Новикова И.А., Плетенев Ф.А., Федоренко Я.В., Хатункин В.Ю., Щепелев А.А., Янбаев Г.М. Доклад на Международной Конференции «XVII Харитоновские тематические научные чтения» (23 - 27 марта 2015 г).

О ВОЗМОЖНОСТЯХ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ВИРТУАЛЬНОГО ПРАКТИКУМА ПО ГАЗОДИНАМИКЕ В УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ САРФТИ НИЯУ МИФИ

Евланов К.И. ¹, Мешков Е.Е. ¹, Попов С.Ф. ¹, Руденко В.В. ², Рыжов И.С. ¹, Рябков А.В. ¹, Холушкин В.С. ¹

¹СарФТИ НИЯУ МИФИ
²ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

В СарФТИ НИЯУ МИФИ разрабатывается комплекс лабораторных работ по газодинамике, основанных на использовании внутренней энергии атмосферного воздуха [1] и газогидравлической аналогии [2]. В 2013 году в рамках проекта ПСР 1.2.423 разработаны три лабораторных работы:

- ◆ Поршневая модель простейшей термоядерной мишени [3].
- ◆ Гидравлическая модель цилиндрической имплозии.
- ◆ Гидравлическая модель плоской стационарной ударной волны

В настоящее время ведется разработка новых работ.

Для проведения численных расчетов (расчет течения в выполняемом эксперименте или его аналога) в рамках лабораторных работ используется расчетный комплекс *MASTER Professional* [4]. Для выполнения работ используются *5 компактных суперЭВМ* на базе процессора *Intel Core i7*, с оперативной памятью *16Gb* и мощными видеокартами. Компьютеры объединены в локальную сеть посредством коммутатора с

последующим выходом в *глобальную сеть*. Установлена операционная система *Windows 7x64*, средства обработки графической информации и другое специальное ПО.

Лабораторные работы могут выполняться как в реальном, так и виртуальном варианте с помощью глобальной сети Интернет. Расчетный комплекс *MASTER Professional* предназначен для проведения расчетно-теоретического моделирования быстротекущих течений, и благодаря простому и удобному интерфейсу его можно применять в учебном процессе без какой-либо профессиональной подготовки. За счет того что все суперЭВМ работают круглосуточно, каждый желающий в любое удобное для него время может без труда воспользоваться данным расчетным комплексом. Всё что для этого потребуется это персональный компьютер с доступом к глобальной сети Интернет. Все расчеты производятся непосредственно на суперЭВМ, что не требует от пользователя наличия мощного процессора на своём компьютере. Благодаря оконному режиму, подключение к удаленному рабочему столу никак не затрудняет работу на персональном компьютере, пользователь с легкостью может сворачивать, разворачивать и менять размеры рабочей зоны, что дает возможность заниматься повседневными делами, пока суперЭВМ проводит расчеты. Само подключение производится посредством ввода номера ЭВМ, на котором пользователь хочет работать, тем самым бронируя и не давая посторонним лицам пользоваться выбранным рабочим столом во время работы на нём.

Данный расчетный комплекс *MASTER Professional* реализует возможность, непосредственно не выходя из дома наблюдать за процессами (сопровождающиеся звуковыми, ударными, тепловыми, детонационными волнами, высокими сжатиями и т.д.), которые в реальной жизни практически невозможно наблюдать из-за сложности проведения и регистрации в лабораторных условиях. Начиная от простейшего соударения двух бильярдных шаров и заканчивая моделированием динамики схлопывания термоядерной мишени.

Литература

1. Мешков Е.Е, Красовский Г.Б. Патент РФ № 2393546 от 27.06.2010
2. Сунцов Н.Н., Методы аналогий в аэрогидродинамике. М., Физматгиз, 1958
3. Барышев А.С. и др.// Физическое образование в ВУЗах, т.20, №1, 2014, сс.54-62.
4. Руденко В.В., Шабуров М.В. Свидетельство об отраслевой регистрации разработки. №11845, 2008г

ЛАБОРАТОРНАЯ МОДЕЛЬ ВЫХОДА УДАРНОЙ ВОЛНЫ НА СВОБОДНУЮ ГРАНИЦУ КОНДЕНСИРОВАННОЙ СРЕДЫ С ОБРАЗОВАНИЕМ ОБЛАКА МИКРОЧАСТИЦ

БАРАНОВ В.К. ¹, ГЕОРГИЕВСКАЯ А.Б. ¹, КЛЕВЦОВ В.А. ²,
МЕШКОВ Е.Е. ², ПОПОВ С.Ф. ², РЫЖОВ И.С. ², СТЕПУШКИН С.Н. ¹

¹ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

²СарФТИ НИЯУ МИФИ

Образование облака микрочастиц при выходе ударной волны на свободную границу конденсированной среды является одной из актуальных проблем современной газодинамики. Одним из направлений исследования этого явления является регистрация облака микрочастиц, для которых известны их параметры: размер, форма, состав, и одновременно движение границы конденсированной среды. Полученные в подобных экспериментах данные могут быть использованы при исследовании процессов, в которых параметры микрочастиц изначально не известны [1].

В рамках практикума по газодинамике в гидродинамической лаборатории СарФТИ НИЯУ МИФИ разрабатывается лабораторная работа «Метод PDV», основанная на применении модификации поршневой ударной трубы (лабораторная работа: «Поршневая модель динамики термоядерной мишени» [2,3]). В постановке эксперимента на этой ударной трубе реализуется возможность одновременной регистрации видеокамерой и методом PDV [4] разгона и торможения поршня и разлетающегося облака микрочастиц с известными параметрами.

Результаты экспериментов могут быть использованы в качестве тестов при разработке расчетно-теоретической модели явления.

Литература

1. Бандуркин К.В., и др.// Физико-химическая кинетика в газовой динамике. Том.16, выпуск 4, 2015 год
2. Мешков Е.Е., Красовский Г.Б. Патент РФ № 2393546 от 27.06.2010
3. А.С.Барышев и др.// Физическое образование в ВУЗах, т.20, №1, 2014, сс.54-62.
4. O.T.Strand, D.R.Goosman, C.Martinez. // Rev. Sci. Instrum, 77, 2006, p. 083108-1 – 083108-8.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДИКИ МАРКЕРОВ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ УСТОЙЧИВОСТИ КУПОЛА ПУЗЫРЯ ТЕЙЛОРА

КАНЫГИН Р.И.¹, КАЩЕЕВ А.², МЕШКОВ Е.Е.², НОВИКОВА И.А.²

¹Физико-математический лицей №15

²СарФТИ НИЯУ МИФИ

Устойчивость купола пузыря Тейлора имеет отношение к проблеме развития зоны турбулентного перемешивания, связанного с неустойчивостью Рэлея-Тейлора [1]. Для исследования природы этого явления применен метод маркеров – частиц с плотностью, приближающейся к плотности воды [2]. Результаты экспериментов с этим методом дают представление об ускорении течения около пузыря Тейлора, всплывающего в воде.

Литература

1. Е.Е.Meshkov. //Phil. Trans. R. Soc. A2013 371, 20120288
2. В.П.Башурин и др // ЖТФ, т.85, №7, с.149-150, 2015

Секция

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
В ХИМИИ**

Председатель жюри –

Голубев А.В., д.ф.-м.н., глава администрации города Саров

Члены жюри –

Данилин Л.Д., к.х.н., в.н.с. ФГУП «РФЯЦ ВНИИЭФ» доцент каф. радиационной и ядерной физики СарФТИ НИЯУ МИФИ

Мильченко Д.В., к.х.н., в.н.с. ФГУП «РФЯЦ ВНИИЭФ»

Штырлин В.Г., к.х.н., доцент, зав. научно-исследовательской лабораторией координационных соединений, Химический институт им.А.М. Бутлерова КФУ

МОЛЕКУЛЯРНО ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СИСТЕМ ХИТОЗАНА С ИНСУЛИНОМ

Авдошин А.А., Наумов В.С., Игнатов С.К.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

В настоящее время разработка систем пероральной доставки инсулина в организм является чрезвычайно актуальной задачей медицинской химии. Для успешного создания пероральной формы необходимо решить проблему низкой биодоступности инсулина, вызванной его гидролизом при низких значениях pH желудочного сока, расщеплением протеинами желудка и тонкого кишечника и слабым проникновением через мембраны эпителиальных клеток кишечника [1]. Путем решения этих проблем может являться использование наночастиц, полимерных мицелл, нано и микрокапсул, внутри которых или на поверхности которых адсорбирован инсулин [2]. Образование подобных комплексов изучено в основном экспериментальными методами. Одним из перспективных материалов для носителей является хитозан (частично N-ацетилированный поли-1,4-β-D-глюкопиранозамин-2), достоинствами которого является биосовместимость и доступность. Экспериментальное изучение термодинамических и кинетических параметров координации хитозана и инсулина осложнено тем, что хитозан является смесью полимеров различной молекулярной массы и степени ацетилирования аминогрупп, а структура и свойства материалов на его основе зависят от свойств окружающей среды. В связи с этим молекулярно-динамическое моделирование может быть эффективным методом установления физико-химических характеристик таких материалов, в частности энергии образования комплекса инсулин-хитозан. В настоящей работе методом молекулярно-динамического (МД) моделирования установлены кинетические и термодинамические характеристики комплексообразования хитозана и инсулина. Модельная система, использованная для МД расчета, представляла собой комплекс пары димеров инсулина, координированных с $ZnCl_2$ в окружении 16 цепей хитозана из 10 мономерных звеньев. Система находилась в прямоугольной ячейке с SPC-водой при степени протонирования 50 %, что соответствовало pH = 6,4.

МД моделирование проводилось на временном интервале 100 нс с шагом интегрирования 1 фс (интегратор leap-frog/LINCS) для NVT-ансамбля при $T = 300$ К (термостат Берендсена). Расчеты проводились с помощью программы GROMACS 4.6, адаптированной для использования ускорителей CUDA, с использованием силового поля GROMOS 56ACARBO, специально модифицированного для расчетов полиаминогликанов. Модификация была произведена на основе квантово-химических расчетов (HF/STO-3G//B3PW91/6-31++G(d,p)) и состояла во

введении в силовое поле основных структурных элементов хитозана и его производных. Установлено что после 20 нс начинается адсорбция цепочек хитозана на молекуле инсулина. После 50 нс происходила полная координация инсулина с как минимум одной молекулой хитозана. Методом потенциала средней силы (PMF) были установлены термодинамические характеристики координации олигомера хитозана на глобуле инсулина. Изучено влияние на эти характеристики параметров хитозана и окружающего раствора.

Литература:

1. Hamman J.H., Enslin G.M., Kotze A.F. // *Bio Drugs*. 2005. V. 1, N 3. P. 165.
2. Butstraen C., Salaun F. // *Carbohydrate Polymers*. 2014. V. 99. P. 608-616.

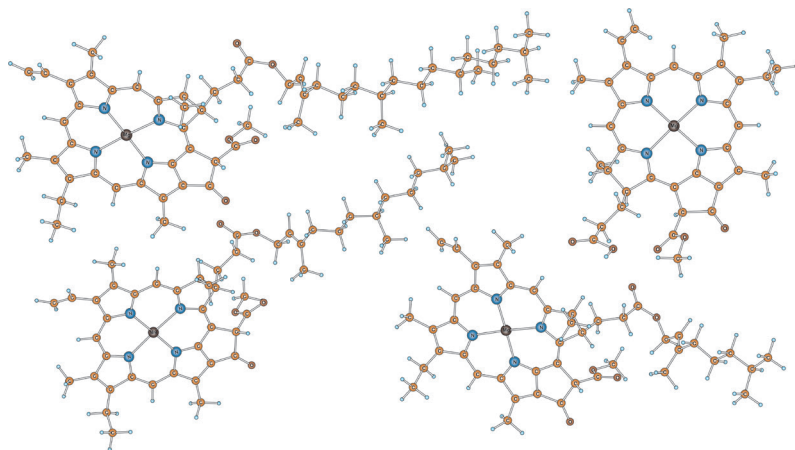
Авторы выражают благодарность за возможность использования суперкомпьютерного кластера «Лобачевский» Нижегородского государственного университета.

СТРУКТУРНЫЕ, ЭЛЕКТРОННЫЕ, ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ И СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА АНАЛОГОВ ХЛОРОФИЛЛА В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

ГРИГОРЬЕВА А.О., ИГНАТОВ С.К.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Процесс фотосинтеза растений представляет собой сложный фотохимический процесс, происходящий с участием молекул хлорофилла. Синтетические аналоги молекул хлорофилла могли бы привести к лучшему пониманию особенностей биологического фотосинтеза и созданию искусственных фотосинтетических систем. Такие системы могут быть основаны на молекулах, подобных хлорофиллу, помещенных в синтетическую среду, например, полимерную матрицу, гель или раствор, в котором возможно осуществление процессов, аналогичных протекающим в хлоропластах. Ранее рассматривались электронные свойства модифицированных порфиринов с атомами различных металлов. Однако влияние структурных характеристик и окружающей среды на электронное возбуждение молекулы изучено в меньшей степени. Целью настоящей работы является исследование особенностей фотовозбуждения в структурно-измененных аналогах хлорофилла, которые более просты для синтеза и помещены в искусственную среду. Примеры модельных молекул, рассмотренных в работе, представлены на схеме:



Структурные, электронные и термодинамические свойства модельных молекул, а также их колебательные и электронные спектры были изучены в вакууме, воде, трет-бутиловом спирте и модельной среде с $\epsilon = 4$, по диэлектрическим свойствам близкой к естественному белковому окружению. Структурные и термодинамические параметры, а также ИК спектры были рассчитаны методом функционала плотности

(B3LYP/6-31G(d,p)). Для расчета спектров электронного возбуждения использовалась времезависимая теория функционала плотности (TDDFT). При расчете электронных спектров были рассмотрены 100 синглетных и триплетных электронных состояний в диапазоне возбуждений 1000-200 нм. Влияние конденсированной среды оценивалось методом PCM с полной оптимизацией геометрии. Анализ полученных колебательных и электронных спектров показывает, что изменение строения углеводородного заместителя в молекуле хлорофилла не изменяет механизм фотовозбуждения. Смена растворителя также не оказывает существенного влияния на электронные переходы в модельных молекулах. Эти выводы свидетельствуют о возможности варьирования структурных параметров и окружения молекул в широких пределах без изменения фотохимических свойств.

СРАВНИТЕЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ВНУТРЕННЕГО ВРАЩЕНИЯ В МОЛЕКУЛАХ МОНОФТОРАЛКАНОВ И ИХ РАДИКАЛАХ

КОТОМКИН А.В., РУСАКОВА Н.П., ТУРОВЦЕВ В.В., ОРЛОВ Ю.Д.

Тверской государственный университет, кафедра общей физики

Исследование внутренних вращений органических радикалов необходимо для более точного определения их термодинамических свойств. Характеристикой таких вращений является потенциальная функция $V(\varphi)$, показывающая возможные конформеры соединения в виде глобальных и локальных минимумов.

Были получены 42 потенциальные функции $V(\varphi)$, описывающие вращения вокруг всех связей C-C в молекулах вида $F-C_nH_{2n+1}$, где $3 \leq n \leq 6$ [1], радикалах вида $FC\cdot H-C_nH_{2n+1}$, где $2 \leq n \leq 5$ (или $FC\cdot H-R$) и $F-C_nH_{2n}-C\cdot H_2$, где $2 \leq n \leq 5$ (или $F-R-C\cdot H_2$). Все найденные $V(\varphi)$ и равновесные конформационные состояния были рассчитаны с помощью метода B3LYP/6-311++(3df,3pd) 6d 10f в программном пакете GAUSSIAN 03 [2, 3] (обоснование метода показано в работе [3]). Расчёт потенциальной функции проводился с шагом в 10° , были уточнены положения и полные энергии локальных минимумов. С помощью процедуры QST2 были найдены положения и полные энергии переходных состояний (TS). Проведено сопоставление полученных результатов между собой, а также их сравнение с данными аналогичных вращений в молекулах n-алканов и их радикалах [4].

Анализ вращения в радикалах вида $FC\cdot H-C_nH_{2n+1}$, где $2 \leq n \leq 5$, выявил влияние группы со свободной валентностью в радикалах вида $FC\cdot H-C_nH_{2n+1}$ только на вращение волчков вокруг первой и второй от F связей C-C. Вращения вокруг третьей и последующих C-C связей идентичны аналогичным вращениям в n-алканах и их радикалах.

Последующее разбиение соединений $F-C_nH_{2n+1}$ и $F-C_nH_{2n}-C\cdot H_2$ на $FC_mH_{2m}-C_kH_{2k+1}$ и $FC_mH_{2m}-(C_kH_{2k})\cdot$ дало возможность выделить и сравнить одинаковые волчки FC_mH_{2m} . Так параметры вращения волчков FC_mH_{2m} - во фторзамещенных молекулах и радикалах отличаются от параметров вращения волчков $H-C_mH_{2m}$ - соответствующих алканов и алкилов только при $m \leq 2$ для одинаковых k. Вращение волчков при $m \geq 3$ показывает, что их барьеры переходов не зависят от m.

Сравнение торсионных переходов в $C_mH_{2m}-C_kH_{2k+1}$ и $FC_mH_{2m}-(C_kH_{2k})\cdot$, показало, что при $k = 1, 2$ и одинаковых m, параметры вращения соответствующих молекул и радикалов отличаются. На основании этого можно сделать вывод о влиянии группы со свободной валентностью на вращение вокруг двух ближайших связей C-C. Полученный результат согласуется с данными работы [4].

Литература

1. Котомкин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. // Вестник Казанского технологического университета. 2014. Т. 17, № 24. С. 36-39.
2. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 03 (Revision E 0.1 SMP). Gaussian Inc., Pittsburgh PA, 2007.
3. Орлов М.Ю., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. // Вестник Башкирского университета. 2008. Т. 13, №3(1). С. 758-760.
4. Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. // ЖОХ. 2011. V. 81, № 9. С. 1458-1464.

Статья выполнена в рамках выполнения научно исследовательской работы «Разработка программного комплекса для расчета термодинамических свойств органических соединений» по договору с Фондом содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере №9498ГУ/2015 от 28.15.2015.

МОЛЕКУЛЯРНО–ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСТВОРЕНИЯ КРИСТАЛЛА ХИТОЗАНА: ВЛИЯНИЕ КИСЛОТНОСТИ СРЕДЫ И РАЗМЕРОВ ПОЛИМЕРА НА КИНЕТИКУ РАСТВОРЕНИЯ

НАУМОВ В.С., ИГНАТОВ С.К.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Хитозан (частично N-ацелированный поли-1,4-β-D-глюкопиранозамин-2), а так же его производные рассматриваются как перспективные средства инкапсуляции на молекулярном уровне для доставки лекарств, в том числе препаратов белковой природы. Инкапсуляция позволила бы реализовать пероральный прием таких препаратов, защищая молекулу лекарства от пищеварительных ферментов. На данный момент реализация этой технологии осложнена отсутствием информации о термодинамических параметрах и кинетике растворения, а также комплексообразования с белковыми субстратами. Интерпретация структуры полимера в растворе на основе данных электронной микроскопии вызывает дискуссию [1], данные о константах нестойкости при взаимодействии с различными белковыми агентами практически отсутствуют, а сам процесс растворения и его кинетика изучены в основном экспериментальными методами на основе формально-кинетического подхода. Экспериментальное изучение хитозана осложнено тем, что он является смесью полимеров различной степени ацелирования аминогрупп и молекулярной массы, для его водных растворов характерен дополнительный фактор протонирования незамещенных аминогрупп. В этой связи молекулярно-динамическое (МД) моделирование является

одним из подходов, обеспечивающих определение истинных термодинамических и кинетических констант. Кроме того, при МД исследовании возможно значительно более простое установление закономерностей изменения этих констант при варьировании числа, заряда и типа заместителей хитозановых цепей, длины этих цепей, установления особенностей взаимодействия между собой и с другими молекулами, поверхностями или частицами рассматриваемой системы.

В данной работе методами МД моделирования изучен процесс растворения кристаллического хитозана. Модель системы представляла собой кристалл хитозана, помещенный в прямоугольную элементарную ячейку с SPC-водой. Кристалл состоял из 8 цепей, длиной 20-60 мономерных звеньев (ММ цепи 3,2-9,6 кДа). Для построения кристаллической структуры использовались данные PCA [2]. Часть аминокрупп в кристалле протонировалась в соответствии с определенным pH водной среды. Время моделирования до 50 нс, шаг 1 фс, NVT-ансамбль, T = 300 K, термостат Берендсена. Расчеты проводились в GROMACS 4.6 (CUDA-версия) с использованием силового поля GROMOS 56ACARBO [3], специально модифицированного для расчетов полиаминогликанов. Модификация была произведена на основе квантово-химических расчетов (HF/STO-3G//B3PW91/6-31++G(d,p)) и состояла во введении в силовое поле основных структурных элементов хитозана и его производных. Такими элементами выступают аминопиранозы с различным состоянием аминокруппы: свободная, замещенная, протонированная. Выявлена зависимость кинетики растворения кристалла хитозана от степени протонирования аминокрупп. Установлено, что растворение начинается при степени протонирования аминокрупп более 30 (pH ~ 6,8) – это хорошо согласуется с экспериментальными данными по растворению хитозанов. Скорость растворения линейно возрастает с увеличением степени протонирования. Исследовано влияние длины полимерной цепи в кристалле на кинетику процесса растворения, сделана аппроксимация кинетических параметров растворения к бесконечно длинному полимеру.

Литература

1. Pedroni V.I.et al. // Colloid Polym. Sci. 2003. V. 282. P. 100.
2. Yui T.et al. // Macromolecules. 1994. V. 27. P. 7601.
3. Hansen H.S., Hunenberger P.H. // J. Comput. Chem. 2011. V. 32. P. 998.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 14-03-00585.

СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ САЛОЛА В РАЗЛИЧНЫХ ФАЗОВЫХ СОСТОЯНИЯХ

БАБКОВ Л.М.¹, ИВЛИЕВА И.В.¹, ДАВЫДОВА Н.А.²

¹Саратовский государственный университет

²Институт физики национальной академии наук Украины

Основные физико-химические и медико-биологические свойства молекулярного объекта определяются его строением, или, согласно современным квантово-механическим теоретическим моделям, формой его адиабатического потенциала (АП), параметры которого (минимум энергии, геометрия молекулярной системы, силовые постоянные, дипольный момент, тензор поляризуемости) должны быть оценены. В настоящее время это стало возможным в рамках современного молекулярного моделирования, использующего квантовые методы, значительная часть которых реализована в сервисных пакетах программ. Квантовые методы моделирования АП позволили приступить к теоретической интерпретации колебательных спектров молекулярных объектов, для которых классический подход оказывается ограниченным.

В настоящем сообщении объектом исследований, использующих неэмпирические квантовые методы и методы колебательной спектроскопии, реализованные в пакете сервисных программ, стал салол – биосоединение, широко используемое в фармацевтике.

Спектры ИК поглощения (ИКС) и комбинационного рассеяния (СКР) салола, измеренные в интервале температур 11 – 298 К в различных фазовых состояниях, отличаются друг от друга, что обусловлено, по мнению авторов, различием упаковок, конформационного состава образца и влиянием водородной связи. В исследуемом образце при температурных изменениях не исключена реализация конформеров с различной ориентацией плоскости фенильного кольца относительно оставшейся части молекулы. Целью проведённых исследований стало обоснование выдвинутых предположений по результатам молекулярного моделирования салола и детальная интерпретация его колебательных спектров. Авторами учтены результаты работы [1], в которой были проведены комплексные исследования ИКС и СКР салола, включая эксперимент в нормальных условиях (кристаллическое состояние, раствор) и теорию (построение структурно-динамической модели изолированной молекулы).

Моделирование молекулярных систем салола проведено методом теории функционала плотности B3LYP/6-31G(D), реализованном в программном комплексе GAUSSIAN'03. Вычислены энергии, геометрические параметры, дипольные моменты, тензоры поляризуемости, силовые постоянные в гармоническом приближении, рассчитаны ИКС и СКР

четырёх конформеров, отличающихся ориентацией фенильного кольца относительно остальной части молекулы, и димеров, образованных внешней водородной связью. Значения всех вычисленных параметров лежат в пределах, допустимых в структурной химии.

Выявлен наиболее устойчивый конформер. Установлено наличие второй внутренней водородной связи (C-H...O), реализующейся в конформере с плоской конфигурацией, которой соответствует интенсивная полоса в области 3000-3100 см⁻¹ ИКС стабильной фазы салола. Длина связи C-H, протон которой обобществлён, увеличивается на 0,09 Å. Выяснено влияние внешней H-связи на строение и ИКС салола, оценена её энергия. Полностью интерпретированы ИКС и СКР салола.

Литература

1. Hanuza J., Sasiadek W., Michalski J., Lorenc J., Marczka M., Kaminslii A.A., Butashin A.V., Klapper H., Hulliger J., Mohmed Abudelrhman F.A. // *Vibrational Spectroscopy*. 2004. V. 34. P. 253-268.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛЫ ФТАЛЕВОГО АНГИДРИДА

ГАЗИМАГОМЕДОВ М.А., ОТЛЕТОВ А.А., ГИРИЧЕВ Г.В.

Ивановский государственный химико-технологический университет

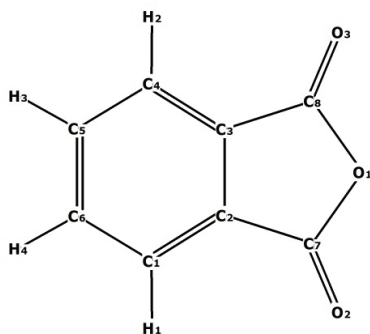


Рис. 1. Модель молекулы фталевого ангидрида

В настоящей работе было изучено геометрическое строение молекулы фталевого ангидрида с помощью квантово-химических расчетов методами DFT/B3LYP, LC-BLYP и MP2 в сочетании с базисными наборами cc-pVTZ и 6-311++G**. Вычисления проводились с использованием программного пакета Gaussian 09. Установлено, что молекула имеет симметрию C_{2v}. Величины основных структурных параметров, полученные в расчетах, представлены в таблице. Экспериментальные данные по структуре фталевого ангидрида имеются

для кристаллической [1] и газовой [2] фазы. Сопоставление расчетных значений структурных параметров молекулы с найденными в микроволновом исследовании [2] показывает, что метод B3LYP с базисными на-

борами 6-311++G** и cc-pVTZ с точностью не хуже 0.01 Å предсказывает длины связей, а валентные углы воспроизводит с точностью на уровне 0.1°.

| Фталевый ангидрид | B3LYP | | MP2 | | LC-BLYP |
|-------------------|---------|------------|---------|------------|---------|
| | cc-pVTZ | 6-311++G** | cc-pVTZ | 6-311++G** | cc-pVTZ |
| R(Å) | | | | | |
| C-O1 | 1,397 | 1,399 | 1,397 | 1,399 | 1,375 |
| C-O2 | 1,190 | 1,192 | 1,197 | 1,199 | 1,179 |
| C2-C7 | 1,480 | 1,483 | 1,479 | 1,485 | 1,474 |
| C2-C3 | 1,386 | 1,390 | 1,387 | 1,392 | 1,367 |
| ∠(град.) | | | | | |
| C-O1-C | 110,3 | 110,3 | 109,9 | 110,0 | 110,7 |
| O2-C-O1 | 122,2 | 122,2 | 122,2 | 122,3 | 122,5 |
| C3-C8-O1 | 107,0 | 107,0 | 107,3 | 107,3 | 107,0 |
| C2-C3-C8 | 107,9 | 107,8 | 107,7 | 107,7 | 107,7 |

Литература

1. Кембриджский банк кристаллографических данных: Deposition IUCr A14523.

2. Pejlovas A.M., Sun M., Kukolich S.G. // J. Mol. Struct. 2014. V. 299. P. 43–47.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (Проектная часть, задание №4.1385.2014К). W

КВАНТОВО–ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛЫ 4–БРОМФТАЛИМИДА

Курочкин И.Ю., Отлёттов А.А., Гиричев Г.В.

Ивановский государственный химико-технологический университет

С помощью методов DFT/B3LYP, LC-BLYP с базисными наборами cc-pVTZ и 6-311++G**, а также методом MP2 с базисом cc-pVTZ, выполнено квантово-химическое исследование геометрического и электронного строения молекулы 4-бромфталимида, C₈H₄BrO₂N (рис. 1). Согласно результатам расчетов, молекула обладает симметрией Cs.

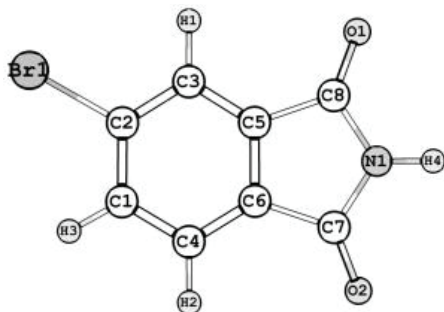


Рис. 1. 4-БРОМФТАЛИМИД

Величины структурных параметров молекулы, рассчитанные с использованием различных приближений, приведены в табл. 1. При переходе от базисного набора 6-311++G** к набору cc-pVTZ наблюдается уменьшение межъядерных расстояний, в то время как величины валентных углов практически не изменяются. При переходе от приближе-

ния V3LYP/cc-pVTZ к LC-BLYP/cc-pVTZ наблюдается уменьшение межъядерных расстояний.

С помощью NBO-анализа установлено наличие σ - и π -аномерных эффектов в данных соединениях. Так, σ -аномерный эффект проявляется в переносе электронной плотности с НЭП атомов галогенов на σ^* -орбитали соседних связей C-C, образованных атомом C, связанным с галогеном, а π -аномерный эффект обусловлен переносом электронной плотности с НЭП атомов галогенов на π^* -орбитали одной из соседних связей C-C.

Ароматичность молекулы была охарактеризована с использованием критериев NICS и HOMA. Критерии HOMA и NICS(0) подтверждают ароматичность бензольного фрагмента, и указывают на то, что пиррольный цикл молекулы ароматичным не является (для бензольного фрагмента HOMA = 0.992, NICS(0) = -7.94; для пиррольного фрагмента HOMA = -1.138, NICS(0) = 3.29).

ТАБЛИЦА 1. ОСНОВНЫЕ СТРУКТУРНЫЕ ПАРАМЕТРЫ МОЛЕКУЛЫ 4-БРОМФТАЛИМИДА (Å , $^\circ$)

| | V3LYP | | LC-BLYP | MP2 |
|------------------------|------------|---------|---------|---------|
| | 6-311++G** | cc-pVTZ | cc-pVTZ | cc-pVTZ |
| R(C-C) ср. в цикле | 1,393 | 1,389 | 1,392 | 1,374 |
| R(C5-C8) | 1,496 | 1,493 | 1,490 | 1,485 |
| R(C-O) ср. | 1,206 | 1,205 | 1,211 | 1,192 |
| R(C-N) ср. | 1,401 | 1,398 | 1,397 | 1,384 |
| R(C2-Hal16) | 1,911 | 1,907 | 1,879 | 1,871 |
| \angle (C-C-Hal) ср. | 118,9 | 119,0 | 119,0 | 119,0 |
| \angle (N-C-O) ср. | 126,0 | 126,0 | 126,2 | 126,2 |

Продолжение таблицы 1

| | | | | |
|--|-------|-------|-------|-------|
| $\angle(\text{C}-\text{C}-\text{O})$ ср. | 129,3 | 129,3 | 129,1 | 128,9 |
| $\angle(\text{C}-\text{C}-\text{N})$ ср. | 104,7 | 104,7 | 104,7 | 105,0 |
| $\angle(\text{C7N12}-\text{C8})$ | 113,6 | 113,6 | 113,6 | 113,2 |

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (Проектная часть, задание №4.1385.2014К).

РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ ЦЕПОЧЕЧНЫХ СТРУКТУР O–Au–O– ПРИ ОКИСЛЕНИИ СО НА ПОВЕРХНОСТИ Au(321): DFT–ИССЛЕДОВАНИЕ В ПЕРИОДИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Логинова А.С.¹, Игнатов С.К.¹, Москалева Л.В.²

¹Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского

²Институт прикладной и физической химии, Университет Бремена, Германия

В отличие от компактно-металлического золота, наноструктурные формы золота являются высокоактивными и селективными катализаторами низкотемпературного окисления [1-2]. Ещё более интересными свойствами обладают катализаторы на основе сплавов золота с другими, менее благородными, металлами, например, серебром. Атом серебра имеет близкий к золоту атомный радиус, и оно образует с золотом непрерывные твердые растворы при любых соотношениях. Вследствие этого каталитические свойства нанокатализаторов на основе Au-Ag можно варьировать путем изменения концентрации Ag в сплаве [3]. Недавно было сообщено о более высокой по сравнению с монометаллическими катализаторами каталитической активности наночастиц Au-Ag в эпексидировании алкенов, низкотемпературной реакции окисления СО и других реакциях [4-5]. Для понимания природы этого синергетического эффекта в биметаллической каталитической системе, важно сравнить механизмы окисления на металлических поверхностях Au, Ag и Au-Ag. В настоящей работе мы рассматриваем термодинамические характеристики и реакционную способность цепочечных структур (–O–Au–O–), которые как показано ранее, являются наиболее энергетически выгодной формой адсорбированного кислорода на поверхностях Au и Ag. Моделью поверхности в квантово-химических расчетах являлась кристаллографическая плоскость Au(321), для которой характерны ступени и террасы. DFT расчеты проводились с использованием обменно-корреляционного функционала PBE в базе плоских волн с

градиентной коррекцией [6]. Элементарная ячейка содержит 28 атомов золота. Была изучена относительная стабильность двух различных типов цепочечных структур при координации CO на поверхности Au(321). Было изучено 2 пути атаки CO на поверхности: 1 – когда CO располагается прямо на цепи –O–Au–O–; 2 – когда CO локализуется рядом с цепочкой. Поверхностные оксидные структуры, состоящие из цепей (–O–Au–O–) оказываются термодинамически более выгодными и стабильны при комнатной температуре и парциальном давлении O₂ выше 10⁻³ атм [6]. Эти цепи могут реагировать с адсорбционным CO путем многостадийной реакции с барьером активации лимитирующей стадии.

Литература

1. Haruta M., Kobayashi T., Sano H., Yamada N. // Chem. Lett. 1987. V. 16. P. 405-408.
2. Hughes M.D., Xu Y.-J., Jenkins P., McMorn P., Landon P., Enache D.I., Carley A.F., Attard G.A., Hutchings G.J., King F., Stitt E.H., Johnston P., Griffin K., Kiely C.J. // Nature. 2005. V. 437. P. 1132-1135.
3. Moskaleva L.V., Rohe S., Wittstock A., Zielasek V., Kloner T., Neyman K.M., Boumer M. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2011. V. 13. P. 4529.
4. Liu J.-H., Wang A.-Q., Chi Y.-S., Lin H.-P., Mou C.-Y. // J. Phys. Chem. B. 2005. V. 109. P. 40-43.
5. Reuter K., Scheffler M. // Phys. Rev. B. 2001. V. 65. P. 035406
6. Moskaleva L.V., Weiss T., Kloner T., Boumer M. // J. Phys. Chem. C. 2015. V. 119. P. 9215-9226.

ВЛИЯНИЕ ОРИЕНТАЦИОННОЙ ИЗОМЕРИИ НА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ И КОНЦЕНТРАЦИИ НЕЙТРАЛЬНЫХ КЛАСТЕРОВ ВОДЫ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ

ШИРОКОВА Е.А., ВОРОНОВА О.С., ИГНАТОВ С.К., РАЗУВАЕВ А.Г.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Кластеры воды являются объектом многочисленных экспериментальных и теоретических исследований, поскольку информация об их свойствах представляет значительный интерес для описания процессов в атмосфере Земли. В частности, они влияют на процессы баланса энергии и таким образом вносят вклад в явления глобального потепления и изменения климата. Кроме того, предполагается, что кластеры воды могут участвовать в различных газофазных процессах, например, гидролиза и гидратации, приводя к их значительному ускорению, являясь «газофазными катализаторами» этих реакций. Вопрос о влиянии кластеров воды на скорость реакций гидролиза осложняется тем, что

имеет место значительный разброс в оценках их термодинамических характеристик и равновесных концентраций. В частности, неясным остается вопрос о влиянии возможности образования большого числа изомеров (изомерии сетки водородных связей) и структурного разнообразия кластеров на их термодинамические характеристики.

В данной работе мы сравниваем результаты расчета термодинамических характеристик кластеров $(\text{H}_2\text{O})_6$ в конформациях «клетка», «призма» и «книга» при учете различных способов образования сетки водородных связей и различных способах усреднения термодинамических характеристик. С этой целью квантовохимическим методом проведена оптимизация геометрии и рассчитаны колебательные частоты всех возможных ориентационных изомеров кластера $(\text{H}_2\text{O})_6$ в указанных конформациях: 27 изомеров конформации «клетка», 10 изомеров конформации «призма», 96 изомеров конформации «книга». Исходные структуры, геометрия которых оптимизировалась в ходе расчетов, выбирались на основе теории графов с помощью оригинальной программы, генерирующей ориентационные изомеры для заданного скелета кислородных атомов. Расчеты геометрических и термодинамических параметров кластеров осуществлялись методом B3LYP/6-311++G(2d,2p). Термодинамические функции рассчитывались в приближении «жесткий ротатор – гармонический осциллятор». Дополнительно проводился расчет термодинамических характеристик наиболее выгодных изомеров высокоточным экстраполяционным методом G4. Индивидуальные результаты расчета усреднялись с использованием различных схем термодинамического взвешивания.

Для каждого изомера в отдельности и для всей выборки из 133 структур были вычислены средние значения термодинамических функций и получены распределения структур по энергиям. Результаты сравнивались со стандартной схемой оценки термодинамических функций по расчету глобального минимума методом G4. На основе рассчитанных термодинамических параметров были вычислены константы равновесия реакций образования кластеров $(\text{H}_2\text{O})_6$ и концентрации кластеров в газовой фазе.

Результаты расчетов показывают, что учет ориентационной изомерии с образованием большого числа изомеров оказывает сильное влияние на равновесную концентрацию гексамера. В частности, концентрации, рассчитанные по термодинамическим функциям глобального минимума, на 1-2 порядка меньше концентраций, рассчитанных с учетом существования всех 133 рассмотренных изомеров.

Таким образом, можно сделать вывод, что для расчета термодинамических функций и равновесных концентраций кластеров воды в газовой фазе необходимо учитывать явление ориентационной изомерии сетки водородных связей. Правильность этого вывода дополнительно анализируется в ходе прямого моделирования образования комплексов SPC-модели воды методом классической молекулярной динамики.

СТРУКТУРА И ДИНАМИКА СОЛЬВАТНЫХ ОБОЛОЧЕК КОМПЛЕКСОВ МЕДИ(II) С N,O- СОДЕРЖАЩИМИ ЛИГАНДАМИ

БУХАРОВ М.С., ГИЛЯЗЕТДИНОВ Э.М., СЕРОВ Н.Ю., ШТЫРЛИН В.Г.

Химический институт им. А.М. Бутлерова Казанского федерального университета,

Структура ближайшего окружения меди(II) в растворах комплексных соединений представляет значительный теоретический и практический интерес, поскольку многие биологические процессы протекают с участием медьсодержащих ферментов, для понимания функционирования которых необходимо исследование их активных металлоцентров и модельных комплексов. Однако ключевой вопрос о координационном числе меди(II) в растворах до сих пор остается дискуссионным и требует дальнейшего изучения.

Для прояснения вопроса о сольватном окружении меди(II) в растворе в настоящей работе методами ЭПР, многочастотной ЯМР-релаксации и квантовой химии было исследовано гидратное окружение ряда моно- и бис-комплексов меди(II) с аминокислотами (глицином, D-аланином, D-валином, L-серином, L-аспарагиновой кислотой, L-глутаминовой кислотой, L-лизинном, L-пролином, N-метилглицином), ди- и триглицином и иминодиуксусной кислотой в водной среде на фоне нитрата калия различной концентрации [1, 2]. В результате получены оценки структурных и динамических параметров первой и второй гидратных оболочек данных комплексных соединений. Установлено, что практически во всех изученных комплексах лишь одна молекула воды координируется в аксиальное положение центрального иона и, таким образом, медь(II) в этих соединениях пентакоординирована. Лишь в комплексе с иминодиуксусной кислотой, Cu(II)DA, оба аксиальных положения могут быть заняты молекулами растворителя. Полученные результаты подтверждены квантово-химическими расчетами методом DFT по программе GAMESS с применением различных функционалов и базисных наборов. При этом экспериментальные значения расстояний от меди(II) до аксиальной молекулы воды, полученные методом ЯМР-релаксации в данной работе и сообщенные по данным РСА в литературе, наилучшим образом согласуются со значениями, рассчитанными методами квантовой химии, при использовании функционала CAM-B3LYP и базисного набора TZVP.

На основе совокупности полученных данных сделано заключение, что донорная сила экваториальных лигандов и трансвливание существенно сказываются на аксиальном связывании молекул растворителя. Показано, что увеличение донорной силы лигандов ослабляет такое связы-

вание и делает пентакоординацию меди(II) в водном растворе более предпочтительной. Однако взаимное трансвлиание экваториальных лигандов может облегчить аксиальную координацию.

Литература

1. Bukharov M.S., Shtyrlin V.G., Mukhtarov A.Sh., Mamin G.V., Stapf S., Mattea C., Krutikov A.A., Il'in A.N., Serov N.Yu. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2014. V. 16, N 20. P. 9411-9421.

2. Bukharov M.S., Shtyrlin V.G., Mamin G.V., Stapf S., Mattea C., Mukhtarov A.Sh., Serov N.Yu., Gilyazetdinov E.M. // Inorg. Chem. 2015. V. 54, N 20. P. 9777-9784.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 16-33-00691.

ТЕРМОДИНАМИКА РЕАКЦИИ ГРИНЬЯРА НА ПРИМЕРЕ СИСТЕМЫ EtBr + Mg_n

Беляев С.Н., Пантелеев С.В., Игнатов С.К.

Научно-исследовательский институт химии ННГУ им. Н. И. Лобачевского

Синтез реактива Гриньяра – сложный многостадийный процесс, включающий в себя адсорбцию окислителя на поверхности металла (кластера), разрыв связи R-X (R – органический или элементоорганический радикал, X – атом галогена) с образованием свободных ион-радикальных пар, формирование полимагнийорганического производного и десорбцию полядерного комплекса с образованием мономагнийорганического производного. Данный гетерогенный процесс в настоящее время является предметом дискуссий, так как механизм взаимодействия металлического магния с галогенпроизводными в среде координирующего растворителя доподлинно неизвестен.

Методом функционала плотности (B3PW91/6-311++G(2d,2p)) изучены структуры, энергии, термодинамические функции и спектральные характеристики интермедиатов и переходных состояний элементарных реакций этилбромидом с оптимизированными кластерами Mg_n (n = 2-10), моделирующими твердую поверхность металлической фазы. Предложена последовательная многостадийная схема процесса, включающая адсорбцию реагентов на внешних атомах кластера, химическое взаимодействие с образованием реактива Гриньяра и десорбцию продуктов в объем.

Наиболее энергетически выгодный маршрут реакции Гриньяра – радикальный, протекающий практически безбарьерно (энергия активации образования Et• составляет несколько ккал/моль), при этом последняя

но каталитическое действие имидазола [2], а также с помощью спектроскопии ЯМР ³¹P изучены превращения частиц, содержащих различные формы фосфора [2, 3]. Для объяснения образования олигопептидов в исследованной системе был предложен механизм пептидного синтеза [4], который включает образование трифосфатов глицина и имидазола, а также циклического фосфата глицина как активных интермедиатов в процессе синтеза олигопептидов.

Настоящая работа является продолжением упомянутых исследований и направлена на более детальное понимание механизма синтеза олигопептидов в присутствии триметафосфата натрия, а также на установление роли имидазола в катализе.

По программе GAMESS [5] методом DFT на уровне CAM-B3LYP/TZVP с учетом эффектов среды в модели растворителя С-PCM были оптимизированы структуры реагентов, интермедиатов и продуктов реакции образования олигопептидов из различных аминокислот. Все полученные структуры были проверены на отсутствие мнимых частот, которое является необходимым условием для энергетических минимумов. Для некоторых стадий структуры переходных состояний были оптимизированы по методике, схожей с описанной в литературе [6]. Полученные при этом структуры были проверены на наличие только одной мнимой частоты, колебание по которой соответствует разрыву старой или образованию новой связи.

На основании выполненных расчетов предложен более детальный механизм образования олигопептидов в пребиотических условиях.

Литература

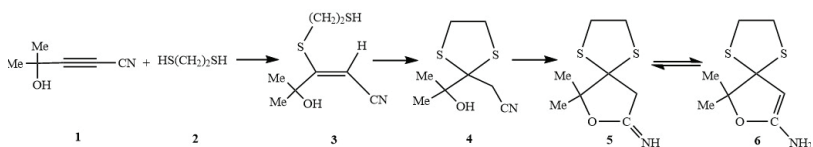
1. Серов Н.Ю., Штырлин В.Г. // «Материалы и технологии XXI века»: Тез. докл. Всерос. школы-конф. студентов, аспирантов и молодых ученых. Казань, 2014. С. 318.
2. Serov N.Yu, Shtyrlin V.G. // EuropaCat XII. Catalysis: Balancing the use of fossil and renewable resources. European Congress on Catalysis. Kazan. Novosibirsk: Boreskov Institute of Catalysis, 2015. P. 1931-1932.
3. Серов Н.Ю., Штырлин В.Г. // «Биомедицина, материалы и технологии XXI века»: Тез. докл. I Междунар. школы-конф. студентов, аспирантов и молодых ученых. Казань, 2015. С. 546.
4. Серов Н.Ю., Штырлин В.Г. // Сб. статей VII Всероссийской молодежной школы-конференции «Квантово-химические расчеты: структура и реакционная способность органических и неорганических молекул». Иваново, 2015. С. 270-271.
5. Schmidt M.W., Baldridge K.K., Boatz J.A., Elbert S.T., Gordon M.S., Jensen J.H., Koseki S., Matsunaga N., Nguyen K.A., Su S.J., Windus T.L., Dupuis M., Montgomery J.A. // J. Comput. Chem. 1993. V. 14, N 11. P. 1347-1363.
6. Jensen J.H. Molecular Modeling Basics. CRC Press, 2010. 166 p.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПРИСОЕДИНЕНИЯ 1,2-ЭТАНДИТИОЛА К 4-ГИДРОКСИ-4-МЕТИЛ-3- ПЕНТИНОНИТРИЛУ

Чиркина Е.А., Малькина А.Г., Кривдин Л.Б.

Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН

В молекуле 4-гидрокси-4-метил-3-пентинонитрила (1) содержится несколько реакционных центров и при его взаимодействии с дитиолом можно ожидать образования различных соединений: нитрила (3), дитиолана (4) и спироциклов (5), (6).



Реакция рассмотрена в трех приближениях: первое – взаимодействие неионизированных форм 1,2-дитиола и цианацетиленового спирта (1+2); второе – неионизированные формы взаимодействующих молекул с добавлением в расчетное пространство молекулы КОН (1+2+KOH); третье – ионизированная форма атакующего реагента в виде 1,2-дитиолят-аниона (1+2a).

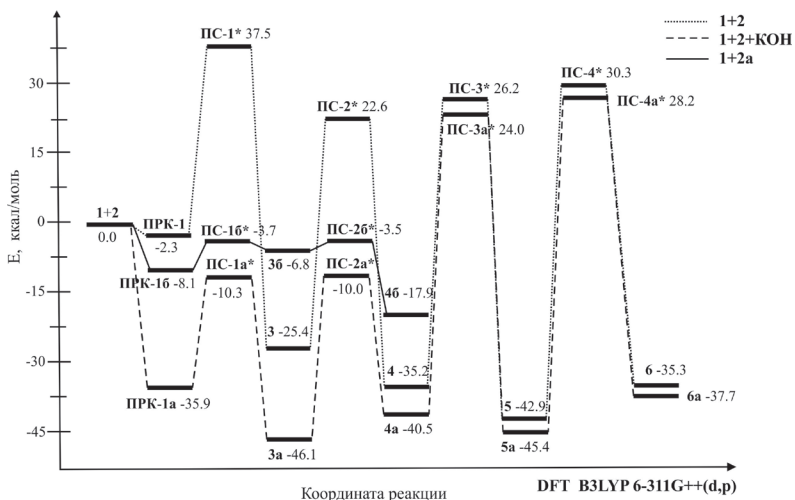


Рисунок 1. Энергетический профиль реакции присоединения 1,2-этандитиола (2) к 4-гидрокси-4-метил-3-пентинонитрилу (1)

Предложенный теоретический механизм взаимодействия 1,2-дитиола с цианацетиленовым спиртом в первом и втором приближениях трудно реализуем ввиду высоких энергетических барьеров. В третьем приближении барьеры существенно снижаются и составляют 3-5 ккал/моль, что позволяет сделать вывод о том, что присоединение дитиола к цианацетиленовому спирту в щелочной среде протекает с участием ионизированной формы дитиола через образование промежуточного винильного карбаниона, претерпевающего внутримолекулярную циклизацию с замыканием 1,3-дитиоланового цикла. К сожалению, стабилизировать анионные структуры спироциклов (5) и (6) не удалось.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ № 14-03-00218.

ПОСТРОЕНИЕ СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ГАЛОИДОЗАМЕЩЕННЫХ БЕНЗОФЕНОНА И ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ИХ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ

БАБКОВ Л.М.¹, БОЙКОВ В.А.¹, ДАВЫДОВА Н.А.²

¹Саратовский государственный университет

²Институт физики национальной академии наук Украины

Построение структурно-динамических моделей молекулярных систем является одной из основных задач молекулярного моделирования. Современное молекулярное моделирование использует неэмпирические и гибридные квантовые методы, развивающиеся и реализуемые в виде сервисных пакетов программ. Точность, с которой рассчитываются молекулярные параметры: минимальная энергия, геометрия, дипольные моменты, тензор поляризуемости, силовые постоянные – значительно возросла, что позволяет с успехом использовать их в теоретической спектроскопии.

В докладе представлены результаты молекулярного моделирования галоидозамещённых бензофенона: 4,4'-хлорбензофенона (4,4'-ClBP) и 3-бромбензофенона (3-BrBP), которые иллюстрируют возросшие возможности молекулярного моделирования в приложении к исследованию структуры и свойств вещества, проявляющихся, в частности, в его колебательных спектрах инфракрасного поглощения (ИКС) и комбинационного рассеяния (СКР).

Галоидозамещённые бензофенона обладают полиморфизмом. Бромзамещённые образуют аморфное состояние (стеклофазу). Представляет интерес выяснение строения этих соединений в различных фазовых состояниях.

На данном этапе при нормальных условиях измерены колебательные спектры 4,4'-ClBP и 3-BrBP в диапазонах 500-4000 см⁻¹ (ИКС) и 0-4000 см⁻¹ (СКР). Методом теории функционала плотности

(ТФП) V3LYP/6-31G(d), реализованного в программном комплексе GAUSSIAN'03 проведено моделирование структуры и колебательных спектров свободных молекул 4,4'-ClBP и 3-BrBP в гармоническом приближении. Рассчитаны энергии, геометрические параметры, дипольные моменты, тензоры поляризуемости, ИКС и СКР обеих молекул.

ТАБЛИЦА 1. ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ 4,4'-CLBP И 3-BRBP

| Связь, Å | 4,4'-ClBP | Связь, Å | 3-BrBP |
|----------|-----------|----------|--------|
| C=O | 1.22 | C=O | 1.22 |
| C-Cl | 1.75 | C-Br | 1.90 |

Рассчитанные параметры соответствуют принятым в структурной химии. Влияние галоидозамещения на геометрию молекул носит локальный характер: длины связей C-C, ближайших к заместителю, различаются не более чем на 0,01 Å. Длина связи C=O одинакова в молекулах 4,4'-ClBP и 3-BrBP, длины связей C-Cl и C-Br различаются на 0,15 Å.

Дана интерпретация измеренных колебательных спектров. Установлено влияние смещений атомов Cl и Br на нормальные колебания фенольных колец, которое оказалось значительным.

СТРУКТУРА, ТЕРМОДИНАМИКА И СТЕРЕОСЕЛЕКТИВНОСТЬ ОБРАЗОВАНИЯ ГОМО- И ГЕТЕРОЛИГАНДНЫХ КОМПЛЕКСОВ В СИСТЕМАХ ЦИНК(II) L/D/DL-АМИНОКИСЛОТЫ

Гилязетдинов Э.М., Серов Н.Ю., Романова Л.А.,
Бухаров М.С., Штырлин В.Г.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова
Казанского федерального университета*

Моделирование структур, термодинамики и стереоселективности образования координационных соединений металлов с аминокислотами представляет значительный интерес для развития координационной, бионеорганической химии и, в особенности, для понимания важнейших процессов молекулярного распознавания в биологических системах. В этой связи представляется целесообразным выявить закономерности образования различных аминокислотных комплексов в ряду соседних металлов: никель – медь – цинк. Из них соединения цинка(II) являются наименее изученными, в то время как они моделируют многие цинксодержащие ферменты и представляют большую ценность для понимания механизмов функционирования последних.

В настоящей работе методом рН-метрии в сочетании с математическим моделированием по новой программе STALABS [1] исследованы

термодинамика и стереоселективность образования гомо- и гетеролигандных комплексов в бинарных и тройных системах цинк(II) – *L/D/DL*-аминокислоты (гистидин, HisH; серин, SerH, треонин, ThrH, метионин, MetH; цистеин, CysH₂) на фоне 1 М KNO₃ при 25.0 °С. Структуры ряда обнаруженных комплексов оптимизированы квантово-химическими расчетами методом DFT по программе GAMESS [2] на уровне CAM-B3LYP/TZVP с учетом эффектов среды в модели растворителя C-PCM.

Выявлены стереоселективные эффекты комплексообразования в ряде систем, наиболее значительный из которых установлен для гетеролигандного комплекса Zn(His)(Met) с доминированием мезо-формы (DL). В соответствии с результатами квантово-химических расчетов последний факт объяснен d-π взаимодействием с переносом электронной плотности по транс-координате с p-орбитали донорного атома серы Met- через d-орбиталь центрального иона на π-акцепторную систему имидазольного кольца His⁻.

На основе анализа полученных результатов в сопоставлении с соответствующими данными для меди(II) и никеля(II) обсуждается совокупность факторов, контролирующих стереоселективность образования аминокислотных комплексов цинка(II) в водных растворах.

Литература

1. Krutikov A.A., Shtyrlin V.G., Spiridonov A.O., Serov N.Yu., Il'yin A.N., Gilyazetdinov E.M., Bukharov M.S. // Journal of Physics: Conference Series. 2012. V. 394. 012031 (P. 1-6).

2. Schmidt M.W., Baldrige K.K., Boatz J.A., Elbert S.T., Gordon M.S., Jensen J.H., Koseki S., Matsunaga N., Nguyen K.A., Su S.J., Windus T.L., Dupuis M., Montgomery J.A. // J. Comput. Chem. 1993. V. 14, N 11. P. 1347-1363.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 16-33-00674.

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ ТРИФЕНИЛФОСФИТА И ИХ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ

БАБКОВ Л.М.¹, ИВЛИЕВА И.В.¹, ДАВЫДОВА Н.А.²

¹*Саратовский государственный университет*

²*Институт физики национальной академии наук Украины*

Одной из задач современного научного направления, названного молекулярным моделированием, является построение структурно-динамических моделей молекулярных систем. Основой молекулярного

моделирования стали неэмпирические и гибридные квантовые методы и их компьютерная реализация в виде сервисных информационных технологий, активно развивающиеся в последние десятилетия. Квантовые методы обладают рядом преимуществ по сравнению с традиционными классическими подходами, основанными на решении прямых и обратных спектроскопических задач.

В докладе представлены результаты молекулярного моделирования трифенилфосфита (ТФФ) – объекта, представляющего интерес для фундаментальной науки и приложений. Он обладает полиморфизмом, аморфным состоянием, особым состоянием, «глассиал», промежуточным между аморфным и кристаллическим, по поводу которого нет окончательного мнения – отдельное это состояние или нет. Из приложений отметим применение ТФФ в качестве лиганда в органометаллической химии.

Для детального исследования фазовых состояний использованы методы квантовой химии и колебательной спектроскопии (эксперимент, теория). Измерены спектры ИК поглощения (ИКС), комбинационного рассеяния (СКР) в различных фазовых состояниях и построены структурно-динамические модели ТФФ. Спектры ИК поглощения и СКР ТФФ в полиморфных состояниях, в стеклофазе, «глассиал» и жидкости отличаются друг от друга, что обусловлено различием элементарных ячеек в кристаллических модификациях, в частности, изменением конформационного состава образца. Изменение конформации молекулы ТФФ обосновано результатами работы [1], в которой методами квантовой химии установлено строение трех наиболее вероятных конформеров, различающихся по симметрии и ориентации фенильных колец и наличие Н-комплексов в виде димеров со слабой Н-связью.

Моделирование проведено с использованием метода теории функционала плотности (ТФП) B3LYP/6-31G(d), реализованного в программном комплексе GAUSSIAN'03. Рассчитаны минимальные энергии, геометрии, дипольные моменты, тензор поляризуемости, ИКС и СКР трех конформеров, различающихся ориентациями фенильных колец относительно группы PO₃ и пробного Н-комплекса «ТФФ-бензол».

Результаты моделирования колебательных спектров подтвердили достоверность и обоснованность результатов работы [1]. На их основе интерпретированы измеренные спектры, объяснены различия в областях 710-750, 850-890, 1180-1220 см⁻¹ (ИКС) и 710-760, 1210-1260 см⁻¹ (СКР), в которых содержатся полосы, являющихся спектрально-структурными признаками ТФФ. Обосновано одно из положений работы [1], в соответствии с которым конформеры ТФФ могут объединяться в димеры со слабой водородной связью. Установлено, что энергия её невелика, а влияние на геометрию и колебательные спектры ИФФ незначительно и носит локальный характер.

Литература

1. Hernandez O.J., Boucekkine A., Hedoux A. // J. Phys. Chem. A. 2007. V. 111. P. 6952-6958.

**МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И АНАЛИЗ
ОПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК УГЛЕРОДНЫХ
НАНОЧАСТИЦ И АЗОТИСТЫХ ОСНОВАНИЙ ДНК**

БОКАРЕВ А.Н., ПЛАСТУН И.Л.

*Саратовский государственный технический университет
им. Гагарина Ю.А.*

В настоящее время множество исследований в различных сферах науки связано с изучением биомолекул и их взаимодействия с углеродными наночастицами. В частности, существенный интерес представляет возможность использования углеродных наночастиц в качестве ДНК-сенсоров и ДНК-маркеров [1]. Основной целью нашей работы является исследование с помощью численного моделирования оптических параметров азотистых оснований без добавления примесей и с добавлением углеродных наночастиц. Для расчётов мы использовали программный комплекс Gaussian 09, который традиционно используется для решения задач молекулярного моделирования в различных сферах вычислительной физики и химии.

Азотистые основания – это органические соединения, являющиеся основными структурными составляющими ДНК и РНК. В наших исследованиях мы рассматриваем два основания – аденин ($C_5H_5N_5$) и тимин ($C_5H_6N_2O_2$) (рис. 1), которые образуют комплементарную пару. Данные соединения играют важную роль и выполняют множество функций в биохимии.

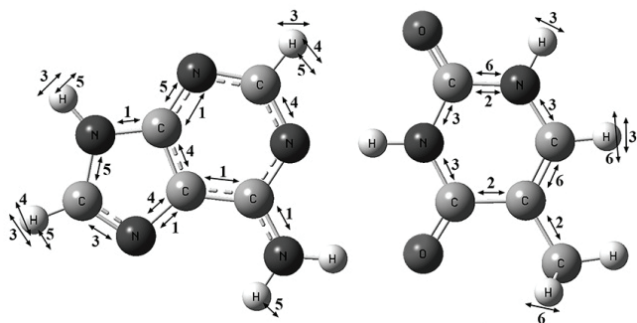


Рис. 1. СТРУКТУРА АДЕНИНА (СЛЕВА) И ТИМИНА (СПРАВА).

В ходе исследований были рассчитаны спектры комбинационного рассеяния для комплементарной пары без примесей (рис. 2), а также с добавлением наночастиц. Для вычислений использовался метод V3LYP. Полученные нами результаты продемонстрировали хорошее согласие со спектрами, полученными в результате экспериментов (рис. 2). На рисунках 1 и 2 цифрами обозначены выявленные в результате исследований колебания связей между атомами.

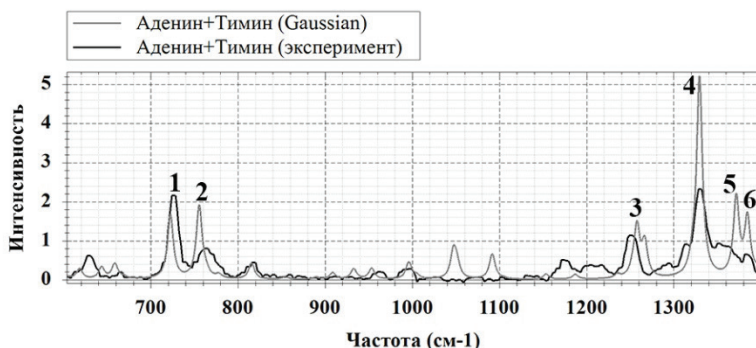


Рис. 2 Численный и экспериментальный спектры комбинационного рассеяния комплементарной пары Аденин-Тимин.

Литература

1. Chakravarty P., Qian W., El-Sayed M., Prausnitz M. // Nature Nanotechnology. 2010. V. 5. P. 607–611.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ЗАМЕЩЕННЫХ β -D-ГЛЮКОЗЫ НА ОСНОВЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ ИХ СТРУКТУРЫ И ИК СПЕКТРОВ

Бабков Л.М.¹, Ивлиева И.В.¹, Моисейкина Е.А.¹,
Королевич М.В.²

¹Саратовский государственный университет

²Белорусский государственный аграрный технический университет

Активное развитие неэмпирических квантовых методов и их компьютерная реализация в виде сервисных информационных технологий стали основой современного молекулярного моделирования. Квантовые методы позволили приступить к теоретической интерпретации коле-

бательных спектров молекулярных систем, для которых классический подход не может быть применен из-за отсутствия данных эксперимента по колебательным спектрам изотопозамещенных аналогов или надежной интерпретации спектров исследуемого соединения. В последнее время квантовые методы часто используют для устранения имеющихся неоднозначностей в интерпретации колебательных спектров ряда соединений, данной ранее на основе результатов, решений механической и электрооптической задач в рамках классической схемы.

К таким объектам относятся замещенные β -D-глюкозы. Роль методов математического моделирования в их исследовании сложно переоценить. Исследование их инфракрасных спектров (ИКС) относится к ряду наиболее трудных проблем молекулярной спектроскопии углеводов из-за их сложного диффузного характера.

Целью работы стало изучение изменений, происходящих в структуре и ИКС замещенных глюкозы при переходе от β -D-глюкозы (I) к метил- β -D-глюкопиранозиду (II) и к 2,3-ди-O-нитро-метил- β -D-глюкопиранозиду (III) на основе методов математического моделирования. При переходе от I к II происходит замещение атома водорода одной из гидроксильных групп метильной группой, при переходе к III атомы водорода двух гидроксильных групп замещаются нитрогруппами.

С помощью метода теории функционала плотности (ТФП) B3LYP/6-31G(d), реализованного в программном комплексе GAUSSIAN'03, построены структурно-динамические модели изолированных молекул II и III и их Н-комплексов (наиболее вероятных димеров II, ассоциированных различными способами, и моделирующих их Н-комплексов III): рассчитаны параметры АП и, на их основе, частоты и интенсивности нормальных колебаний в ИКС.

В ходе анализа полученных результатов установлено, что исследуемые соединения II и III не обладают симметрией. Их пиранозные кольца имеют конформацию «кресло». При переходе от II к III изменение длин связей пиранозного кольца крайне незначительно и не превышает 0,03 Å.

Дана интерпретация ИК спектров. Установлены спектрально-структурные признаки соединений II и III: полосы, возникающие вследствие замещения атомов водорода в I на метильную группу или нитрогруппу.

Теоретически обосновано наличие водородных связей, которым в ИКС соответствуют широкие бесструктурные полосы в области выше 3000 см⁻¹. Выяснено, что в Н-комплексах реализованы водородные связи с энергиями от 5 до 10 ккал/моль (связь средней силы). Длина водородных мостиков лежит в пределах 2,7- 3,0 Å. При образовании Н-связей изменения геометрии носят локальный характер: длины связей С-О и О-Н, прилегающих к водородному мостику, возрастают не более чем на 0,010 Å. Геометрия пиранозного цикла не претерпевает изменений.

СКРИНИНГУЮЩАЯ СИСТЕМА НЕВРОЛОГИЧЕСКОЙ ДИАГНОСТИКИ НА ОСНОВЕ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ МОДЕЛИ

Индюхин А.А.

ООО «Престиж»

Отправной точкой работы [1] были исследования функций корреляции (ФК) электроэнцефалограммы (ЭЭГ), проведенные акад. М.Н. Ливановым с сотрудниками [2]. Записи ЭЭГ по нескольким каналам фиксировались на фотопленку, по меткам времени снимались значения сигналов и рассчитывался коэффициент корреляции по Пирсону:

$$r_{jk} = \frac{\sum_{i=1}^N u_{jk} u_{ki}}{N-1} \quad (1)$$

где: r_{jk} – коэффициент корреляции;
 u_j, u_k – значения сигналов ЭЭГ в j -том и k -том каналах регистрации;

N – количество временных отсчетов сигналов.

Для получения ФК $R(\tau)$ операция многократно повторялась со сдвигом одного сигнала относительно другого на фиксированный интервал времени τ . Восхищение огромным объемом ручных вычислений заставило задуматься над тем, какая же получалась «добыча» (по В. Маяковскому: в грамм добыча, в годы труды)? По полученной ФК можно судить о:

- а) степени связи двух процессов – по коэффициенту корреляции $R(0)$;
- б) временной глубине связи – по скорости затухания $R(\tau)$;
- в) наличии общей периодической составляющей – если $R(\tau)$ не затухает.

При этом остается необходимость визуального анализа полученного результата.

Неудивительно, что у исследователей ЭЭГ интерес к ФК практически угас, и их расчет часто не входит в опции компьютерных диагностических систем [3].

Между тем, произведение сигналов в (1), полученное уже на компьютере и доступное для автоматического анализа, представляет собой функцию, в достаточной мере характеризующую взаимосвязь различных точек коры, с которых регистрируется ЭЭГ.

Была предложена система неврологической диагностики, в которой для всех возможных пар отведений определяется коэффициент r_{jk} и частота f_{jk} доминирующего ритма в сигнале

$$U_{jk} = u_j(t)u_k(t) \quad (2)$$

Полученные для пациента 960 чисел (по 4 значения g_{jk} и f_{kj} в четырех стандартных частотных диапазонах – дельта, тета, альфа, бета, помноженные на количество возможных пар отведений – 120 при 16 точках регистрации) сравниваются с заранее определенными групповыми параметрами, что позволяет по определенному логическому правилу отнести пациента к определенной неврологической группе.

В качестве опорных групп были выбраны дети с нарушениями слуха, зрения, задержкой психического развития и нормальные дети.

Дети были выбраны из таких соображений, что именно у них отмечена значительная возрастная динамика параметров межкорковых связей, а диагностика неврологических нарушений в раннем возрасте дает наибольший эффект в плане дальнейшей реабилитации.

Литература

1. Индюхин А.А. Скрининговая система диагностики неврологических нарушений на основе самонастраивающегося фильтра. Дисс. ... канд. техн. наук. – Курск, 2013.
2. Ливанов М.Н. Пространственно-временная организация потенциалов и системная деятельность головного мозга. М., Наука, 1989. - 400 с.
3. Комплекс компьютеризированный для анализа и картирования электрической активности головного мозга «НЕЙРОКАРТОГРАФ-01-МБН». Руководство пользователя. М.: Научно-медицинская фирма МБН, 2003. – 100 с.

ИЕРАРХИЧЕСКАЯ СИСТЕМА МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ БИОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ГОЛОВНОГО МОЗГА

Кондратьева П.В., Коржук Н.Л., Индюхин А.Ф.

Тулский государственный университет

Разработка математических моделей электроэнцефалограммы (ЭЭГ) до настоящего времени преследовала узкие цели – демонстрационные и учебные [1]. Отсутствие единого методического подхода к анализу фоновой и вызванной активности привело к аппаратному разделению соответствующих диагностических систем.

Выделение достоверных признаков неврологических нарушений, старческой деменции, наркозависимости, профессиональной пригодности спортсменов, диспетчеров, операторов, построение нейроинтерфейса, полиграфа можно осуществить на основе математической модели ЭЭГ, структура и параметры которой определяются в ходе настройки в реальном времени.

Модель первого уровня представляет собой уравнения цифрового полосового фильтра, подключенного на выход канала регистрации ЭЭГ:

$$y_i = b_0(u_1 u_2)x_i + b_1(u_1 u_2)x_{i-1} + b_2(u_1 u_2)x_{i-2} - a_1(u_1 u_2)y_{i-1} - a_2(u_1 u_2)y_{i-2}$$

где: x_i, y_i - входной и выходной сигналы фильтра;

a_i, b_i - коэффициенты фильтра;

u_1, u_2 - выходные сигналы первого и второго регуляторов.

Регуляторы изменяют резонансную частоту и полосу пропускания фильтра таким образом, чтобы резонансная частота совпала с частотой доминирующего ритма ЭЭГ, а полоса обеспечивала равенство дисперсии сигнала ЭЭГ с дисперсией сигнала на выходе фильтра при подаче на его вход «белого шума». Структура первого регулятора строится на фазовом детектировании сигнала. Второй регулятор использует вариометры, вычисляющие дисперсию сигнала на входе и выходе фильтра.

По завершении настройки получают аналитические выражения спектра сигнала ЭЭГ (без спектральных преобразований), позволяющие оценивать межкорковые взаимодействия по фоновой ЭЭГ. Настроенный фильтр в компенсационном режиме позволяет в реальном времени выделять вызванную активность коры на единичные внешние стимулы, т.е. многократно повышает информативность метода вызванных потенциалов со всеми вытекающими отсюда перспективами.

Модель второго уровня использует систему фильтров с несимметричными частотными характеристиками для оценки дисперсии высокочастотных и низкочастотных составляющих сигнала ЭЭГ. Периодические методы анализа позволяют автоматизировать диагностику грубой патологии [2], а усложнение структуры регулятора - повысить точность выделения корковых вызванных потенциалов [3].

Модель третьего уровня предназначена для выявления полиритмичных колебаний в ЭЭГ, часто возникающих при неврологических расстройствах (энурез у детей, цефалгии), а предложенный авторами регулируемый генератор позволит регистрировать единичные сенсорные ответы головного мозга на внешний стимул.

Литература

1. Индюхин А.Ф. Обработка электроэнцефалографической информации фильтром с переменными параметрами. Дисс.... канд. биол. наук. – Тула, 2006.
2. Mishina L.M., Indyukhin A.A., Indyukhin A.F., Tarhov N.S. A SUBSYSTEM FOR ELECTROENCEPHALOGRAPHIC DIAGNOSIS OF EPILEPSY // Biomedical Engineering, 2012. - Т. 46. - № 1. - С. 21-24.
3. Способ диагностики вызванного потенциала мозга и устройство для его осуществления (патент РФ № 2502466) / Индюхин А.А., Индюхин А.Ф., Коржук Н.Л., Хадарцев А.А., Жеребцова В.А. Публикация патента: 27.12.2013

МЕТОДЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ПРОГНОЗА МЕЗОМОРФИЗМА У ДИСКООДОБНЫХ ВЕЩЕСТВ РАЗЛИЧНОЙ ХИМИЧЕСКОЙ ПРИРОДЫ

Акопова О.Б.

НИИ Наноматериалов, Ивановский государственный университет

Дискотические мезогены (ДМ) интенсивно исследуются последние 40 лет. Интерес к ним не ослабевает, т.к. они перспективны для применения в нанoeлектронике, сенсорных устройствах, как неподвижные фазы для хроматографии, присадки к смазкам и как объекты для создания общей теории жидкокристаллического (ЖК) состояния вещества. Сейчас их синтезировано около 10 тысяч, что на порядок меньше, чем каламитных ЖК. Остается актуальным вопрос априорного описания ЖК фазового состояния подобных соединений и их целенаправленный синтез. Синтез ДМ обычно многостадийен, требует больших материальных затрат, связан с увеличением нагрузки на окружающую среду, трудоемок. Все это способствует развитию прогностических подходов к созданию ЖК материалов нового поколения с минимальными затратами.

Анализ теоретических работ по компьютерному моделированию и прогнозу мезоморфизма у дископодобных веществ показывает, что исследования ведутся в различных направлениях и различными методами: молекулярной динамики, Монте-Карло, распознавания образов, с использованием непараметрических моделей, молекулярных параметров и оригинальной программы SMP "ChemCard" и др. [1-10].



Модели предлагаемые большинством из теорий и исследуемые численными методами требуют значительных вычислительных затрат, оперируют большим числом эмпирических параметров, не всегда могут про-

гнозировать весь спектр фазовых переходов, практически не учитывают особенности молекулярного строения соединений. Безусловно, все это в определенной степени ограничивает их прогностическую способность и широкое применение.

Метод прогнозирования мезоморфизма дископодобных веществ с помощью молекулярных параметров (MP): K, Kc, Kp, Ka, Ks, Mm, Mr, предложенный в [9, 10], имеет ряд преимуществ перед известными способами, поскольку требует небольших затрат машинного времени при относительно высокой прогностической способности (от 70 до 90 % и выше) и простоте его использования. С помощью этого метода можно проводить поиск новых ДМ с различными типами мезоморфизма. На рис. 1 приведены алгоритмы выделения класса ДМ и подклассов соединений в этом классе мезогенов, проявляющих колончатый (Col), нематический (N), хиральный нематический (N*) и колончатый геликоидальный (ColH) типы мезоморфизма [9, 10].

Литература

1. Pappalardo M., Milardi D., La Rosa C. et al. // Chem. Phys. Lett. 2004. V. 390. P. 511.
2. Berardi R., Orlandi S., Zannoni C. // Liq. Cryst. 2005. V. 32, N 11-12. P. 1427.
3. Orlandi S., Muccioli L., Ricci M. et al. // Chem. Centr. J. 2007. V. 1, N 15. P. 1-13.
4. Шестакова Р.Г., Просочкина Т.Р., Токунова Э.Ф. и др. // ЖОХ. 2006. Т. 76, № 4. С. 648.
5. Потемкин В.А. // Автореферат дисс.... Канд. хим. наук. Челябинск. 1998. 20 с.
6. Белик А.В., Потемкин В.А., Гревцева Ю.Н. // ДАН. 1992. Т. 327, № 2. С. 226-227.
7. Барташевич Е.В. // Автореферат дисс....канд. хим. наук. Челябинск. 2001. 16 с.
8. Соцкий В.В. // ЖК и их практическое использование. 2011. Вып. 3(37). С.76-83.
9. Жидкие кристаллы: дискотические мезогены / Под ред. Н.В. Усолцевой. Иваново: ИВГУ. 2004. 546 с.
10. Акопова О.Б., Акопов Д.А. // Прогр. для ЭВМ «СМР ChemCard» № гос. регистрац. 2012610165, 10.01.2012.

Работа поддержана программой Минобрнауки РФ (грант № 4.106.2014/К)

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТАДИИ ОБРАЗОВАНИЯ СИГМА-КОМПЛЕКСОВ В АРОМАТИЧЕСКОМ НУКЛЕОФИЛЬНОМ ЗАМЕЩЕНИИ

Антонова Е.А., Котов А.Д.

Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова

Широкое применение ароматических нитрилов в качестве полупродуктов и мономеров для полимерных материалов, химических реактивов, исходных соединений для органических красителей обуславливает необходимость поиска методов их получения и функционализации. Цианогруппа, так же как и нитрогруппа, может быть использована для активации аренов к нуклеофильному замещению.

При взаимодействии фталонитрила с фениацетонитрилом в системе ДМСО/NaOH образуется 2,3-бис(2-цианофенил)-2,3-дифенилсукцинамид [1].

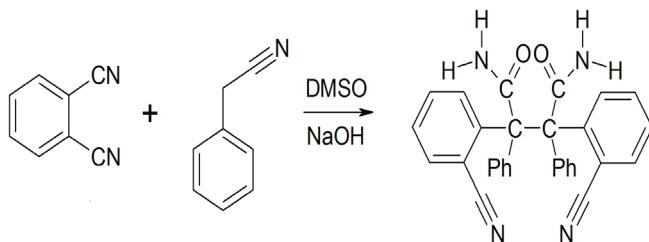


СХЕМА 1.

Структура полученного соединения определена на основании данных комплекса методов анализа. При этом следует отметить, что в масс-спектре полученного продукта отсутствует пик молекулярного иона, что свидетельствует о неустойчивости соединения к электронному удару, а смещение полосы CN-группы в ИК спектре (2202 см^{-1}) объясняется образованием внутримолекулярной водородной связи.

Образование конечного продукта включает в себя ряд стадий, одной из которых является стадия образования σ^{H} или σ^{CN} -комплексов. Для определения структурных и термодинамических параметров этих интермедиатов было проведено их квантово-химическое моделирование с использованием программ МОРАС2012 и Firefly v. 8.0.

Анализ квантово-химических расчетов (табл. 1) всеми использованными методами показал, что σ^{H} комплекс более устойчив. Разница значений ΔE_{total} для структур σ^{H} (a) и σ^{CN} (b)-комплексов составляет от 0.10205 до 0.18920 эВ. На основании вышеизложенного можно предположить, что протекание процесса образования 2,3-бис(2-цианофенил)-2,3-дифенилсукцинамида идет через образование интермедиата а (Рис 1).

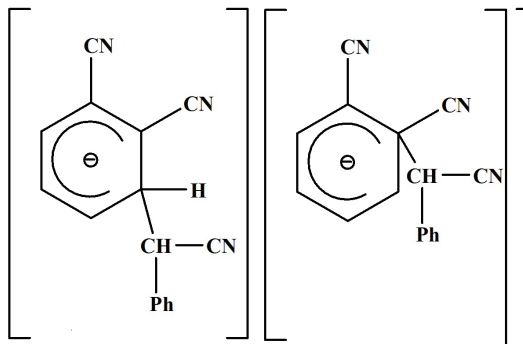


Рис 1. СМОДЕЛИРОВАННЫЕ СТРУКТУРЫ σ^H (А) И σ^{CN} (В)-КОМПЛЕКСОВ.
ТАБЛИЦА 1. ЗНАЧЕНИЯ ЭНЕРГИИ (E_{TOTAL} , эВ) σ^H И σ^{CN} -КОМПЛЕКСОВ.

| Метод \ Структура | PM3 | PM6 | PM7 | B3LYP 6-31+G(d,p) |
|--------------------|-------------|-------------|-------------|----------------------|
| a | -2534.24354 | -2632.52281 | -2658.61114 | -2663.6145 |
| b | -2534.05434 | -2632.42076 | -2658.47397 | -2662.43569 |
| ΔE_{total} | 0.18920 | 0.10205 | 0.13717 | 0.17881 |

Литература

1. Orlov V.Yu., Kotov A.D., Budanov N.A. // Mendeleev communications. 2000. N 2. P. 76-77.

КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ СУЛЬФАМЕТОКСАЗОЛА В СОСТАВЕ ПРЕПАРАТА «БИСЕПТОЛ»

Бирюкова М.М., Геньк Е.А., Золотарева Н.В.,
Кемельбаева Д.Р., Халилова Р.М.

Астраханский государственный университет

«Бисептол» – комбинированный противомикробный препарат, в состав которого входят сульфаметоксазол и триметоприм в соотношении 5:1. Ранее было установлено, что биохимическая активность препарата в значительной степени определяется наличием радикала при сульфо-

намидной группе $-SO_2NH-$. Информация о структуре сульфаниламидов, их конформационной подвижности важна для понимания реакционной способности в процессах нуклеофильного замещения, протекающих с разрывом связей $-C-S-N-$ [1], а также участие их в качестве конкурентных антагонистов в отношении ряда ферментных систем.

Нами была проведена оптимизация сульфаметоксазола, вычислены парциальные заряды на атомах, рассчитаны силовые, термодинамические величины, проанализированы конфигурации молекулярных орбиталей, с целью локализации реакционных центров в молекуле, способных принимать участие в конкурирующих реакциях с ингибитором секреции гормонов гипофиза – меланостатином.

Вычисления сульфаметоксазола проведены РМЗ методом в хартри-фоковском приближении, также с использованием гибридного функционала B3LYP в рамках теории функционала электронной плотности, в качестве базисного набора атомных орбиталей использовался поляризационный валентно-расщепленный базис 6-31G*. Расчеты выполнены в программе Gamess [2]. Координаты атомов молекул были получены из банка данных Pubchem [3].

В процессе вычислительного эксперимента были установлены локальные минимумы на ППЭ, соответствующие возможным конформациям сульфаметоксазола. Полученные результаты не противоречат сведениям, приведенным авторами в работе [4] при изучении конформационной подвижности сульфазина.

В структуре сульфаметоксазола между ароматическим кольцом и радикалом изоксазола наблюдаются наиболее заметные деформационные изменения торсионных углов (от $52,0^\circ$ до $92,3^\circ$ для 5C6S7N8C; от $37,5^\circ$ до $169,2^\circ$ для 6S7N8C9N). Вычислено, что наиболее активными центрами нуклеофильной атаки являются 7N ($\Delta q = -0,57$ а.е.), ${}^{10}O$ ($\Delta q = -0,42$ а.е.), ${}^{20}C$ ($\Delta q = -0,27$ а.е.), 2C ($\Delta q = -0,15$ а.е.), ${}^{15}O$, ${}^{16}O$ ($\Delta q = -0,14$ а.е.) и электрофильной атаки 6S ($\Delta q = 0,64$ а.е.). Планируется исследовать конкурентную реакцию между сульфаметоксазолом и участком Met-Glu-His-Phe-Arg-Trp-Gly меланостатина.

Литература

1. Гиричева Н.И. и др. Изменение структуры молекул замещенных ароматических сульфонамидов при переходе «кристалл – газ» // Квантово-химические расчёты: структура и реакционная способность органических и неорганических молекул. – Иваново: Ивановский государственный химико-технологический университет, 2009. – С. 31-36.
2. Электронный ресурс: <http://www.msg.ameslab.gov/>
3. Электронный ресурс: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>
4. Oganessian E.T., Tvorovskii D.E., Mutsueva S.Kh. // Bioorganic Chemistry. 1999. V. 25, N 8. P. 603-610.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ 1-АМИНОНАФТАЛИН-8-СУЛЬФОКИСЛОТЫ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ И В РАЗЛИЧНЫХ ПО ПОЛЯРНОСТИ РАСТВОРИТЕЛЯХ

Буданова К.А., Лапыкина Е.А., Федоров М.С.

Ивановский государственный университет

1-Аминафталин-8-сульфо кислота является важным объектом промышленной химии и служит основой для синтеза многих фармацевтических препаратов, красителей и моющих средств. Синтез препаратов на основе этого соединения проводят в водно-органических средах.

Выполнены квантово-химические расчеты (DFT/B3LYP/cc-pVTZ) для исследования конформационных свойств молекулы 1-аминонафталин-8-сульфо кислоты в газовой фазе и в различных по полярности растворителях, таких как гептан ($\epsilon = 1,9$), вода ($\epsilon = 80,4$) и формамид ($\epsilon = 108,9$). Проведено сравнение геометрических и электронных характеристик молекулы при переходе от газа к растворителю. Учет сольватации выполнен с использованием модели SMD в программном пакете Gaussian.

Молекула 1-аминонафталин-8-сульфо кислоты имеет 5 конформеров, отличающихся взаимным расположением групп $-\text{NH}_2$ и $-\text{SO}_3\text{H}$, каждому из которых соответствует энантиомер. Самое значительное изменение молекулярных параметров наблюдается при переходе из газовой фазы к полярным растворителям характерно для наиболее энергетически выгодного конформера рассматриваемой молекулы. Данный конформер сохраняет молекулярную форму в неполярном растворителе, но переходит в цвиттер-ионную форму в полярных (рис.1). В результате чего кардинальным образом изменяются как его электронные, так и геометрические характеристики. Например, при переходе из газовой фазы в водную среду изменяются энергии граничных орбиталей (ВЗМО от $-2,0$ до $-1,8$ эВ; НСМО от $-6,4$ до $-6,5$ эВ), поляризуемость (α_{xx} : от $299,3$ до $296,2$ см³, α_{yy} от $310,5$ до $307,9$ см³, α_{zz} от $132,8$ до $130,9$ см³), длины связей C-S (от $1,807$ до $1,812$ Å), C-N (от $1,419$ до $1,467$ Å), S=O (от $1,441$ до $1,468$ Å). В молекулярной форме длины связей S-O и S=O существенно отличаются, в то время как в цвиттер-ионной форме фрагмент SO_3^- имеет три близкие по длине связи S-O. Изменение длин связей сопровождается уменьшением валентного угла $\angle \text{O-S-O}$. Связи C-N и N-H в образовавшемся фрагменте NH_3^+ удлиняются. В результате происходит значительное увеличение дипольного момента молекулы в полярных растворителях на 9 Дебай по сравнению с газовой фазой в отличие от неполярного растворителя, где эта разница не превышает 1 Дебай.

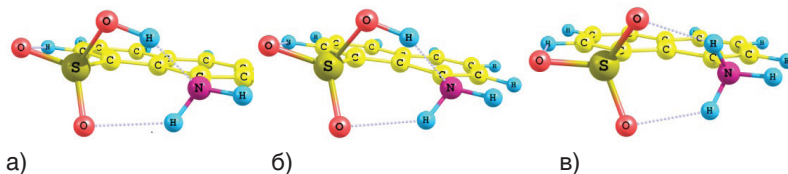


Рис.1. СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛЫ 1-АМИНОНАФТАЛИН-8-СУЛЬФОКИСЛОТЫ
В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ (Б), В ГЕПТАНЕ (А) И ВОДЕ (В).

Остальные четыре конформера молекулы сохраняют молекулярную форму в растворителях любой полярности. Отметим, что используемая модель учета сольватации приводит к понижению энергии всех конформеров в водной среде и в неполярном растворителе по сравнению с газовой фазой.

Таким образом, наибольшее изменение при переходе от газовой фазы к среде полярного растворителя претерпевает первый конформер молекулы за счет образования цвиттериона, что следует учитывать при изучении свойств данного соединения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №16-33-00386.

СТРОЕНИЕ, ЧАСТОТЫ КОЛЕБАНИЙ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТРИМЕТОПРИМА: КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

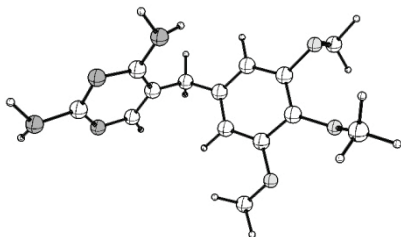
ГЕНЫК Е.А., БИРЮКОВА М.М., ЗОЛОТАРЕВА Н.В., КЕМЕЛЬБАЕВА Д.Р., ХАЛИЛОВА Р.М.

Астраханский государственный университет

Триметоприм (2,4-диамино-5-(3,4,5-триметоксибензил)-пиримидин) входит в состав лекарственного препарата «Бисептол» и усиливает антибактериальные свойства сульфаметоксазола. Известно, что высокие концентрации веществ создаются в тканях легких, почек, в спинномозговой жидкости, желчи и костях. Биотрансформация молекул осуществляется в печени с образованием неактивных метаболитов, поэтому препарат противопоказан при почечной/печеночной недостаточности. Попадая в организм, оказывает токсическое воздействие на ЦНС и увеличивает вероятность аллергических осложнений [1].

Целью работы явилось изучение строения триметоприма, вычисление энергии МО, частот колебаний, зарядовых, энергетических величин и поиск реакционных центров, способные взаимодействовать с компонентами меланоцитстимулирующего гормона. Предварительно иссле-

довали нейтральную и ионизированные формы триметоприма. Квантово-химические расчеты выполнены методами 6-31G*/RHF и теории функционала плотности B3LYP/6-31G* в программе Gamess [2]. Оптимизация геометрии проведена PM3 методом.



В процессе вычислительного эксперимента были установлены локальные минимумы, соответствующие возможным конформациям триметоприма. Общая энергия молекулы составила -982,582 а.е., величина энергетической щели 11,864 эВ. Наиболее вероятными центрами

электрофильной атаки являются 1N, 5N (-0,95 а.е. заряда), менее выражены свойства у атомов 16O, 18O (-0,77 а.е.), 3N (-0,67 а.е.). Центрами нуклеофильной атаки в молекуле являются 2C, 4C (0,73 а.е. заряда) и менее выражены свойства у атомов 22H (0,39 а.е.), 19H (0,21 а.е.). Вычисленные частоты колебаний: $\nu_s(\text{NH}_2)$ в диапазоне 3487 см⁻¹ – 3500 см⁻¹; $\nu_{as}(\text{NH}_2)$ в диапазоне 3610 см⁻¹ – 3630 см⁻¹; $\delta(\text{NH}_2)$ в диапазоне 1638 см⁻¹ – 1662 см⁻¹; 948 – 977 см⁻¹; $\nu(\text{NH}) = 3043$ см⁻¹; $\delta(\text{NH}) = 1490$ см⁻¹; $\nu_s(\text{COC})$ в диапазоне 893 см⁻¹ – 899 см⁻¹; $\nu_{as}(\text{COC})$ в диапазоне 1102 – 1470 см⁻¹.

В таблице 1 приведены рассчитанные термодинамические функции триметоприма.

ТАБЛИЦА 1. РАССЧИТАННЫЕ АБ ИНИТЮ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ ТРИМЕТОПРИМА (ГАЗ)

| T, K | $C_p^\circ(T)$, Дж/(моль·K) | $S^\circ(T)$, Дж/(моль·K) | $H^\circ(T) - H^\circ(0)$, кДж/моль | $G^\circ(T)$, кДж/моль |
|--------|------------------------------|----------------------------|--------------------------------------|-------------------------|
| 278,15 | 294,893 | 596,884 | 38,589 | 784,485 |
| 298,15 | 311,630 | 617,935 | 43,990 | 772,336 |
| 348,15 | 353,097 | 669,390 | 58,948 | 740,146 |

Имитируя воздействие электрофильного реагента, исследовали протонированную форму (\rightarrow) триметоприма в синглетном состоянии с зарядом +2. Величина энергетической щели протонированной формы составила 7,736 эВ, общая энергия -983,152 а.е. В случае нуклеофильного реагента исследовали гидроксильную форму (\rightarrow) триметоприма в синглетном состоянии с зарядом -2. Величина энергетической щели ионизированной формы составила 9,608 эВ, а общая энергия -982,368 а.е. Таким образом, наиболее оптимальным и энергетически выигрышным является электрофильность протонированной формы триметоприма.

Литература

1. Panciera D.L., Post K. // Can. J. Vet. Res. 1992. V. 56, N 4. P. 349-52.
2. Электронный ресурс: <http://www.msg.ameslab.gov/>

ОЦЕНКА РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ 1,1,1-ТРИХЛОР-2,2-ДИАРИЛЭТАНОВ МЕТОДАМИ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

Кужин М.Б., Казин В.Н., Сибриков С.Г., Гузов Е.А., Сирик А.В.

Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова

Изучена реакция дегидрохлорирования 1,1,1-трихлор-2,2-диарилэтанов при взаимодействии с нитрит-ионом. Результаты кинетических исследований свидетельствуют о том, что процесс протекает по механизму E2. Квантово-химические расчеты выполнены методом функционала плотности в рамках континуальной сольватационной модели РСМ (растворитель – ДМФА): программа Firefly, обменно-корреляционный функционал B3LYP, базис 6-31G++(d,p). На рисунке 1, в качестве примера, представлена последовательность протекания дегидрохлорирования 1,1,1-трихлор-2,2-дифенилэтана нитрит-ионом.

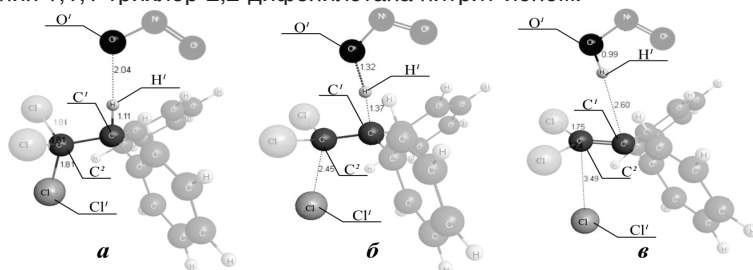


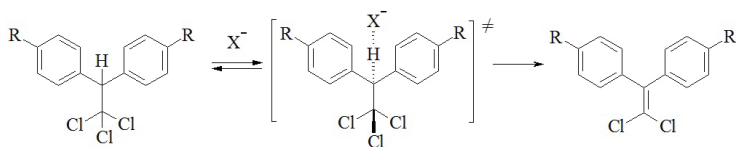
Рис. 1. Предреакционное состояние (А), переходное состояние (Б) и продукты реакции (В) дегидрохлорирования 1,1,1-трихлор-2,2-дифенилэтана нитрит-ионом.

Следует отметить, что для всех переходных состояний 1,1,1-трихлор-2,2-диарилэтанов пять атомов $O^1 \cdots H^1 \cdots C^1 - C^2 - Cl^1$ расположены практически в одной плоскости, что является необходимым условием протекания реакции по механизму E2 в силу его стереоспецифичности. Рассчитаны величины тепловых эффектов и энтальпий активации исследуемой реакции (табл. 1). Обнаружена корреляция между значениями $\ln k_{эф}$ и энтальпией активации (ΔH^\ddagger), связывающая экспериментальные данные с результатами квантово-химических расчетов: $\ln k_{эф} = (25.7 \pm 2.1) - (0.48 \pm 0.03) \cdot \Delta H^\ddagger$; $r = 0.991$; $s = 0.521$; $N = 6$.

Таблица 1. Значения расчетных термодинамических величин для реакций дегидрохлорирования 1,1,1-трихлор-2,2-диарилэтанов нитрит-ионом.

| R | 4-NO ₂ | 4-Cl | 4-H | 4-CH ₃ | 4-OCH ₃ | 4-OC ₂ H ₅ |
|--|-------------------|---------|---------|-------------------|--------------------|----------------------------------|
| ΔH^\ddagger , кДж/ моль* | 52.51 | 63.74 | 69.58 | 69.84 | 71.41 | 71.88 |
| ΔH , кДж/ моль** | -104.49 | -103.71 | -103.71 | -102.92 | -105.28 | -103.60 |

Результаты кинетического эксперимента и квантово-химических расчетов позволяют заключить, что реакция дегидрохлорирования замещенных 1,1,1-трихлор-2,2-диарилэтанов нитритами щелочных металлов в апротонных диполярных растворителях протекает по механизму бимолекулярного элиминирования E2:



R = -NO₂, -Cl, -H, -CH₃, -OCH₃, -OC₂H₅; X = NO₂.

ВЗАИМОСВЯЗЬ МЕЖДУ СОРЕБЦИОННЫМИ И СТРУКТУРНЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ ПРОИЗВОДНЫХ АЗОЛОВ

ДЖАБИЕВА С.А., КУРБАТОВА С.В.

Самарский государственный аэрокосмический университет
им. академика С.П. Королева
(национальный исследовательский университет)

Применение молекулярных дескрипторов к поиску QSAR/QSPR/QSRR соотношений широко практикуется в химии. В качестве молекулярных дескрипторов можно использовать как физико-химические свойства, например теплоту образования, дипольный момент, поляризуемость и др., так и топологические характеристики молекул. Среди таких дескрипторов можно также выделить величины хроматографического удерживания. Нами исследовано влияние электронных и физико-химических параметров молекул на их хроматографическое удержива-

ние в условиях обращенно-фазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии (ОФ ВЭЖХ) на сорбентах различной природы, а также взаимосвязь между физико-химическими и топологическими характеристиками молекул на примере производных бензотриазола. Значения электронных и физико-химических параметров рассчитывали в программе Spartan версии 1.1.0 методами теории функционала плотности с обменно-корреляционным функционалом B3LYP и базисным набором 6-31G* и Хартри Фока с базисным набором 3-21G.

На основании анализа полученных данных установлена симбатность в изменении хроматографического удерживания аналитов в условиях ОФ ВЭЖХ и таких физико-химических параметров, как дипольный момент, поляризуемость, площадь поверхности, объем. При этом уровень корреляции существенно зависит от природы используемого сорбента и состава элюента. Наилучшие корреляции соответствуют зависимости удерживания на пористом графитированном углероде, однако, по мере увеличения содержания органического модификатора в составе элюента коэффициент корреляции снижается, что, вероятно, связано с протеканием процессов образования гомо- и гетероассоциатов с компонентами подвижной фазы.

Существенное влияние на сорбцию ПГУ оказывает также топология молекул, что связано с особенностями плоской поверхности данного сорбента. Установлено, что зависимость между величинами удерживания производных бензотриазола и топологическими индексами (ТИ), в частности индексами связанности (ИС), линейна, при этом максимальная коррелирующей способностью обладают ИС с нулевого по третьей рядок. Уровень корреляции также существенно зависит от концентрации органического модификатора в элюенте. Из полученных данных следует, что максимальное значение коэффициента корреляции R^2 соответствует зависимости между фактором удерживания на ПГУ и ИС при незначительном содержании ацетонитрила в элюенте (25%), то есть для случая минимально возможного влияния элюента на сорбцию. Увеличение концентрации модификатора существенно ухудшает качество корреляции, так же, как и переход от хроматографирования на ПГУ к сверхсшитому полистиролу, сорбция на котором осуществляется преимущественно за счет специфических взаимодействий. На основании полученных зависимостей были рассчитаны значения фактора удерживания некоторых производных бензотриазола, при этом было установлено вполне удовлетворительное соответствие рассчитанных и экспериментальных значений фактора удерживания аналитов на ПГУ при минимальном содержании ацетонитрила в элюенте.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках государственного задания по гранту №4.110.2014/К.

АНАЛИЗ АТОМНЫХ ОРБИТАЛЕЙ В СИСТЕМЕ АДЕНИН-УРАЦИЛ

Ильина М.Г.¹, Хамитов Э.М.²

¹Башкирский государственный университет

²ФГБУН Уфимский институт химии РАН

В 1953 году была расшифрована структура ДНК, что стало переломным моментом в развитии биологической науки. Однако комплементарность пар нуклеотидов может нарушаться из-за вероятности образования их редких таутомерных и анионных форм, что может приводить к появлению точечных спонтанных мутаций.

Для того чтобы оценить возможность возникновения таутомерных или анионных форм нуклеиновых оснований в данной работе были рассмотрены комплементарная пара Аденин – Урацил и “неправильная” пара Гуанин – Урацил [1]. Структуры изученных систем были оптимизированы применением метода DFT(TPSS) в сочетании с базисным набором 6-311+G(d, p) с использованием программного пакета Gaussian Rev. D. Для анализа молекулярных орбиталей был проведен NBO-анализ на том же уровне теории. Электронная плотность в случае НОМО сконцентрирована на аденине(гуанине), в случае LUMO – на урациле. На рисунке 1 визуализированы НОМО и LUMO (верхние занятые молекулярные орбитали и нижние вакантные молекулярные орбитали) для системы Аденин - Урацил. В таблице 1 приведена энергия НОМО/LUMO, вычисленная также с помощью DFT(TPSS)/6-311+G(d, p).

Аденин (А) - Урацил (У)

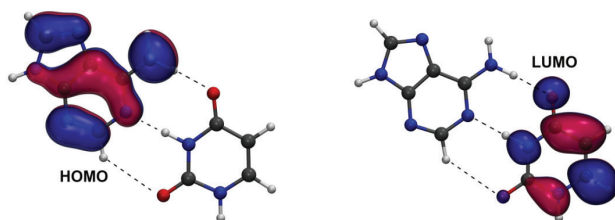


Рисунок 1. Верхние занятые и нижние свободные молекулярные орбитали системы Аденин - Урацил

Таблица 1. Энергии НОМО/LUMO орбиталей.

| Система | ЕНОМО, эВ | ELUMO, эВ | ЕНОМО/LUMO |
|-----------------|-----------|-----------|------------|
| Аденин – Урацил | -5.38 | -2.15 | 3.23 |
| Гуанин – Урацил | -5.11 | -2.62 | 2.49 |

Найденное значение зазора граничных орбиталей НОМО/LUMO является энергетическим разрывом и представляет собой важную величину, так как согласно теории граничных орбиталей является мерой стабильности изученной системы. С помощью полученных значений возможно объяснить достаточно высокую вероятность образования “неправильной пары”.

Литература

1. Синтез, модификации и биологическая активность урацилов. / Ги-мадиева А.Р., Чернышенко Ю.Н., Абдрахманов И.Б., Мустафин А.Г.; Под ред. ГИЛЕМ. Уфа, 2013.

Все необходимые расчеты были проведены на кластерном суперкомпьютере Enterprise ГУП ИНХП РБ.

Работа выполнена при поддержке проекта №4.299.2014/К, исполняемого в рамках проектной части государственного задания Минобрнауки РФ в сфере научной деятельности.

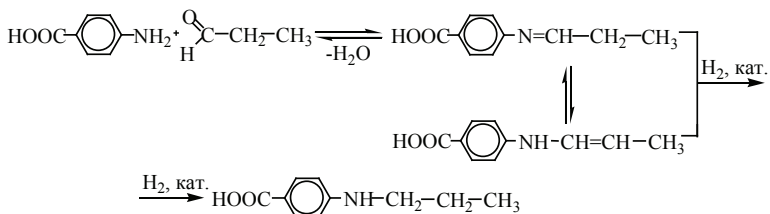
КОНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ МОЛЕКУЛ АЗОМЕТИНА И ЕНАМИНА В РЕАКЦИИ ПОЛУЧЕНИЯ N-ПРОПИЛ-4-АМИНОБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ НА Pd-СОДЕРЖАЩИХ ГРАФЕНОПОДОБНЫХ НАНОМАТЕРИАЛАХ

Калмыков П.А., Магдалинова Н.А., Ключев М.В.

Ивановский государственный университет

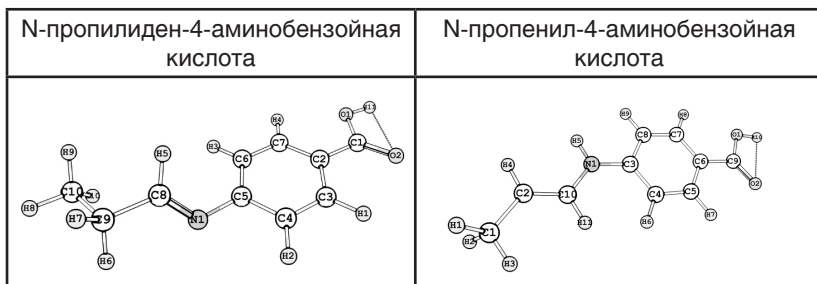
Гидрогенизационное аминирование (ГА), как универсальный способ получения аминов, относится к «one-pot» методам «зеленой химии», поэтому разработка катализаторов ГА является актуальной задачей. Pd-содержащие графеноподобные наноматериалы могут являться перспективными катализаторами жидкофазного ГА. Каталитические свойства Pd-содержащих графеноподобных наноматериалов, функционализированных этилендиамином, диэтилентриамином и триэтилентетраамином, с содержанием металла 5 мас. % изучали в модельной реакции жидкофазного ГА пропаналя *para*-аминобензойной кислотой: растворитель – этанол, $T = 318\text{ K}$, $P_{H_2} = 1\text{ атм}$ (схема).

Известно, что в спиртовом растворе алкилиденанилинов – промежуточных продуктов реакции ГА, присутствует явление имин-енаминной таутомерии (схема). Квантово-химическими методами (B3LYP/cc-pVTZ) с учетом неспецифической сольватации (этанол) методом РСМ были определены устойчивые структурные конформеры обоих таутомеров – азометина(N-пропилиден-4-аминобензойная кислота) и енамина (N-пропенил-4-аминобензойная кислота).



СХЕМА

ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ УСТОЙЧИВЫХ КОНФОРМЕРОВ ТАУТОМЕРОВ



Согласно результатам расчетов енамины по сравнению с азометином обладают меньшей как общей электронной энергией, так и термической энергией Гиббса на 6.6 кДж/моль и 8.4 кДж/моль, соответственно. Вероятно, что в реакции гидрирования будут участвовать оба таутомера, однако быстрее будет восстанавливаться менее устойчивый азометин.

Проведенные исследования показали, что все изученные катализаторы проявляют активность в модельной реакции, причем существенно выше, чем часто используемый Pd/C. Анализ реакционных смесей методом ЯМР доказал существование в них азометина, который в ходе гидрирования превращается в N-пропил-4-аминобензойную кислоту. Таким образом, подтвержден азометиновый маршрут ГА в присутствии изученных катализаторов.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ в рамках госзадания.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ РЕАКЦИЙ АМИДО- И СУЛЬФАМИДООБРАЗОВАНИЯ

Катушкин А.А., Романова Ю.М., Буданова П.М.

Ивановский государственный университет

Реакции амидо- и сульфамидообразования с участием аминосоединений разных классов представляют значительный интерес для исследования в связи с широким спектром применения продуктов указанных процессов. Указанные реакции могут использоваться в качестве модельных при исследовании процессов, протекающих *in vivo*. Кроме этого, изучение реакций аминосоединений с производными карбоновых и сульфоновых кислот способствует развитию представлений о механизмах реакций нуклеофильного замещения у карбонильного атома углерода и сульфонильного атома серы.

Целью настоящей работы явилось квантово-химическое моделирование механизмов газофазных реакций α -аминоуксусной кислоты и аммиака с 4-нитрофенилацетатом (4-НФА), а также N-метиланилина (N-МА) и N-этиланилина (N-ЭА) с бензолсульфонилхлоридом (БСХ). Методами RHF//6 31G(d) и DFT//B3LYP/6-311G(d,p) с использованием программного пакета Firefly 7.1G [1] были рассчитаны трехмерные поверхности потенциальной энергии (ППЭ) указанных реакций в газовой фазе в координатах длины образующейся связи C-N или S-N и угла атаки нуклеофила (аминосоединения) на карбонильный или сульфонильный реакционный центр.

Для реакций с участием 4-НФА, а также для реакции N МА с БСХ получены ППЭ с единственным путем минимальной энергии, на котором присутствует единственная седловая точка, соответствующая переходному состоянию. На потенциальной поверхности реакции N ЭА с БСХ присутствуют два практически равновероятных маршрута с различным начальным направлением атаки нуклеофила, которые приводят к образованию одного и того же продукта. Вне зависимости от маршрута, указанная реакция также идет с образованием единственного переходного состояния. Полученные результаты указывают на одностадийное протекание изучаемой реакции по механизму согласованного бимолекулярного механизма нуклеофильного замещения S_N2 .

Проведено моделирование активированных комплексов изучаемых реакций и установлено, что конфигурация реакционных центров в переходных состояниях зависит от структуры реагентов и направления атаки нуклеофила на реакционный центр.

Оценка энергий активации (E) реакций показала, что величины E, рассчитанные для газофазных процессов, сильно превышают значения,

полученные экспериментально для тех же реакций в жидкой фазе [2, 3]. В то же время, значения E для реакций с участием 4-НФА существенно превышают величины E реакций с участием БСХ, что согласуется с экспериментальными данными по относительной реакционной способности сложных эфиров и сульфонилхлоридов в амидообразовании [2, 3].

Литература

1. Granovsky A.A.. Firefly version 7.1.G, <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>.

2. Кустова Т.П., Смирнова Е.Г., Кочетова Л.Б., Калинина Н.В. // Журн. Прикл. Химии. 2014. Т. 84, № 2. Р. 1280-1285.

3. Соловьева Д.С., Дицина О.Ю., Кочетова Л.Б., Калинина Н.В. Структура и реакционная способность аминокислот и сложных эфиров в N-ацилировании // В сб. «Квантово-химические расчеты: структура и реакционная способность органических и неорганических молекул». Иваново, ИГХТУ. 2013. С.293-298.

Выражаем благодарность Министерству образования и науки Российской Федерации за финансовую поддержку наших исследований.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТАВА, СТРУКТУРНЫХ И СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ БИС (ДИПИРРИНАТОВ) ЦИНКА(II) С N- И O-СОДЕРЖАЩИМИ АНАЛИТАМИ

КСЕНОФОНТОВ А.А., ГУСЕВА Г.Б., АНТИНА Е.В.

*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова
Российской академии наук*

Разработка различных сенсорных устройств в настоящее время является одним из наиболее актуальных направлений аналитической химии. Главным компонентом в таких устройствах является молекула-индикатор. В качестве молекул-индикаторов удачно могут применяться биядерные геликаты цинка(II) с бис (дипирринами) $[Zn_2L_2]$. Данные люминофоры высоко селективны к полярности среды и обладают индивидуальными спектральными характеристиками. При выборе сенсорного материала для оптических хемосенсоров необходимо знать природу взаимодействия аналитов с молекулой-индикатором и возникающие при данном взаимодействии изменения спектральных параметров. Такие характеристики материала можно предсказать, используя методы компьютерного моделирования.

В данной работе представлены результаты квантово-химических исследований состава, геометрических, спектральных характеристик,

структурной организации молекулярных комплексов $[Zn_2L_2]$ с N- и O-содержащими аналитами X– ацетон, ДМФА, ДМСО, пиридини триэтиламин. Геометрическая оптимизация (PCM/B3LYP/6-31G(d,p)) изолированных структур геликатов с различным числом (от 1 до 4) молекул растворителя X, скоординированных на одном или обоих металлоцентрах геликатов была проведена в программном пакете PC GAMESS. Сканирование поверхности потенциальной энергии предполагаемых структур показало, что для 3,3'-бис(дипиррината) цинка(II) $[Zn_2(l)_2]$ наиболее энергетически выгодным является образование сольватов состава $[Zn_2(l)_2X_2]$ или $[Zn_2(l)_2X_4]$, в которых каждый атом цинка дополнительно координирует одну или две молекулы электронодонорного растворителя. Длины координационных связей Zn–O(X) или Zn–N(X) в таких сольватах укладываются в диапазон 1.893–2.744 Å. Для 2,3'- и 2,2'-бис(дипирринатов) цинка(II) энергетически выгодным оказалось образование сольватов состава $[Zn_2L_2X]$ или $[Zn_2L_2X_2]$. Значения длин координационных связей Zn–O(X) или Zn–N(X) в сольватах $[Zn_2(II)_2X]$ и $[Zn_2(III)_2X_2]$ находятся в диапазонах 1.881–2.823 и 1.885–2.866 Å соответственно. Результаты квантово-химических расчетов показывают, что в сольватоконплексах 3,3'-бис(дипирринатов) состава $[Zn_2(l)_2(X)_2]$ координационный полиэдр имеет геометрию искаженной тетрагональной пирамиды. В сольватах состава $[Zn_2(l)_2(X)_4]$ координационный полиэдр представляет слабо искаженный октаэдр с атомом цинка в плоскости тетраэдрического бипирамидального основания. Координационные узлы в 2,3'- и 2,2'-сольватах $[Zn_2L_2X]$ и $[Zn_2L_2X_2]$ имеют конфигурацию сильноискаженной тетрагональной пирамиды.

Расчет энергетических переходов с первого до десятого уровней проводился методом TD-DFT/B3LYP/cc-pVTZ. Анализ орбитальных энергий (ЕВЗМО, ЕНСМО) и ширины ВЗМО–НСМО энергетических щелей (ДЕВЗМО/НСМО) сольватоконплексов $[Zn_2L_2X_n]$ показал, что основной вклад в флуоресценцию люминофоров вносит переход ВЗМО–НСМО. Существенное влияние на энергетическую стабильность и квантовый выход супрамолекулярных структур $[Zn_2L_2X_n]$ оказывает природа геликанда. Так, при замене 3,3'-бис(дипиррина) на 2,3'- и, особенно, на 2,2'-аналог наблюдается рост энергии образования связи Zn–O(X) или Zn–N(X) ($E_{св}$) и уменьшение размера энергетической щели (от 0.7 до 0.13 эВ в зависимости от X). Результаты квантово-химических расчетов хорошо согласуются с экспериментальными исследованиями состава, термической стабильности и квантового выхода флуоресценции (ϕ) молекулярных комплексов $[Zn_2L_2X_n]$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 15-43-03081-р-центр-а). Выражаем благодарность Межведомственному суперкомпьютерному центру РАН (г. Москва) за предоставленные ресурсы на кластере МВС 100К.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИК- И КР- СПЕКТРОВ МОЛЕКУЛЫ ГЛИЦИНА И ИХ СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ ДАННЫМИ

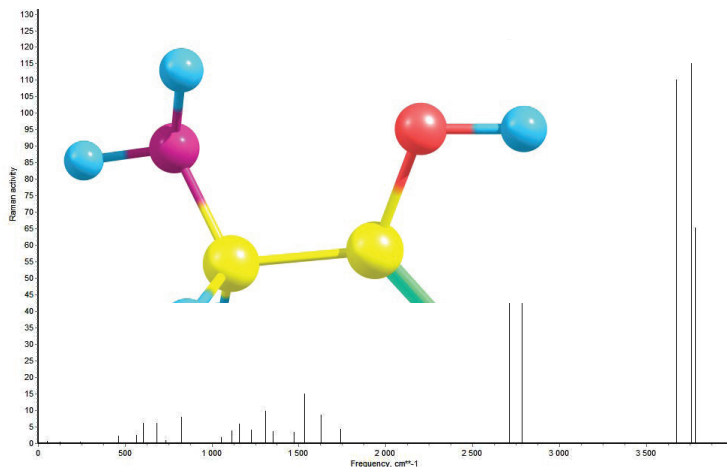
Лысенко А.А., Волкова Т.Г.

Ивановский государственный университет

Применение аминокислот в кристаллическом состоянии различно. Они рассматриваются в качестве самых разных материалов – нелинейные оптические материалы, ферроэлектрики, пьезоэлектрики, биомиметики и т.д.

Одной из фундаментальных проблем, существующих в исследовании молекулярных кристаллов, биополимеров и супрамолекулярных ансамблей, является вопрос о влиянии межмолекулярных взаимодействий, особенно водородных связей на кристаллизацию и формирование структуры кристалла. ИК- и КР-спектроскопия являются двумя основными методами оценки энергий водородных связей в структуре.

Целью настоящей работы стало построение модельных ИК- и КР-спектров молекулы глицина и проведение сравнительного анализа с экспериментальными спектроскопическими данными.



Моделирование проводилось в рамках теории самосогласованного реакционного поля в программе PC GAMESS [1] методом DFT/V3LYP/6-31G (d, p) с полной оптимизацией геометрии без ограничений по симметрии. Теоретические спектры были получены на основе результатов расчета силового поля в гармоническом при-

ближении, собственных частот колебаний и интенсивностей в ИК-спектре. Визуализация результатов расчета проводилась в программе ChemCraft [2].

Сравнительный анализ модельного и экспериментального [3] КР-спектров показал достаточно хорошее соответствие линий в интервале от 500 до 1700 см⁻¹. Сильное различие в положении частот в области 2500-3500 см⁻¹ можно объяснить отсутствием в модельной системе водородных связей.

Литература

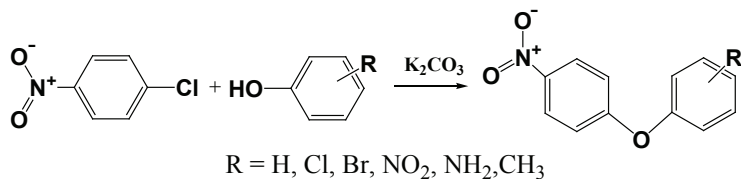
1. Granovsky A.A. PCGAMESS version 7.1, <http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html>
2. ACD/NMR Processor Academic Edition. www.acdlabs.com.
3. Gelder J.De, Gussem K.De, Vandenabeele P., Moens L. // J. Raman Spectrosc. 2007. V. 38. P. 1133-1147.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПРОИЗВОДНЫХ РЯДА ДИФЕНИЛОВЫХ ЭФИРОВ

Люткин А.С., Гузов Е.А. Волков Е.М., Цивов А.В.

Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова

Дифениловый эфир и его производные, содержащие разнообразные функциональные группы, широко применяются в различных областях науки и техники, а также в качестве лекарственных препаратов, обладающих широким спектром физиологической активности [1-2]. Его нитропроизводные обладают гербицидными свойствами, и поэтому их используют в качестве компонентов химической защиты растений. Дифенилоксиды, содержащие феноксифенильные фрагменты, применяются в фармакологии, сельском хозяйстве, резинотехнической промышленности. Алкилдифенилоксиды используются в качестве мономеров при производстве маслорастворимых смол, обладающих хорошей кислото-, водо- и светостойкостью, при получении высококачественных лаков, эмалей, для которых характерны высокие тепло- и термостойкость, химическая, радиационная и абляционная стойкость, хорошие диэлектрические свойства, для получения жидкокристаллических материалов. Поэтому изучение их спектральных характеристик является важной задачей.



(СХЕМА 1)

Нами было проведено квантово-химическое моделирование свойств и характеристик производных ряда дифениловых эфиров, полученных по схеме 1. С использованием программы PC Gamess были рассчитаны энергетические, электронные и ИК-спектральные характеристики изучаемых объектов. В качестве последних были вычислены колебательные частоты различных функциональных групп, для чего был выполнен расчет гессиана – матрицы вторых производных по энергии системы (параметр hssend=.t. в группе \$statpt).

Расчеты выполнялись методом RHF с использованием базисных наборов 3-21G, 6-31G(d) и 6-311G(d), а также методом DFT с использованием базисного набора 6-31G(d) и различных функционалов плотности: BLYP, V3LYP и V3PW91.

Полученные результаты квантово-химического моделирования сравнивались с данными экспериментальных исследований – ИК-спектрами дифениловых эфиров. Результаты эксперимента показали, что наиболее близкие к экспериментальным данным характеристики были получены методом DFT с использованием функционала плотности V3PW91 – расхождение значений отдельных частот для расчетных и экспериментальных данных составило не более 50 см⁻¹. Таким образом, сделан вывод о применимости выбранного метода для изучения спектральных характеристик соединений ряда дифениловых эфиров.

Литература

1. Попов Ю.В., Корчагина Т.К., Камалетдинова В.С. Патент 2366647 РФ, 2009.
2. Попов Ю.В., Корчагина Т.К., Камалетдинова В.С. Патент 2398762 РФ, 2010.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ РАСЧЕТА СИНХРОНИЗАЦИИ БИОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ГОЛОВНОГО МОЗГА

Миляева В.В.

Тульский государственный университет

Синхронизация биоэлектрической активности коры головного мозга - электроэнцефалограммы (ЭЭГ), является определяющим условием его интегративной деятельности [1]. Наиболее эффективным методом диагностики неврологических нарушений (НН) считается оценка степени синхронизации фоновой ЭЭГ между различными отведениями – определение функций когерентности (ФК) [2]. Предлагалось использовать альтернативный метод, основанный на корреляционной модели, работающей в реальном времени [3]. В скринингующей системе диагностики НН у пациента определялись параметры синхронизации ЭЭГ и по решающему правилу вычислялась вероятность его принадлежности к одной из нозологических групп.

Сохранив идею системы – скрининговое обследование, базы данных по группам НН, логическая оценка, предлагается вместо громоздкой системы фильтров [3] получать алгебраическую оценку ФК на основе параметров математической модели ЭЭГ.

В предлагаемой структуре самонастраивающиеся фильтры используются не для обработки попарных произведений сигналов каналов регистрации, а только на выходах этих каналов, что на два порядка уменьшает их количество.

Спектр ЭЭГ $S(\omega)$ в каждом канале регистрации определяется по передаточной функции полосового фильтра, коэффициенты которого a_1 и b_1 принимают окончательное значение в процессе самонастройки.

$$S(\omega) = \frac{(b_0 + b_2 c s 2\varpi)^2 + (b_2 \sin 2\varpi)^2}{(1 + a_1 \cos \varpi + a_2 \cos 2\varpi)^2 + (a_1 \sin \varpi + a_2 \sin 2\varpi)^2} \quad (1)$$

Оценка ФК между отведениями i и j (с учетом того, что значение $S(\omega)$ находится в пределах от 0 до 1) получается по формуле

$$M_{ij}(\omega) = S_i(\omega) S_j(\omega) \quad (2)$$

Полученная оценка (2) анализируется в стандартных частотных диапазонах: дельта, тета, альфа и бета: определяется средний уровень и частота, на которой оценка достигает максимума в диапазоне. Таким образом, каждый пациент характеризуется таким же количеством параметров, что используется в исходной системе [3].

База данных по группам НН легко может быть уточнена в рамках нового подхода. Как показали предварительные оценки [4], возможно

существенное упрощение расчетов принадлежности пациента к конкретной группе НН с учетом эмпирического закона распределения параметров оценки $M_{ij}(\omega)$.

Предлагаемая оценка (2) может быть сопоставлена с результатами расчетов ФК в штатных диагностических системах [2], использующих такой показатель, как средневзвешенная частота ФК в стандартных частотных диапазонах.

Литература

1. Ливанов М.Н., Свицерская Н.Е. Психологические аспекты феномена пространственной синхронизации потенциалов // Психологический журнал, 1984. - Т. 5. - № 5. - С. 71 - 83.
2. Иванов Л.Б. Прикладная компьютерная электроэнцефалография. М.: АОЗТ «Антидор», 2000. – 256 с.
3. Индюхин А.А. Скрининговая система диагностики неврологических нарушений на основе самонастраивающегося фильтра. Дисс. ... канд. техн. наук. – Курск, 2013.
4. Бакланова Н.А., Индюхин А.А., Коновалова В.А., Федянина А.Г. Электроэнцефалографический скрининг // Актуальные вопросы биомедицинской инженерии: сборник материалов III Всероссийской заочной научной конференции для молодых ученых, студентов и школьников. 21 октября - 15 декабря 2013 г. – Саратов: ООО «Издательский центр «Наука», 2013. – С. 367 – 373.

РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ АРИЛСУЛЬФОНИЛГАЛОГЕНИДОВ КАК ФУНКЦИЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА РЕАКЦИОННОГО ЦЕНТРА

МОРАРЬ А.И.¹, КРЫЛОВ Е.Н.¹, ВИРЗУМ Л.В.²

¹Ивановский государственный университет

²Ивановская государственная сельскохозяйственная академия им. Д.К.Беляева

Для SN-реакций замещения в арилсульфонилгалогенидах ($XArSO_2Y$, $Y = F, Cl, Br$) проблема заключается в соотношении между S_N1 , S_N2 и $S_A N$ механизмами в зависимости от типа среды, заместителя X и нуклеофугности Y. Для модельной SN-реакции гидролиза замещенных тиофенсульфонилгалогенидов ($XThSO_2Y$, $Y = Cl, Br$) среде водного MeCOMe (95 об.%) и аналогичная ей реакция гидролиза замещенных бензолсульфонилгалогенидов ($XPhSO_2Y$, $Y = F, Cl$) – получена антибатная зависимость между константами скоростей и молекулярным электростатическим потенциалом на реакционном центре (МЭП). ТСХ с акцепторными заместителями

образуют свою реакционную серию с положительным трендом зависимости $\lg K_{\text{hydr}} \text{ vs } \text{Vesp } \lg K_{\text{hydr}} = (-4062.3 \pm 55.9) - (68.81 \pm 0.95) * \text{Vesp}(S)$, $R = 0.9998$, $SD = 0.013$, $N = 4$, $P = 1.9 * 10^{-4}$, что указывает на нестабильный механизм с изменением соотношения между степенью образования связи S-Nu и разрыва связи S-X со сдвигом переходного состояния по перпендикулярной координате в соответствии с диаграммой O`Феррала – Дженкса в сторону механизма SAN, поскольку акцепторы стабилизируют структуры, близкие по строению к тетраэдрическому интермедиату этого механизма. Для TySO_2Br наблюдается симбатная зависимость между $\lg K_{\text{hydr}}$ и $\text{Vesp } \lg K_{\text{hydr}} = (3216 \pm 534) + (54.52 \pm 9.06) * \text{Vesp}(S)$, $R = 0.961$, $SD = 0.282$, $N = 5$, $P = 0.009$, что свидетельствует об изменении соотношения между скоростями нуклеофильной атаки и анионоидного отрыва, поскольку хлорид-анион – плохая уходящая группа. Поэтому при $X = \text{Cl}$ стадией, лимитирующей скорость, является анионоидный отрыв, а для $X = \text{Br}$ – нуклеофильная атака. PhSO_2F при гидролизе в водном диоксане образуют свою реакционную серию с положительным трендом зависимости между Vesp и $\lg K_{\text{hydr}}$ $\lg K_{\text{hydr}} = (4821.9 \pm 278.6) + (81.75 \pm 4.72) * \text{Vesp}$, $R = 0.9967$, $SD = 0.126$, $N = 4$, $P = 0.0033$, что согласуется с влиянием вида уходящей группы на положение переходного состояния на координате реакции и свидетельствует о сохранении механизма реакции при изменении заместителей от донорных до акцепторных. Поскольку F- – плохая уходящая группа, ей требуется поддержка отрицательным МЭП. Молекула воды является жестким нуклеофилом, а уходящая группа – жестким нуклеофугом, что с точки зрения реакционной способности является выигрышным – жесткие реагенты быстрее вытесняют жесткие уходящие группы. В связи с этим уменьшение отрицательного значения МЭП облегчает нуклеофильную атаку молекулы воды, мало воздействуя на скорость отрыва уходящей группы, которая отрывается при электрофильном катализе (водородной связью) второй молекулой воды, которая как жесткий реагент хорошо связывает фторид-анион.

Таким образом, количественная теория ЖМКО на основе концептуальной теории функционала плотности адекватно отражает изменения механизма сольволиза ароматических сульфониалогенидов и позволяет выяснить детали изменения структуры переходных состояний при реализации механизмов, отличных от чистого SN_2 механизма, а сам молекулярный электростатический потенциал представляется весьма чувствительным к изменениям структуры арилсульфонилгалогенидов дескриптором реакционной способности, несмотря на его статический характер. Расчет МЭП проведен на уровне теории M06/6-311+G* (SMD, схема разделения зарядов Хиршфельда), NWChem v.6.5 [1].

Литература

1. Valiev M., et al. // Comput. Phys. Commun. 2010. V. 181, I 9. P. 1477-1489.

МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ КАК ДЕСКРИПТОР РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ АРИЛГАЛОГЕНИДОВ В РЕАКЦИИ ГИДРОДЕГАЛОГЕНИРОВАНИЯ

Морарь А.И.¹, Крылов Е.Н.¹, Вирзум Л.В.²

¹Ивановский государственный университет

²Ивановская государственная сельскохозяйственная академия им. Д.К.Беляева

Проблема утилизации галогенорганических соединений, противоречащих принципам «зеленой» химии [1], представляется актуальной как с практической стороны, так и в теоретическом плане. Одним из перспективных методов удаления их является реакция гидродегалогенирования их молекулярным водородом на палладиевых катализаторах, механизм которой до сих пор в деталях не установлен [2]. Для диагностики механизма использован молекулярный электростатический потенциал (МЭП) на реакционном центре.

Процесс гидродегалогенирования замещенных хлорбензолов XPhCl молекулярным водородом на катализаторе Pd/AlPO₄/SiO₂ в среде MeOH при 40°C приводит к образованию дехлорированных продуктов с начальной активностью субстратов Rg по схеме XPhCl + H₂ → XPhH + HCl. Расчет МЭП проведен программным комплексом NWChem ver. 6.5 на уровне теории M06/6-311+G* с учетом влияния растворителя в рамках неспецифической сольватации методом SMD при рабочей температуре эксперимента с учетом величины диэлектрической проницаемости MeOH.

Величина МЭП на ключевом атоме углерода определяется электронным эффектом заместителя, на что указывает корреляция, близкая к линейной, между V_{esp} и σ-константами Гаммета для X, имеющая вид:

$$V_{\text{esp}} = (-14.709 \pm 0.002) + (0.041 \pm 0.007) \cdot \sigma(X), R = 0.942, SD = 0.00492, N = 6, P = 0.005,$$

$$\lg R_g = (-276.82 \pm 25.05) - (18.79 \pm 1.70) \cdot V_{\text{esp}}, R = -0.988, SD = 0.044, N = 5, P = 0.0016.$$

Вследствие этого зависимость между lgR_g и V_{esp} также имеет линейный характер, имеющий тренд, соответствующий электрофильному характеру стадии, определяющей скорость. Корреляция между начальной активностью субстратов (в виде lgR_g [9]) и МЭП на реакционном центре (с учетом статистической поправки в lgR_g, равной -0.301 для данных по 4-дихлорбензолу, имеющему два эквивалентных реакционных центра), имеет антибатный характер и достаточно близка к линейной.

Однако стадией, определяющей скорость процесса (1), может быть не только электрофильное палладирование с образованием интермедиата

$XPhCl + Pd \rightarrow XPhPdCl$, но и протодепалладирование этого интермедиата $XPhPdCl + H^+ \rightarrow XPhH + PdCl^+$.

$lgRg = (-621.2 \pm 168.4) - (42.4 \pm 11.5) * Vesp$, $R = -0.833$, $SD = 0.308$, $N = 8$, $P = 0.010$

Антибатная зависимости между $Vesp$ атома углерода, несущего палладий, и начальной активности субстратов в логарифмической форме $lgRg = f(Vesp)$ наблюдается в действительности, что подтверждает электрофильный характер стадии, лимитирующей скорость. Невысокое качество корреляции ($R = -0.833$) указывает на стерические препятствия процессу из-за конечного размера группы $PdCl$. Таким образом, МЭП как дескриптор реакционной способности арилгалогенидов в реакции каталитического гидродегалогенирования позволяет диагностировать электрофильный характер реакции, одновременно учитывая степень влияния стерических затруднений данному процессу, которое выражается в изменении тренда относительной реакционной способности арилгалогенидов от величины МЭП на реакционном центре.

Литература

1. Sheldon R.A., Arends J., Hanefeld U. Green chemistry and catalysis. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH. 2007. 447 p.
2. Keane M.A. // Chem. Cat. Chem. 2011. V. 3, N 5. P. 800-821.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АДсорбЦИИ ПРОИЗВОДНЫХ 1,2,3,4-ТЕТРАГИДРОХИНОЛИНА НА УГЛЕРОДНОЙ ПОВЕРХНОСТИ

НЕКРАСОВА Н.А.

Самарский государственный аэрокосмический университет им. Академика С.П. Королева (Национальный Исследовательский Университет)

Проблема установления зависимостей между строением органических молекул и их свойствами становится особенно актуальной в связи с постоянно увеличивающимся количеством новых соединений. Особое внимание в последнее время привлекают методы молекулярного моделирования, позволяющие предсказывать различные характеристики соединений, не прибегая к эксперименту. Среди прогнозируемых параметров огромное значение имеют сорбционные характеристики соединений в связи с широким распространением процессов адсорбции как в природных, так и в технологических системах. В частности, адсорбция органических молекул на углеродных материалах играет значительную роль в таких процессах как гетерогенный катализ, стабилизация нано-

частиц, удаление токсикантов из воды, воздуха и продуктов питания и т.д. В качестве объектов исследования нами были выбраны производные тетрагидрохинолина, обладающие ценными практическими свойствами, с одной стороны, и способные вступать в различные типы межмолекулярных взаимодействий в процессе сорбции – с другой.

Целью работы явилось моделирование сорбционных комплексов некоторых производных 1,2,3,4-тетрагидрохинолина на углеродной поверхности и их сопоставление с экспериментально определенными характеристиками удерживания в условиях высокоэффективной жидкостной хроматографии.

Оптимизацию геометрии молекул, графитового слоя и сорбционных комплексов проводили в программе Gaussian 09 в рамках теории функционала плотности на уровне B3LYP/6–31G. Для учета Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий использовали дисперсионную поправку GD3. Влияние растворителя (ацетонитрил – вода 2:3, 1:1) на сорбционный процесс учитывали с помощью PCM-модели. Такие же растворы были использованы нами в хроматографическом эксперименте.

При образовании сорбционных комплексов не наблюдалось значительных изменений в распределении электростатического потенциала, зарядов и в разнице энергий ВЗМО – НСМО, что свидетельствует о том, что при этом не образуются ковалентные связи и комплексы с переносом заряда. Нами были исследованы различные ориентации молекул относительно плоскости сорбента. Наиболее энергетически выгодными оказались комплексы, в которых сорбаты с карбоксильной, гидразидной и сложноэфирными группами располагаются карбонильным кислородом в сторону объемной фазы раствора. Поворот функциональной группы на 90° приводит к увеличению площади контакта и уменьшению расстояния сорбат – сорбент, однако это не сопровождается выигрышем в энергии в результате возникновения в молекуле внутренних напряжений. Полная энергия комплексов в растворе оказывается значительно (на ~10 кДж/моль) ниже, чем в вакууме. Введение метильного заместителя в положение 6, как и удлинение углеводородного радикала в сложноэфирной группе, приводит к значительному увеличению энергии адсорбции за счет усиления дисперсионных взаимодействий. Замена метильного радикала в положении 2 на оксо-группу приводит к увеличению энергии адсорбции, так как при этом усиливаются индукционные взаимодействия с сорбентом. В целом между фактором удерживания и энергией адсорбции для соединений с близкими по природе заместителями наблюдается линейная корреляция, которая может быть использована для прогнозирования удерживания.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках государственного задания по гранту №4.110.2014/К. Автор выражает благодарность научному руководителю д.х.н., проф. Курбатовой Светлане Викторовне.

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ АЦЕТИЛСАЛИЦИЛОВАЯ КИСЛОТА – ПОЛЯРНЫЙ СОРАСТВОРИТЕЛЬ В СРЕДЕ СВЕРХКРИТИЧЕСКОГО ФЛЮИДА

Одинцова Е.Г.¹, Чернышева Т.А.²

¹Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН

²Ивановский государственный университет

Исследование межмолекулярных взаимодействий ацетилсалициловая кислота (АСК) – полярный соразтворитель в среде сверхкритического (СК) диоксида углерода представляет интерес не только с позиций фундаментальной науки, но и в плане развития современных СК технологий. Для повышения растворяющей способности СК CO₂ используют добавки полярных соразтворителей, например, низкомолекулярных спиртов. Проведение прямого эксперимента по изучению трехкомпонентных систем при высоких температурах и давлениях представляет собой очень сложную задачу, поэтому единственным инструментом исследований в данной области является компьютерное моделирование.

Цель данной работы состояла в изучении методом классической молекулярной динамики (МД) структурных характеристик АСК в среде СК CO₂ – метанол.

Для АСК характерны два наиболее стабильных конформера [1, 2], отличающиеся взаимным расположением карбоксильной и ацетильной групп. Предварительный расчёт структурных параметров конформеров АСК был проведен с использованием программного пакета Gaussian 98 [3] в рамках теории функционала плотности (DFT) с функционалом B3LYP с базисным набором 6-31G**. Затем с использованием метода МД в программном пакете Gromacs-4.5.4 [4] создавались кубические ячейки с периодическими граничными условиями, содержащие 4627 молекул диоксида углерода и 47, 145, 296 молекул метанола (что соответствует концентрации метанола 0.01, 0.03, 0.06 мол. д.). После уравнивания в течение 500 пс в ячейки, содержащие бинарный сверхкритический растворитель, помещалась 1 молекула растворенного вещества – АСК. Полученная система уравнивалась 200 пс – 1000 пс. На всех этапах длина ребра ячеек корректировалась для сохранения плотности 0.7 г/см³ при температуре 318 К. Окончательное моделирование проводилось в NVT-ансамбле в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Постоянная температура поддерживалась с помощью термостата Нозе-Хувера [5,6]. Уравнения движения интегрировались с помощью алгоритма Верле [7]. Молекулярно-динамические траектории получали на отрезках в 500 пс с шагом 1 фс.

Были рассчитаны функции радиального распределения, средние числа водородных связей, распределения локальной плотности соразвителя вокруг растворённого вещества.

Литература

1. Glaser R. // J Org Chem. 2001. V. 66. P. 771-779.
2. Karthika M., Senthilkumar K., Kanakaraju R. // Computational and Theoretical Chemistry. 2011. V. 966. P. 167-179.
3. Gaussian 03, Revision B.04, Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., et al. Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 2003.
4. Van der Spoel D., et al. Gromacs User Manual version 4.5.4, www.gromacs.org (2010).
5. Nose S. // Mol. Phys. 1984. V. 52, N 2. P. 255.
6. Hoover W.G. // Phys. Rev. A. 1985. V. 31, N 3. P. 1695.
7. Swope W. C., et al. // Journal of Chemical Physics. 1982. V. 76. P. 637-649.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ ЭФФЕКТИВНОСТИ ИЗЛУЧЕНИЯ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПЛЕКСОВ ЕВРОПИЯ(III)

Романова К.А., Галяметдинов Ю.Г.

Казанский национальный исследовательский технологический университет

Координационные соединения лантаноидов (Ln) ввиду своих отличительных излучательных свойств (большие времена жизни, узкие полосы излучения) широко используются в устройствах оптической электроники, светоизлучающих диодах, дисплеях, оптических волокнах, лазерах и т.д. [1]. Жидкокристаллические комплексы Ln(III) обладают также способностью ориентироваться под действием внешних электрических и магнитных полей. С целью оценки влияния природы лигандного окружения на излучательные свойства соединений Eu(III) нами было проведено моделирование теоретических значений возбужденных уровней лигандов и квантового выхода люминесценции. На первом этапе производился квантово-химический расчет геометрии комплекса методом DFT с использованием функционала PBE. Далее были определены низшие триплетные и синглетные возбужденные состояния молекул методом TDDFT в программе FireFly v.8. На последнем этапе производился расчет скоростей прямого и обратного переноса энергии с триплетного возбужденного уровня лиганда на резонансный 5D1 уровень иона Eu(III), которые в дальнейшем использовались при составлении

системы дифференциальных уравнений заселенностей энергетических уровней и расчете теоретического квантового выхода по формуле [2]:

$$q = \frac{A \cdot \eta(^5D_0)}{\varphi \cdot \eta(S_0)}$$

где A – интенсивность излучающих переходов $^5D_0 \rightarrow ^7F_j$ ($j=0 \div 4$) иона Eu(III) ; $\eta(S_0)$ и $\eta(^5D_0)$ – заселенности основного S_0 уровня лиганда и излучающего 5D_0 уровня Eu(III) ; φ – интенсивность фотонного поглощения лиганда при переходе $S_0 \rightarrow S_1$.

Численное решение системы дифференциальных уравнений было выполнено методом Рунге-Кутты 4-го порядка. В начальный момент времени значение заселенности основного состояния принималось равным 1, для остальных состояний – 0, начальный шаг был равен обратной величине наибольшего значения скорости переноса ($\sim 10^{-8} \text{ с}^{-1}$). Время расчета составляло примерно 0.01 с. Было установлено, что увеличение сопряженности системы и введение дополнительных объемных ароматических заместителей, являющихся хорошими фотоантеннами, усиливает поглощательную способность лигандов и улучшает излучательные характеристики комплексов. На основании полученных данных выявлено, что наибольшими значениями квантового выхода обладают комплексы с триплетным уровнем лиганда в интервале от 2.451 до 2.637 эВ.

Квантово-химические расчеты были проведены с использованием суперкомпьютера МВС-100К «Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН» и вычислительных ресурсов системы «Ломоносов» суперкомпьютерного комплекса МГУ имени М.В. Ломоносова [3]. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 14-13-00758).

Литература

1. Romanova K.A., Freidzon A.Ya., Bagaturyants A.A., Galyametdinov Yu.G. // Journal of Physical Chemistry A. 2014. V. 118. P. 11244-11252.
2. Longo R., Goncalves e Silva F.R., Malta O.L. // Chemical Physics Letters. 2000. V. 328. P. 67-74.
3. Воеводин В.В., Жуматий С.А., Соболев С.И., Антонов А.С., Брызгалов П.А., Никитенко Д.А., Стефанов К.С., Воеводин В.В. // Открытые системы. 2012. № 7. С. 36-39.

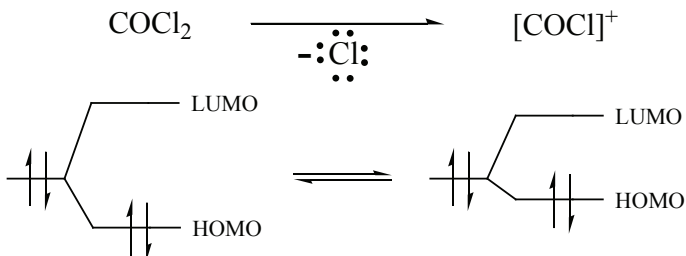
КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕОМЕТРИИ И ЧАСТОТ КОЛЕБАНИЙ МОЛЕКУЛЫ ФОСГЕНА

Кожина А.Д., Золотарева Н.В., Садомцева О.С., Хандусенко Е.А., Бирюкова М.М.

Астраханский Государственный университет

Фосген (карбонилхлорид) – бесцветный, очень ядовитый газ с удушливым запахом гнилого сена, относится к II классу опасности [1, 2] является промышленным продуктом в производстве красителей, поликарбонатов и других соединений, также используется в качестве растворителя. Неправильное обращение с летучими хлорорганическими соединениями приводит к серьезным экологическим последствиям, к загрязнению атмосферы, почвы и грунтовых вод вблизи промышленных зон. Из-за сильного токсичного эффекта информацию о свойствах фосгена и его реакционной способности по отношению к различным соединениям можно получить с помощью квантово-химических и/или молекулярно-динамических исследований. Например, в работе [3] авторы изучили гидролиз фосгена в рамках теории возмущения MP2 с использованием базисных наборов –6-31++G**, 6-311++G**, aug-cc-pVDZ, and aug-cc-pVTZ и установили, что формирование комплекса сопровождается межмолекулярным переносом заряда с последующей внутримолекулярной перегруппировкой. В работе [4] авторы рассмотрели модели адсорбции фосгена на поверхности УНТ, на поверхности нанотрубки состава AlN и представили результаты энергетических и зарядовых параметров, полученные методом B3LYP/6-31G*.

Целью настоящей работы является изучение реакционной способности молекулы фосгена и его ионизированной формы, вычисление геометрических, термодинамических параметров, частот валентных колебаний и энергий молекулярных орбиталей. Квантово-механические расчеты проведены в приближении метода Хартри-Фока с использованием валентно-расщепленных базисов – 3-21G, 6-31G, 6-31G*, 6-31G**, 6-31+G, 6-31++G, 6-31+G* и корреляционно-согласованных– cc-pVDZ, cc-pVTZ в программе Gamess [5].



Геометрия молекулы и ионизированной формы фосгена, силовые параметры связей, полученные в базисе 6-31G**оказались наиболее сопоставимы с данными ЭПР. Анализ энергий молекулярных орбиталей показал, что молекула COCl_2 жесткий нуклеофильный реагент, а его ион $[\text{COCl}]^+$ мягкий нуклеофил. В силу высокой реакционной способности фосгена процесс ионизации $\text{COCl}_2 \leftrightarrow [\text{COCl}]^+$ протекает в прямом направлении. Энтропия составила 288,8 Дж/моль·К, вычисленная в базисе 6-31G при температуре 298 К (эксперимент: 289,2 Дж/моль·К), энтропия соответствующего иона составила 234,5 Дж/моль·К. Учет электронной корреляции занижает термодинамические параметры и завышает энергии молекулярных орбиталей.

Литература

1. ГОСТ 12.1.005–88 (переиздание 01.01.2008). Система стандартов безопасности труда. Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны. М.: Изд-во стандартов, 1988. 75 с.; М.: Стандартинформ, 2008. 48 с.
2. Alykov N.M., Zharkikh L.I., Zolotareva N.V., Medovikova Y.E., Ocheredko Y.A. // International Journal of Applied Engineering Research. 2015. V. 10, N 21. P. 42731-42736.
3. Tanaka N., Tamezane T., Nishikiori H., Fujii T. // J. Mol. Struct. 2003. V. 631. P. 21-28.
4. Babaheydari A.K.// Oriental Journal of Chemistry. 2015. V. 31, N 2. P. 681-687.
5. Электронный ресурс: <http://www.msg.ameslab.gov/games/download.html>

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

СИВКОВА В.А.

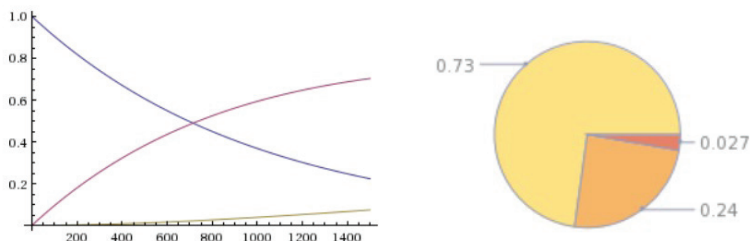
ДИТИ НИЯУ МИФИ

Стремящийся к ближайшему изучению химии должен быть сведущ и в математике.

(М.В. Ломоносов)

Соглашаясь с мнением великого русского учёного М.В. Ломоносова, являющегося примером «универсального человека», можно утверждать с полной уверенностью, что абсолютно невозможно превосходство в какой-либо естественной или технической науке без знаний математики. А чем же может быть полезна математика, кроме того, что она «ум в порядок приводит»?

Математическая модель, пренебрегая второстепенными характеристиками явления, использует основные законы, управляющие им, в математической форме. Таким образом, реально сделать вывод об эффективности и возможности совершенствования реакции, целого производственного цикла. Нитрозил хлорид – пищевая добавка E919, пеногаситель, предупреждает и снижает образование пены, придаёт продуктам приятный внешний вид. Процесс его синтеза (двухстадийная реакция $2\text{NO} + \text{Cl}_2 \rightarrow 2\text{NOCl}$) имеет практическое значение. Используя точные константы скоростей реакций при определённых условиях, условные концентрации реагентов, основные принципы математического моделирования и, например, интернет-программу WolframAlpha можно не только создать математическую модель, но и проиллюстрировать изменения концентраций исходных веществ и продуктов реакции с течением времени, а так же показать доли веществ в реакционном сосуде:



Для упрощения процесса создания математической модели полистадийной химической реакции, исключения возникновения ошибки вследствие человеческого фактора, т.е. для автоматизации процесса возможно создание программы, имеющей следующий интерфейс:

The screenshot shows a software interface on a dotted grid background. At the top, there is a chemical equation template: $\text{[] A} + \text{[] B} = \text{[] C} + \text{[] D}$. Below this, there are two input fields for rate constants: $K1 = \text{[]}$ and $K2 = \text{[]}$. At the bottom, there is a button labeled "Построить" (Build).

Рассматривая приложение дифференциальных уравнений, а также систем дифференциальных уравнений в химической кинетике с лёгкостью решается проблема построения математической модели химического процесса, включающего в себя несколько, зачастую обратимых, стадий. Создаются графики, диаграммы, иллюстрирующие процесс, кроме того возможно использование и модернизация уже существующих программ для построения моделей многостадийных химических реакций.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ АЛИФАТИЧЕСКИМИ ГРУППАМИ МОЛЕКУЛ В ПЕНТИЛОВОМ ЭФИРЕ α -D- ГЛЮКОПИРАНОЗИД) АМИНОБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ

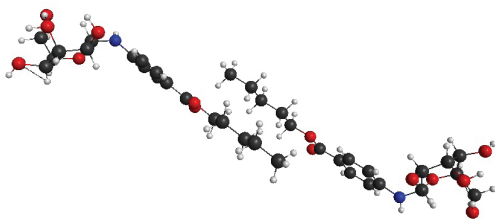
ХАРИНА А.А., Волкова Т.Г.

Ивановский государственный университет

Функциональные производные аминов, полученные при конденсации с глюкозой, являются предметом пристального внимания исследователей, благодаря проявлению различных свойств, в том числе и мезоморфных и биологической активности.

Ранее была изучена возможность образования межмолекулярных водородных связей в ассоциатах пентилового эфира α -D-глюкопиранозид)аминобензойной кислоты. Проведен сравнительный анализ экспериментального и теоретических ИК-спектров модельных димеров, показавший особенности системы водородных связей в рассматриваемых H-комплексах. Также проведена оценка энергии взаимодействия двух молекул и ее декомпозиции по методу Морокумы. Установлено, что максимальные вклады в энергию взаимодействия вносят электростатическая энергия и энергия обменного отталкивания.

Целью настоящей работы стало построение одного из вероятных димеров пентилового эфира α -D-глюкопиранозид)аминобензойной кислоты, в котором возможно гидрофобное взаимодействие между алифатическими фрагментами молекул и оценка энергии взаимодействия и ее отдельных компонентов.



Квантово-химические расчеты проводились в рамках теории самосогласованного реакционного поля в программе PC GAMESS [1] методом DFT/B3LYP/6-31G(d,p) с полной оптимизацией геометрии без ограничений по симметрии. Расчет энергии взаимодействия в исследуемом ассоциате и ее декомпозиция были проведены по методу Морокумы (HF/6-31G (PC GAMESS)).

ЭНЕРГИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ (ΔE) И ЕЕ КОМПОНЕНТЫ, ККАЛ/МОЛЬ

| E_{es} | E_{ex} | E_{pl} | E_{ct} | E_{mix} |
|--------------------------------|----------|----------|----------|-----------|
| $\Delta E = -0.7(\approx 0^*)$ | | | | |
| -0.72 | 1.05 | -0.23 | -0.79 | -0.01 |

*в скобках приведено значение энергии взаимодействия с учетом BSSE

E_{es} – электростатическая энергия, E_{ex} – энергия обменного отталкивания, E_{pl} – поляризационная энергия, E_{ct} – энергия переноса заряда, E_{mix} – энергия смешивания

Как видно из таблицы, наибольшие вклады в энергию взаимодействия двух молекул дают электростатическая энергия, энергия обменного отталкивания и энергия переноса заряда. Энергия взаимодействия, рассчитанная с учетом BSSE, для исследуемой молекулярной системы практически равна нулю, что позволяет сделать вывод о невозможности образования подобных ассоциатов.

Литература

1. Granovsky A.A. // PCGAMESS v. 7.1. <http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html>

АНАЛИЗ ЛИПОФИЛЬНОСТИ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОДНОЙ РАСТВОРИМОСТИ АНЕСТЕЗИНА И ЕГО ГЛИКОЗИЛИРОВАННОГО АНАЛОГА

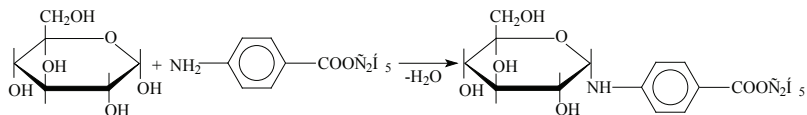
ЦАРЬКОВА А.И.¹, ВОЛКОВА Т.Г.¹, ТАЛАНОВА И.О.²

¹Ивановский государственный университет

²Ивановская государственная медицинская академия МЗ РФ

В настоящее время метод гликозилирования физиологически активного соединения является одним из перспективных способов получения лекарственных препаратов, являющихся менее токсичными и хорошо растворимыми по сравнению с исходными субстратами.

Целью настоящей работы стало проведение сравнительного анализа липофильности и моделирование водной растворимости анестезина и его гликозилированного аналога – этилового эфира п-(N- α -D-глюкопиранозид) аминокислоты, являющегося продуктом конденсации анестезина с глюкозой:



Значение коэффициента липофильности $\log P$ для стандартной системы октан-1-ол–вода определялось при помощи программного комплекса ACD/Labs [1]. Расчеты термодинамических характеристик растворения анестезина и его гликозилированного аналога проводились методом B3LYP/6-31G(p,d), изучение влияния растворителя осуществлялось в рамках континуального подхода PCM (PCGAMESS7.1) [2]. Полученные данные представлены в таблице 1.

ТАБЛИЦА 1.

| | Анестезин | Этиловый эфир п-(N- α -D-глюкопиранозид) аминобензойной кислоты |
|--|-----------------|--|
| Величина энергии сольватации и термодинамические | | |
| характеристики растворения | | |
| ЕС, ккал/моль | -10,93 | -24,18 |
| ΔH_{solv} , ккал/моль | 0,24 | 1,69 |
| ΔS_{solv} , ккал/моль.К-1 | 2,95 | 23,59 |
| ΔG_{solv} , ккал/моль | -0,63 | -5,07 |
| Доноры, акцепторы водородной связи и коэффициент липофильности | | |
| Число доноров водородной связи* | 2 | 5 |
| Число акцепторов водородной связи** | 5 | 8 |
| $\log P$ | 1,95 \pm 0,25 | 1,38 \pm 0,51 |

*Определяется как сумма OH- и NH-групп в соединении.

**Определяется как сумма атомов O и N в соединении.

Анализ таблицы показывает, что образование раствора в обоих случаях идет самопроизвольно ($\Delta G < 0$), а растворение протекает с небольшим эндозэффектом ($\Delta H_{\text{solv}} > 0$). Энтропия раствора больше суммы энтропий растворителя и растворяемого вещества ($\Delta S_{\text{solv}} > 0$). Введение глюкозного фрагмента в молекулу анестезина приводит к увеличению как атомов-доноров, так и атомов-акцепторов в молекуле субстрата, и к снижению $\log P$. Таким образом, модификация анестезина глюкозой приводит к некоторому увеличению его растворимости в воде.

Литература

1. <http://www.acdlabs.com>.
2. Granovsky A.A. PCGAMESS version 7.1, <http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html>.

Работа выполнена при поддержке Программы «Научно-исследовательские работы ФГБОУ ВПО «Ивановский государственный университет» (16-02-23).

РАЗВИТИЕ МЕТОДА МАКОИНТРЕМЕНТИРОВАНИЯ В ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ

ЧЕРНОВА Е.М., РУСАКОВА Н.П., ОРЛОВ Ю.Д., ТУРОВЦЕВ В.В.

Тверской государственный университет

Современное состояние химии и химических технологий нуждается в веществах с определенными, «заданными» параметрами и свойствами. Определение структуры молекул вещества до его синтеза возможно при использовании методов расчетного прогнозирования: квантово-механического, аддитивного, метода макроинкрементирования и др.

Электронная плотность ($\rho(r)$) несет в себе всю информацию о свойствах химического соединения. Квантово-химические методы позволяют получить распределение электронной плотности с высокой точностью, а использование дополнительных инструментов позволяет разбить молекулярную электронную плотность на атомы, группы и другие фрагменты, для исследования внутримолекулярных закономерностей электронного строения. Такое рассмотрение дает возможность обосновать и углубить метода расчетного прогнозирования наблюдаемых свойств химических соединений.

При исследовании строения соединений могут быть использованы такие характеристики $\rho(r)$ как: заряд, полная энергия и объем атомных фрагментов (R). Наиболее показательным являются заряды R , сравнение которых позволяет выделить наиболее электроотрицательный фрагмент и определить дальность распространения его индуктивного влияния на остальное соединение.

Метод макроинкрементирования заключается в выделении в структуре различных соединений фрагмента (-ов), чьи параметры электронной плотности идентичны (изменяются в пределах расчетной погрешности). В нашем случае выделение фрагмента для этого метода определяется отсутствием его индуктивного воздействия на остальное соединение.

Были исследованы гомологические ряды $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$ [1], $(\text{CH}_3)_2\text{CH}(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$ [2], $(\text{CH}_3)_3\text{C}(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$ [3], $(\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n)_2\text{CH}$, $(\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n)_3\text{CCH}_3$, $(\text{CH}_2)_n\text{CH}=\text{CH}_2$ [4], $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{C}\equiv\text{CH}$ [4], $\text{C}\cdot\text{H}_2(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$ [1], $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{C}\cdot=\text{CH}_2$ [5], $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{CH}=\text{C}\cdot\text{H}$ [5], $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{C}\equiv\text{C}\cdot$.

На основании распределения электронной плотности в этих соединениях выделены опорные фрагменты для метода макроинкрементирования:

CH_3CH_2- , $\text{CH}_2=\text{CH}(\text{CH}_2)_2-$, $\text{CH}\equiv\text{C}(\text{CH}_2)_2-$, $\text{C}\cdot\text{H}_2(\text{CH}_2)_2-$, $\text{C}\cdot\text{H}=\text{CH}(\text{CH}_2)_2-$, $\text{CH}_2=\text{C}\cdot\text{H}(\text{CH}_2)_2-$, $\text{C}\cdot\equiv\text{C}(\text{CH}_2)_2-$, $\text{CH}((\text{CH}_2)_2)_3-$, $\text{C}((\text{CH}_2)_2)_4-$, $(\text{CH}_3)_2\text{CH}(\text{CH}_2)_2-$, $(\text{CH}_3)_3\text{C}(\text{CH}_2)_2-$, $(\text{CH}_3)\text{CH}((\text{CH}_2)_2)_2-$, $(\text{CH}_3)_2\text{C}((\text{CH}_2)_2)-$, $(\text{CH}_3\text{CH}_2)\text{C}((\text{CH}_2)_3)-$, $(\text{CH}_3\text{CH}_2)\text{CH}((\text{CH}_2)_2)_2-$, $(\text{CH}_3\text{CH}_2)_2\text{C}((\text{CH}_2)_2)-$, $(\text{CH}_3\text{CH}_2)\text{C}((\text{CH}_2)_3)-$.

Выделенные фрагменты можно использовать для прогнозирования наблюдаемых свойств органических веществ. Данный способ разбиения структур позволяет минимизировать ошибки аддитивных методов.

Литература

1. Туровцев В.В., Орлов Ю.Д., Лебедев Ю.А. // Журнал физической химии. 2009. Т. 83, №2. С. 313-321.
2. Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. // Журнал физической химии. 2010. Т. 84, № 6. С. 1074-1080.
3. Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. // Журнал физической химии. 2010. Т. 84, № 7. С. 1296-1303.
4. Чернова Е.М., Ситников В.Н., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. // Вестник Казанского технологического университета. 2014. Т. 17, № 24. С. 13-15.
5. Чернова Е.М., Ситников В.Н., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. // Вестник Казанского технологического университета. 2015. Т. 18, № 19. С. 19-21.

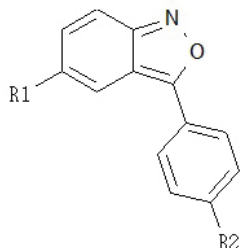
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ 5-R-3-АРИЛ-2,1-БЕНЗИЗОКСАЗОЛОВ

Шайдакова А.А., Пирогова С.А., Калина С.А.,
Сажина А.А., Котов А.Д.

Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова

Математическое моделирование воздействия гетероциклических соединений на живые организмы является весьма актуальной проблемой на стыке химии, математики, биологии и фармацевтики. В данной работе мы провели корреляционный анализ «структура - свойства» для

производных 2,1-бензизоксазола на основе экспериментальных данных по их мутагенности и цитотоксичности [1]. Структуры исследованных 2,1-бензизоксазолов и их мутагенные и цитотоксические показатели представлены на рис. 1 и в табл. 1.



- 1 $R_1 = C_4H_7O_2$
 2 $R_1 = CHO, R_2 = Cl$
 3 $R_1, R_2 = Cl$
 4 $R_1 = C_6H_3OCl_2$
 5 $R_1 = I$
 6 $R_1 = C_3H_2O_2$

Рис. 1. Производные 2,1-бензизоксазолов.

Таблица 1. Мутагенные и цитотоксические показатели 2,1-бензизоксазолов (концентрация 0,05 %)

| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
|---------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| выж-ть | 465.0 | 478.0 | 408.3 | 504.0 | 321.3 | 471.7 |
| % выж-ти, N | 91.1 | 93.6 | 80.0 | 98.7 | 62.9 | 92.4 |
| мут-ген | 5.3 | 8.3 | 9.3 | 7.0 | 6.7 | 11.3 |
| мутации, %, M | 1.1 | 1.7 | 2.3 | 1.4 | 2.1 | 2.4 |

Для построения корреляционных зависимостей был осуществлен расчет основных дескрипторов 2,1-бензизоксазолов с использованием программного пакета PC-GAMESS v. 7.0 (табл.2).

Таблица 2. Физико-химические параметры 2,1-бензизоксазолов.

| B-во | Total Energy | Final Heat | Dipole Sum | Ion Potential | N charge | O charge | lgP |
|------|--------------|------------|------------|---------------|----------|----------|------|
| 1 | -3327,32363 | 525,7766 | 2,192 | 8,941585 | -0,25656 | -0,40423 | 3,23 |
| 2 | -2868,51671 | 134,47603 | 0,802 | 9,226393 | -0,25512 | 0,090922 | 3,60 |
| 3 | -2704,19461 | 219,83071 | 0,626 | 9,147158 | -0,2391 | 0,096815 | 4,44 |
| 4 | -3789,77855 | 191,46446 | 3,01 | 8,993031 | -0,2448 | 0,090462 | 5,99 |
| 5 | -2406,97419 | 365,6736 | 2,835 | 8,71558 | -0,24527 | 0,094803 | 4,21 |
| 6 | -3212,2271 | 241,93 | 6,838 | 3,01362 | -0,01598 | -0,39244 | 2,69 |

С помощью программы STATISTICA 7 Portable на основе обучающей выборки (вещества 1-4) были построены регрессионные уравнения, прогнозирующее мутагенное и цитотоксическое воздействие производных 2,1-бензизоксазола.

Математические модели прогнозирующие мутагенность:

$$y = 16,97316 - 0,00019_{x_1} - 0,86857_{x_2} + 0,61712_{x_3} + 56,85103_{x_4} + 3,27672_{x_5}; \quad (1)$$
$$R^2 = 0,999; p = 0,0011$$

Используемые дескрипторы в уравнении (1): Total Energy (x_1), Dipole Sum (x_2), Ion Potential (x_3), N charge (x_4), O charge (x_5).

Математические модели прогнозирующие цитотоксичность:

$$y = 121,429 - 0,309_{x_1} - 0,154_{x_2} - 476,413_{x_3} + 341,325_{x_4} - 181,661_{x_5} \quad (2)$$
$$R^2 = 0,94; p = 0,002$$

Используемые дескрипторы в уравнении (2): Total Energy (x_1), Final Heat (x_2), N charge (x_3), O charge (x_4), lgP (x_5).

Литература

1. Соковиков Я.В., Котов А.Д., Соковицова И.Н., Орлов В.Ю. // Токсикологический вестник. 2002. N 2. С. 29-33.

АНАЛИЗ АНТИОКИСЛИТЕЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ 5-ГИДРОКСИ-6-МЕТИЛУРАЦИЛА ПРИ ОКИСЛЕНИИ ИЗОПРОПИЛОВОГО СПИРТА

САФАРОВА И.В.¹, ШАРИПОВА Г.М.¹, БУЛЯКОВА Р.¹,
САХИБГАРЕЕВА М.В.²

¹Башкирский государственный университет

²ООО "БашНИПИНефть"

Окисление органических соединений относится к классу вырожденно-разветвленных цепных реакций, механизм которых достаточно хорошо изучен [1]. В то же время определение кинетических характеристик элементарных стадий в ряде случаев затруднительно или даже невозможно, что связано с методическими сложностями регистрации малых концентраций и крайне малым временем жизни лабильных промежуточных частиц (атомов и радикалов). В связи с этим для решения обратной задачи химической кинетики – восстановление констант скорости элементарных стадий в рамках конкретного механизма реакции – применение методов математического моделирования становится весьма актуальным. В связи с этим в настоящей работе для исследования механизма реакции радикально-цепного окисления изопропилового спирта в присутствии добавок 5-гидрокси-6-метилурацила, выступающего в качестве ингибитора, был применен программный комплекс "ХимКинОптима" [2].

Экспериментальной базой для исследования обсуждаемого механизма служили результаты, полученные при изучении окисления изопропилового спирта, ингибированного добавками 5-гидрокси-6-метилурацила [3].

Механизм реакции радикально-цепного окисления изопропилового спирта в присутствии добавок ингибитора детально анализировали путем решения обратной кинетической задачи индексным методом глобальной оптимизации в программном комплексе “ХимКинОптима”. В результате были восстановлены значения констант скорости всех элементарных стадий, при которых наблюдается наименьшее расхождение между рассчитанными и экспериментальными кинетическими кривыми расхождения урацила:

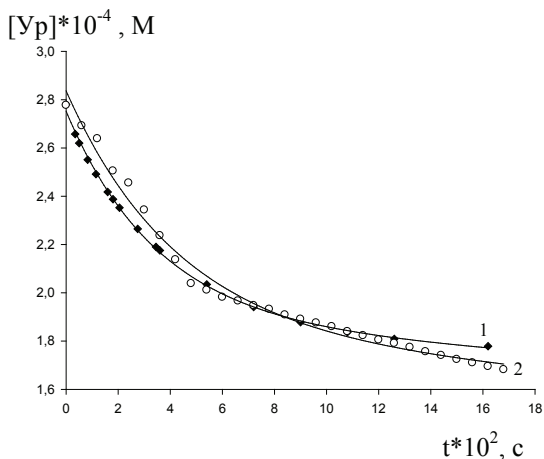


Рис. Рассчитанная (1) и экспериментальная (2) и кинетические кривые расхождения 5-гидрокси-6-метилурацила.
 $[Ур]_0 = 2.8 \times 10^{-4}$ моль/л, $V_i = 4 \times 10^{-7}$ 348 К.

Литература

1. Денисов Е.Т., Мицкевич Н.И., Агабеков В.Е. Механизм жидкофазного окисления кислородсодержащих соединений. Минск: Наука и техника, 1975.
2. Тихонова М.В., Масков Д.Ф., Спивак С.И., Губайдуллин И.М. Программный комплекс “ХимКинОптима” для математического моделирования и оптимизации химических реакций на основе кинетики с использованием параллельных вычислений и базы данных: свидетельство о регистрации электронного ресурса // ИНИПИ РАО ОФЭРНИО. № 19247; дата рег. 30.05.2013.
3. Сафарова И.В., Даутова И.Ф., Ахатова Г.Р., Герчиков А.Я., Хурсан С.Л. Взаимодействие пероксильных радикалов с урацилами в акте ингибирования окисления изопропилового спирта // Доклады Академии наук. 2010. Т. 431, №4. С. 487-489

Секция

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЭКОНОМИКЕ И СОЦИОЛОГИИ

Председатель жюри –

Беляева Г.Д., к.э.н., доцент,
декан экономико-математиче-
ского факультета СарФТИ НИЯУ
МИФИ, зав.кафедрой экономиче-
ской теории, финансов и бухгал-
терского учета

Члены жюри –

Макарец А.Б., и.о. зав.кафе-
дрой прикладной информатики,
ст. преподаватель кафедры вы-
числительной и информационной
техники СарФТИ НИЯУ МИФИ

Соловьев Т.Г., к.э.н, доцент ка-
федры прикладной информатики
СарФТИ НИЯУ МИФИ

Федоренко Г.А., к.э.н., доцент,
декан ФПК, доцент кафедры вы-
числительной и информационной
техники СарФТИ НИЯУ МИФИ

К ВОПРОСУ О ПРИНЯТИИ РЕШЕНИЙ В ЭКОНОМИКЕ

ЛАПАЕВ Д.Н.

*Нижегородский государственный технический университет
им. Р.Е. Алексеева*

Сравнительной оценке эффективности и поиску предпочтительных альтернатив в экономической науке и практике уделялось существенное внимание на всех этапах функционирования государства и общества. Проблема является весьма значимой независимо от укладов отдельных экономик. Актуальность ее растет совместно с развитием научно-технического прогресса в связи с масштабным повышением затрат по реализации сложных проектов в условиях глобальной конкуренции, и ограниченностью различных ресурсов [1]-[3].

В качестве основных аспектов, которые следует учитывать при принятии научно-обоснованных решений, необходимо указать многокритериальность выбора и требование учета интересов стейкхолдеров. Несмотря на важность отмеченных обстоятельств в научной-экономической литературе им не уделяется надлежащего внимания.

Совместный, комплексный анализ совокупности показателей призван приблизить постановку задачи к экономическим реалиям. Однако многокритериальность сопоставления эффективности рассматриваемых систем оборачивается значительным осложнением выбора лучших вариантов. Как правило, на практике присутствует противоречивость оценочных показателей, т.е. улучшение одних показателей осуществляется за счет ухудшения других.

Ключевым моментом остается необходимость анализа эффективности систем различными заинтересованными сторонами. В современной экономике в процессе решения многих общественно-значимых задач взаимодействуют несколько стейкхолдеров. К таковым относятся собственников, менеджеров, инвесторов, кредиторов, государственные органы власти различных иерархических уровней, общественные организации и т.п. Интересы сторон полностью не совпадают, а в ряде случаев характеризуется антагонизмом. При этом выбор совместных решений существенно затрудняется. Возникает потребность согласования запросов каждого стейкхолдера в рамках выработанных схем компромисса.

Для успешного решения задач сравнительной оценки вариантов необходима методология, опирающаяся на системный многокритериальный анализ и комплексно учитывающая интересы сторон, а также соответствующий инструментарий. Приоритет следует отдать содержательной стороне вопроса, а экономико-математические методы задействовать как действенный инструмент количественного анализа [1]-[3].

В многокритериальном сравнительном анализе изначально применяются принцип доминирования, который при отсутствии противоречия показателей приведет к отбору лучшей альтернативы. Однако в реальных условиях принцип доминирования выполняется редко, и тогда обращаются к принципу Парето, позволяющему сформировать эффективное множество вариантов. Элементы паретовского множества признаются несравнимыми между собой и допускаются к окончательному выбору единственного оптимального решения.

Литература

1. Лапаев, Д.Н. Многокритериальная оценка экономического состояния хозяйствующих субъектов: монография / Д.Н. Лапаев. – Н. Новгород, 2008.
2. Лапаев, Д.Н. Многокритериальное принятие инвестиционных решений: монография / Д.Н. Лапаев. – Н. Новгород, 2009.
3. Лапаев, Д.Н. Многокритериальное принятие решений в экономике: монография / Д.Н. Лапаев. – Н. Новгород, 2010.

РАСКРЫТИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ПРИ СРАВНЕНИИ ЭФФЕКТИВНЫХ ЭКОНОМИЧЕСКИХ СИСТЕМ

ЛАПАЕВА О.Н.

НИЖЕГОРОДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ.
Р.Е. АЛЕКСЕЕВА

При многокритериальном принятии решений в экономике используются принцип доминирования и принцип Парето. Первый принцип позволяет непосредственно выделить лучший вариант, а второй – сформировать решение в виде множества неулучшаемых альтернатив [1]-[3]. По результатам применения принципа Парето остается некоторая неопределенность в плане окончательного отбора единственной системы из двух и более вариантов, раскрываемая различными способами. Наиболее простым считается метод выделения главного показателя и перевода остальных в разряд ограничений, что в итоге приведет к однокритериальному выбору. Сохранить многокритериальность позволит сравнительный анализ эффективных альтернатив.

Рассмотрим следующий трехкритериальный пример. Информация по шести альтернативам $S_1 – S_6$ приведена в таблице. Необходимо выделить эффективное множество и лучший вариант.

ТАБЛИЦА
СРАВНИВАЕМЫЕ ВАРИАНТЫ

| Показатели | Альтернативы в порядке возрастания эффективности | | | | | |
|-------------------|---|----|----|----|----|----|
| K1 | S4 | S6 | S1 | S3 | S2 | S5 |
| K2 | S1 | S6 | S5 | S2 | S3 | S4 |
| K3 | S5 | S1 | S6 | S4 | S3 | S2 |

Имеем эффективные альтернативы S5, S4 и S2, характеризуемые оптимальными величинами показателей. Вариант S2 доминирует альтернативы S1 и S6, расположенные слева от него в таблице. Паретовское множество завершит оставшийся вариант S3. Получим эффективное решение в виде Мэф = {S2, S3, S4, S5}. Из шести альтернатив было две, однако с окончательным ответом нет полной ясности.

Можно экспертно принять один из показателей за главный. Тогда имеем решение в виде альтернативы S5, или S4, либо S2. Однако таким способом нельзя получить альтернативу S3, хотя она также принадлежит паретовскому множеству. Более логично выбирать главный показатель, минуя процедуру формирования эффективного множества в полном объеме.

Вместе с тем возможен и многокритериальный подход [1]-[2]. Положим, что в нашем примере ухудшение одного из показателей допустимо за счет улучшения двух других. Обратимся к частным оптимумам по показателям K1 – K1. От альтернативы S5 с улучшением второго и третьего показателей перейдем к вариантам S2 – S4, находящимся справа от нее в таблице. От альтернативы S4 с улучшением первого и третьего показателей перейдем к вариантам S2 и S3. От альтернативы S2 переход с улучшением первого и второго показателей неосуществим. Совместно переходя от оптимумов S2, S4 и S5 к прочим альтернативам с улучшением двух показателей из трех, получим окончательный ответ в виде варианта S2.

Если предположить, что допустимо улучшение одного показателя за счет ухудшения двух других, то реализуется классический однокритериальный выбор.

Литература

1. Лапаев, Д.Н. Многокритериальное принятие решений в экономике: монография / Д.Н. Лапаев. – Н. Новгород, 2010.
2. Лапаев, Д.Н. Многокритериальное сравнение альтернатив в экономике: монография / Д.Н. Лапаев, О.Н. Лапаева. – Н. Новгород, 2012.
3. Лапаева, О.Н. Многокритериальная оценка экономического состояния предприятий и отраслей промышленности и выбор предпочтительных альтернатив: монография / О.Н. Лапаева. – Н. Новгород, 2015.

«ЦИФРОВОЕ ПРЕДПРИЯТИЕ» – КОНЦЕПЦИЯ КОМПЛЕКСНОЙ АВТОМАТИЗАЦИИ СОВРЕМЕННОГО ПРЕДПРИЯТИЯ ЯДЕРНО-ОРУЖЕЙНОГО КОМПЛЕКСА

Соловьев Т.Г., Федоренко Г.А.

САРФТИ НИЯУ МИФИ

Предприятиям с высоко-технологичными производствами, каковыми в основном и являются предприятия ядерно-оружейного комплекса, необходим новый подход к осуществлению основной деятельности, который даст возможность не просто достичь результата, а сделать это более оптимально, эффективно и экономно.

На сегодняшний день в большинстве случаев на предприятиях отсутствует современная эффективная система проектного управления, комплексная система автоматизации производства и автоматизированная система управления ресурсами предприятия в целом. Существенная модернизация предприятий, в том числе путем внедрения информационных технологий обеспечения разработки и выпуска продукции, является необходимым условием выполнения поистине грандиозных задач по реализации государственной программы вооружения.

Комплексная автоматизация предприятия согласно концепции «Цифровое предприятие» даст возможность не просто получить надежный высоко-производительный инструмент автоматизации, но и органично ориентироваться в своем развитии на заложенные в нем бизнес-процессы и, отталкиваясь от этого, двигаться вперед и на равных конкурировать на мировом рынке вооружений.

Важным в сложившихся условиях является понимание того, что для получения наибольшего эффекта от внедрения информационных систем необходимо использовать ПО разработчиков мирового уровня, базирующееся на лучших мировых практиках промышленного производства. Современная мировая ситуация по отношению к России накладывает определенные ограничения на использование зарубежных информационных систем. Государственная политика по импортозамещению программного обеспечения предусматривает в планах к 2025 году снижение доли иностранного программного обеспечения, используемого в государственных нуждах, с нынешних 75-97% до 10-50%.

На площадке Федерального ядерного центра (РФЯЦ-ВНИИЭФ) к 2019 году планируется разработать отечественную систему управления сквозным жизненным циклом продукта, которая будет являться основной функционирования предприятия ядерно-оружейного комплекса в концепции «Цифровое предприятие». Компоненты системы включают сквозную 3D-технологии полного жизненного цикла изделий, комплекс систем управления предприятием и управления производством

изделий, информационную систему оптимизации и реинжиниринга бизнес-процессов, защищенную аппаратно-программную платформу. При разработке системы максимально соблюдаются принципы импортозамещения зарубежного программного обеспечения и используются отечественные разработки в области управления предприятием, инженерных расчетов и моделирования, оптимизации и реинжиниринга бизнес-процессов и др. Планируется, что технологическая платформа системы будет базироваться на отечественной операционной системе и в основу системы управления базами данных ляжет свободно распространяемое программное обеспечение.

Проекту по разработке отечественной системы управления сквозным жизненным циклом продукта предшествовало создание РФЯЦ-ВНИИ-ЭФ типовой информационной системы ядерного оружейного комплекса (ТИС ЯОК) на базе импортонезависимых решений. Работы велись в рамках программы трансформации ИТ «Росатома». В 2015 году система перешла в промышленную эксплуатацию в опытной зоне - РФЯЦ-ВНИИЭФ.

Уровень использования информационных технологий на предприятиях ОПК, Государственных корпорациях, органах исполнительной власти во многом определяет уровень обороноспособности и безопасности государства.

ЭКОНОМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ СОВРЕМЕННЫХ МЕЖДУНАРОДНЫХ ОТНОШЕНИЙ

Мисатюк Е.В.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

В докладе исследуются экономические составляющие современных международных отношений. В настоящее время экономические аспекты международных отношений включает в себя, как минимум, три составляющие: материальные ресурсы в системе международных отношений, экономическую безопасность и экономико-политический аспект глобализации мирового хозяйства. Представлен детальный анализ этих аспектов.

Автор обосновывает положение о том, что на глобальный уровень в последнее время вышли: проблема экономической стабильности в контексте тесной хозяйственной взаимосвязи развитых и развивающихся государств; вопросы обеспечения экономической безопасности; проблема происходящей смены модели глобализации, выражающаяся в тенденциях регионализации и частичной локализации стран.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ИНВАРИАНТНОГО ОБЪЕКТА УПРАВЛЕНИЯ

Синицын М.А.

Тульский государственный университет

В период экономического кризиса работодатель получает возможность выбора из круга соискателей работника, соответствующего наиболее строгим профессиональным требованиям. Имеется ряд средств объективного контроля психофизиологических параметров работника [1]. В то же время работник может улучшить свои показатели, используя систему тренажеров [2].

Для тренажера нового типа, сочетающего в себе элементы психофизиологической диагностики и тренировки динамического «предвидения», предлагается усложненная модель объекта управления.

Интерфейс тренажера отображает положение объекта управления и текущую величину команды, формируемой оператором.

Поведение объекта тем труднее предсказать, чем сложнее его динамическая модель. Движение в отдельном канале (вертикальном или горизонтальном) описывается системой уравнений:

$$\ddot{y}_1 = k_1 \dot{y}_1 + k_2 y_3 + k_3 x_1;$$

$$\dot{y}_2 = k_4 y_3 + k_5 x_1 + u_1;$$

$$y_3 = y_1 - y_2;$$

$$\dot{y}_4 = k_6 y_2.$$

где: $y_1 - y_3$ - динамические переменные объекта;
 y_4 - выходная координата объекта, отображаемая на экране;
 $k_1 - k_6$ - постоянные коэффициенты модели объекта;
 x_1 - управляющее воздействие на объект, формируемое из команды оператора;

u_1 - помеха, действующая на объект.

Движение объекта определяется величиной переменной y_3 , которая дважды интегрируется. Поэтому даже при постоянной ее величине отклонение y_4 во времени нарастает по параболе. Такое поведение объекта становится неожиданностью для оператора, и остановить набравший скорость объект будет непросто. Эта задача усложняется тем, что величина y_3 нарастает также не мгновенно, а в результате некоторого переходного процесса, зависящего от величины управляющего сигнала x_1 .

Выполнение тренировочной задачи – удержание объекта в разрешенной зоне, потребует от оператора выработки навыка предупреждающих

действий, который не может стать просто моторным, поскольку характеристики объекта могут изменяться в разных сеансах.

Объект управления можно сделать инвариантным к развороту системы координат, если формировать команду управления не отдельно по вертикальному и горизонтальному каналам, а пропорционально радиусу отклонения. В таком случае движение в направлении, перпендикулярном радиусу, парировать значительно трудней, и выработанный оператором навык упреждения оказывается недостаточным для обеспечения устойчивости.

Таким образом, варьируя математическую модель объекта управления в тренажере, можно не только проводить первичный отбор операторов для работы на сложной технике, но и тренировать различные психофизиологические навыки, равно как и оценивать обучаемость, стрессоустойчивость и гибкость мышления.

Литература

1. Комплекс для психофизиологических исследований компьютерный КПФК-99 «Психомат»: Руководство по эксплуатации - Российская Академия Медицинских Наук ВНИИ Медицинского Приборостроения, ЗАО «ВНИИМП-ВИТА», 2006.
2. Комплекс компьютеризированный МБН-БОС1. Руководство пользователя. М.: Научно-медицинская фирма МБН, 2002. – 21 с.

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ ТРАНСПОРТНОГО ПОТОКА ПРИМЕНЕНИЕМ АЛГОРИТМА МУРАВЬИНОЙ КОЛОНИИ

Есаков Ю.Ю.

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет имени Н.П. Огарева

Одним из способов экономии ресурсов при перевозках является применение систем оптимизации маршрутов различного назначения для построения эффективной транспортной сети. Данная работа посвящена исследованию задачи, состоящей в нахождении минимальных маршрутов для посещения заданного множества адресов с возвращением в начальное местоположение после окончания поездки. Классической задачей оптимизации транспортных путей является задача коммивояжера, здесь рассматривается частное решение задачи коммивояжера применением алгоритма муравьиной колонии.

Муравьи социальные насекомые живущие в пределах определенной системы - колонии. Принципиальной особенностью взаимодействия

внутри системы является использование ее элементами только локальной информации, без какого-либо централизованного управления и обращения к глобальному образу. Их поведение во время поиска пропитания, обхождения препятствий, построения жилища и т.п. приближается к теоретически оптимальному значению. При своём движении муравей метит путь специальным веществом - феромоном, который используется другими муравьями для выбора пути. При выборе направления движения муравьи учитывают интенсивность следа феромона, таким образом, более короткий путь получает преимущество. Впервые использовать природный механизм муравьиной колонии для задач оптимизации предложил Марко Дориго в 1992 г.

Муравьиный алгоритм строится на моделировании поведения муравьёв, связанного с их способностью быстро находить кратчайший путь от муравейника к источнику пищи и адаптироваться к изменяющимся условиям, находя новый кратчайший путь. Муравьи имитируют транспортные средства, маршруты строятся пошагово выбором следующего клиента до тех пор, пока не будут обслужены все клиенты.

Движение муравья и выбор клиента основывается на следующем уравнении:

$$P = \frac{\tau(i, j)^{\alpha} * \eta(i, j)^{\beta}}{\sum_k \tau(i, j)^{\alpha} * \eta(i, j)^{\beta}} \quad (1)$$

где τ - количество феромона на пути между текущей и возможной позиции, α и β - параметры, которые являются показателями интенсивности феромона и расстояния при выборе следующего клиента соответственно. Если $\alpha = 0$, то более вероятным будет переход в ближайшие города. Если $\beta = 0$, тогда сработает феромонное усиление, которое приведет к завершению работы алгоритма через совпадение маршрутов всех муравьёв.

В результате проводимого исследования, компьютерное моделирование показало, что применение муравьиного алгоритма обеспечивает наиболее быстрое нахождение решения задачи коммивояжера по сравнению с другими методами, например, методом полного перебора. Также эксперимент свидетельствует, что число решений никогда не приходит к одному для всех муравьёв маршруту, алгоритм продолжает создавать новые решения, которые могут быть ближе к оптимальному. Качество получаемых решений во многом зависит от настроечных параметров на основе текущего количества феромона.

ПОНЯТИЕ ПРОЦЕССНОГО ПОДХОДА К УПРАВЛЕНИЮ

РОМАНОВСКАЯ Е.В., СЕВРЮКОВА А.А.

*Нижегородский государственный педагогический университет
им. К. Минина*

Процессный подход к управлению – делегирование полномочий и ответственности через бизнес-процессы, где бизнес-процесс это устойчивая многократно повторяющаяся деятельность, преобразующая ресурсы в результаты. В рамках процессного подхода предполагается выделение проблемного бизнес-процесса и его участников, назначение одного из участников бизнес-процесса владельцем и делегирование полномочий и ответственности по управлению данным бизнес-процессом. Возникает матричная структура при управлении регулярной деятельностью. Участник бизнес-процесса подчиняется функциональному руководителю и владельцу бизнес-процесса, что связано с применением одновременно двух подходов к управлению регулярной деятельностью: функционального и процессного.

Разработка и внедрение процессного подхода к управлению – достаточно сложная и ресурсоемкая задача. Поэтому он должен применяться только для ограниченного количества наиболее проблемных бизнес-процессов. При принятии решения о применении процессного подхода необходимо всегда соотносить получаемый эффект с его себестоимостью.

Определение же целевого значения требует досконального изучения бизнес-процесса. Последовательность работ, уровень автоматизации, применяемая технология, квалификация исполнителей существенно влияет на значения, которые будут считаться оптимальными для той или иной системы. Кроме того, существенное влияние на скорость получения результата оказывает наличие или отсутствие статистических данных о результатах бизнес-процесса и их достоверность. Процесс определения целевого значения для KPI может продлиться от нескольких часов до нескольких месяцев.

Выделим основные преимущества процессного подхода: координация действий различных подразделений в рамках процесса; ориентация на результат процесса; повышение результативности и эффективности работы организации; прозрачность действий по достижению результата; повышение предсказуемости результатов; выявление возможностей для целенаправленного улучшения процессов; устранение барьеров между функциональными подразделениями; сокращение лишних вертикальных взаимодействий; исключение невостребованных процессов; сокращение временных и материальных затрат.

Таким образом, исходя из представленных выше пояснений, следует заключить:

В настоящее время процессный подход, является теоретической основой для многих управленческих концепций, он представляет очередной этап развития эволюции в управлении на предприятии и имеет своё научное направление. Процессный подход благодаря упору на новые информационные технологии способен за счёт инновационных программ на оптимизацию производства достичь максимального результата при имеющихся ресурсах.

Решение проблем дальнейшего развития процессного подхода на региональном уровне должно приводить к формированию механизмов и методов управления с учетом современных достижений в области социологии, экономики, управления, информационных технологий, а также эколого-экономических особенностей конкретного региона.

Литература

1. Гарина Е.П., Романовская Е.В., Андрияшина Н.С. Изучение методического инструментария оценки эффективности процесса разработки новой продукции в промышленности // Научное обозрение. 2015. № 10-1. С. 396-400.
2. Удалов Ф.Е., Кузнецов В.П., Гарина Е.П. Изучение методов процессного управления промышленным предприятием // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2011. № 5-2. С. 232-237.

КАТЕГОРИАЛЬНАЯ МАТРИЦА ПОНЯТИЙ, СВЯЗАННЫХ С УСТОЙЧИВЫМ РАЗВИТИЕМ ПРОМЫШЛЕННЫХ ПРЕДПРИЯТИЙ

Козлова Е.П.

Нижегородский государственный педагогический университет им. К. Минина

Для современной российской экономики наиболее актуальными являются проблемы обеспечения экономической устойчивости и конкурентоспособности промышленных предприятий. В таких условиях одним из важнейших аспектов является устойчивое развитие промышленности. Решение данной задачи влечет за собой понимание сущности и содержания устойчивого развития, а так же обеспечивающих его механизмов. Изучение проблемы формирования механизмов устойчивого развития промышленных предприятий, в первую очередь, требует уточнения в экономическом смысле такой категории как «механизмы устойчивого развития промышленных предприятий». Для

этого рассмотрим определения понятий «механизм», «устойчивость» и «развитие».

Определим механизм как комплекс последовательных действий, который способствует функционированию, продвижению и развитию экономических систем.

Устойчивость на уровне предприятия зависит от сбалансированного сочетания производственных, социальных, кадровых, маркетинговых, структурных и управленческих подсистем подверженных воздействию внешних и внутренних факторов с целью достижения заранее обозначенных результатов.

Развитие это процесс необратимых, направленных и логичных изменений, происходящих под воздействием как внутренних, так и внешних факторов, приводящий к становлению количественных, качественных и структурных преобразований.

Категория «устойчивое развитие» также имеет множество определений. А.Д. Урсул отмечает что «в принципе их будет еще больше, поскольку идет процесс осознания будущего развития, которое в принципе неопределенно и многовариантно» [1].

Исходя из вышеизложенного, учитывая специфику промышленных предприятий и используя математические методы моделирования, составим категориальную матрицу понятия «механизм устойчивого развития промышленных предприятий». Для этого мы составим квадратную матрицу категории «механизм устойчивого развития» (обозначим – МУР) и умножим ее на категорию «промышленное предприятие», что будет представлять собой вектор \vec{P} , который задает направление всему определению.

Матрица МУР состоит из понятий: механизм, устойчивость, развитие.

| | | |
|----------------------------------|-----------------------------|--|
| <i>комплекс действий</i> | <i>функционирование</i> | <i>продвижение</i> |
| <i>МУР = сочетание подсистем</i> | <i>воздействие факторов</i> | <i>достижение обозначенных результатов</i> |
| <i>изменения</i> | <i>воздействие факторов</i> | <i>преобразования</i> |

Под промышленным предприятием будем понимать организацию, производящую промышленную продукцию и являющуюся, как правило, точечным объектом: завод, фабрика, шахта, карьер, комбинат и др.

\vec{P} (организация промышленная продукция точечный объект)

Таким образом, механизм устойчивого развития промышленного предприятия можно определить как комплекс действий организации в рамках производственных, социальных, кадровых, маркетинговых, структурных и управленческих подсистем промышленного предприятия, способствующих функционированию, продвижению и развитию объекта под воздействием как внутренних, так и внешних факторов, приводящих к становлению количественных, качественных и структурных преобразований предприятия, с целью достижения заранее обозначенных результатов.

Литература

1. Урсул А.Д. Концептуальные проблемы устойчивого развития // Бюллетень РАН. Использование и охрана природных ресурсов в России. –2010. – № 1. – С. 30–38.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ БИЗНЕС-ПРОЦЕССОВ
ПРОМЫШЛЕННОГО ПРЕДПРИЯТИЯ**

ГАРИН А.П.

Нижегородский государственный педагогический университет им. К. Минина

Доминирующее значение в научных разработках проблем организации производства и управления промышленными предприятиями, начиная с 1990-х гг., занимают работы по созданию интегрированных адаптивных производственных систем и технологий управления на основе комплекса бизнес-процессов. В России проблематика управления бизнес-процессами находится на этапе теоретического поиска и осуществляются преимущественно в области организационного проектирования, инженерии и автоматизации производства [1, 2]. Имеющиеся результаты научных исследований применительно к условиям отечественных промышленных предприятий нередко весьма противоречивы и не базируются на системном подходе. Дискуссионными остаются вопросы, связанные с выделением системы бизнес-процессов в момент перехода предприятия от функционально-ориентированного управления к процессному, распространенному в настоящее время в отечественном производстве. Цель исследования – оценить операционную эффективность реализации процессного управления в отечественной практике в условиях преобразования формата деятельности типичного предприятия отрасли путем моделирования его бизнес-процессов. В процессе исследования планируется использовать методы системного и сравнительного анализа, метод экспертных оценок.

В статье предлагаются рекомендации по использованию методики формирования ландшафта бизнес-процессов предприятий отрасли, учитывающие переход предприятия от линейно-функционального управления к процессному. Преобразование формата деятельности предприятия видится за счет повышения операционной эффективности существующих бизнес-процессов с применением их «вертикального и горизонтального сжатия» [4], путем проектирования гибридных процессов производства [3], в частности рассматривается переход от производства партиями к созданию потока единичных изделий на эталонных участках; визуализация и контроль параметров процессов, имеющихся

на предприятии; возможность сокращения бизнес-процессов, обслуживающих технологический процесс производства. Предложены целевые показатели оценки результативности основных бизнес-процессов, полученные в разрезе отдельного производства отечественного автомобилестроительного предприятия, отражающие интересы большего числа внешних участников системы, а также тех процессов, которые не имеют резервов для совершенствования и в дальнейшем будут подлежать изменению. Результаты исследования выступят основой для дальнейшей проработки вопросов создания сбалансированного комплекса бизнес-процессов предприятия при производстве высокотехнологичного продукта.

Литература

1. Егорова А.О. Механизм разработки и реализации конкурентной стратегии предприятий машиностроения: монография / А.О. Егорова, В.П. Кузнецов. – Н.Новгород: Нижегородский государственный педагогический университет имени Козьмы Минина. – 2014. – 180 с.
2. Романовская Е.В., Семахин Е.А., Андрияшина Н.С. Система управления бережливым производством в автомобильной промышленности // Актуальные проблемы гуманитарных и естественных наук. – 2014. - №4-1. – С.264-267
3. Dassisti M. (2010), HY-CHANGE: a hybrid methodology for continuous performance improvement of manufacturing processes/International Journal of Production Research, vol. 48, no. 15, pp. 4397-4442.
4. Gupta, S., V. Krishnan (2009). Integrated component and supplier selection for a product family. Production and Oper. Management 8(2), pp.163-181.

ФОРМИРОВАНИЕ МОДЕЛИ СЛОЖНОГО ПРОДУКТА В ПРОМЫШЛЕННОСТИ

ГАРИНА Е.П.

*Нижегородский государственный педагогический университет
им. К. Минина*

Исторически сложилось так, что развитие производства долгое время определялось развитием производственных мощностей, изменением организации процесса производства в целом; формированием системы адаптивного инструментария и развитием новых технологий. Создание и развитие производственного продукта в этой системе являлось отдельной процедурой, а в лучшем случае – отдельным бизнес-процессом. Сам же продукт выступал объектом воздействия. Как следствие,

очевидным недостатком подхода выступала слабая адаптированность методов и средств моделирования сложных высокотехнологичных процессов к интегрированным производственным процессам и производственным системам производителя.

Исследования показывают, что задачи развития продукта главным образом связаны с перепроектированием, совершенствованием и расширением уже существующих продуктов производства. Обновленные требования к конструкции чаще всего сопоставляются с существующей архитектурой продукта. Часто применяемыми моделями сложных промышленных продуктов, реализованных в условиях отечественного производства являются: 1) «стадии ворот», «процесс ворот»; «ворота качества», которые в настоящее время в рамках методологии выступают одним из инструментов управления под названием PROsys, LLC. Суть методологии состоит в том, что процесс производства разбивается на реперные точки, каждая из которых соответствует определенному этапу проекта. Для точек прописываются контрольные показатели, выполнение которых позволяет перейти на следующий этап; 2) дизайн «матричной структуры производства» (DSM). Модель позволяет определить «разумную» последовательность/группировку задач (планирования, выполнения, управления) сложных PD-проектов с использованием различных алгоритмов (кластеризации, моделирования); 3) PDPNet-модель, суть которой – формирование модели PD-процессов в ландшафте бизнес-процессов интегрированных предприятий; 4) DMADV-модель, в которой PD-процесс представлен как замкнутая последовательность пяти этапов: 1) определение целей проекта в соответствии с требованиями заказчика; формирование стратегии предприятия; 2) измерение и идентификация CTQ – ключевых характеристик качества продукта, имеющих нормативные значения/пределы в рамках спецификации; 3) анализ проектных решений, развитие продукта, проектирование альтернативных вариантов; 4) уточнение конструктивных особенностей продукта, оптимизация его структуры, формирование плана реализации проекта; 5) контроль/оценка решений по дизайну, создание опытных партий, реализация производственного процесса; 5) модель «Туннеля/Воронки» PD-процесса. По разным источникам, авторство приписывают Шепхерду и Ахмету или Уйлрайту и Кларку. Модель представляет собой набор действий PD-процесса в рамках формирования концепции, отбора, производства и запуска продукта на рынок. Из идей, генерируемых в начале проекта, до конца процесса/проекта доходят лишь единицы. «Отсев» осуществляется на всех стадиях проекта.

Цель данного исследования видится в изучении содержания элементов методологии разработки сложного продукта (PD-процессов) в части применяемого инструментария, классических моделей PD-процессов. Освоение производства новой продукции на базе выделенных моделей, позволит в дальнейшем производителям экспериментировать и развивать новые и альтернативные подходы к организации системы разработки сложного высокотехнологичного промышленного продукта.

РАЗВИТИЕ ПРОИЗВОДСТВЕННЫХ СИСТЕМ В РОССИИ

Семахин Е.А., Андряшина Н.С.

*Нижегородский государственный педагогический университет
им. К. Минина*

В настоящее время в России функционирует большое количество заводов международных компаний, и все они имеют свою корпоративную производственную систему, в основе которой лежат принципы эффективного производства в данной индустрии. Наряду с этим, в последние годы многие российские компании стали серьезно развиваться и достигли значительных результатов в управлении производством, так как для конкуренции в условиях ВТО необходимо максимально снижать себестоимость и улучшать качество продукции. Можно сказать, что мы имеем значительное количество компаний в России с действительно эффективными производственными системами. Трудно назвать лучших их них, поскольку наиболее эффективными являются наиболее успешные на рынке компании, и таких достаточно много. Традиционно наиболее структурированными считаются производственные системы автомобилестроительных компаний.

Горьковский автомобильный завод «Группы ГАЗ» – первое российское предприятие, разработавшее уникальную систему бережливого производства. Данная система базируется на принципах Toyota production system и позволяет повышать эффективность производства с максимальной ориентацией на потребителя, исключая все виды потерь и вовлекая каждого сотрудника в оптимизацию производства.

Уникальность производственной системы ГАЗ в том, что она меняет подход к организации труда, рабочего места, призывает думать, как исключить лишнюю работу, не добавляющую ценность продукту, и делает процесс улучшений постоянным. Используя инструменты производственной системы и запуская механизм снижения издержек, предприятия добиваются кардинального роста производительности труда, повышения качества продукции и комфорта рабочих мест без дополнительных затрат. В результате внедрения принципов бережливого производства на предприятиях «Группы ГАЗ» увеличился суточный темп выпуска продукции, производительность труда выросла в 4 раза, производственные площадки были сжаты на 100 тыс. кв. м при сохранении необходимых мощностей. Ежегодный экономический эффект от снижения затрат, достигаемого благодаря производственной системе, составляет для «Группы ГАЗ» от 500 до 700 млн руб.

Таким образом, производственная система ГАЗ стала неотъемлемым элементом всех процессов на предприятиях «Группы ГАЗ» - от закупок материалов и до продаж готовой продукции. Базовые подходы и ин-

струменты производственной системы используются в процессе освоения и выпуска новых продуктов: коммерческих автомобилей «ГАЗель БИЗНЕС» и «ГАЗель NEXT», автобусов «ЛиАЗ», «ПАЗ» экологического класса «Евро-4» и «Евро-5», автобусов «ГолАЗ» для обслуживания участников и гостей Олимпиады-2014 в Сочи, линейки современных дизельных двигателей ЯМЗ-530 и ЯМЗ-650.

Литература

1. Романовская Е.В., Семахин Е.А., Андрияшина Н.С. Система управления бережливым производством в автомобильной промышленности // Актуальные проблемы гуманитарных и естественных наук. – 2014. - №4-1. – С.264-267
2. Семахин, Е.А. Формирование организационно-экономических механизмов управления производственной системой в машиностроении: автореф.дис. канд.экон.наук / Е.А. Семахин. – Н.Новгород: 2009. – 25 с.
3. Системы создания продукта в промышленности / под. ред. В.П. Кузнецова. – Н.Новгород: НГПУ, 2012. –164 с.

РОЛЬ ЛОГИСТИКИ В ДЕЯТЕЛЬНОСТИ МЕДИЦИНСКОЙ ТОРГОВОЙ КОМПАНИИ

САМАРОВА Н.А., ПЕТУХОВА А.В.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

В настоящее время, для того чтобы добиться успеха в предпринимательской деятельности, недостаточно использовать маркетинговые подходы, требуется применение современных высокоэффективных способов и методов управления потоковыми процессами, таких как логистика.

Логистика - наука, предмет которой заключается в организации рационального процесса движения товаров и услуг от поставщиков сырья к потребителям, функционирования сферы обращения продукции, товаров, услуг, управления товарными запасами и провиантом, создания инфраструктуры товародвижения.

Основное правило логистики: предприятие должно поставлять конкретному потребителю нужную продукцию установленного качества в определенном количестве по установленной цене в нужное место в нужное время.

Логистическую структуру следует представлять несколькими функциональными областями: информация, запасы, складирование и складская обработка, транспортировка готовой продукции, разгрузка и другие.

Логистика имеет большое значение для клиентов компании, как постоянных, так и новых, его поставщиков и владельцев. Своевременный и правильно организованный процесс доставки товара всегда хорошо сказывается на репутации компании в целом. Логистика как раз и регулирует все важные процессы на этапе доставки: отслеживает и выбирает правильное направление товара, упорядочивает и распределяет продукцию от производителя до конечного потребителя, учитывая рентабельность, отслеживает сроки и качество доставки.

Для медицинской торговой компании логистика является неотъемлемым звеном. Сфера медицинской торговли предполагает своевременную, иногда ускоренную доставку в кратчайшие сроки товара до больничного учреждения. Некоторый товар требуется перевозить с соблюдением температурного режима, при этом он должен быть защищен от ударов и сильной тряски. Работа транспортных предприятий, как и любых других участников товародвижения, должна быть нацелена на получение единого экономического результата в логистической цепи – удовлетворение потребностей заказчика с соблюдением сроков и норм доставки.

Перемещение товаров медицинского назначения чаще всего происходит с использованием автомобильного или железнодорожного транспорта, реже – с использованием воздушного. При выборе транспорта, вместе с транспортными и складскими расходами, затратами на упаковку необходимо учитывать что во время перевозки груза возможна его порча, утрата или другие виды рисков. Кроме того, задержка груза в пути может привести к отказу потребителя от товара. Иногда, за несвоевременную доставку грузов предусматриваются штрафы.

Успешной деятельностью медицинской торговой компании является сокращение времени реализации товара, то есть от времени получения заказа от больничного учреждения до его поставки. Компании, которые перешли на организацию сбыта продукции по принципам логистики, могут рационально осуществлять закупку готовых товаров на склад, выбирать поставщиков и организовывать своевременный процесс сбыта продукции, при этом снизив расходы на доставку.

В целях повышения эффективности своей деятельности медицинским торговым организациям следует соблюдать основные принципы логистики: системности, комплексности, научности, конкретности, конструктивности, вариантности.

ОСОБЕННОСТИ ВЛИЯНИЯ КОНКУРЕНТНОЙ СРЕДЫ НА СТРАТЕГИЮ ПОВЕДЕНИЯ ПРЕДПРИЯТИЯ

Егорова А.О.

*Нижегородский государственный педагогический университет
им. К. Минина*

Каждое предприятие в рыночной экономике действует в условиях конкурентной среды, факторы которой оказывают на него определённое влияние. Конкурентная среда представляет собой определённое количество предприятий, которые усиливают своё положение на рынке, предлагая лучшие по качеству товары по сравнению с конкурентами. Кроме того, конкурентная среда - это своеобразная система отношений между субъектами конкуренции, имеющими в качестве объективной основы конкурентное поведение потребителей, выраженное в объёме платёжеспособного спроса. В свою очередь конкурентное поведение потребителей выражается в целенаправленной деятельности по изучению конкурентных предложений и выбору наиболее конкурентоспособной продукции или услуги.

На состоянии и развитии конкурентной среды оказывают влияние множество различных факторов: численность конкурирующих предприятий, объём и структура спроса, дифференциация товаров, реализуемые стратегии конкурентов и т.д. Конкурентная среда имеет определённый стратегический характер, поскольку отражает предпосылки будущего развития отдельных сегментов рынка и/или рынка в целом. В настоящее время конкурентная среда рынка оценивается не только государственными органами, регулирующими её развитие, но и продавцами, покупателями и производителями для определения целесообразной стратегии поведения.

При разработке стратегии поведения предприятия необходимо учитывать все разнообразие конкурентных отношений возникающих между хозяйственными субъектами и оказывающими прямое воздействие на функционирование предприятий. При анализе этих отношений, как правило, выделяют три уровня: микроуровень (предприятия/подразделения предприятия), мезоуровень (отрасли/группы видов экономической деятельности), макроуровень (народнохозяйственные комплексы). Оценка уровней конкурентных отношений осуществляется с помощью микроуровневых (доля рынка), мезоуровневых (интенсивность конкуренции в отрасли) и макроуровневых (общее состояние конкуренции в стране) показателей.

Конкурентная среда является частью микросреды предприятия, поскольку характер конкуренции в отрасли основывается на взаимодействии покупателей, поставщиков и конкурентов, образуя силы

конкуренции. При формировании стратегии предприятия необходимо проводить исследование конкурентной среды с целью изучения стратегического потенциала предприятий-конкурентов: целей, текущих стратегий, средств и методов реализации стратегий, вероятных будущих стратегий.

Исследование состояния конкурентной среды, а также изучение особенностей влияния конкурентной среды на деятельность предприятия должно быть непрерывным и отражать не только текущее состояние дел, но и складывающиеся тенденции развития. Анализ данных, полученных в результате таких исследований, предприятие должно использовать не только для прогнозирования изменений в конкурентной среде, а также для планирования стратегических действий на возможные неблагоприятные изменения ситуации.

Литература

1. Гарина Е.П., Егорова А.О. Формирование и реализация бизнес - стратегий предприятий машиностроения (на примере ОАО «ОСВАР»)// Экономика и предпринимательство. 2015. № 4-1 (57-1). С. 842-849.

СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКИМ СНАБЖЕНИЕМ КАК ФАКТОР ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ПРЕДПРИЯТИЯ

КОРОТКОВА А.М., БЕЛЯЕВА Г.Д.

СарФТИ НИЯУМИФИ

Материально-техническое снабжение (МТС) - это деятельность, направленная на обеспечение предприятия материальными ресурсами, необходимыми для выполнения производственной программы в плановом периоде с минимальными издержками. Плановыми периодами в МТС предприятия являются год, полугодие, кварталы, месяцы.

Производственный процесс имеет три основные стадии: снабжение, производство, сбыт. Материально-техническое снабжение, являясь первой стадией производственного цикла «снабжение-производство-сбыт», обеспечивает материальную основу изготовления продукции. От материально-технического снабжения зависит ритмичность, эффективность, качество, затраты и себестоимость выпускаемой продукции, прибыль и финансовые результаты предприятия.

Основной целью процесса закупок является своевременное обеспечение качественными товарно-материальными ценностями (ТМЦ) производства и организации в целом.

Этапы процесса:

1. определение потребности в ТМЦ;
2. формирование заявок;
3. оценка и выбор поставщиков;
4. формирование заказа (заказов);
5. получение и обработка счета (счетов);
6. отслеживание процесса поставки;
7. поступление ТМЦ;
8. оприходование ТМЦ;
9. хранение и отпуск ТМЦ.

Отдел снабжения координирует действия поставщика и потребителя дистанционно, занимаясь лишь информационной деятельностью, организуя материальные потоки, но занимаясь их прямым перемещением. Такой вид деятельности на любом предприятии играет решающую роль, ведь от правильно скоординированного снабжения зависит более 50% финансов организации, возлагая на снабжение большую ответственность за снабжение предприятия сырьём.

В условиях нестабильной экономической ситуации на производственных предприятиях возрастают риски, связанные с возможными изменениями условий работы с поставщиками материалов и сырья. Отдел снабжения должен выступать гарантом поставки материалов хорошего качества, в планируемые сроки, нужное место, на выгодных условиях от надежных поставщиков. Поэтому, особое внимание должно уделяться проблеме выбора потенциальных поставщиков, которые могли бы с наибольшим эффектом обеспечить успешную производственно-сбытовую деятельность предприятия.

В докладе рассмотрена снабженческая деятельность на предприятии, на ее основе проведен анализ и даны рекомендации для повышения эффективности деятельности предприятия.

ПЕРСПЕКТИВЫ СОЗДАНИЯ ПРОМЫШЛЕННЫХ ПАРКОВ – ПЛОЩАДОК ПРОМЫШЛЕННОГО РОСТА

Кузнецов В.П., Кузнецова С.Н.

*Нижегородский государственный педагогический университет
им. К.Минина*

Создание промышленных парков — основной тренд в развитии экономики регионов. Под промышленным парком (ПП) понимается договорная межфирменная производственная сеть малых и средних хозяй-

ствующих субъектов (резидентов ПП), расположенных на специально созданной и управляемой промышленной зоне с единой инженерной инфраструктурой и технологически связанных с крупным предприятием (интегратором ПП), осуществляющим разработку и производство конечной продукции [1].

С 2013 года на территории Нижегородской области созданы Саровский инновационный кластер и Нижегородский инновационный кластер в области автомобилестроения и нефтехимии промышленные парки: «Бор-Центральный», «Дзержинск-Восточный», ОАО «Индустриальный парк «Ока-полимер» [2].

В целях стимулирования и создания, новых ПП предусмотрены налоговые каникулы для них на период до 10 лет, субсидии на создание производственной инфраструктуры. В 2016 году налоговая ставка на имущество ПП по кадастровой стоимости снижена с 1,5 до 1,3% от кадастровой стоимости, в 2017 году — с 1,8 до 1,4%, в 2018 году — с 2 до 1,5%. Таким образом, в 2016–2018 годах налоговая нагрузка на бизнес снизится на 13–25%. Возмещение затрат регионов будет осуществляться за счет налога на прибыль, акцизов, НДС и таможенных пошлин, которые резиденты ПП и технопарков уплачивают в федеральный бюджет. В федеральном бюджете на 2016 год на эти цели предусмотрены средства на общую сумму свыше 4 млрд рублей. В проработке три варианта стимулирующих мер. Программа предусматривает только субсидирование процентной ставки по кредитам резидентам ПП, затем добавляются субсидии, покрывающие 10% общих вложений денег в создание ПП, кроме указанных мер, предлагается еще и возмещение 75 % затрат на подключение к энергосетям.

Субсидии будут предоставляться по результатам проведения отбора при соответствии проекта ПП ряду критериев. К пятому году с начала реализации он должен обеспечить 15% рост числа высокопроизводительных рабочих мест, а также достижение одного из предусмотренных правилами целевых показателей. Ключевые из них – снижение затрат на закупку комплектующих у сторонних организаций, в том числе зарубежных производителей и увеличение доли компонентов конечной продукции кластера, произведенных организациями-участниками ПП. Для получения господдержки инициаторы совместного проекта ПП обязаны также осуществить финансирование за счет собственных средств не менее 50% всего объема затрат по проекту. При соблюдении условий по объему инвестиций, выручки, фонда оплаты труда, средней зарплаты работников, ПП могут получить снижение налоговой нагрузки на 25% по сравнению с обычным уровнем [1].

Актуальность создания ПП в условиях изменения внешнеполитической ситуации не снижается, учитывая как в целом непостоянство динамики иностранных инвестиций, так и возможность переориентации геоэкономических интересов в различных регионах.

Литература

1. Кузнецова С.Н. Развитие организационно-экономического механизма формирования промышленных парков: автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата экономических наук /Ивановский государственный университет. Иваново, 2013. 24 с.
2. Кузнецов В.П., Кузнецова С.Н., Булатова Е.А. Развитие российского машиностроительного комплекса на базе создания промышленных парков // Экономический анализ: теория и практика. 2015. № 17 (416). С. 12-20.

АНАЛИЗ СОЦИАЛЬНО-ЭКОНОМИЧЕСКОГО РАЗВИТИЯ РЕГИОНА НА ПРИМЕРЕ НИЖЕГОРОДСКОЙ ОБЛАСТИ

ФАТЬКИНА М.М., БЕЛЯЕВА Г.Д.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Региональное развитие – это режим функционирования региональной системы, который ориентирован на позитивную динамику параметров уровня и качества жизни населения, обеспеченную устойчивым, сбалансированным и многофакторным воспроизводством социального, хозяйственного, ресурсного и экологического потенциалов территории.

Актуальность выбранной для исследования темы обусловлена стремлением регионов России сформировать свою собственную эффективную, направленную в будущее стратегию территориального развития. Экономико-политические тенденции последних лет расширили самостоятельность и ответственность регионов за состояние, и развитие экономики и социальной сферы на подведомственной территории. Рыночные условия хозяйствования ставят перед регионами задачу выбора своего стратегического места и роли в территориальном разделении труда, вектора регионального социально-экономического развития в геополитическом пространстве страны, позволяющих максимально эффективно использовать региональные ресурсы, специфику и потенциал территории, а также решать социально-экономические проблемы территорий.

Целью функционирования региональной экономики является обеспечение достаточно высокого уровня и качества жизни населения соответствующего региона.

Функции региональной экономики следующие:

- ◆ в области производства: выпуск продукции и предоставление услуг по региональным программам для внутреннего и внешнего рынков; производство общественных товаров (авиалинии, железные и автомобильные дороги, очистные установки, зеленые насаждения и

т. д.); оказание общественных услуг (туризм, образование, медицина, жилье, культурные мероприятия и др.);

- ◆ в области ценообразования: регулирование цен и тарифов, разработка всевозможных льгот и штрафных санкций, определение налоговой политики;
- ◆ в области распределения: формирование региональных каналов распределения товаров и услуг;
- ◆ в области обмена: стимулирование реализации товаров и услуг, послепродажное сервисное обслуживание, организация рекламы, формирование системы общественной информации, региональных систем телекоммуникаций, статистических баз данных и др.;
- ◆ в области потребления: обеспечение рационального уровня потребления.

В работе проведен анализ социально – экономического положения Нижегородской области на основе главных социально-экономических показателей.

Изучены основные социально – экономические характеристики области такие как, демографические процессы, проблемы занятости и безработицы, денежные доходы населения, развитие сельского хозяйства, инвестиционного климата, предпринимательства и др. Раскрыта сущность и количественные показатели Основных направлений социально-экономического развития на среднесрочную перспективу(2016-2018г.) для Правительства Нижегородской области которыми станут:

- ◆ развитие эффективной, динамично растущей и сбалансированной экономики;
- ◆ создание благоприятных условий для жизни, профессиональной и творческой самореализации жителей области;
- ◆ эффективная исполнительная власть области.

Таким образом, успешное функционирование региональной экономики во многом зависит от возможностей и умения администрации регионов принимать оптимальные решения, учитывающие интересы центра и регионов. Лицо каждого региона определяется не формами собственности, а способами управления экономикой, социально-экономическими отношениями, рациональным использованием региональных преимуществ, поиском методов сочетания общенациональных и региональных социально-экономических интересов, которые могут находиться в противоречии. Все это определяет разумную и Действенную региональную экономическую политику.

ФРАНЧАЙЗИНГ КАК ФОРМА ПРЕДПРИНИМАТЕЛЬСТВА В Г. САРОВ И НИЖЕГОРОДСКОЙ ОБЛАСТИ

Куликов Р.В.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Актуальность темы доклада заключается в том, что в РФ сейчас наблюдается большой энтузиазм к этой форме предпринимательства - более 6000 российских предприятий используют франчайзинг в качестве основной модели бизнеса, что обусловлено ростом нынешних заработков будущих предпринимателей, последующим их накоплением и созданию новых компаний. Согласно данным социологов, юное поколение просто жаждет открыть собственные компании, чтобы получить определённый доход и изменить собственный социальный статус.

Стоит отметить, что на исходном этапе самым результативным способом и единственным известным инструментом в настоящее время, который позволит увеличить эффективность и конкурентоспособность малых предприятий и их продвижению на более высокий уровень, может стать именно франчайзинг.

Целью доклада является исследование франчайзинга в городе Саров и Нижегородской области в целом.

Задачами доклада являются:

1. рассмотрение франчайзинга как формы предпринимательства;
2. анализ франчайзинга в г. Саров;
3. анализ франчайзинга в Нижегородской области.

Одним из методов развития малого бизнеса можно считать франчайзинг. Это аренда торгового знака или коммерческого обозначения. Использование франшизы контролируется договором между франчайзером (тот, кто предоставляет франшизу) и франчайзи (тот, кто её получает). В Европе эту форму ведения бизнеса считают не только полезной, но и престижной.

В ходе проведения анализа франчайзинга в г. Саров выяснилось, что много магазинов осуществляет свою деятельность по франчайзингу и эта форма предпринимательства представлена в городе, в основном в розничной торговле и в сфере питания. [2]

Про анализ франчайзинга в Нижегородской области можно сказать, что наибольшими успехами могут похвастаться франчайзеры одежды и обуви, бытовой техники, туристических услуг, электроники, бухгалтерских программ.

Франчайзинг - очень перспективная форма ведения малого бизнеса. Для начинающего предпринимателя - это шанс к созданию успешного бизнеса.[1]

Литература

1. Актуальные проблемы управления: Сборник научных статей. Электронное издание / ред. кол. – С.Н. Яшин, Ю.С. Ширяева. – Н. Новгород: ННГУ им. Н.И. Лобачевского, 2015. – 363 с. // <http://www.iee.unn.ru/files/2015/08/Sbornik.pdf>
2. Франчайзинг // <http://www.sarobiz.ru/>

**РАЗВИТИЕ МАЛОГО ПРЕДПРИНИМАТЕЛЬСТВА В
РЕСПУБЛИКЕ МОРДОВИЯ**

ЕРМАКОВА М.Б., САМАРОВА Н.А

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Малое предпринимательство является важнейшим субъектом экономической системы государства и выполняет важнейшие функции для развития экономики в целом. По итогам 2015 года в Республике Мордовия действует более 28 тыс. субъектов малого и среднего предпринимательства. Основная часть малого предпринимательства сосредоточена в столице республики и ряде крупных муниципальных образований. Однако, в большинстве районов Мордовии по-прежнему наблюдается недостаточный уровень развития малого бизнеса. Основная доля индивидуальных предпринимателей сосредоточена в г. Саранск - 8 570 единиц (54,3 %. Среди муниципальных районов Республики Мордовия лидируют Рузаевский муницип. район - 1 144 единиц (7,25 %), Ковылкинский муницип. район - 711 единиц (4,51 %), Лямбирский муницип. район - 649 единиц (4,11 %), Зубово-Полянский муницип. район - 625 единиц (3,96 %), Чамзинский муницип. район - 586 единиц (3,71 %), Краснослободский муницип. район - 512 единиц (3,24 %), Ромодановский муницип. район - 340 единиц (2,15 %).

На 1000 жителей Республики Мордовия приходится 2,7 малых предприятия. Доля объема произведенной продукции и оказанных услуг малыми предприятиями составляет 5,8% общего республиканского объема. Основной объем произведенной малыми предприятиями продукции (работ, услуг) сосредоточен в торговле и общественном питании – 41,5%, строительстве – 17,1% и промышленности – 11,3%.

По итогам 2015 года доминирующим сектором малого предпринимательства является торговля. По статистически данным розничный товарооборот малых предприятий и частных предпринимателей составил 2 млрд. 267 млн. рублей, т.е. более трети республиканского розничного товарооборота. При этом доля инновационной сферы сокращается по всем ключевым показателям.

Численность занятых в малом предпринимательстве, включая совместителей и лиц, работающих по договорам гражданско-правового характера, и индивидуальных предпринимателей, составляет порядка 80 тыс. чел, то есть около трети экономически активного населения Республики.

В последние годы существенно увеличилась доля и объем налоговых отчислений субъектов малого предпринимательства в общем объеме собственных налоговых доходов бюджетов муниципальных образований Ковылкино и Рузаевка и г. Саранска.

Вопросы развития предпринимательства, создания благоприятных условий для малого и среднего предпринимательства, финансовой и имущественной поддержки малого и среднего предпринимательства являются приоритетами в развитии экономики Республики Мордовия. Необходимые условия для поддержки предпринимательства в республике обеспечены реализацией Комплексной программы развития и государственной поддержки малого предпринимательства в Республике Мордовия на 2011-2015 годы. Общий объем субсидии из федерального бюджета на реализацию данной программы составил 90 917 577,0 рублей. В рамках реализации данной программы, Республика Мордовия приняла участие в конкурсном отборе субъектов Российской Федерации для предоставления субсидий на реализацию мероприятий государственной поддержки малого и среднего предпринимательства, проводимом Министерством экономического развития Российской Федерации в целях привлечения дополнительного федерального финансирования для реализации ряда мероприятий. Заявки были поданы по четырем направлениям, Республика Мордовия признана по ним победителем.

Малый бизнес Мордовии уверенно входит в число результативных секторов экономики Мордовии: его экономический эффект значительно превосходит ресурсы, которыми он располагает, и в перспективе, при соответствующей государственной политике по его поддержке и развитию, реализация его потенциала значительно возрастет.

ФИЛОСОФСКИЙ ВЗГЛЯД НА ЧЕЛОВЕЧЕСКОЕ В ЧЕЛОВЕКЕ В УСЛОВИЯХ НАРАСТАНИЯ ТЕХНОСРЕДЫ

НЕМОВА О.А.

*Нижегородский государственный педагогический университет
им. К.Минина*

«Сдвиг гуманитарной парадигмы», о чем активно ведет дискуссию на протяжении многих лет известный нижегородский философ В.А. Кутырев, отчетливо заметен на рубеже XX-XXI веков[2]. Глобальные социально-экономические и политические изменения являются ярким тому

подтверждением, а именно, возрождение и всевозрастающая популярность идей нацизма, расового превосходства в центре современной Европы, широкомасштабное распространение работорговли в масштабах всего мирового сообщества, и в целом отношения к человеку не как цели мироздания, а как к средству удовлетворения своих, зачастую низменных, узко прагматических потребностей. Во многом это обусловлено бурным ростом научно-технического прогресса (НТП) и, в связи с этим, набирающего с каждым годом все большие обороты технократического мышления и потребительского отношения к жизни.

Оставаться безучастными к полемике в данном контексте считаем для себя неприемлемым, так как убеждены в том, что наука должна не только создавать что-либо для общества, но и предупреждать его о грозящих опасностях тех или иных научных изобретений. Мы также полагаем, что ошибки представителей гуманитарных направлений науки порой обходятся обществу намного дороже, чем представителей естественно-научных направлений. Ярким подтверждением данной мысли может послужить пример возникновения, становления и развития гендерной концепции. Изначально в самом основании выше обозначенной концепции содержалась методологическая ошибка, которую сами гендеристы не очень-то хотят признавать, а об эмпирическом подтверждении своей неправоты – говорить [1].

В XX веке в процессе осуществления научно-технической революции, возникла уверенность, что все проблемы человека и созданной им цивилизации разрешат наука и новая техника. И не удивительно, – ведь в течение века были сделаны миллионы открытий и изобретений, и сменилось несколько поколений техники. Но человеческих проблем от всего этого не убавилось, а количество угроз человеку увеличилось. И самое главное заключается в том, что для рационально организованного производства, для рациональной и высокоточной техники по расчетам рациональной бухгалтерии само содержание человека становится делом все более дорогим, нерациональным. Научно-техническая революция, и превращения науки в производительную силу вдруг выявили крайнее несовершенство человека. Речь идет о несовершенстве человека (*Homo sapiens!*) как субъекта производства, о его нетехнологичности, нерациональности. И действительно, человек быстро устает, допускает ошибки, не успевает, не выдерживает, не справляется. Он вообще невыгоден для производства; но организаторы и владельцы средств производства вынуждены терпеть его как потребителя произведенных продуктов. Как члена «общества массового потребления». Отсюда вопрос: не является ли прогресс науки и техники, преодолевающий несовершенство человека, борьбой с ним самим, с его жизнью? В этом случае технический прогресс является дорогой к небытию, к смерти.

В начале XXI века гуманитарная парадигма не только не укрепила свои позиции, а, наоборот, под давлением НТП находится на грани ис-

чезновения как такового [5]. Тотальная компьютеризация и технизация жизни современного человека стала очередным вызовом времени, ответ на который необходимо дать философам (антропологам и гуманитариям) уже сейчас. Вторжение техники и современных технологий в повседневную жизнь и природу человека резко разделила философов на противников и сторонников результатов подобного «вмешательства» [6]. В отечественной науке самыми яркими сторонниками первой точки зрения являются: В.А. Кутырев [2], С.С. Хоружий [8], а второй – М.Н. Эпштейн [9]. Перспектива появления разновидностей Постчеловека (киборгов, мутантов, клонов), фантазии в области «генетического дизайна» свидетельствуют о создании таких существ, которых трудно будет назвать человеком, а в итоге, считает С.С. Хоружий, придется констатировать «эвтаназию» человека.

Представители философской антропологии справедливо отмечают, что в связи с явным «онтологическим «размыканием» человека и превращением техносферы в «инобытие» возникает острая необходимость в методологическом, мировоззренческом, парадигмальном переосмыслении сущности происходящих перемен, и прежде всего – на уровне герменевтики, которая, в соответствующих понятиях, категориях, дефинициях, описала бы происходящие процессы. Помогла бы, наконец, ответить на следующие вопросы: «Что происходит с сознанием и с целостной человеческой личностью? Что происходит со сферой эмоций, с эстетическими восприятиями? Со сферой общения, с социальными измерениями существования? Ответом на эти вопросы решается, находимся ли мы еще «на территории Человека», а антропологический критерий еще позволяет ли разделить ареалы Человека и Постчеловека».

Литература:

1. Голованова Т. Гендерная политика в России: сайт. Санкт-Петербург, 23.11.2013. URL: <http://zoomir.mybb.ru/viewtopic.php?id=1180> (дата обращения 2.03.2016).
2. Кутырев В.А. Философия трансгуманизма: Учебно-методическое пособие. – Нижний Новгород: Нижегородский университет, 2010. – 85 с.
3. Немова О.А. Бурухина А.Ф. Мультипликационные фильмы как средство формирования семейных духовно-нравственных ценностей / О.А. Немова, А.Ф. Бурухина // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 18. Социология и политология. 2014. №1. – С.152-173.
4. Немова, О.А., Свадьбина Т.В. Семейное воспитание в условиях общества потребления /О.А. Немова, Т.В. Свадьбина // Социология, 20013, №3.- С.35-42.
5. Свадьбина Т.В., Немова, О.А. Трэффик: проблемы социокультурной и правовой дезадаптации женщин к условиям рынка // Девиация и делинкветность: социальный контроль: Сб. материалов международной

конференции. В 2-х т. Т.1 / Под общей редакцией проф. З.Х. Саралиевой. – Н. Новгород: Издательство НИСОЦ, 2006. – С.134-136.

6. Свадьбина Т.В., Немова О.А., Пакина Т.А. Путь за рубеж: воплощенная мечта или трэффик? Учебно-методическое пособие для учащейся молодёжи и потенциальных мигранток. – Н. Новгород: НГПУ. 2007. – 79 с.

7. Свадьбина, Т.В., Немова, О.А. Пакина Т.А, / Современный трафик: причин, разновидностей, последствия, профилактика // Т.В. Свадьбина, О.А. Немова, Т.А. Пакина // Социологические исследования, 2014, №2, С.43-48.

8. Хоружий С.С. Проблема постчеловека, или трансформативная антропология глазами синергичной антропологии // Философские науки. 2008. №2. – С.10-31.

9. Эпштейн М.Н. Творческое исчезновение человека. Введение в гуманологию // Человек, 2009, №4. – С.48-57.

ВОЗДЕЙСТВИЕ КОРРУПЦИИ НА РАЗВИТИЕ БИЗНЕСА

СТРЕЛЬНИКОВА А.О.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Термин «коррупция» происходит от от латинского слова *corruptio* — подкуп, порча. Данный термин обычно обозначает использование должностным лицом своих властных полномочий и доверенных ему прав, а также связанных с этим официальным статусом авторитетов, возможностей, связей в целях личной выгоды, противоречащее законодательству и моральным установкам.

В рейтинге восприятия коррупции в странах мира, ежегодно составляемом организацией Transparency International, Россия в 2014 году заняла 136-е место из 175 с индексом 27 балла. А в 2015 году поднялась на 119 место с индексом 29 баллов. Самое высокое значение за последние 4 года.

Для расчета эмпирической оценки эффективности борьбы с бытовой коррупцией в Нижегородской области нами были использованы соответствующие данные государственной и ведомственной региональной статистики. Кроме того, мы опирались на результаты, полученные в ходе нашего социологического мониторинга регионального рынка бытовой коррупции.

В рамках исследования нами были проведены два социологических опроса населения Нижегородской области. Первый проходил осенью 2014 г., а второй – осенью 2015 г.

В исследованиях приняли участие жители городов Нижний Новгород, Арзамас, Выкса и Саров в возрасте от 16 до 65 лет включительно, по-

стоянно проживающие на территории региона. Методом формализованного персонального интервью и раздаточного анкетирования в общей сложности были опрошены 1046 человек (540 чел. – осенью 2014 г. и 506 чел. – осенью 2015 г.).

Данная методика, апробированная на примере Нижегородского региона, оказалась достаточно надежной и дала возможность проследить ситуацию в динамике.

Так как всего по результатам нашего опросного исследования бытовой коррупции в 2014 г. было зафиксировано в среднем 252 328 случаев дачи взятки, то на одного чиновника Нижегородской области в среднем в год пришлось 2,097 взятки (численность занятых в 2014 г. в сферах государственного управления и обеспечения военной безопасности, а также образования, здравоохранения, предоставления социальных и коммунальных услуг в Нижегородской области составляла 120,3 тыс. человек).

Средняя взятка, по результатам опроса, составляла 10 272 рубля.

Среднемесячная усредненная заработная плата государственных и муниципальных служащих, занятых в сферах государственного управления и обеспечения военной безопасности, а также образования, здравоохранения, предоставления социальных и коммунальных услуг в Нижегородской области, – 31 128 рублей. Среднемесячная зарплата в частном секторе составила, в свою очередь, 25 936 рублей.

В 2015 г. ситуация немного улучшилась: судя по опросным данным, в области было совершено в среднем 250 477 случаев взятки, индекс коррупции составил 2,098 (численность занятых в 2015 г. в указанных сферах составляла 119,4 тыс. человек).

Средний размер взятки, по результатам опроса, составил 10 560 рублей.

Среднемесячная усредненная заработная плата государственных и муниципальных служащих, занятых в сферах государственного управления и обеспечения военной безопасности, а также образования, здравоохранения, предоставления социальных и коммунальных услуг по Нижегородской области, – 32 422 рубля, а частном секторе – 26 909 рублей.

Таким образом, совершенствование деятельности по борьбе с коррупцией надо связывать с комплексным осуществлением правовых, политических, организационных, технических и финансовых мероприятий, обеспечивающих развитие необходимых механизмов, реализация которых позволит создать серьезные предпосылки для коренного изменения ситуации в сфере противодействия масштабным проявлениям коррупции. Полагаю, что с этой задачей мы справимся, если верить в то, что Президент России всерьез и надолго объявил войну коррупции.

ДЕНЕЖНО-КРЕДИТНАЯ ПОЛИТИКА БАНКА РОССИИ

БЕЛЯЕВА Г.Д., ФЕДЯЕВА А.А.

СарФТИ НИЯУМИФИ

Одним из наиболее главных условий эффективного развития экономики страны является формирование отлаженного механизма денежно-кредитного регулирования, позволяющего Центральному банку контролировать деятельность коммерческих банков, добиваться стабилизации денежного обращения.

Монетарная политика Центрального Банка признается наиболее современным и эффективным методом регулирования экономики. В настоящее время возрастает актуальность этой проблемы в условиях падения курса рубля и роста цен на продовольственные продукты.

Основной целью денежно-кредитной политики является помощь экономике в достижении общего уровня производства, характеризующейся полной занятостью и отсутствием инфляции. Денежно-кредитная политика состоит в изменении денежного предложения с целью стабилизации совокупного объема производства, занятости и уровня цен.

В условиях рыночной экономики в основе денежно-кредитной политики центрального банка лежит принцип «компенсационного регулирования».

Принцип компенсационного регулирования включает сочетание двух комплексов мероприятий:

- политики денежно-кредитной рестрикции (ограничения кредитных операций путем повышения уровня процентных ставок, торможения темпов роста денежной массы в обращении);
- политики денежно-кредитной экспансии (стимулирование кредитных операций через снижение нормы процента и увеличение денежной массы в обращении).

Классическими и главными инструментами проведения денежно-кредитной политики являются:

- дисконтная политика (изменение ставки рефинансирования);
- регулирование банковских резервов (изменение норм обязательных резервов);
- операции на открытом рынке с ценными бумагами и иностранной валютой, а также некоторые иные меры, носящие жесткий административный характер.

В докладе рассматриваются основные мероприятия денежно – кредитной политики Банка России в 2015 году, а так же дана оценка их эффективности.

К основным мероприятиям Банка Росси в области денежно – кредитной политики в 2015 году относятся: снижение ключевой ставки с 17%

до 11% ;повышение ликвидности банка за счет аукционных операций; решение о необходимости пополнения международных резервов; продажа иностранной валюты с валютных счетов Банка России (объем операций составил 2.3 млрд долларов США); применение антикризисных мер в области банковского регулирования при участии программы докапитализации банков через механизм ОФЗ; предоставление средств по более низкой процентной ставке и на более длительные сроки; был расширен Ламбардный список Цб, а так же Перечень Цб; отзвыы лицензий у банков с целью оздоровления банковской системы в целом и для роста доверия населения к банковскому сектору.

В докладе проанализированы основные направления единой государственной денежно-кредитной политики на период 2016 – 2018 годов. На предстоящий период 2016-2018 года снижение инфляции при обеспечении роста ВВП по прежнему остается конечной целью денежно-кредитной политики. Задачей определения количественных параметров экономической политики является выбор наилучшего сочетания экономического роста и инфляции. Критерием такого выбора должно быть повышение доходов населения в реальном выражении.

СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ БАНКОВСКИМИ РИСКАМИ В САРОВСКОМ ОСБ

ЧИБИРЕВА О.О., САМАРОВА Н.А.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Тема управления рисками становится все более и более существенной как в мировом масштабе, так и в масштабе банковской системы России.

В соответствии с Положением Банка России от 16.12.2003 № 242-П «Об организации внутреннего контроля в кредитных организациях и банковских группах» под банковским риском понимается присущая банковской деятельности возможность (вероятность) понесения кредитной организацией потерь и (или) ухудшения ликвидности вследствие наступления неблагоприятных событий, связанных с внутренними факторами (сложность орг. структуры, уровень квалификации служащих, организационные изменения, текучесть кадров и т.д.) и (или) внешними факторами (изменение экономических условий деятельности кредитной организации, применяемые технологии и т.д.).

Валютный риск возникает при формировании активов и пассивов с использованием валют иностранных государств. Поскольку Саратовское ОСБ покупает и продает иностранную валюту, то подвергается валютному риску, не только риску курсовых потерь, но и риску открытой валютной позиции (несовпадение требований и обязательств). На дра-

гоценные металлы также распространяется риск открытой валютной позиции. Основными валютами, с которыми работает Саратовское ОСБ, являются доллары и евро. По каждому из этих видов валют, а также по драгоценным металлам, величина открытой валютной позиции распределяется пропорционально. Поэтому, если, например, на счет клиента приходит какой-либо другой вид валюты, то банку выгоднее закрыть эту валютную позицию, для того чтобы не распределять на нее разрешенный лимит.

Различают следующие виды процентного риска: базисный риск и риск переоценки. Базисный риск выражается в использовании различных видов процентных ставок (плавающие или фиксированные) по привлечению и размещению. Базисный риск не характерен для Саратовского ОСБ, так как в целом используются фиксированные процентные ставки по привлеченным и размещенным средствам. Риск переоценки возникает из-за разрыва в сроках активов и пассивов. Поскольку активы и пассивы по срокам востребования и погашения на 01.01.15 не совпадают, то банк может понести прямые финансовые потери из-за увеличения процентных ставок по привлеченным ресурсам или недополучения из-за снизившихся по сравнению с существовавшими на момент начала операции процентов по активным операциям. Банк может снизить процентный риск также как и риск потери ликвидности, путем достижения нулевого количественного значения GAP, т.е. путем соответствия активов и пассивов по срокам востребования и погашения. Но, это банку невыгодно.

Операционный риск опасен тем, что он тесно взаимосвязан с другими видами банковских рисков, таких как рыночный и кредитный. Проанализировав статистические данные деятельности Саратовского ОСБ за 2015г., были выявлены следующие причины, повлиявшие на возникновение операционного риска: неверный ввод данных о сделке; непроверенная рыночная информация; отсутствие контроля за соблюдением лимитов; некорректные подтверждения; задержка в предоставлении отчетов.

Система управления банковскими рисками – это совокупность приемов (способов и методов) работы персонала банка, позволяющих обеспечить положительный финансовый результат при наличии неопределенности в условиях деятельности, прогнозировать наступление рискового события и принимать меры к исключению или снижению его отрицательных последствий.

В Саратовском ОСБ эффективно применяются следующие 4 группы методов управления рисками: методы уклонения от рисков; методы локализации рисков; методы диверсификации рисков; методы компенсации рисков.

ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ СОЗДАНИЯ И ЗАВИТИЯ ЕВРАЗИЙСКОГО ЭКОНОМИЧЕСКОГО СОЮЗА (ЕАЭС)

Лунин О.А., Кочетова О.А.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Современные интеграционные процессы – закономерное проявление эволюции хозяйственной системы общества, характеризующейся столкновением двух противоречивых тенденций – глобализации экономической деятельности и ее регионализации. Высокая степень взаимного дополнения и воспроизводства экономик стран постсоветского пространства, сходные трансформационные социально-экономические задачи, единое евразийское пространство обуславливают перспективные приоритеты совместного развития стран-участниц.

Евразийский экономический союз (далее – ЕАЭС) - международная организация региональной экономической интеграции, обладающая международной правосубъектностью и учрежденная Договором о Евразийском экономическом союзе. Государствами-членами Евразийского экономического союза являются Республика Армения, Республика Кыргызстан, Республика Беларусь, Республика Казахстан и Российская Федерация. ЕАЭС создан в целях всесторонней модернизации, кооперации и повышения конкурентоспособности национальных экономик.

С 01.01.2015 начал своё функционирование Евразийский Экономический Союз стран Беларусь, Казахстана и России. Чуть позднее к ним присоединились Армения (со 2 января 2015 года) и Киргизия (с 12 августа 2015 года). Согласно договору о создании ЕАЭС, на территории союза обеспечиваются свобода движения товаров, услуг, капитала и рабочей силы, а также проведение скоординированной, согласованной или единой политики в отраслях экономики. Договор обозначил переход евразийского экономического проекта на новый, более глубокий уровень интеграции.

В докладе нами был проделан анализ экономических показателей стран-членов ЕАЭС, таких как экспорт и импорт товаров во внешней и взаимной торговле. Подведены промежуточные итоги создания ЕАЭС, определены перспективы взаимодействия стран в рамках Евразийского экономического союза.

Согласно договоренностям стран-участниц, в 2016 году должен быть создан общий фармацевтический рынок, к 2019 году – общий рынок электроэнергии, к 2025 году – рынок нефти, газа и нефтепродуктов. Также в 2025 году в Алма-Ате должен начать работу наднациональный орган по регулированию финансового рынка союза.

В постоянно меняющейся политической и экономической обстановке деятельность Евразийского экономического союза оказывает большое влияние на мировую экономику и на граждан стран его участниц.

В общем, на сегодняшний день становится очевидным правильность и своевременность выбранной Казахстаном, Россией и Беларусью интеграционной модели, которая обусловила желание тройки стран перейти на инновационный путь развития, отойти от зависимого положения в качестве доноров сырьевых ресурсов, интегрироваться в сообщество развитых стран с высокотехнологичными производствами и диверсифицированной экономикой. Сделав свой выбор в сторону восстановления единого экономического пространства и устранения пограничных барьеров, страны – члены ЕАЭС тем самым определили наиболее эффективное средство для реализации своих национальных интересов.

СОСТОЯНИЕ И РАЗВИТИЕ ЧЕЛОВЕЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА В СТРАНАХ ЕВРАЗИЙСКОГО ЭКОНОМИЧЕСКОГО СОЮЗА

Шаболдина И.С., Мисатюк Е.В.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

В докладе исследуется вопрос о роли развития человеческого потенциала в странах Евразийского экономического союза (ЕАЭС), как важнейшей составляющей их развития. В 1990 году эксперты Программы развития Организации Объединённых Наций опубликовали первый доклад с оценкой экономического и социального прогресса стран мира, в котором было сформулировано понятие человеческого развития: «Развитие человека является процессом расширения спектра выбора. Наиболее важные элементы выбора - жить долгой и здоровой жизнью, получить образование и иметь достойный уровень жизни. Дополнительные элементы выбора включают в себя политическую свободу, гарантированные права человека и самоуважение». Данная система взглядов ориентирована на повышение качества жизни человека, расширение и совершенствование его возможностей во всех областях. Концепция человеческого развития сменила так называемые «классические» теории экономического развития, которые базировались на показателе валового национального продукта, рассматривали человека только в качестве движущей силы экономического развития и провозглашали экономический рост главной целью общественного прогресса.

Авторы обосновывают положение о том, что несмотря на существенные различия в достижениях между странами ЕАЭС по Индексу развития человеческого потенциала и по каждой его составляющей (по продолжительности жизни, ВВП на душу населения, образовательному уровню), отмечено сходство многих проблем в сфере развития человеческого потенциала, которые должны быть приняты во внимание как в каждой стране - члене ЕАЭС, так и на уровне интеграционного объединения.

МЕСТО РОССИИ В МЕЖДУНАРОДНОЙ ТОРГОВЛЕ: СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ

ГЛЕБОВА А.А., МИСАТЮК Е.В.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

В докладе исследуется вопрос о роли и месте России в международной торговле, а также состояние и перспективы торговых отношений с основными торговыми партнерами. В настоящее время перед Россией стоит важнейшая задача по преодолению доминирующего положения минеральных ресурсов в российском экспорте. Анализируются все важнейшие аспекты состояния внешней торговли Российской Федерации, включая её товарную и региональную структуру. Отмечается, что сложившаяся за последнее время сырьевая модель развития экономики страны не в состоянии сформировать запрос на инновации со стороны бизнеса. Эта ситуация находится в противоречии основным тенденциям развития наиболее передовых стран, опирающихся на преимущества, связанные с наличием знаний и инноваций, а, также, человеческий капитал. Особое внимание обращено на современное состояние торговых отношений с развитыми странами, обозначены перспективы и препятствия к их развитию.

Авторы обосновывают положение о том, что политика импортозамещения, которую Россия начала активно реализовывать в связи с санкциями развитых стран, ограничивших поставки в страну современного высокотехнологичного оборудования, потребует огромных финансовых, материальных и кадровых ресурсов и продуманной долгосрочной стратегии.

ВОЗДЕЙСТВИЕ ПРОДОВОЛЬСТВЕННЫХ САНКЦИЙ И ЭМБАРГО НА РОССИЙСКИЙ РЫНОК

ПОЗДНЯКОВА Э.Ф., САМАРОВА Н.А.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Проблема влияние продовольственных санкций и эмбарго на экономику России является одной из обсуждаемых в стране. С одной стороны, отечественные производители и фермеры видят в этом большой плюс, ведь это большая возможность прорваться на российский рынок и занять лидирующие места. С другой стороны, импортозамещение – постепенная замена иностранной продукции отечественной, – на которую был взят курс Правительством РФ, показывает не самые высокие результаты.

В марте 2014 года в состав Российской Федерации вернулся полуостров Крым. В связи с непризнанием законности присоединения Крыма к России рядом стран и международных организаций были введены экономические санкции против РФ. В ответ на экономико-политические меры западных стран в августе 2014 года Россия наложила запрет на импорт ряда продовольственных товаров из стран Европейского союза, США, Канады, Австралии и Норвегии.

В июне 2015 года Россия продлила действие запрета на импорт продовольствия из Евросоюза, США, Норвегии, Канады и Австралии ещё на год — до 5 августа 2016 года. Так российские власти отреагировали на решение Евросоюза продлить экономические санкции против России ещё на полгода — до конца января 2016 года, чтобы заставить страну соблюдать минские договорённости об урегулировании конфликта на Украине.

Конкретный перечень товаров, в отношении которых вводятся ограничения, определило правительство РФ. В итоге под эмбарго оказались поставки молока и молочной продукции, сыров и творога, колбас и аналогичных продуктов из мяса, рыбы и ракообразных моллюсков, а также овощей, корнеплодов и фруктов. Суммарный годовой объём импорта, попавшего под санкции, оценивается в 9 миллиардов долларов США. При этом ограничения на ввоз не коснулись таких видов продукции как алкоголь и детское питание. Так же российская таможенная служба позволяет заказывать санкционные продукты через интернет.



Продукцию из стран, поддерживавших санкции против России начали заменять товары из СНГ, Азии и Латинской Америки. Так, Белоруссия полностью заменила импорт молочной продукции из Европы.

С целью не упустить российский рынок сбыта, компании, попавшие под эмбарго, спешно начали приспосабливаться к новым условиям и старались выйти из положения, путем обхода продовольственного эмбарго. На сегодняшний день вырисовываются следующие вари-

анта обхода эмбарго: размещение производства на территории РФ и перепродажа продукции через страны, которые не попали под эти санкции.

В полном объеме заменить товары из ЕС, США и Канады вряд ли удастся. Однако курс, направленный на импортозамещение, постепенно приносит свои плоды и имеет позитивные тенденции: в стране имеются более 2500 проектов, на которые из государственного бюджета будет выделено приблизительно 3 трлн. рублей.

По данным Росстата, с июня 2014 по июнь 2015 года индекс потребительских цен вырос на 18,8%. Россияне стали экономить и перешли на потребление более дешевых товаров.

Объективная оценка влияния продовольственного эмбарго на отечественный рынок, особенно в краткосрочном периоде, в значительной степени затруднена одновременным воздействием нескольких факторов. В частности, помимо введенного эмбарго, значительное влияние на цены и динамику отечественного производства оказали такие факторы, как девальвация российского рубля во второй половине 2014 г., запреты Россельхознадзора на ввоз отдельных видов продукции в начале 2014 г., последовательное субсидирование сельхозтоваропроизводителей в последние несколько лет.

Введение эмбарго оказало разнонаправленные эффекты на внутренний рынок:

- ◆ Эмбарго стало дополнительным фактором роста цен на продовольственные товары на внутреннем рынке наряду с девальвацией рубля.
- ◆ Эмбарго создало возможности для расширения отечественного производства. Динамика производства осуществляется преимущественно в секторе по производству мяса и молочной продукции.
- ◆ В уязвимом положении от введения эмбарго оказались отдельные европейские производители сыров, овощей и фруктов, а также рыбы (в частности, Польша, Швеция и Норвегия).

ДЕОФШОРИЗАЦИЯ ЭКОНОМИКИ: МИРОВОЙ ОПЫТ И РОССИЙСКАЯ СПЕЦИФИКА

Куликов Р.В.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

Актуальность темы доклада заключается в том, что в настоящее время во всех развитых странах мира остро стоит вопрос деофшоризации экономики. Это реальная проблема не только государственного уровня, а уже глобального масштаба, для решения которой необходимы манипуляции законодательного характера, в том числе и в Российской Федерации.

Целью доклада является исследование деофшоризации экономики на примере анализа мирового опыта и российской специфики.

Задачами доклада являются:

1. раскрытие сущности и особенностей офшоров и деофшоризации экономики;
2. анализ мирового опыта и российской специфики, связанных с деятельностью офшоров;
3. изучение существующих путей и мер, применяемых как в России, так и в мире, их результаты и предложение комплекса рекомендаций по совершенствованию деофшоризации экономики.

Впервые определение понятия «деофшоризация» было предложено известным российским экспертом в сфере международного налогового права Александром Сергеевичем Захаровым 22 мая 2013 года. «Деофшоризация — проведение государством комплекса мероприятий в законодательной, правоприменительной и информационной областях для снижения или исключения впоследствии вовлеченности в национальный хозяйственный оборот резидентов под видом иностранных лиц или с использованием иностранных правовых конструкций, преследующих преимущественно незаконные или недобросовестные цели». [1]

Проведённый анализ позволяет сделать вывод, что вред офшоризации российской экономике состоит не только и не столько в недополученных налоговых доходах. Главные угрозы - утрата государственного контроля над стратегическими активами в ТЭКе, металлургии, машиностроении, оборонных производствах, потеря управляемости экономической и снижение обороноспособности страны.

Несмотря на явный вред офшоров и долгую борьбу с ними, ведущуюся без преувеличения всем миром, офшорный бизнес не только не сворачивается, а, наоборот, растет. Согласно оценкам ООН, около 90 государств во всем мире практикуют, в той или иной мере, развитие офшорной индустрии на своей территории.

Стоит отметить, что первый год деофшоризации российской экономики отмечен резким сокращением роста налогов на фоне ухудшения общей конъюнктуры.[2]

Литература

1. Деофшоризация // <https://ru.wikipedia.org/wiki/Деофшоризация>
2. Деофшоризация российской экономики – первые оценки// <http://www.vestifinance.ru/articles/36141>

ПЕРСПЕКТИВЫ УЧАСТИЯ НИЖЕГОРОДСКОЙ ОБЛАСТИ В РЕАЛИЗАЦИИ ПРОГРАММЫ ИМПОРТОЗАМЕЩЕНИЯ

Подурева М. С., Свинкин И. В.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

На сегодняшний день проблема импортозамещения стала особенно актуальной. Многие товары и услуги наша страна получает через импорт и после введения Западом санкций эта проблема усугубилась. Вопросы импортозамещения стратегически важны, от их решения зависит уровень роста, развития и обороноспособности национальной экономики.

Прежде всего, санкционные меры отразились на экспортно-импортных потоках товаров. Если говорить об отраслевой структуре санкций, то можно заметить, что большинство санкций направлено на конкурентоспособные отрасли экономики России: газовой, атомной, военной и нефтяной промышленности. Такой шаг, принятый рядом стран против России, не случаен, направлен на вытеснение российских компаний с мирового рынка.

Одним из главных направлений развития экономики России на ближайшие годы становится импортозамещение, и даже в ряде случаев производство товаров, которые ранее не производились на территории России. Например, в республике Татарстан изготавливают французские и итальянские сыры, такие как пармезан, камамбер, в республике Алтай – итальянский сливочный сыр – маскарпоне. По данным статистики отечественное производство сыров выросло на 36,5 % за 2015 год.

В докладе нами был проделан анализ, основных направлений по повышению конкурентоспособности местной продукции (на основе плана Правительства Нижегородской области по содействию импортозамещения на территории региона на период 2015–2020 годов). Ими станут: новые меры стимулирующей финансовой поддержки для предприятий, ориентированных на импортозамещение, мониторинг уровня цен на продукцию, актуализация программы «Покупайте нижегородское», а также развитие логистической сети для реализации продовольственной продукции местных производителей. Наиболее перспективные отрасли с точки зрения импортозамещения являются станкостроение, тяжелое машиностроение, легкая, электронная, фармацевтическая, медицинская, пищевая промышленность, оборонно-промышленный комплекс, а также сельское хозяйство.

Сельское хозяйство в приоритете по планам областного Правительства, регион должен обеспечить себя всей необходимой сельскохозяйственной продукцией на 90%. В 2015 году Правительство области

выделило сельскому хозяйству почти 4 млрд рублей. В основном эти средства пошли на животноводство, растениеводство и социальное развитие. В 2016 году на развитие агропромышленного комплекса выделяют чуть больше 3 млрд рублей. Сотрудники государственной сельскохозяйственной академии настроены оптимистично.

Таким образом, импортозамещение в жизнь воплотить реально, если грамотно распределить усилия, выявить новые подходы управления и тогда, при поддержке государства, всё получится.

СОВРЕМЕННЫЕ ПОДХОДЫ К ИНФОРМАЦИОННОМУ ОБЕСПЕЧЕНИЮ ТРУДОУСТРОЙСТВА И ОБЗОРА КАРЬЕРЫ ВЫПУСКНИКОВ ВУЗОВ (НА ПРИМЕР ИС «ИСТОК»)

Соловьев Т.Г., Федоренко Г.А., Юрина Я.А., Танаев М.С.

СарФТИ НИЯУ МИФИ

ИСТОК — Информационная система трудоустройства и обзора карьеры.

Достойная работа, успешная карьера, профессиональная реализация — цель и предмет жизненных устремлений каждого человека, особенно когда профессиональный путь только начинается. Сегодня важнейшая задача не только получить образование и профессиональную компетентность, но и суметь эффективно применить знания и навыки на практике, соответствовать высоким требованиям времени, быть востребованным на рынке труда.

Создание информационной поддержки выпускников и студентов высшего учебного заведения в целях содействия их трудоустройству является первоочередной целью системы «ИСТОК». С её помощью выпускники без труда могут получить информацию о вакансиях на предприятиях города и области.

Трудоустройство выпускников ВУЗов является не только проблемой выпускников, но и проблемой самих высших учебных заведений. Известно, что повышение гарантии трудоустройства выпускников после получения образования является важным конкурентным преимуществом ВУЗа на рынке образовательных услуг, привлекающим больше абитуриентов. В таких условиях необходим постоянный анализ востребованности тех или иных специальностей и прогнозирование изменения спроса на них, что является одной из основных задач ИС «ИСТОК». С помощью системы ВУЗ может отслеживать профессиональную траекторию и карьерный рост выпускников.

Основные модули системы:

- Администратор.

- Организации города и области, зарегистрированные в системе.
- Соискатель (выпускники, студенты высшего учебного заведения)
- Сотрудники высшего учебного заведения.

Система ИСТОК выполняет следующие функции:

1. Регистрация личных кабинетов участников процесса в информационной базе системы на портале.
 - 1.1. Регистрация организации
 - 1.2. Регистрация выпускника
2. Формирование информационной базы выпускников образовательного учреждения и предоставление доступа к данной информации работодателям.
3. Управление информацией о вакансиях и подбор претендентов.
4. Формирование информационных срезов с данными о выпускниках.

Информационная система ИСТОК – это современное технологичное RIA-приложение*, которое по сути является не традиционным интернет-порталом, а полноценным настольным приложением с развитым пользовательским интерфейсом.

**Rich Internet Application (RIA) - это веб-приложение, доступное через Интернет, насыщенное функциональностью традиционных настольных приложений.*

МАРКЕТИНГОВОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АБИТУРИЕНТОВ САРФТИ НИЯУ МИФИ: ФАКТОРЫ ВЫБОРА ВУЗА, ОЖИДАНИЯ ОТ ОБУЧЕНИЯ, УРОВЕНЬ ИНФОРМИРОВАННОСТИ

МАКАРЕЦ А.Б., Кудрявцев И.В.

СарФТИ НИЯУМИФИ

В современном мире выбор высшего учебного заведения играет важную роль в процессе профессионального самоопределения. Сделать данный выбор очень непросто, так как рынок образовательных услуг очень широк и разнообразен.

В процессе продвижения образовательных услуг вуза необходимо учитывать, что современное информационное общество расширяет возможности получения сведений, необходимых для выбора абитуриентами и родителями образовательных услуг. Главной задачей маркетинга вуза при проведении рекламной кампании является создание и обеспечение функционирования системы продвижения конкурентных преимуществ и специальностей вуза. Данный процесс существенно повышает значение маркетинговых исследований по выявлению особенностей потребительского поиска в процессе выбора вуза и образовательной программы.

Необходимость проведенного исследовании обуславливается наличием объективного противоречия между высокой значимостью информации в сфере осознанного профессионального выбора, поступления в вуз и получения образования, необходимого для последующей карьеры, с одной стороны, и достаточно низким уровнем внимания к созданию и поиску целенаправленных информационных потоков и точек контакта со стороны вузов, с другой стороны.

В докладе рассматриваются особенности проведения маркетингового исследования поведения абитуриентов СарФТИ 2015 г. в процессе принятия решения о выборе вуза и образовательных услуг. В его рамках был осуществлен анализ данных приемной комиссии и дополнительный опрос целевой группы с целью выявления предпочтений абитуриентов при выборе вуза, а также с целью выявления эффективных каналов по доведению информации о вузе до абитуриентов. Основную целевую группу в проведенном исследовании составляли абитуриенты, подавшие документы в СарФТИ НИЯУ МИФИ (в т.ч. поступающие в магистратуру), а также в рамках программы опроса дополнительно анкетировались студенты 1-2 курса.

В докладе представляется функциональные возможности и разработанного программного комплекса, автоматизирующего обработку результатов проведенного исследования и представления результатов в качественной форме для последующего качественного анализа.

Результаты проведенного исследования наглядно иллюстрируют текущее состояние информационного обеспечения абитуриентов СарФТИ, критерии выбора учебного заведения, определяют степень влияния различных факторов при поступлении и многие другие важные показатели.

Маркетинговые исследования факторов и мотивов потребительского поиска на стадии продвижения вузом образовательной услуги позволяют смоделировать поведение потребителей в процессе выбора высшего учебного заведения, образовательных программ, получить информацию об основных источниках информации о вузе, выявить факторы, оказывающие влияние на потребителей на основных этапах принятия решения о выборе образовательной услуги. Данная информация должна стать основой разработки клиентоориентированных программ продвижения образовательных услуг, в том числе онлайн-точки контакта в Интернет.

Литература

1. Рыченков М.В., Рыченкова И.В., Киреев В.С. Исследование факторов, оказывающих влияние на выбор вуза абитуриентами, на различных этапах процесса поступления // Современные проблемы науки и образования. – 2013. – №6.; URL:<http://www.science-education.ru/ru/article/view?id=11612>

2. Макарец А.Б., Ершов П.Е. Обработка и анализ результатов маркетингового исследования факторов и мотивов потребительского выбора на рынке образовательных услуг // Девятая Всероссийская молодежная научно-инновационная школа «Математика и математическое моделирование»: Сборник материалов. - 09-10 апреля 2015 г. / А.Г. Сироткина (отв. за выпуск). – Саров: изд. «Интерконтакт», 2015. – С. 99-100.
3. Danchenok L., Netesova A. Differentiated approach to organization of marketing research of university educational services consumers // International Marketing Trends Conference / Venice, 2015 (ISBN 978-2-9532811-2-5); URL: <http://www.marketing-trends-congress.com>
4. Манн И., Турусин Д. Точки контакта: простые идеи для улучшения вашего маркетинга. Манн, Иванов и Фербер, 4-е изд. - 2015 г. – 156 с.

СОДЕРЖАНИЕ

СЕКЦИЯ: БЕЗОПАСНОСТЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ И ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМ

| | |
|---|----|
| АНАЛИЗ ВОЗМОЖНОСТИ ПОСТРОЕНИЯ ГИБРИДНЫХ ЗАЩИЩЕННЫХ СИСТЕМ ДЛЯ НАДЕЖНОЙ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ПЕРЕДАЧИ ДАННЫХ В КВАНТОВЫХ КАНАЛАХ СВЯЗИ | |
| Астайкин В.О., Николаев Д.Б., Казаков Д.А., Шишков В.Ю. | 3 |
| АНАЛИЗ ВОПРОСОВ МОНИТОРИНГА ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫХ КАНАЛОВ СВЯЗИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СОВРЕМЕННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ | |
| Башлаков М.В., Голихин М.В., Рыжов А.А., Мартынов А.П. | 4 |
| АНАЛИЗ СОВРЕМЕННЫХ УГРОЗ ИНФОРМАЦИОННОЙ БЕЗОПАСНОСТИ ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ | |
| Булгакова А.О., Николаев Д.Б., Беликов А.Е. | 5 |
| ИССЛЕДОВАНИЕ ВОПРОСОВ ИДЕНТИФИКАЦИИ НА ОСНОВЕ МЕТОДА ВЫДЕЛЕНИЯ РЕЧЕВОГО БАЗИСА | |
| Васильев Р.А., Николаев Д.Б. | 7 |
| ПРИМЕНЕНИЕ РЕЧЕВОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ В СИСТЕМАХ РАЗГРАНИЧЕНИЯ ДОСТУПА | |
| Васильев Р.А., Николаев Д.Б. | 8 |
| АНАЛИЗ ВОПРОСОВ ПОСТРОЕНИЯ ПРОГРАММНЫХ СИСТЕМ ОБРАБОТКИ РАЗНОРОДНЫХ ДАННЫХ | |
| Емельянов А. А., Николаев Д. Б. | 9 |
| МОДЕЛИРОВАНИЕ МОДУЛЯЦИОННОГО МЕТОДА ПРИЕМА ИНФОРМАТИВНЫХ СИГНАЛОВ ПОБОЧНОГО ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ | |
| Евстифеев А.А., Ерошев В.И., Казаков А.А., | 11 |
| ИССЛЕДОВАНИЕ ВОПРОСОВ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ЦИФРОВЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ ДЛЯ ПЕРЕДАЧИ ПО КАНАЛАМ СВЯЗИ С ЗАДАНЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ | |
| Казаков Д.А., Николаева И.А. | 12 |
| АНАЛИТИЧЕСКОЕ УПРАВЛЕНИЕ КРИПТОГРАФИЧЕСКИМИ СИСТЕМАМИ ПУТЕМ ДИНАМИЧЕСКОГО ИЗМЕНЕНИЯ БАЗИСНЫХ ПАРАМЕТРОВ | |
| Казаков Д.А., Казаков С.С., Николаева И.А. | 13 |
| ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТРОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК УНИВЕРСАЛЬНОГО ТЕСТЕРА НА ОСНОВЕ МИКРОКОНТРОЛЛЕРА | |
| Кашеев В.М., Родионова Т.В., Смирнов М.К., Левцова В.А. | 14 |

| | |
|---|----|
| ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СТРУКТУРИРОВАННЫХ ИНФОРМАЦИОННЫХ МАССИВОВ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ИСПОЛНЯЕМЫХ МОДУЛЕЙ УПРАВЛЕНИЯ И КОНТРОЛЯ | |
| Козлов Д. А., Николаев Д. Б., Шишков С.Ю., Точилин А.В. | 15 |
| АППАРАТНО-ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ПРОТОТИПИРОВАНИЯ ПОЛУЗАКАЗНЫХ БИС | |
| Латыпов Т.И., Ведерников В.Л., Биктимиров З.Н., Хлестков С.М. | 16 |
| МНОГОЭЛЕМЕНТНАЯ СЕТЬ БЕЗОПАСНОГО ОБМЕНА С ФУНКЦИЕЙ СИНЕРГЕТИЧЕСКОГО РЕЗЕРВИРОВАНИЯ | |
| Коткова С.С., Николаев Д.Б., Чащихин С.С. | 17 |
| АППАРАТНЫЙ ГЕНЕРАТОР СЛУЧАЙНЫХ БИНАРНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ С ЕМКОСТНЫМ ИСТОЧНИКОМ ЭНТРОПИИ | |
| Латыпов Т.И., Хлестков С.М., Матвеевко А.С., Маланцев А.Г. | 18 |
| КОНСТРУИРОВАНИЕ ИНФОРМАЦИОННОЙ ИЗМЕРИТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ РАДИАЦИОННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА | |
| Левцова В.А., Кошкин В.В., Овсов А.В., Смирнов М.К. | 19 |
| РАЗРАБОТКА КОМПЛЕКСА ДЛЯ ОПЕРАТИВНОГО ПРОТОКОЛИРОВАНИЯ ДАННЫХ | |
| Нескородьев А.Ю., Анашкин А.Н., Ерошев В.И., Конов В.А., Умаров А.А., Евстифеев А.А. | 20 |
| ИССЛЕДОВАНИЕ ВОПРОСОВ СУПЕРПОЗИЦИОННОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ ПРИ АНАЛИЗЕ КОНФИГУРАЦИИ СИСТЕМЫ | |
| Орлов А.В., Николаев Д.Б., Точилин А.В., Чащихин С.С. | 21 |
| АНАЛИЗ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПОКРЫТИЯ КОДА ПРИ ДИНАМИЧЕСКОМ УПРАВЛЕНИИ ПРОГРАММНЫМ ОБЕСПЕЧЕНИЕМ | |
| Соколов П.С., Колтаков С.Н., Скоробогатый А.А., Николаев Д.Б. | 22 |
| СПОСОБ ИСПРАВЛЕНИЯ ОШИБОК ПРИ ПЕРЕДАЧЕ ИНФОРМАЦИИ БИИМПУЛЬСНЫМ КОДОМ МАНЧЕСТЕР-II И УСТРОЙСТВО ЕГО ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ | |
| Рыжов А.А., Точилин А.В., Мартынов А.П., Гончаров С.Н., Марунин М.В. | 24 |
| ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ АНАЛИЗА ПРОГРАММНЫХ МОДУЛЕЙ МЕТОДОМ ГРАФИЧЕСКОЙ ИНТЕРПРЕТАЦИИ | |
| Соколов П.С., Колтаков С.Н., Скоробогатый А.А., Николаев Д.Б. | 25 |
| АНАЛИЗ ХАРАКТЕРИСТИК ГЕТЕРОГЕННЫХ ПСЕВДОСЛУЧАЙНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ И ИХ СТАТИСТИЧЕСКИХ ТЕСТИРОВАНИЙ | |
| Сплюхин Д.В., Данилкин М.В., Мартынов А.А., Николаев Д.Б. | 27 |

| | |
|--|----|
| АНАЛИЗ НОВЕЙШИХ ТРЕБОВАНИЙ ФСТЭК И ОБЩИЕ РЕШЕНИЯ СУЩЕСТВУЮЩИХ ПРОБЛЕМ ЗАЩИТЫ ИНФОРМАЦИОННЫХ СИСТЕМ | |
| Сплюхин Д.В., Николаев Д.Б. | 28 |
| МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ТРАНСПОРТАЦИИ ИНФОРМАЦИИ В СЕТЯХ РАЗЛИЧНОЙ СТЕПЕНИ РАЗВЕТВЛЕННОСТИ | |
| Тарасов А.М., Николаев Д.Б. | 30 |
| СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ИНСТРУМЕНТАРИЯ ОПЕРАЦИОННЫХ СИСТЕМ ОС «WINDOWS» И ОС «LINUX» В ОБЛАСТИ ИНФОРМАЦИОННОЙ БЕЗОПАСНОСТИ | |
| Терентьева Е.Е., Николаев Д.Б., Калимуллин В.Г. | 31 |
| РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ОТЛОЖЕННОГО АНАЛИЗА СИГНАЛОВ | |
| Умаров А.А., Ерошев В.И., Нескородьев А.Ю., Евстифеев А.А. | 33 |

СЕКЦИЯ: МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ПРОБЛЕМЕ НЕРАСПРОСТРАНЕНИЯ ЯДЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ И ВООРУЖЕНИЙ

| | |
|--|----|
| ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ НЕЧЕТКОЙ ЛОГИКИ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА НЕРАСПРОСТРАНЕНИЯ ЯДЕРНОГО ОРУЖИЯ | |
| Верещага А.Н., Чернышев А.К. | 35 |
| СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ РЕЖИМА ЯДЕРНОГО НЕРАСПОСТРАНЕНИЯ | |
| Каравашкина Е.В., Медведева Н.С. | 36 |
| ПРЕДОТВРАЩЕНИЕ УГРОЗЫ ЯДЕРНОГО ТЕРРОРИЗМА | |
| Михайлюк А.С., Захарова М.А. | 37 |
| ИСТОРИЯ И СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ РЕЖИМА ЯДЕРНОГО НЕРАСПРОСТРАНЕНИЯ | |
| Немцева А.В., Росчихмарова Ю.Д., Мисатюк Е.В. | 38 |
| СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ И ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В МИРЕ | |
| Юркова Е.Д., Лебедев И.М., Страхов А.В. | 39 |
| ЧЕРНОБЫЛЬ: ОЦЕНКА ПОСЛЕДСТВИЙ ЯДЕРНОЙ АВАРИИ | |
| Березовский А.Ю., Алеханов А.В., Ковалёва Е.В. | 40 |
| МЕЖДУНАРОДНЫЙ РЕЖИМ ЯДЕРНОГО НЕРАСПРОСТРАНЕНИЯ | |
| Бикмухаметов А.Р., Пучкова С.А., Глазова М.А. | 41 |

| | |
|---|----|
| СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ И ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В МИРЕ | |
| Гущин Д.А., Зоткин С.П. | 41 |
| ЯДЕРНЫЙ ТЕРРОРИЗМ | |
| Дегтярев А.В. | 42 |
| МЕЖДУНАРОДНЫЙ РЕЖИМ ЯДЕРНОГО НЕРАСПРОСТРАНЕНИЯ | |
| Ерёмкина М.С. | 43 |
| СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ И ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В МИРЕ | |
| Кичемасов Н.Х., Хайров М.Ю., Шишканов Д.А. | 43 |
| ПРОТИВОДЕЙСТВИЕ АТОМНОМУ ТЕРРОРИЗМУ | |
| Козлова С.П., Петрова М.М., Ерунова В.А. | 44 |
| 28 СЕНТЯБРЯ – ДЕНЬ РАБОТНИКОВ АТОМНОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ | |
| Кокуркина К.А., Рыбин Д.А., Кособоков Д.Г. | 45 |
| МЕЖДУНАРОДНЫЕ И НАЦИОНАЛЬНЫЕ ЗАКОНОДАТЕЛЬНЫЕ ОСНОВЫ ЯДЕРНОЙ И РАДИАЦИОННОЙ БЕЗОПАСНОСТИ | |
| Ларькина О.С., Лемясева О.В. | 46 |
| ГОСУДАРСТВЕННАЯ ПОЛИТИКА РОССИИ В ОБЛАСТИ НЕРАСПРОСТРАНЕНИЯ ЯДЕРНОГО ОРУЖИЯ И СРЕДСТВ ЕГО ДОСТАВКИ | |
| Липенкова Л.И. | 47 |
| 28 СЕНТЯБРЯ – ДЕНЬ РАБОТНИКОВ АТОМНОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ | |
| Лобачёва М.А., Вавилова Т.А. | 48 |
| ПРОТИВОДЕЙСТВИЕ ЯДЕРНОМУ ТЕРРОРИЗМУ | |
| Малышев А., Пронин И. | 49 |
| СОСТОЯНИЕ И РАЗВИТИЕ СТРАТЕГИЧЕСКИХ ЯДЕРНЫХ СИЛ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ | |
| Мишин А.А., Мисатюк Е.В. | 50 |
| ИСТОРИЯ И СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ РЕЖИМА ЯДЕРНОГО НЕРАСПРОСТРАНЕНИЯ | |
| Чередниченко И.Е. | 51 |
| ПРОБЛЕМЫ ПЕРЕДАЧИ ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ | |
| Мурылев В.В., Сычёв А.А. | 52 |
| ПРОТИВОДЕЙСТВИЕ ЯДЕРНОМУ ТЕРРОРИЗМУ | |
| Становов А.А., Решетняк А.Д., Майоров В.А. | 52 |

| | |
|--|----|
| МЕЖДУНАРОДНЫЙ РЕЖИМ АТОМНОГО НЕРАСПОСТРАНЕНИЯ | |
| Трусов М.А., Кузьмин А.С., Правдынюк А.В. | 53 |
| ПРОБЛЕМЫ ПЕРЕДАЧИ ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ | |
| Шавров Е.Д., Тимонин Д.А. | 54 |

СЕКЦИЯ: СОВРЕМЕННЫЕ ПРОГРАММНЫЕ КОМПЛЕКСЫ И СИСТЕМЫ В МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ

| | |
|--|----|
| МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБЪЕКТА УПРАВЛЕНИЯ В КОМПЬЮТЕРНОМ ТРЕНАЖЕРЕ | |
| Алексеев О.В. | 56 |
| РАЗРАБОТКА МОБИЛЬНОГО ПРИЛОЖЕНИЯ LEARN ENGLISH ДЛЯ ПОПОЛНЕНИЯ СЛОВАРНОГО ЗАПАСА МЕТОДОМ АУДИАЛЬНО-ВИЗУАЛЬНЫХ АССОЦИАЦИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ СОЗНАТЕЛЬНОГО ВНИМАНИЯ | |
| Шиков С.А., Алексеев Е.Г., Ивлиев С.Н. | 57 |
| КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГОЭФФЕКТИВНЫХ СВЕТОВЫХ ПРИБОРОВ | |
| Байнев В. В. | 58 |
| ГЕНЕРАТОР ЗАМКНУТОЙ ПОВЕРХНОСТНОЙ ТРИАНГУЛЯЦИОННОЙ СЕТКИ В КОМПЛЕКСЕ ПРОГРАММ ЛОГОС | |
| Голомидов Ф.О., Никитин В.А., Панов А.И., Соколов С.С., Шурыгин А.В. | 60 |
| ДЕТЕКТИРОВАНИЕ ОБРАЗОВ В СИСТЕМАХ КОМПЬЮТЕРНОГО ЗРЕНИЯ | |
| Дюпин В. Н., Фролкина А. В., Доронин В.А., Кузьмин В.В., Корнилова А.Ю. | 61 |
| СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СИСТЕМ ОТСЛЕЖИВАНИЯ ОШИБОК ПРИМЕНИТЕЛЬНО К РАЗРАБОТКЕ АСУ ТП | |
| Ескова Е.А., Тюндюна А.А. | 63 |
| РАЗВИТИЕ МОДЕЛЕЙ ГИДРОГЕОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ В ПАКЕТЕ ПРОГРАММ НИМФА | |
| Горев И.В., Журавлева М.В. | 63 |
| ПРИМЕНЕНИЕ ВИХРЕРАЗРЕШАЮЩИХ МОДЕЛЕЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ В ЗАДАЧАХ ЕСТЕСТВЕННОЙ И ВЫНУЖДЕННОЙ КОНВЕКЦИИ С ПРЕОБЛАДАНИЕМ ГРАВИТАЦИОННЫХ СИЛ | |
| Крутякова О.Л., Курулин В.В. | 64 |

| | |
|---|----|
| РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ МЕТОДОМ СГЛАЖЕННЫХ ЧАСТИЦ SPH | |
| Полищук С.Н., Лазарев А. А., Тихомиров Б.П. | 65 |
| МОДУЛЯРНО-СИСТОЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ДЛЯ МАССОВЫХ АРИФМЕТИЧЕСКИХ ВЫЧИСЛЕНИЙ | |
| Осинин И.П. | 67 |
| ПРИНЦИПЫ МОДУЛЯРНО - ЛОГАРИФМИЧЕСКОЙ АРИФМЕТИКИ | |
| Макаров С.А. | 68 |
| МАТРИЧНЫЕ СБИС-СТРУКТУРЫ НА БАЗЕ МНОГОУРОВНЕВОЙ СИСТЕМЫ ОСТАТОЧНЫХ КЛАССОВ | |
| Симаков В.Ю. | 69 |
| ПРИМЕНЕНИЕ СУПЕРКОМПЬЮТЕРОВ ПРИ РЕШЕНИИ ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧ | |
| Макейкин Е.Г., Макаева И.В., Кашеев Ю.Н. | 71 |
| СИНТЕЗ УПРАВЛЕНИЯ ПРИ ОГРАНИЧЕНИЯХ НА ФАЗОВЫЕ И УПРАВЛЯЮЩИЕ ПЕРЕМЕННЫЕ НА ОСНОВЕ ЛИНЕЙНЫХ МАТРИЧНЫХ НЕРАВЕНСТВ | |
| Николаева О.Ю. | 72 |
| СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ОТЕЧЕСТВЕННЫХ И ЗАРУБЕЖНЫХ ПРОГРАММНЫХ КОДОВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ РАСЧЕТОВ В РАЗЛИЧНЫХ ОБЛАСТЯХ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ | |
| Прошкина Е.Я., Тихомиров Г.В., Сальдилов И.С., Богданова Е.В. | 73 |
| АЛГОРИТМЫ ДИНАМИЧЕСКОЙ БАЛАНСИРОВКИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ НАГРУЗКИ ДЛЯ МНОГОМЕРНЫХ РАСЧЕТОВ В МЕТОДИКЕ ТИМ | |
| Половникова Т.Н., А.А. Воропинов. | 74 |
| УРОВЕНЬ ГАШЕНИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ПРИ НЕИЗВЕСТНЫХ НАЧАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ СИСТЕМЫ | |
| Прыткова А.С. | 76 |
| МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗОТОПНОГО СОСТАВА АКТИВНОЙ ЗОНЫ БЫСТРОГО РЕАКТОРА В ЗАМКНУТОМ ЯДЕРНОМ ТОПЛИВНОМ ЦИКЛЕ | |
| Сальдилов И.С., Тихомиров Г.В. | 77 |
| ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ДВУХФАЗНОЙ ЗАДАЧИ СТЕФАНА В МОДУЛЕ РАСЧЕТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ КОМПЛЕКСА ПРОГРАММ ЛОГОС | |
| Тришин Р.А., Глазунов В.А. | 78 |
| АЛГОРИТМЫ ПОСТРОЕНИЯ ТРЕХМЕРНЫХ НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТОК НА ОСНОВЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ СЕТКИ ДЛЯ МЕТОДИКИ ТИМ | |
| Шмелёва А.К., Воропинов А.А. | 79 |

СЕКЦИЯ: МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И ЯВЛЕНИЙ

ОПЫТ ПРИМЕНЕНИЯ ПП ЛОГОС-ПРОЧНОСТЬ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ САРФТИ НИЯУ МИФИ

Жаворонкова Н.А., Бухарев Ю.Н., Чембаров А.И., Коваленко И.В.,
Липенкова Е.И., Ивашов А.Э., Тонов В.Ю., Федосеев А.В., Ерофеев К.В. 82

РЕЗУЛЬТАТЫ ВЕРИФИКАЦИИ ПП ЛОГОС НА ЗАДАЧАХ АНАЛИЗА СОБСТВЕННЫХ ЧАСТОТ И ФОРМ КОЛЕБАНИЙ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ОБОЛОЧЕК

Речкин В.Н., Сидоренко Е.И. 82

РАСЧЕТЫ ПАРАМЕТРОВ ПРОБИТИЯ АЛЮМИНИЕВЫХ ПЛАСТИН СФЕРИЧЕСКИМИ УДАРНИКАМИ СО СКОРОСТЯМИ ОТ 1 ДО 8 КМ/С С ПОМОЩЬЮ ПАКЕТА ПРОГРАММ «ЛОГОС» И СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ ДАННЫМИ

Сулоев И.А., Полюхов А.Ю., Хуторной П.В., Бухарев Ю.Н. 83

МОЛЕКУЛЯРНО–ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТАТИЧЕСКОГО И УДАРНО- ВОЛНОВОГО СЖАТИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ: ГЕКСОГЕН, ТАТЬ И СL-20

Губин С.А., Маклашова И.В., Селезнев А.А., Козлова С.А. 85

МЕТОДЫ ТЕСТИРОВАНИЯ ПРОГРАММ ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ В ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ КОМПЛЕКСАХ ПРОГРАММ

Данилов А.С. 86

РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДИКИ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ТРЕХМЕРНОЙ ЗАДАЧИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ДЛЯ ТЕЛ С ПОДВИЖНЫМИ ГРАНИЦАМИ

Серяков Ю.Д., Глазунов В.А. 87

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИМЕНЕНИЯ ОГРАНИЧИТЕЛЕЙ ГРАДИЕНТА ПРИ РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ-СТОКСА НА ПРОИЗВОЛЬНЫХ НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТКАХ

Глазунова Е.В., Козелков А.С., Лашкин С.В., Курулин В.В. 88

НЕЯВНЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ-СТОКСА ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕЧЕНИЙ В АНИЗОТРОПНЫХ ПОРИСТЫХ СРЕДАХ

Гиниятуллин Р.Р., Козелков А.С., Лашкин С.В. 89

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТАНИЯ УДАРНИКОВ ПРОДУКТАМИ ВЗРЫВА В ИНИЦИИРУЮЩИХ СИСТЕМАХ

Скляров А.В., Устимкин П.А. 90

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ИНИЦИИРОВАНИЯ ПИРОТЕХНИЧЕСКОГО СОСТАВА МОСТИКОМ НАКАЛИВАНИЯ

Липенкова Е.И., Устимкин П.А., Селезнев А.А. 92

| | |
|---|-----|
| ЧИСЛО РЕЗОНАНСНЫХ ЧАСТОТ РЕАКТИВНЫХ ДВУХПОЛЮСНИКОВ ЛЮБОЙ КОНФИГУРАЦИИ | |
| Волков С.С., Ивлева Л.А., Ивлева Е.В., Пузевич Н.Л. | 93 |
| ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПЕРЕДАЧИ СИЛЫ В СИСТЕМЕ «ГЕНЕРАТОР-ЛИНИЯ-ДВИГАТЕЛЬ» | |
| Волков С.С., Пузевич Н.Л., Сучугов Б.Н., Дмитриев В.В., Николин С.В. | 95 |
| АКУСТИЧЕСКИЕ СИГНАЛЫ КАК ДИАГНОСТИЧЕСКИЙ ПАРАМЕТР ДЛЯ АНАЛИЗА ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ТЕХНИЧЕСКОГО ОБОРУДОВАНИЯ | |
| Дробышев В.В. | 98 |
| МОДЕЛИРОВАНИЕ ОТКАЗА ТОРЦОВОЙ ФРЕЗЫ | |
| Бородин Д.С. | 99 |
| МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ РЕШЕНИЕМ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ | |
| Лаптев А. П., Прибытов В. Д., Вебер В. А., Вебер А. Е. | 100 |
| ВЕКТОРНЫЙ МЕТОД РАСПРОСТРАНЯЮЩИХСЯ ПУЧКОВ И ЕГО СКАЛЯРНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ В РАСЧЕТЕ ПРОПУСКАНИЯ ВОЛОКОН С ФОТОННОЙ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНОЙ | |
| Пластун А.С., Конюхов А.И. | 101 |
| СПОСОБ НАСТРОЙКИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ФИЛЬТРА | |
| Епонешников И.С. | 103 |
| ОЦЕНКА ВРЕМЕНИ ВСТУПЛЕНИЯ ВОЛНЫ ПО ИЗМЕРЕНИЯМ УРОВНЯ МОРЯ | |
| Иванченко О.В. | 104 |
| МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА ВЧ ИНЪЕКТОРА РЕЗОНАНСНОГО УСКОРИТЕЛЯ ЭЛЕКТРОНОВ БЕТА-8 | |
| Беляев А.Н., Опекунов А.М. | 106 |
| ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ ОДНОМЕРНЫХ МАГНИТНЫХ СИСТЕМ | |
| Козабаранов Р.В, Кудасов Ю.Б. | 107 |
| ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПЕРЕКРЕЩИВАЮЩИХСЯ УЗ-ПУЧКОВ В ДОПЛЕРОВСКОМ МЕТОДЕ ИЗМЕРЕНИЯ СКОРОСТИ ЖИДКОСТИ | |
| Орлов А.С., Диденкулов И.Н., Мартьянов А.И., Прончатов-Рубцов Н.В. | 108 |
| ПРОВЕРКА ОТЛИЧИЯ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НАПРЯЖЕННОСТИ ИЗЛУЧЕНИЯ СЛУЧАЙНОГО ВОЛОКОННОГО ЛАЗЕРА ОТ ГАУССОВА ВИДА В МОДЕЛИ ВОЛНОВОЙ КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ | |
| Огородников Л.Л., Лебедев В.В., Вергелес С.С. | 108 |
| ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И РАСЧЕТНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ СТАБИЛИЗАЦИИ ПОЛЕТА ПЛОСКОГО УДАРНИКА | |
| Башурин В.П., Гук Д.Е., Ктиторов Л.В., Лазарева А. Макаров С.А., Мешков Е.Е. | 110 |

КОНСТРУИРОВАНИЕ ВЕТРО- И ГИДРОГЕНЕРАТОРОВ НА ОСНОВЕ ПРИНЦИПА
КУМУЛЯЦИИ ЭНЕРГИИ ПОТОКА

Башурин В.П., Ктиторов Л.В., Лазарева А.С., Плетенев Ф.А. 111

О ВОЗМОЖНОСТЯХ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ВИРТУАЛЬНОГО ПРАКТИКУМА ПО
ГАЗОДИНАМИКЕ В УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ САРФТИ НИЯУ МИФИ

Евланов К.И., Мешков Е.Е., Попов С.Ф., Руденко В.В.,
Рыжов И.С., Рябков А.В., Холушкин В.С. 112

ЛАБОРАТОРНАЯ МОДЕЛЬ ВЫХОДА УДАРНОЙ ВОЛНЫ НА СВОБОДНУЮ ГРАНИЦУ
КОНДЕНСИРОВАННОЙ СРЕДЫ С ОБРАЗОВАНИЕМ ОБЛАКА МИКРОЧАСТИЦ

Баранов В.К., Георгиевская А.Б., Клевцов В.А., Мешков Е.Е.,
Попов С.Ф., Рыжов И.С., Степушкин С.Н. 114

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДИКИ МАРКЕРОВ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ УСТОЙЧИВОСТИ
КУПОЛА ПУЗЫРЯ ТЕЙЛОРА

Каныгин Р.И., Кащеев А., Мешков Е.Е., Новикова И.А. 115

СЕКЦИЯ: МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ХИМИИ

МОЛЕКУЛЯРНО ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СИСТЕМ ХИТОЗАНА С
ИНСУЛИНОМ

Авдошин А.А., Наумов В.С., Игнатов С.К. 117

СТРУКТУРНЫЕ, ЭЛЕКТРОННЫЕ, ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ И СПЕКТРАЛЬНЫЕ
СВОЙСТВА АНАЛОГОВ ХЛОРОФИЛЛА В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

Григорьева А.О., Игнатов С.К. 118

СРАВНИТЕЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ВНУТРЕННЕГО ВРАЩЕНИЯ В МОЛЕКУЛАХ
МОНОФТОРАЛКАНОВ И ИХ РАДИКАЛАХ

Котомкин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. 120

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСТВОРЕНИЯ КРИСТАЛЛА
ХИТОЗАНА: ВЛИЯНИЕ КИСЛОТНОСТИ СРЕДЫ И РАЗМЕРОВ ПОЛИМЕРА НА
КИНЕТИКУ РАСТВОРЕНИЯ

Наумов В.С., Игнатов С.К. 121

СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ САЛОЛА В РАЗЛИЧНЫХ ФАЗОВЫХ
СОСТОЯНИЯХ

Бабков Л.М., Ивлиева И.В., Давыдова Н.А. 123

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛЫ
ФТАЛЕВОГО АНГИДРИДА

Газимагомедов М.А., Отлетов А.А., Гиричев Г.В. 124

| | |
|---|-----|
| КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛЫ 4-БРОМФТАЛИМИДА Курочкин И.Ю., Отлёттов А.А., Гиричев Г.В. | 125 |
| РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ ЦЕПОЧЕЧНЫХ СТРУКТУР –O-AU-O- ПРИ ОКИСЛЕНИИ СО НА ПОВЕРХНОСТИ AU(321): DFT-ИССЛЕДОВАНИЕ В ПЕРИОДИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ Логинова А.С., Игнатов С.К., Москалева Л.В. | 127 |
| ВЛИЯНИЕ ОРИЕНТАЦИОННОЙ ИЗОМЕРИИ НА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ И КОНЦЕНТРАЦИИ НЕЙТРАЛЬНЫХ КЛАСТЕРОВ ВОДЫ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ Широкова Е.А., Воронова О.С., Игнатов С.К., Разуваев А.Г. | 128 |
| СТРУКТУРА И ДИНАМИКА СОЛЬВАТНЫХ ОБОЛОЧЕЧКОМПЛЕКСОВ МЕДИ(II) С N,O-СОДЕРЖАЩИМИ ЛИГАНДАМИ Бухаров М.С., Гилязетдинов Э.М., Серов Н.Ю., Штырлин В.Г. | 130 |
| ТЕРМОДИНАМИКА РЕАКЦИИ ГРИНЬЯРА НА ПРИМЕРЕ СИСТЕМЫ ETBR + MGN Беляев С.Н., Пантелеев С.В., Игнатов С.К. | 131 |
| КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ СИНТЕЗА ОЛИГОПЕПТИДОВ В СИСТЕМАХ АМИНОКИСЛОТА-ТРИМЕТАФОСФАТ-НАТРИЯ – ИМИДАЗОЛ Серов Н.Ю., Штырлин В.Г. | 132 |
| МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПРИСОЕДИНЕНИЯ 1,2-ЭТАНДИТИОЛА К 4-ГИДРОКСИ-4-МЕТИЛ-3-ПЕНТИНОНИТРИЛУ Чиркина Е.А., Малькина А.Г., Кривдин Л.Б. | 134 |
| ПОСТРОЕНИЕ СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ГАЛОИДОЗАМЕЩЕННЫХ БЕНЗОФЕНОНА И ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ИХ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ Бабков Л.М., Бойков В.А., Давыдова Н.А. | 135 |
| СТРУКТУРА, ТЕРМОДИНАМИКА И СТЕРЕОСЕЛЕКТИВНОСТЬ ОБРАЗОВАНИЯ ГОМО- И ГЕТЕРОЛИГАНДНЫХ КОМПЛЕКСОВ В СИСТЕМАХ ЦИНК(II) – L/D/DL- АМИНОКИСЛОТЫ Гилязетдинов Э.М., Серов Н.Ю., Романова Л.А., Бухаров М.С., Штырлин В.Г. | 136 |
| МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ ТРИФЕНИЛФОСФИТА И ИХ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ Бабков Л.М., Ивлиева И.В., Давыдова Н.А. | 137 |
| МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И АНАЛИЗ ОПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК УГЛЕРОДНЫХ НАНОЧАСТИЦ И АЗОТИСТЫХ ОСНОВАНИЙ ДНК Бокарев А.Н., Пластун И.Л. | 139 |

| | |
|---|-----|
| ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ЗАМЕЩЕННЫХ β -D-ГЛЮКОЗЫ НА ОСНОВЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ ИХ СТРУКТУРЫ И ИК СПЕКТРОВ | |
| Бабков Л.М. 1, Ивлиева И.В. 1, Моисейкина Е.А., Королевич М.В. | 140 |
| СКРИНИНГУЮЩАЯ СИСТЕМА НЕВРОЛОГИЧЕСКОЙ ДИАГНОСТИКИ НА ОСНОВЕ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ МОДЕЛИ | |
| Индюхин А.А. | 142 |
| ИЕРАРХИЧЕСКАЯ СИСТЕМА МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ БИОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ГОЛОВНОГО МОЗГА | |
| Кондратьева П.В., Коржук Н.Л., Индюхин А.Ф. | 143 |
| МЕТОДЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ПРОГНОЗА МЕЗОМОРФИЗМА У ДИСКОПОДОБНЫХ ВЕЩЕСТВ РАЗЛИЧНОЙ ХИМИЧЕСКОЙ ПРИРОДЫ | |
| Акопова О.Б. | 145 |
| КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТАДИИ ОБРАЗОВАНИЯ СИГМА-КОМПЛЕКСОВ В АРОМАТИЧЕСКОМ НУКЛЕОФИЛЬНОМ ЗАМЕЩЕНИИ | |
| Антонова Е.А., Котов А.Д. | 147 |
| КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ СУЛЬФАМЕТОКСАЗОЛА В СОСТАВЕ ПРЕПАРАТА «БИСЕПТОЛ» | |
| Бирюкова М.М., Генык Е.А., Золотарева Н.В., Кемельбаева Д.Р., Халилова Р.М. . . | 148 |
| ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ 1-АМИНОНАФТАЛИН-8-СУЛЬФОКИСЛОТЫ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ И В РАЗЛИЧНЫХ ПО ПОЛЯРНОСТИ РАСТВОРИТЕЛЯХ | |
| Буданова К.А., Лапыкина Е.А., Федоров М.С. | 150 |
| СТРОЕНИЕ, ЧАСТОТЫ КОЛЕБАНИЙ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТРИМЕТОПРИМА: КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ | |
| Генык Е.А., Бирюкова М.М., Золотарева Н.В., Кемельбаева Д.Р., Халилова Р.М. . | 151 |
| ОЦЕНКА РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ 1,1,1-ТРИХЛОР-2,2-ДИАРИЛЭТАНОВ МЕТОДАМИ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ | |
| Кужин М.Б., Казин В.Н., Сибриков С.Г., Гузов Е.А., Сирик А.В. | 153 |
| ВЗАИМОСВЯЗЬ МЕЖДУ СОРБЦИОННЫМИ И СТРУКТУРНЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ ПРОИЗВОДНЫХ АЗОЛОВ | |
| Джабиева С.А., Курбатова С.В. | 154 |
| АНАЛИЗ АТОМНЫХ ОРБИТАЛЕЙ В СИСТЕМЕ АДЕНИН-УРАЦИЛ | |
| Ильина М.Г., Хамитов Э.М. | 156 |

| | |
|---|-----|
| <p>КОНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ МОЛЕКУЛ АЗОМЕТИНА И ЕНАМИНА В РЕАКЦИИ ПОЛУЧЕНИЯ N-ПРОПИЛ-4-АМИНОБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ НА PD-СОДЕРЖАЩИХ ГРАФЕНОПОДОБНЫХ НАНОМАТЕРИАЛАХ</p> | 157 |
| <p>Калмыков П.А., Магдалинова Н.А., Ключев М.В.</p> | |
| <p>КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ РЕАКЦИЙ АМИДО- И СУЛЬФАМИДООБРАЗОВАНИЯ</p> | 159 |
| <p>Катушкин А.А., Романова Ю.М., Буданова П.М.</p> | |
| <p>КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТАВА, СТРУКТУРНЫХ И СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ БИС (ДИПИРРИНАТОВ) ЦИНКА(II) С N- И O-СОДЕРЖАЩИМИ АНАЛИТАМИ</p> | 160 |
| <p>Ксенофонтов А.А., Гусева Г.Б., Антина Е.В.</p> | |
| <p>МОДЕЛИРОВАНИЕ ИК- И КР- СПЕКТРОВ МОЛЕКУЛЫ ГЛИЦИНА И ИХ СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ ДАННЫМИ</p> | 162 |
| <p>Лысенко А.А., Волкова Т.Г.</p> | |
| <p>КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПРОИЗВОДНЫХ РЯДА ДИФЕНИЛОВЫХ ЭФИРОВ</p> | 163 |
| <p>Люткин А.С., Гузов Е.А. Волков Е.М., Цивов А.В.</p> | |
| <p>МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ РАСЧЕТА СИНХРОНИЗАЦИИ БИОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ГОЛОВНОГО МОЗГА</p> | 165 |
| <p>Миляева В.В.</p> | |
| <p>РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ АРИЛСУЛЬФОНИЛГАЛОГЕНИДОВ КАК ФУНКЦИЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА РЕАКЦИОННОГО ЦЕНТРА</p> | 166 |
| <p>Морарь А.И., Крылов Е.Н., Вирзум Л.В.</p> | |
| <p>МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ КАК ДЕСКРИПТОР РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ АРИЛГАЛОГЕНИДОВ В РЕАКЦИИ ГИДРОДЕГАЛОГЕНИРОВАНИЯ</p> | 168 |
| <p>Морарь А.И., Крылов Е.Н., Вирзум Л.В.</p> | |
| <p>КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АДСОРБЦИИ ПРОИЗВОДНЫХ 1,2,3,4-ТЕТРАГИДРОХИНОЛИНА НА УГЛЕРОДНОЙ ПОВЕРХНОСТИ</p> | 169 |
| <p>Некрасова Н.А.</p> | |
| <p>МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ АЦЕТИЛСАЛИЦИЛОВАЯ КИСЛОТА — ПОЛЯРНЫЙ СОРАСТВОРИТЕЛЬ В СРЕДЕ СВЕРХКРИТИЧЕСКОГО ФЛЮИДА</p> | 171 |
| <p>Одинцова Е.Г., Чернышева Т.А.</p> | |

| | |
|---|-----|
| ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ ЭФФЕКТИВНОСТИ ИЗЛУЧЕНИЯ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПЛЕКСОВ ЕВРОПИЯ(III) | |
| Романова К.А., Галяметдинов Ю.Г. | 172 |
| КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕОМЕТРИИ И ЧАСТОТ КОЛЕБАНИЙ МОЛЕКУЛЫ ФОСГЕНА | |
| Кожина А.Д., Золотарева Н.В., Садомцева О.С., Хандусенко Е.А., Бирюкова М.М. | 174 |
| МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ | |
| Сивкова В.А. | 175 |
| ОПРЕДЕЛЕНИЕ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ АЛИФАТИЧЕСКИМИ ГРУППАМИ МОЛЕКУЛ В ПЕНТИЛОВОМ ЭФИРЕ П-(N-A-D- ГЛЮКОПИРАНОЗИД) АМИНОБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ | |
| Харина А.А., Волкова Т.Г. | 177 |
| АНАЛИЗ ЛИПОФИЛЬНОСТИ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОДНОЙ РАСТВОРИМОСТИ АНЕСТЕЗИНА И ЕГО ГЛИКОЗИЛИРОВАННОГО АНАЛОГА | |
| Царькова А.И., Волкова Т.Г., Таланова И.О. | 178 |
| РАЗВИТИЕ МЕТОДА МАКОИНТРЕМЕНТИРОВАНИЯ В ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ | |
| Чернова Е.М., Русакова Н.П., Орлов Ю.Д., Туровцев В.В. | 180 |
| МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ 5-R-3-АРИЛ-2,1-БЕНЗИЗОКСАЗОЛОВ | |
| Шайдакова А.А., Пирогова С.А., Калина С.А., Сажина А.А., Котов А.Д. | 181 |
| АНАЛИЗ АНТИОКИСЛИТЕЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ 5-ГИДРОКСИ-6-МЕТИЛУРАЦИЛА ПРИ ОКИСЛЕНИИ ИЗОПРОПИЛОВОГО СПИРТА | |
| Сафарова И.В., Шарипова Г.М., Булякова Р. Сахибгареева М.В. | 183 |

СЕКЦИЯ: МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЭКОНОМИКЕ И СОЦИОЛОГИИ

| | |
|--|-----|
| К ВОПРОСУ О ПРИНЯТИИ РЕШЕНИЙ В ЭКОНОМИКЕ | |
| Лапаев Д.Н. | 186 |
| РАСКРЫТИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ПРИ СРАВНЕНИИ ЭФФЕКТИВНЫХ ЭКОНОМИЧЕСКИХ СИСТЕМ | |
| Лапаева О.Н. | 187 |

| | |
|---|-----|
| «ЦИФРОВОЕ ПРЕДПРИЯТИЕ» - КОНЦЕПЦИЯ КОМПЛЕКСНОЙ АВТОМАТИЗАЦИИ СОВРЕМЕННОГО ПРЕДПРИЯТИЯ ЯДЕРНО-ОРУЖЕЙНОГО КОМПЛЕКСА | |
| Соловьев Т.Г., Федоренко Г.А. | 189 |
| ЭКОНОМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ СОВРЕМЕННЫХ МЕЖДУНАРОДНЫХ ОТНОШЕНИЙ | |
| Мисатюк Е.В. | 190 |
| МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ИНВАРИАНТНОГО ОБЪЕКТА УПРАВЛЕНИЯ | |
| Синицын М.А. | 191 |
| РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ ТРАНСПОРТНОГО ПОТОКА ПРИМЕНЕНИЕМ АЛГОРИТМА МУРАВЬИНОЙ КОЛОНИИ | |
| Есаков Ю.Ю. | 192 |
| ПОНЯТИЕ ПРОЦЕССНОГО ПОДХОДА К УПРАВЛЕНИЮ | |
| Романовская Е.В., Севрюкова А.А. | 194 |
| КАТЕГОРИАЛЬНАЯ МАТРИЦА ПОНЯТИЙ, СВЯЗАННЫХ С УСТОЙЧИВЫМ РАЗВИТИЕМ ПРОМЫШЛЕННЫХ ПРЕДПРИЯТИЙ | |
| Козлова Е.П. | 195 |
| МОДЕЛИРОВАНИЕ БИЗНЕС-ПРОЦЕССОВ ПРОМЫШЛЕННОГО ПРЕДПРИЯТИЯ | |
| Гарин А.П. | 197 |
| ФОРМИРОВАНИЕ МОДЕЛИ СЛОЖНОГО ПРОДУКТА В ПРОМЫШЛЕННОСТИ | |
| Гарина Е.П. | 198 |
| РАЗВИТИЕ ПРОИЗВОДСТВЕННЫХ СИСТЕМ В РОССИИ | |
| Семахин Е.А., Андряшина Н.С. | 200 |
| РОЛЬ ЛОГИСТИКИ В ДЕЯТЕЛЬНОСТИ МЕДИЦИНСКОЙ ТОРГОВОЙ КОМПАНИИ | |
| Самарова Н.А., Петухова А.В. | 201 |
| ОСОБЕННОСТИ ВЛИЯНИЯ КОНКУРЕНТНОЙ СРЕДЫ НА СТРАТЕГИЮ ПОВЕДЕНИЯ ПРЕДПРИЯТИЯ | |
| Егорова А.О. | 203 |
| СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ МАТЕРИАЛЬНО – ТЕХНИЧЕСКИМ СНАБЖЕНИЕМ КАК ФАКТОР ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ПРЕДПРИЯТИЯ | |
| Короткова А.М., Беляева Г.Д. | 204 |
| ПЕРСПЕКТИВЫ СОЗДАНИЯ ПРОМЫШЛЕННЫХ ПАРКОВ - ПЛОЩАДОК ПРОМЫШЛЕННОГО РОСТА | |
| Кузнецов В.П., Кузнецова С.Н. | 205 |

| | |
|---|-----|
| АНАЛИЗ СОЦИАЛЬНО-ЭКОНОМИЧЕСКОГО РАЗВИТИЯ РЕГИОНА НА ПРИМЕРЕ НИЖЕГОРОДСКОЙ ОБЛАСТИ | |
| Фатьякина М.М., Беляева Г.Д. | 207 |
| ФРАНЧАЙЗИНГ КАК ФОРМА ПРЕДПРИНИМАТЕЛЬСТВА В Г. САРОВ И НИЖЕГОРОДСКОЙ ОБЛАСТИ | |
| Куликов Р.В. | 209 |
| РАЗВИТИЕ МАЛОГО ПРЕДПРИНИМАТЕЛЬСТВА В РЕСПУБЛИКЕ МОРДОВИЯ | |
| Ермакова М.Б., Самарова Н.А. | 210 |
| ФИЛОСОФСКИЙ ВЗГЛЯД НА ЧЕЛОВЕЧЕСКОЕ В ЧЕЛОВЕКЕ В УСЛОВИЯХ НАРАСТАНИЯ ТЕХНОСРЕДЫ | |
| Немова О.А. | 211 |
| ВОЗДЕЙСТВИЕ КОРРУПЦИИ НА РАЗВИТИЕ БИЗНЕСА | |
| Стрельникова А.О. | 214 |
| ДЕНЕЖНО-КРЕДИТНАЯ ПОЛИТИКА БАНКА РОССИИ | |
| Беляева Г.Д., Федяева А.А. | 216 |
| СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ БАНКОВСКИМИ РИСКАМИ В САРОВСКОМ ОСБ | |
| Чибирева О.О., Самарова Н.А. | 217 |
| ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ СОЗДАНИЯ И ЗАВИТИЯ ЕВРАЗИЙСКОГО ЭКОНОМИЧЕСКОГО СОЮЗА (ЕАЭС) | |
| Лунин О.А., Кочетова О.А. | 219 |
| СОСТОЯНИЕ И РАЗВИТИЕ ЧЕЛОВЕЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА В СТРАНАХ ЕВРАЗИЙСКОГО ЭКОНОМИЧЕСКОГО СОЮЗА | |
| Шаболдина И.С., Мисатюк Е.В. | 220 |
| МЕСТО РОССИИ В МЕЖДУНАРОДНОЙ ТОРГОВЛЕ: СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ | |
| Глебова А.А., Мисатюк Е.В. | 221 |
| ВОЗДЕЙСТВИЕ ПРОДОВОЛЬСТВЕННЫХ САНКЦИЙ И ЭМБРАГО НА РОССИЙСКИЙ РЫНОК | |
| Позднякова Э.Ф., Самарова Н.А. | 221 |
| ДЕОФШОРИЗАЦИЯ ЭКОНОМИКИ: МИРОВОЙ ОПЫТ И РОССИЙСКАЯ СПЕЦИФИКА | |
| Куликов Р.В. | 223 |

ПЕРСПЕКТИВЫ УЧАСТИЯ НИЖЕГОРОДСКОЙ ОБЛАСТИ В РЕАЛИЗАЦИИ
ПРОГРАММЫ ИМПОРТОЗАМЕЩЕНИЯ

Подуруева М. С., Свинкин И. В. 225

СОВРЕМЕННЫЕ ПОДХОДЫ К ИНФОРМАЦИОННОМУ ОБЕСПЕЧЕНИЮ
ТРУДОУСТРОЙСТВА И ОБЗОРА КАРЬЕРЫ ВЫПУСКНИКОВ ВУЗОВ
(НА ПРИМЕР ИС «ИСТОК»)

Соловьев Т.Г., Федоренко Г.А., Юрина Я.А., Танаев М.С. 226

МАРКЕТИНГОВОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АБИТУРИЕНТОВ САРФТИ НИЯУ
МИФИ: ФАКТОРЫ ВЫБОРА ВУЗА, ОЖИДАНИЯ ОТ ОБУЧЕНИЯ, УРОВЕНЬ
ИНФОРМИРОВАННОСТИ

Макарец А.Б., Кудрявцев И.В. 227

ДЛЯ ЗАМЕТОК

ДЛЯ ЗАМЕТОК



СПОНСОРЫ

X Всероссийская молодежная научно-инновационная школа «Математика и математическое моделирование»