

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

Сессия ИВТН-2010



COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENTIFIC RESEARCH

IVTN-2010 Session

Сборник материалов
The Proceedings



Москва – 2010
Moscow - 2010

ИВТН.ru – электронные конференции

Информационно-Вычислительные Технологии в Науке

Главный организатор - НВК "ВИСТ"

При поддержке Zenon N.S.P.

IVTN.ru – web conferences

Computer Applications in Science

Provided by NVK "VIST"

Supported by Zenon N.S.P.

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

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

Организационный комитет выражает благодарность всем участникам сессии ИВТН-2010

The Organizational committee thanks all of the participants of the IVTN-2010 session

Сборник материалов сессии ИВТН-2010 содержит аннотации докладов, представленных на электронную конференцию «Информационно-вычислительные технологии в решении фундаментальных и прикладных научных задач» в 2010 году. Среди докладов работы передовых отечественных и зарубежных научных коллективов. Полные тексты докладов доступны на сайте ИВТН.ru (<http://www.ivtn.ru>).

The Proceeding of IVTN-2010 session contains annotations of the reports presented on web-conference « Computer Applications in Science research» in 2010. Among reports are the works of the advanced domestic and foreign scientific groups. Full texts of reports are accessible on site IVTN.ru (<http://www.ivtn.ru>).

© НВК «ВИСТ»

© NVK «VIST»

Уважаемые коллеги!

Представляем вашему вниманию очередной сборник материалов электронной конференции ИВТН-2010.

В нашем ежегодном издании опубликованы краткие аннотации заявленных на конференцию ИВТН-2010 докладов на двух языках, с указанием постоянного адреса полной версии статьи на сайте ИВТН.ru в Интернете.

С этого года печатному сборнику материалов, а также Интернет-изданию ИВТН.ru, присвоен международный стандартный серийный номер ISSN — (International Standard Serial Number), идентифицирующий все опубликованные на ИВТН.ru материалы, как на русском, так и на английском языках.

Организационный комитет ИВТН.ru благодарит вас за участие в работе электронной конференции ИВТН-2010. Мы всегда рады вашим предложениям, замечаниям и любым комментариям относительно работы ИВТН.ru.

До встречи на конференции ИВТН-2011!

С уважением,

Организационный комитет ИВТН.ru

E-mail: org@ivtn.ru

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

Тел.: +7 495 995 8017

Dear colleagues!

We represent to yours attention the Proceedings of IVTN-2010 web-conference.

In our annual edition short summaries of the reports declared on conference IVTN -2010 in two languages with instructions of the permanent address of the full report version at web-site IVTN.ru in Internet are published.

From this year to the printing Proceedings and also Internet edition IVTN.ru the international standard serial number ISSN — (International Standard Serial Number) identifying all published on IVTN.ru materials both in Russian and in English languages is assigned.

Organizing committee IVTN.ru thanks you for participation in work of electronic conference IVTN-2010. We will be glad to hear your suggestions, criticism and any comments concerning IVTN.ru work.

To a meeting at conference IVTN-2011!

Sincerely yours,

IVTN.ru Organizational Committee

E-mail: org@ivtn.ru

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

Tel.: +7 495 995 8017

**ИВТН-2010
IVTN-2010**



**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ
В НАУКЕ**

COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENCE

**Организаторы
Providers**

Конференции ИВТН-2010 организованы по инициативе НВК "ВИСТ", при поддержке научных центров и институтов Российской Академии Наук и Российской Академии Медицинских Наук.

The IVTN-2010 Conferences were initially organized by NVK "VIST" and supported by Scientific Centers and Institutes of Russian Academy of Sciences and Russian Academy of Medical Sciences.

<http://www.ivtn.ru>

СЕКЦИЯ 1

ОБЩИЕ ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ И КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В НАУКЕ

Section 1

GENERAL PROBLEMS AND PROSPECTS OF COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENCE

ОБЕСПЕЧЕНИЕ ЭКОЛОГИЧЕСКОЙ БЕЗОПАСНОСТИ ПРИ ФУНКЦИОНИРОВАНИИ ПОТЕНЦИАЛЬНО ОПАСНЫХ ОБЪЕКТОВ

Адаменко Н.И.

Харьковская государственная академия физической культуры

MAINTENANCE OF ECOLOGICAL SAFETY AT FUNCTIONING OF POTENTIALLY DANGEROUS OBJECTS

Adamenko N.I.

Kharkov state academy of physical culture

В статье рассмотрена возможность решения проблемы обеспечения экологической безопасности функционирования потенциально опасных объектов путем разработки методологии технического и организационного обеспечения экологической безопасности на отмеченных объектах при их повседневной деятельности и в аварийном состоянии
<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1256>

In article possibility of a solution of a problem of maintenance of ecological safety of functioning of potentially dangerous objects by working out of methodology of technical and organizational maintenance of ecological safety on noted objects is considered at their daily activity and in an emergency condition
http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1256

ПОЛИМОРФНЫЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ВРЕДНОСНОГО КОДА И ВОЗМОЖНЫЕ ПУТИ ИХ ОБНАРУЖЕНИЯ

Дроботун Е.Б.

Военная академия воздушно-космической обороны

POLYMORPHIC TRANSFORMATIONS OF A HARMFUL CODE AND POSSIBLE WAYS OF THEIR DETECTION

Drobotun E.B.

Military academy of aerospace defence

В работе рассмотрены основные принципы генерации полиморфного кода вредоносного программного обеспечения, препятствующие его обнаружению антивирусными программами, а также рассмотрены возможные методы обнаружения и анализа таких преобразований. В дополнение к существующим методам предлагается метод анализа полиморфных преобразований, основанный на анализе частоты появления отдельных команд и их последовательностей
<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1228>

In work main principles of generation of a polymorphic code of the harmful software, interfering its detection by anti-virus programs are considered, and also possible methods of detection and the analysis of such transformations are considered. In addition to existing methods the method of the analysis of the polymorphic transformations, based on the analysis of frequency of occurrence of separate commands and their sequences is offered
http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1228

СЕКЦИЯ 2**КОМПЬЮТЕРНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ, ИХ ОРГАНИЗАЦИЯ (СЕТИ И ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ
ВЫЧИСЛЕНИЯ)****SECTION 2****COMPUTING AND COMPUTING MANAGEMENT (NETWORKS AND PARALLEL
COMPUTATION)****ОЦЕНКА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЗАТРАТ
КВАНТОВОХИМИЧЕСКИХ ПРИБЛИЖЕНИЙ,
РЕАЛИЗОВАННЫХ В ПАКЕТЕ ПРОГРАММ
«ПРИРОДА»****Панкратьев Е.Ю.**

Институт нефтехимии и катализа РАН

Собраны и проанализированы служебные данные квантовохимических расчётов, проведённых в программе ПРИРОДА 06, и путём аппроксимации получены оценочные выражения зависимостей вычислительных затрат от размера базиса волновой функции молекулярной системы для различных квантовохимических приближений. Полученные зависимости могут быть использованы для прогнозирования требований к оперативной и дисковой памяти вновь проводимых расчётов с целью экономии вычислительных ресурсов

<http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper.php?p=1239>**ESTIMATION OF COMPUTING EXPENSES OF
QUANTUM-CHEMICAL APPROACH,
REALIZED IN THE SOFTWARE PACKAGE «NATURE»****Pankratev E.Yu.**

Institute of Petrochemistry and Catalysis of Russian Academy of Sciences

Office data of quantum-chemical calculations spent in the program the NATURE 06 is collected and analysed, and by approximation estimated expressions of dependences of computing expenses from the size of basis of wave function of molecular system for various quantum-chemical approximations are received. The received dependences can be used for forecasting of requirements to operative and disk memory of again spent calculations for the purpose of economy of computing resources

http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper_e.php?p=1239**ВЫЧИСЛЕНИЕ КОЛИЧЕСТВА ВСЕХ
ПИФАГОРОВЫХ ТРОЕК
Спиридонов Ф.Ф., Смирнов В.В.**

Московский гуманитарно-экономический институт

На основе анализа известных параметрических зависимостей получены зависимости общего числа пифагоровых троек от значений максимального и минимального числа в тройке. Найдены соответствующие аппроксимации. Производится сравнение с полученным ранее аналогичным результатом. Делаются соответствующие выводы и предположения

<http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper.php?p=1221>**THE CALCULATION OF THE QUANTITY OF ALL
PYTHAGOREAN THREE-SET NUMBERS
Spiridonov F.F., Smirnov V.V.**

Moscow humanitarno-economic institute

Being based on the analysis of certain parametric relations, dependencies of general number of Pythagorean three-set numbers are acquired from the maximum and minimum number values in a three. The adequate approximations have been found. The results are compared with the previously obtained similar ones and corresponding conclusions and assumptions have been drawn

http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper_e.php?p=1221**НЕИДЕАЛЬНЫЕ ГАЗЫ В ПОЛЕ СИЛ ТЯЖЕСТИ
Крылов А.Ф., Крылова В.А.**

Саратовский государственный университет

Предложено аналитическое выражение расчёта $n(z)$ распределения частиц по высоте внутри конечного объёма газовой системы, находящейся в состоянии термодинамического равновесия для неидеальных газов, позволяющее проводить вычисления в каждом конкретном случае с любой заданной точностью

<http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper.php?p=1218>**NONIDEAL GASES IN THE FIELD OF GRAVITY
Krylov A.F., Krylova V.A.**

Saratov State University

Analytical expression of calculation $n(z)$ of distribution of particles on height in final volume of the gas system, which is in a condition of thermodynamic balance for nonideal gases is offered, allowing to spend calculations in each specific case with any set accuracy

http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper_e.php?p=1218

**РАСЧЕТ ТЕРМОХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК
КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИХ ПРОИЗВОДНЫХ
ПИРИДИНА****Зауэр Е.А.**Волгоградский государственный технический
университет

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

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1225>**CALCULATION OF THERMOCHEMICAL
CHARACTERISTICS OF THE OXYGEN CONTAINING
PYRIDINE DERIVATIVES****Zauer E.A.**

Volgograd State Technical University

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

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1225**СТРУКТУРИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВА
ПАРАМЕТРОВ ДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ПО
ЭНТРОПИЙНОМУ КРИТЕРИЮ ПРИ
ИССЛЕДОВАНИИ МНОГОКРИТЕРИАЛЬНЫХ
ЗАДАЧ ПРОЕКТИРОВАНИЯ****Статников И.Н., Фирсов Г.И.**

Институт машиноведения им. А.А.Благонравова РАН

Рассмотрена попытка предварительного оценивания энтропийных свойств системы «пространство варьируемых параметров – поверхность отклика» на основе методики ПЛП-поиска с целью найти ярко выделяющиеся подобласти максимума или минимума энтропии. На тестовых примерах показано, что характер изменения энтропийных оценок в зависимости от значений параметров был в определенной мере аналогичен характеру изменения самих выборочных средних значений функций

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1238>**STRUCTURING OF PARAMETER SPACES OF
DYNAMIC SYSTEM ON THE ENTROPY CRITERION AT
A STUDY OF THE MULTICRITERIAL TASKS OF
THE DESIGN****Statnikov I.N., Firsov G.I.**A.A. Blagonravov Mechanical Engineering Research
Institute of Russian Academy of Sciences

Is examined an attempt at the preliminary evaluation of the entropy properties of system the "space of the varied parameters - the surface of response" on the basis of the procedure of PLP- search for the purpose to find the vividly separating subregions of maximum or minimum of entropy. It is shown based on test examples that the nature of a change of the entropy estimations in the dependence on the values of the parameters was in a certain degree analogous to the nature of a change in themselves sample means of the functions.

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1238**О ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ DFT-РАСЧЕТОВ
ЧАСТОТ ПО GAUSSIAN-09****Аникин Н.А., Кузьминский М.Б., Мендкович А.С.**

Институт органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН

Проведен сравнительный анализ производительности Gaussian-09 и Gaussian-03 при проведении расчетов частот колебаний больших (~100 атомов, ~1000 АО) молекул методом DFT. Тестовые расчеты проведены на серверах с четырехъядерными микропроцессорами Intel Xeon/Nehalem и AMD Opteron Barcelona

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1262>**ABOUT PERFORMANCE OF DFT CALCULATIONS OF
FREQUENCIES BY GAUSSIAN-09****Anikin N.A., Kuzminskiy M.B., Mendkovich A.S.**N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian
Academy of Sciences

Comparative analysis of Gaussian-09 vs Gaussian-03 performance was performed for DFT-calculations of vibration frequencies for large (~100 atoms, ~1000 AO) molecules. Testing calculations were performed on servers with quad-core microprocessors - Intel Xeon/Nehalem and AMD Opteron/Barcelona

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1262

СЕКЦИЯ 3

МОДЕЛИРОВАНИЕ, ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

SECTION 3

COMPUTER SIMULATION

ВЛИЯНИЕ КОЛИЧЕСТВА ДВОЙНЫХ СВЯЗЕЙ В ЦЕПЯХ МОЛЕКУЛ ФОСФОЛИПИДОВ НА СВОЙСТВА ГИДРАТИРОВАННЫХ ЛИПИДНЫХ БИСЛОЕВ: КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
Рабинович А.Л., Любарцев А.П.

Институт биологии Карельского научного центра РАН

Проведены молекулярно-динамические эксперименты с 16 гидратированными бислоями фосфатидилхолинов в жидкокристаллическом состоянии, которые отличались между собой количеством двойных связей в цепи sn-2 фосфолипидов. Последние содержали насыщенную цепь в положении sn-1 и ненасыщенную – в положении sn-2. Кроме того, различались также и длины обеих цепей

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1246>

EFFECT OF THE NUMBER OF DOUBLE BONDS OF PHOSPHOLIPIDS ON PROPERTIES OF HYDRATED LIPID BILAYERS: A COMPUTER SIMULATION STUDY

Rabinovich A.L., Lyubartsev A.P.

Karelian Research Centre of Russian Academy of Sciences

Molecular dynamics simulations of 16 hydrated liquid crystalline phase phosphatidylcholine bilayers have been carried out, with various number of double bonds in the sn-2 chain of phospholipids having sn-1 saturated and sn-2 unsaturated chains. The lengths of the both chains were also varied

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1246

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АПТАМЕРА С ЭКЗОСАЙТАМИ ТРОМБИНА
Щербинин Д.С.

Научно-исследовательский институт биомедицинской химии имени В.Н.Ореховича РАН

В работе методами молекулярной динамики проведено исследование взаимодействия аптамеров с двумя экзосайтами тромбина. Было показано, что связывание аптамера на определенный экзосайт зависит от его пространственной структуры. Для аптамеров из разных pdb-структур комплексов было выбрано лучшее положение

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1232>

ANALYSIS OF INTERACTIONS OF APTAMER WITH EXOSITES OF THROMBIN
Scherbinin D.S.

Institute of Biomedical Chemistry of Russian Academy of Medical Sciences

Interactions of 15-members aptamers with two thrombin's exosites have been investigated using molecular dynamics methods. It was found that aptamer - exosite binding specificity depends on the oligonucleotide's spatial structure. The best binding sites were selected for the aptamers from the different pdb-structures

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1232

СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ПРОТЕОМНОГО И ТРАНСКРИПТОМНОГО АНАЛИЗА И ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОРРЕЛЯЦИИ МЕЖДУ НИМИ

Рыбина А.В., Андреевский Т., Згода В.Г., Курбатов Л.К.

УРАМН НИИ биомедицинской химии им. В.Н.Ореховича РАН

В данной работе были сравнены результаты протеомного и транскриптомного анализа для клеточной линии HepG2, и была выявлена некоторая корреляция, между ними, однако, не было найдено прямой зависимости для каждой отдельной пары ген-белок

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1235>

COMPARISON OF THE RESULTS OF THE PROTEOMIC AND TRANSCRIPTOMIC ANALYSIS AND FINDING A CORRELATION BETWEEN THEM

Rybina A.V., Andreevskiy T., Zgoda V.G., Kurbatov L.K.

V.N.Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of Russian Academy of Medical Sciences

In this work the results of the the proteomic and transcriptomic analysis of the HepG2 cell line were compared, and there was found a correlation between them. Though, there were no straight dependence between each gene-protein pair

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1235

ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ И РЕЗОНАНСЫ**Позднеев С.А.**

Физический институт им.П.Н.Лебедева РАН

В настоящее время установлено, что природа химической связи определяется кулоновским взаимодействием между электронами, электронами и ядрами и никаких особых сил химического взаимодействия не существует. Это не означает, что теория химической связи разработана окончательно. Существует ряд нерешенных вопросов. Если за образование молекул из атомов ответственны дальнедействующие кулоновские силы, то почему химические взаимодействия проявляются главным образом на очень коротких расстояниях и каким образом возникает свойство насыщенности химических сил? Следующие вопросы возникают при исследовании химической связи молекулярных структур, таких как биополимеры, белки и т.д.

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1207>**CHEMICAL BOND AND RESONANCES****Pozdneev S.A.**

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

Now it is established that the chemical bond nature is defined by Kulon's interaction between electrons, electrons and kernels and no special forces of chemical interaction exist. It doesn't mean that the chemical bond theory is developed definitively. There is a number of unresolved questions. If for formation of molecules from atoms are responsible Kulon's forces, operation on a long distance, why chemical interactions are shown mainly on very short distances and how there is a property of saturability of chemical forces? Following questions arise at research of a chemical bond of molecular structures, such as biopolymers, fibers etc

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1207**МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ N-ДОМЕНА АНГИОТЕНЗИН-ПРЕВРАЩАЮЩЕГО ФЕРМЕНТА С ПЕПТИДОМ АЛЬЦГЕЙМЕРА КРЫСЫ И ЧЕЛОВЕКА****Жаркова М.С., Веселовский А.В.**

УРАМН НИИ биомедицинской химии им. В.Н.Ореховича РАМН

Недавно было показано, что N-домен ангиотензин-превращающего фермента (АПФ) способен расщеплять N-домен пептида Альцгеймера (Аβ), причем основное место гидролиза отличается для человеческого и крысиного Аβ. В работе построены модели комплексов N-домена АПФ человека с тетрапептидами, включающими в себя сайты расщепления Аβ человека и крысы. Полученные модели комплексов позволяют объяснить различия в местах расщепления человеческого и крысиного амилоидного пептида

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1237>**MODELLING OF COMPLEXES OF N-DOMAIN OF ANGIOTENSIN-CONVERTING ENZYME WITH RAT AND HUMAN ALZHEIMER'S PEPTIDE****Zharkova M.S., Veselovskiy A.V.**

V.N.Orehovich Institute of Biomedical Chemistry of Russian Academy of Medical Sciences

Recently it was shown that N-domain of angiotensin-converting enzyme (ACE) is able to hydrolyze the N-domain of Alzheimer's peptide, and the main position of its hydrolysis is differ for rat and human peptide. The complexes of ACE with tetrapeptides accommodated these sites of hydrolysis of the rat and human Aβ were designed. These complexes are able to explain the preference of sites of hydrolysis in the rat and human Aβ

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1237**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АТОМОВ АЛЮМИНИЯ С ГРАФЕНОМ****Свечников А.Б.**

Российский научный центр "Курчатовский Институт"

Результаты квантово-химических расчетов дают основание считать, что графен не является химически инертным соединением по отношению к адсорбции атомов металлов. В работе проведено моделирование всех стадий формирования адсорбционных слоев алюминия на гладких и мятых однослойных графенах. Предложен механизм формирования двумерных алюминиевых структур

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1249>**ATOMIC AL INTERACTION WITH THE GRAPHENE****Svechnikov A.B.**

The Russian Research Centre Kurchatov Institute

The results of quantum-chemical calculations show that graphene is not chemically inert nanostructure in relation to the atomic adsorption of metals. All stages of aluminium adsorption layers formation were studied by modeling the smooth and crushed single-layered graphene. The formation mechanism of two-dimensional Al structures was offered

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1249

3D QSAR МОДЕЛИРОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА НЕПРЕРЫВНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПОЛЕЙ

Жохова Н.И., Баскин И. И., Зефиоров А.Н., Палюлин В. А.

Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова

Предложен новый метод построения 3D QSAR моделей, основанный на анализе непрерывных молекулярных полей вместо дискретного массива их потенциалов, рассчитываемых на узлах трехмерной решетки конечного размера, что позволяет преодолеть ряд ограничений стандартных методов CoMFA и CoMSIA. Основным элементом подхода является процедура расчета статистических ядер, которые используются при построении моделей на основе метода регрессии на опорных векторах. Возможности метода показаны на примере моделирования ингибирующей активности производных 3-амидинофенилаланина в отношении ферментов тромбина, трипсина и фактора Ха

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1224>

3D QSAR MODELING OF BIOLOGICAL ACTIVITY BY USING METHOD OF CONTINUOUS MOLECULAR FIELDS

Zhokhova N.I., Baskin I.I., Zefirov A.N., Palyulin V.A.

M.V.Lomonosov Moscow State University

Novel method for constructing of 3D QSAR models, that is based on direct analysis of continuous molecular fields instead of their potentials, calculated at points of three-dimensional grid of finite size, that permits to overpass a number of restrictions of standard methods CoMFA and CoMSIA, is suggested. The main element of new approach is the procedure of calculation of kernels, used in constructing of 3D QSAR models in the framework of statistical method of support vectors regression. The possibilities of the method is shown using by modeling of ability of 3-amidinophenylalanines to inhibit enzymes thrombin, trypsin and Factor Xa

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1224

ОБРАЗОВАНИЕ НАНОПОЛОС ИЗ ГРАФЕНА

Свечников А.Б.

Российский научный центр "Курчатовский Институт"

Образование углеродных нанополос шириной от 0,3 нм до 1,5 нм моделировалось в квантово-химических расчетах методом молекулярной динамики. Фрагменты графена с дефектами атомных связей на краях распадаются на нанополосы при температурах выше 1000K за время порядка нескольких микросекунд. При температурах ниже 500K, вследствие взаимного притяжения нанополос, наблюдается возникновение упорядоченных слоистых структур типа сэндвичей

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1248>

NANOSTRIPES FORMATION FROM GRAPHENE

Svechnikov A.B.

The Russian Research Centre Kurchatov Institute

The formation process of 0.3 nm to 1.5 nm width carbon nanostripes has been studied with the quantum chemical molecular dynamics modeling. It was shown that the graphene fragments with the defects had formed various carbon nanostripes at temperatures above 1000K during some microseconds. The ordered layered sandwich-like structures with the attractive interaction between nanostripes were obtained at temperatures below 500K

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1248

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛОТНОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ НАНОРАЗМЕРНЫХ ОБЛАСТЕЙ РАЗУПОРЯДОЧЕНИЯ В КРЕМНИИ

Богатов Н.М., Коваленко М.С.

Кубанский государственный университет

Создана компьютерной программа моделирования плотности электронных состояний наноразмерных областей разупорядочения в кремнии. Рассчитаны численно с помощью этой программы зависимости распределения плотности электронных состояний в запрещенной зоне кремния от энергии для различных значений параметров областей разупорядочения и температуры. Показано, что в запрещенной зоне преобладают энергетические уровни, созданные вакансиями, хаотически распределенными в пределах области разупорядочения

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1233>

THE MODEL OF THE ELECTRONIC STATES DENSITY OF THE NANOSCALE DISORDERED AREAS IN SILICON

Bogatov N.M., Kovalenko M.S.

Kuban State University

The modelling program of the electronic states density of the nanoscale disordered areas in silicon is created. With the help of this program the dependences from energy of the density distribution of the electronic states in the forbidden zone of silicon are calculated numerically for the various values parameters of the nanoscale disordered areas and temperatures. It is shown, that in the forbidden zone the power levels created by chaotically distributed vacancies within nanoscale disordered area are prevailed

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1233

**ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ СЛОЖНОСТЬ ЗАДАЧИ
РАСПОЗНАВАНИЯ ИЗОМОРФНЫХ ГРАФОВ**

Дудов М.Х.

Карачаево-Черкесская государственная
технологическая академия

Предлагается метод распознавания изоморфных графов, вычислительная сложность которого не превышает $O(n^5)$

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1259>

**COMPUTING COMPLEXITY OF THE PROBLEM OF
RECOGNITION OF ISOMORPHIC GRAPHS**

Dudov M.H.

Karachaevo-Cherkessia State Technological Academy

The method of a discernment of the isomorphic graphs is offered, which computing complexity does not exceed $O(n^5)$

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1259

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛООВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ
АТОМА ГЕЛИЯ**

Островский Н.В.

Вятский государственный университет

На основе гипотезы о том, что тепловое излучение можно рассматривать как периодическое изменение напряжённости магнитного поля, связанное с вращением плоскостей орбит спаренных электронов, и оригинальной электронной модели атома гелия проведены расчёты пространственной и временной динамики процесса. Показано, что в рамках данной модели излучение должно иметь импульсный характер и удовлетворять уравнению $E=h\nu$

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1230>

**MODELING OF THE THERMAL RADIATION OF
HELIUM ATOM**

Ostrovskiy N.V.

Vyatka State University

On the basis of a hypothesis that thermal radiation can be considered as periodic change of the magnetic field intensity, connected with rotation of orbits planes of coupled electrons and original electronic model of helium atom the calculations of spatial and time dynamics of process was made. It is shown, that within the limits of the given model the radiation should have pulse character and satisfy to equation $E=h\nu$

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1230

**МОДЕЛЬ РАСЧЕТА ДОЗОВЫХ НАГРУЗОК ОТ
ИСТОЧНИКОВ ОБЛУЧЕНИЯ, НАХОДЯЩИХСЯ В
ПОЧВЕ**

Мамихин С.В., Бадави В.М.

Московский государственный университет
им.М.В.Ломоносова

Разработана модель расчета дозовых нагрузок от источников облучения, находящихся в почве или искусственном грунте и распределенных в ней в любых пространственных конфигурациях. Алгоритм применим для оценки доз от приповерхностных захоронений радиоактивных отходов или расчетов при проведении дезактивационных мероприятий. Для учета пространственно-временной динамики содержания радионуклидов может подключаться вспомогательный модуль, который воспроизводит поведение радионуклидов в почве

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1213>

**MODEL OF THE CALCULATION OF THE RADIATION
DOSES FROM RADIATION SOURCES ARE LOCATED
IN THE SOIL**

Mamihin S.V., Badavi V.M.

M.V.Lomonosov Moscow State University

Model of the calculation of the radiation doses from the radiation sources are located in the soil or any man-made soil and are distributed in it in any space configuration was developed. We apply the algorithm for estimation of the dose from the near-surface burial of radioactive waste or calculations in the time of decontamination actions. For calculating the space-time dynamics of the content of the radionuclides, may be connected an auxiliary model which reproduces the behavior of the radionuclides in soil

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1213

**АЛГОРИТМЫ ДЛЯ КОМПЬЮТЕРНОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ ЦЕПНЫХ МОЛЕКУЛ. МЕТОД
МОНТЕ-КАРЛО**

Журкин Д.В., Рабинович А.Л.

ГОУ ВПО "Петрозаводский государственный
университет"

Разработан достаточно универсальный алгоритм описания химического строения молекулы и компьютерная программа для имитации ее конформационного поведения методом Монте-Карло

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1220>

**MONTE CARLO ALGORITHMS FOR COMPUTER
SIMULATIONS OF CHAIN MOLECULES**

Zhurkin D.V., Rabinovich A.L.

Petrozavodsk state university

A fairly universal algorithm for describing the chemical structure of a molecule and the program for Monte Carlo computer simulations of conformational behavior of the molecule are created

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1220

**«ЦЕЛОЕ», «ЖИВОЕ», «СОЗНАЮЩЕЕ»: ПОПЫТКА
МОДЕЛИРОВАНИЯ**

Гришин Е.А.

Организация не указана / Независимый консультант

Предложен подход, позволяющий содержательно интерпретировать понятия целое, живое и сознающее с целью заложить основу для компьютерного моделирования подобных феноменов. В качестве исходного материала привлекаются понятия универсальная машина Тьюринга (УМТ), а также принцип самоприменимости УМТ как способ её самопрограммирования. В качестве инструмента используются принцип заимствования, предложенный В.А. Лефевром, а также предлагаемая автором модель рефлексивной машины и принцип самопланирования (взамен принципу самопрограммирования УМТ). Показано, что в результате может быть снята проблема алгоритмической невычислимости задачи самоуправления УМТ как помеха на пути алгоритмического варианта реализации функции машинного сознания

<http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper.php?p=1219>

**«WHOLE», «LIVING», «CONSCIOUS»: ATTEMPT TO
MODELING**

Grishin E.A.

Unknown company / Independent adviser

Is proposed the approach, which makes it possible to meaningfully interpret concepts .whole., .living. and .conscious. for the purpose to place basis for the computer simulation of similar phenomena. As the source material are drawn the concepts .universal machine of Turing (UMT)., the principle of self-using UMT as the method of its self-programming. As the tool they are used .the principle of adoption., proposed by V. A. Lefebre, and also the proposed by the author model of .reflexive machine. and the .principle of self-planning. (instead of to the principle of self-programming UMT). It is shown that as a result can be taken the problem of algorithmic non-calculate hood of the task of self-guidance UMT as interference in the path of the algorithmic version of the realization of the function .machine consciousness

http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper_e.php?p=1219

**РЕФЛЕКСИВНАЯ МАШИНА: МОДЕЛЬ
ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ «ОСОЗНАНИЯ»
ПЕРСОНАЖЕМ ВИРТУАЛЬНОГО МИРА**

Гришин Е.А.

Организация не указана / Независимый консультант

Предпринята попытка оригинального подхода к созданию модели «псевдоразумного» Персонажа виртуального мира с использованием таких идей, как рефлексивные модели В. Лефевра, «принцип дополнителности» Н. Бора и «теория метасистемного перехода» В.Турчина. Разработан соответствующий комплекс программ для исследовательских и дидактических целей

<http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper.php?p=1223>

**REFLECTIVE MACHINE: A MODEL OF PARALLEL
PROCESSES «CONSCIOUSNESS» AND BEHAVIOR
OF CHARACTER IN THE VIRTUAL WORLD**

Grishin E.A.

Unknown company / Independent adviser

An attempt was made to the original approach to model virtual «kvazireasonable» person using such ideas as a reflexive models of Lefebre V., the principle of subsidiarity of N. Bohr, and the theory of metasystem transitions of Turchin V. Developed a set of programmes for research and teaching purposes

http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper_e.php?p=1223

**L-СИСТЕМЫ, МОДЕЛИРУЮЩИЕ ВЕГЕТАТИВНОЕ
РАЗМНОЖЕНИЕ И СТАДИИ
ОНТОГЕНЕТИЧЕСКОГО РАЗВИТИЯ РАСТЕНИЙ**

**Калмыков В.Л., Хасанова Л.М., Шпак А.Б.,
Гомов Е.Е.**

Институт биофизики клетки РАН

В настоящей работе мы представляем три L-системы, которые моделируют вегетативное размножение растений и позволяют одновременно представить несколько потомков различного возраста. Данные L-системы были получены в результате комбинирования «геномов» (логических формул итерационной генерации) различных L-систем – прототипов. Развитие данного модельного подхода в перспективе позволит решить наиболее трудную задачу математического моделирования – задачу биологического морфогенеза

<http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper.php?p=1255>

**MODELLING VEGETATIVE REPRODUCTION AND
STAGES OF ONTOGENY OF PLANTS BY THE L-
SYSTEMS**

**Kalmikov V.L., Khasanova L.M., Shpak A.B.,
Gomov E.E.**

Institute of Cell Biophysics of Russian Academy of Sciences

Here we show three L-systems which model vegetative reproduction of plants and allow presenting descendants series of various ages simultaneously. These L-systems have been received in a result of a combination of "genomes" (logic formulas of iterative generation) of various L-systems-prototypes. Elaboration of the given modelling approach in the long term will allow to solve the most difficult problem of mathematical modelling - the problem of biological morphogenesis

http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper_e.php?p=1255

**ДИАГНОСТИКА ПОВРЕЖДЕНИЙ ВАЛА С
МАХОВИКОМ
Хакимов А.Г.**

Институт механики уфимского научного центра РАН

**DAMAGE DIAGNOSIS OF A SHAFT WITH A
FLYWHEEL
Khakimov A.G.**

Institute of Mechanics of the Ufa Branch of Russian
Academy of Sciences

По трем собственным частотам крутильных колебаний определяются место и размеры поперечного надреза вала с маховиком

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1229>

The incision coordinate, its depth and length are defined by three natural frequencies torsion vibrations of shaft with flywheel

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1229

СЕКЦИЯ 4

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ В НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

SECTION 4

VISUALIZATION IN SCIENTIFIC RESEARCHES

**СТРУКТУРА ЦВИТТЕР-ИОННОЙ ФОРМЫ АЛАНИНА
В ВОДНОМ РАСТВОРЕ**

Тен Г.Н., Кадров Д.М., Баранов В.И.
Саратовский государственный университет

Известно, что аминокислоты в жидком и твёрдом состояниях находятся в цвиттер-ионной форме, а в изолированном состоянии имеют нейтральную форму. Цель данной работы – рассчитать структуру цвиттер-ионной формы аланина в водном растворе и рассмотреть влияние воды на структуру аланина методом эффективного учёта межмолекулярных взаимодействий (модель SCRF) и явного учёта влияния водородных связей (комплексы аланина с молекулами воды (1:3 и 1:5)). Расчёты проводились квантово-химическим методом B3LYP/6-311++G(d,p)
<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1217>

**STRUCTURE OF THE TSVITTER-IONIC FORM OF
ALANIN IN A WATER SOLUTION**

Ten G.N., Kadrov D.M., Baranov V.I.
Saratov State University

It is known that amino acids in liquid and firm conditions are in the tsvitter-ionic form, and in the isolated condition have the neutral form. The purpose of the given work is to calculate structure of the tsvitter-ionic form of the alanin in a water solution and to consider the influence of water on the structure of alanin a method of the effective account of intermolecular interactions (model SCRF) and the obvious account of influence of hydrogen communications (complexes of alanin with water molecules (1:3 and 1:5)). Calculations were spent by kvantovo-chemical method B3LYP/6-311 ++ G (d,p)
http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1217

**ВЛИЯНИЕ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ НА СТРУКТУРУ
ЦИКЛИЧЕСКИХ ДИМЕРОВ УРАЦИЛА**

Тен Г.Н., Яковлева А.А., Баранов В.И.
Саратовский государственный университет

Выполнен расчёт геометрических параметров шести циклических димеров урацила в приближении B3LYP/6-311++G(d,p). Показано влияние водородных связей на структуру димеров в зависимости от их симметрии. Проведено сравнение с изолированной молекулой урацила
<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1216>

**EFFECT OF HYDROGEN BONDING ON THE
STRUCTURE OF URACIL CYCLIC DIMERS**

Ten G.N., Yakovleva A.A., Baranov V.I.
Saratov State University

The calculation of geometrical parameters of the six cyclic dimers of uracil in B3LYP/6-311++G(d,p) approximation was completed. The influence of hydrogen bonding on the structure of dimers, depending on their symmetry was shown. A comparison with the isolated molecule of uracil was studied
http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1216

**СХОДСТВО СТРУКТУРНЫХ МЕЙОТИЧЕСКИХ
БЕЛКОВ ЭУКАРИОТ С БЕЛКАМИ БАКТЕРИЙ**

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

Исследовано сходство основных белков синаптонемного и когезинового комплексов эукариот с белками из протеомов всех архей и всех бактерий, содержащихся в базе данных NCBI. Показано, что практически все эти белки ближе к белкам бактерий, а не архей, что противоречит данным литературы. Взятые для контроля митохондриальные и цитоплазматические белки рибосом, как и ожидалось, показали сходство с белками бактерий и архей соответственно
<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1231>

**THE SIMILARITY OF STRUCTURAL MEIOTIC
PROTEINS OF EUKARYOTES WITH BACTERIAL
PROTEINS**

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

The similarity of main eukaryotic proteins of synaptonemal and cohesion complexes with bacterial and archaeal proteomes from NCBI database was studied. It was shown that practically all these proteins are more similar to bacterial proteins than to archaeal ones. This fact contradicts the literature data. Mitochondrial and cytoplasmic ribosomal proteins predictably have shown the similarity with bacterial and archaeal proteins respectively
http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1231

ВТОРИЧНАЯ ПЕРИОДИЧНОСТЬ В СТРУКТУРНЫХ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИКАХ 3,3-ДИМЕТИЛЦИКЛОПРОПЕНОВ, ДИ- И МОНОЗАМЕЩЁННЫХ ГРУППАМИ $X(CH_3)_3$ ($X = C, Si, Ge, Sn$ И Pb)

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

SECONDARY PERIODICITY IN THE STRUCTURAL AND VIBRATIONAL CHARACTERISTICS OF 3,3-DIMETHYLCYCLOPROPENES DI- AND MONOSUBSTITUTED BY $-X(CH_3)_3$ ($X = C, Si, Ge, Sn$ И Pb)

Panchenko Y.N., De Maré G.R., Abramnikov A.V.
M.V.Lomonosov Moscow State University

Закономерности в изменениях структурных параметров и колебательных волновых числах прослежены для определённых групп указанных соединений. Оптимизированные геометрические параметры и силовые поля дизамещённых 3,3 диметил-циклопропенов и монозамещённых 3,3 диметилциклопропенов определены на уровнях HF/3-21G и DDAI, соответственно. Выбор указанных теоретических уровней обусловлен особенностями комплекса программ G03 для атомов Sn и Pb. Теоретические колебательные волновые числа рассчитаны с соответствующими масштабированными силовыми полями. Закономерности, имеющие на графиках форму зигзагообразных линий, аналогичны закономерностям, которые характерны для атомов 14 (IVA) группы периодической системы Менделеева. Эта закономерность известна как явление вторичной периодичности

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1215>

The regularities of changes in the structural parameters and vibrational wavenumbers have been traced for certain moieties of the title compounds. The optimized geometrical parameters and the force fields of disubstituted 3,3-dimethylcyclopropenes [1] and monosubstituted 3,3-dimethylcyclopropenes [2] were determined at the HF/3-21G and DDAI levels, respectively. The choice of these theoretical levels was brought about by peculiarities of G03 suite of programs for Sn and Pb atoms. The theoretical vibrational wavenumbers were calculated from the corresponding scaled force fields. The regularities obtained in the form of the zigzag lines are analogous to regularities that are characteristic to the atoms of the 14 (IVA) group of the Mendeleev Periodic Table. This is known as the secondary periodicity phenomenon

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1215

СЕКЦИЯ 5**ОБРАБОТКА ДАННЫХ, БАЗЫ ДАННЫХ, АНАЛИЗ ДАННЫХ****SECTION 5****DATA PROCESSING, DATABASES AND DATA ANALYSIS****ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ
СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ ФЛУКТУАЦИОННОЙ
ПОДСИСТЕМЫ МОНОКРИСТАЛЛОВ
 $Y_{1-z}PR_zBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ С РАЗЛИЧНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ
ПРАЗЕОДИМА МЕТОДОМ МНК****Вовк Р.В., Завгородний А.А., Оболенский М.А.,
Иврий Е.И.**Харьковский национальный университет им
В.Н.Каразина

В работе исследована флуктуационная проводимость оптимально допированных кислородом монокристаллов $Y_{1-z}PR_zBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ с различной концентрацией празеодима. Применение ВТ-методов и, в частности метода МНК с использованием в качестве подгоночных параметров длины когерентности в направлении с-оси, критической температуры и характерного размера двумерного слоя, позволило определить значения $\xi_c(0)$ в точке 2D-3D кроссовера и идентифицировать различные режимы флуктуационной проводимости. Температурная зависимость флуктуационной парапроводимости наиболее удовлетворительно описывается в рамках теоретической модели Асламазова-Ларкина. Показано, что примеси Pr являются эффективными центрами рассеяния нормальных и флуктуационных носителей

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1245>**DETERMINATION OF SUPERCONDUCTING
PARAMETRES OF FLUCTUATION SUBSYSTEMS OF
 $Y_{1-z}PR_zBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ SINGLE CRYSTALS WITH
DIFFERENT PRASEODYMIUM CONTENT BY MMS
METHOD****Vovk R.V., Zavgorodniy A.A., Obolenskii M.A.,
Ivryi E.I.**

V.N.Karazin Kharkov National University

In present work we have investigated the fluctuation conductivity of the optimal oxygen doped $Y_{1-z}PR_zBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ single crystals with different praseodymium concentration. Application of MMS-method method by using of coherent length, critical temperature and characteristic size of two-dimensional layer as the fitting parameters allowed to define values of $\xi_c(0)$ in the point of 2D-3D crossover and to identify different regimes of fluctuation conductivity. It is shown that paraconductivity satisfactory described by Aslamazov-Larkin theoretical model.. It is shown that Pr admixtures are the effective scattering centers of normal and fluctuation carriers.

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1245**ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ЭНТАЛЬПИЙ ОБРАЗОВАНИЯ
АЛКИЛПРОИЗВОДНЫХ НАФТАЛИНА****Зауэр Е.А.**Волгоградский государственный технический
университет

С помощью полуэмпирических квантово-химических методов PM3, MINDO, AM1 и MNDO, входящих в программный пакет MOPAC, рассчитаны энтальпии образования алкилпроизводных нафталина. Сравнение экспериментальных и расчетных значений показало, что наилучшая корреляционная связь наблюдается при использовании методов AM1 и PM3. Она описывается уравнениями линейной регрессии, которые могут быть использованы для прогнозирования энтальпий образования алкилпроизводных нафталина

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1261>**PREDICTION OF ENTHALPIES OF FORMATIONS OF
NAPHTHALENE ALKYL DERIVATIVES****Zauer E.A.**

Volgograd State Technical University

By means of semiempirical quantum chemical methods PM3, MINDO, AM1 and MNDO, entering into software package MOPAC, are calculated heats of formations of the naphthalene alkyl derivatives. Comparison of experimental and calculated values has shown that the best correlation communication is observed at use of methods AM1 and PM3. It is described by the equations of linear regress which can be used for prediction of enthalpies of formations of naphthalene alkyl derivatives

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1261

БАЗА ДАННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ НАУЧНЫХ РАБОТНИКОВ ИММ КАЗНЦ РАН

Скворцова З.В.

Институт механики и машиностроения Казанского
научного центра РАН

Описывается база данных результатов научных работников Учреждения Российской академии наук Института механики и машиностроения Казанского научного центра РАН (ИММ КазНЦ РАН), созданная в среде MS Access. База данных используется при составлении отчетов Института, подсчете баллов сотрудников, формировании списков результатов для аттестации, выборов по конкурсу, защит диссертаций, выдвижения на ученые звания

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1260>

DATABASE OF ACHIEVEMENTS OF SCIENTISTS OF IME KAZSC RAS

Skvortsova Z.V.

Institute of Mechanics and Engineering, Kazan Science
Center, Russian Academy of Sciences

The database created in the MS Access to account for the achievements of scientists of the Institute of Mechanics and Engineering, Kazan Science Center, Russian Academy of Sciences (IME KSC RAS) is describes. The database is used to generate reports of the Institute, to calculate scores of staff, to compile lists of results for certification, election of the contest, dissertations, promotion to the rank of scientists

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1260

ПРИМЕНЕНИЕ КОСМИЧЕСКИХ СНИМКОВ ДЛЯ ОЦЕНКИ ВЛИЯНИЯ НЕФТЕРАЗЛИВОВ НА СОСТОЯНИЕ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ ХАНТЫ-МАНСИЙСКОГО АВТОНОМНОГО ОКРУГА

Яценко И.Г., Алексеева М.Н.

Институт химии нефти СО РАН

Известно [1], что по чрезвычайным техногенным ситуациям, связанным с выбросами нефти и нефтепро-дуктов, Ханты-Мансийский автономный округ (ХМАО) лидирует не только в России, но и в мире. Ежегодные объемы аварийно разливаемой нефти составляют от 50 до 70 тыс. т. Так, в 2007 г. количество аварий составило 5480 и площадь разливов нефти составила 890,9 га. Из общего количества аварий 1/3 приходится на Нижневартовский район [2]. Несмотря на многократное увеличение объемов рекультивационных работ, влияющих на уменьшение площади загрязнения, данная проблема остается чрезвычайно острой. Влияние нефтеразливов на окружающую среду определяются площадями загрязнения, природными ус-ловиями территории (состояние почвы, растительности и атмосферы) и свойствами нефти. Вследствие трудно-доступности и заболоченности северных территорий, находящихся в зоне воздействия предприятий нефтедо-бычи, наиболее перспективным подходом к оценке влияния нефтеразливов на состояние окружающей природной среды рассматривается использование КС (КС) и ГИС- технологий. В связи с этим целью работы явилось выявление нефтеразливов и оценка их влияния на окружающую природную среду с использованием КС

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1258>

APPLICATION OF SPACE PICTURES FOR AN ESTIMATION OF INFLUENCE OF PETROFLOODS ON A STATE OF ENVIRONMENT OF HUNTY-MANSIJSKY AUTONOMOUS REGION

Yaschenko I.G., Alekseeva M.N.

Institute of Petroleum Chemistry, Siberian Division of
Russian Academy of Sciences

It is known [1] that on the extreme technogenic situations connected with emissions of oil and oil products, Hunty-Mansijsky the autonomous region (HMAR) is in the lead not only in Russia, but also in the world. Annual volumes of under abnormal condition spilled oil make from 50 to 70 thousand t. So, in 2007 the quantity of failures has made 5480 and the area of floods of oil has made 890,9 hectares. From total of failures 1/3 it is necessary on Nizhnevartovsky area [2]. Despite repeated increase in the amounts of works directed on liquidation of consequences of cultivation influencing reduction of the area of pollution, the given problem remains extremely sharp. Influence of petrofloods on environment are defined by the pollution areas, natural a territory mustache-lovijami (a condition of soil, vegetation and atmosphere) and properties of oil. Owing to difficult-availability and marshiness of northern territories which are in a zone of influence of the enterprises of oil extracting, the most perspective approach to an estimation of influence of petrofloods on a condition of surrounding environment considers use KS (KS) and GIS - technologies. In this connection the work purpose was revealing of petrofloods and an estimation of their influence on surrounding environment with use KC

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1258

ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЕ ЦЕПИ

Прогонный А.Н., Придубков П.Я.

Украинская государственная академия
железнодорожного транспорта

Исследованы электрические поля, создаваемые статическими зарядами, разработаны интегральные аналитические зависимости, описывающие процессы данного поля, сделано определение понятий электростатической цепи, и установлены методы её расчета

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1252>

ELECTROSTATIC CHAINS

Progonnny A.N., Pridubkov P.Ya.

Ukrainian State Academy of Railway Transport

The electric fields created by static charges are investigated, the integrated analytical dependences describing processes of the given field are developed, definition of concepts of an electrostatic chain is made, and methods of its calculation are established

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1252

**КОМПЛЕКСНЫЙ АНАЛИЗ И РАЗВИТИЕ БАЗЫ
ДАННЫХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
ТРУДНОИЗВЛЕКАЕМОЙ НЕФТИ**

Яценко И.Г., Козин Е.С.
Институт химии нефти СО РАН

Необходимость изыскания новых путей поиска, разведки и разработки месторождений углеводородов в связи с ростом нефтепотребления и увеличения запасов трудноизвлекаемой (тяжелой, вязкой, высоко-смолистой малопарафинистой и высокопарафинистой) нефти определяет актуальность изучения физико-химических свойств и состава нефти. Для выполнения указанных исследований разработана и развивается созданная в Институте химии нефти СО РАН мировая база данных (БД) по физико-химическим свойствам нефти, включающая описания более 19000 образцов нефти. Рассмотрены методические вопросы комплексного анализа пространственных и количественных изменений физико-химических свойств трудноизвлекаемой нефти с применением методов статистического и пространственного анализа данных. Целью комплексного анализа свойств трудноизвлекаемой нефти является установление географических закономерностей распределения нефти, зависимости изменения ее физико-химических свойств от глубины залегания, возраста нефтемещающих пород, литологических характеристик коллекторов и термобарических условий ее залегания. Пространственный анализ осуществлен на основе использования средств геоинформационных систем (ГИС) и ГИС-технологий. Приведены результаты сравнительного анализа пространственных изменений физико-химических свойств вязкой нефти континентов, стран и нефтегазоносных бассейнов

<http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper.php?p=1257>

**ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА НА ТЕМПЕРАТУРНУЮ
ЗАВИСИМОСТЬ ПСЕВДОЩЕЛИ В
МОНОКРИСТАЛЛАХ $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ С МАЛЫМ
ОТКЛОНЕНИЕМ ОТ КИСЛОРОДНОЙ
СТЕХИОМЕТРИИ**

**Вовк Р.В., Завгородний А.А., Назиров З.Ф.,
Оболенский М.А.**

Харьковский национальный университет им
В.Н.Каразина

В работе исследовано влияние отжига при комнатных температурах на избыточную проводимость монокристаллического монокристалла $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ с малым отклонением от стехиометрии по кислороду. Обнаружено, что в процессе отжига при комнатных температурах в течение около четырех суток происходит общее относительное расширение области существования псевдощелевого режима. При этом избыточная проводимость подчиняется экспоненциальной температурной зависимости в широком интервале температур, а температурная зависимость псевдощели - удовлетворительно описывается в рамках теории кроссовера БКШ-БК.

<http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper.php?p=1243>

**THE COMPLEX ANALYSIS AND DEVELOPMENT OF A
DATABASE OF PHYSICAL AND CHEMICAL
PROPERTIES OF OIL WHICH IS DIFFICULT FOR
TAKING**

Yaschenko I.G., Kozin E.S.

Institute of Petroleum Chemistry, Siberian Division of
Russian Academy of Sciences

Necessity of research of new ways of search, investigations and workings out of deposits of hydrocarbons in connection with growth of petroconsumption and increase in stocks of oil which is difficult for taking (heavy, viscous, highly-resinous, oil with big or small maintenance of paraffin), defines an urgency of studying of physical and chemical properties and oil structure. For performance of the specified researches it is developed and the world database (DB) on physical and chemical properties of the oil, including descriptions more than 19000 samples of oil develops created in Institute of chemistry of oil of the Siberian Branch of the Russian Academy of Science. Methodical questions of the complex analysis of spatial and quantitative changes of physical and chemical properties of oil which is difficult for taking, with application of methods of the statistical and spatial analysis of the data are considered. The purpose of the complex analysis of properties of oil which is difficult for taking is the establishment of geographical laws of distribution of oil, dependence of change of its physical and chemical properties on depth of placing of breeds, age of petrocontaining breeds, lithograph characteristics of collectors, thermal conditions and pressure conditions of its placing. The spatial analysis is carried out on the basis of use of means of geoinformation systems (GIS) and GIS-TECHNOLOGIES. Results of the comparative analysis of spatial changes of physical and chemical properties of viscous oil of continents, the countries and petroliferous and gas pools are resulted

http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper_e.php?p=1257

**EFFECT OF ANNEALING ON TEMPERATURE
DEPENDENCE OF A PSEUDOGAP IN $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$
SINGLE CRYSTALS WITH A SMALL DEVIATION
FROM OXYGEN STOICHIOMETRY**

**Vovk R.V., Zavgorodniy A.A., Nazirov Z.F.,
Obolenskii M.A.**

V.N.Karazin Kharkov National University

Effect of annealing at room temperatures on excess conductivity of untwined $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ single crystal with small deviation from oxygen stehiometry are investigated. It is shown, that in the process of annealing at room temperatures about four days are results to the significant expansion of the temperature interval of pseudogap anomaly. The excess conductivity submits exponential temperature dependence in the wide temperature interval. The temperature dependence of pseudogap satisfactorily described by BCSH-BEK theoretical model

http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper_e.php?p=1243

ВЛИЯНИЕ ГИДРОСТАТИЧЕСКОГО ДАВЛЕНИЯ НА ЭЛЕКТРОТРАНСПОРТ МОНОКРИСТАЛЛОВ

$Nb_{1-x}Se_2Sn_x$

Вовк Р.В., Завгородний А.А., Балла Д.Д., Назиров З.Ф., Оболенский М.А.

Харьковский национальный университет им В.Н.Каразина

В работе исследовано влияние гидростатического давления до 12 кбар на критические и резистивные параметры монокристаллов $Nb_{1-x}Se_2Sn_x$ ($x=0.1$ и $x=0.15$). Показано, что основной вклад в увеличение T_c под давлением вносит изменение плотности состояний на уровне Ферми. Установлено, что при приложении гидростатического давления фононный спектр смещается в сторону высоких частот (происходит ужесточение спектра). Численные оценки температуры Дебая согласуются с данными, полученными путем измерения теплоемкости монокристаллов $NbSe_2$. Показано, что с увеличением гидростатического давления длина свободного пробега возрастает, а соединение $Nb_{1-x}Se_2Sn_x$ можно рассматривать в чистом пределе в теории Гинзбурга-Ландау

<http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper.php?p=1244>

EFFECT OF HYDROSTATIC PRESSURE ON ELECTROTRANSPORT OF

$Nb_{1-x}Se_2Sn_x$ SINGLE

Vovk R.V., Zavgorodniy A.A., Balla D.D., Nazirov Z.F., Obolenskii M.A.

V.N.Karazin Kharkov National University

In present work effect of hydrostatical pressure up to 12 kbar on the critical parameters of $Nb_{1-x}Se_2Sn_x$ single crystals ($x=0.1$ and $x=0.15$) are investigated. It is shown that a basic contribution to the T_c increasing constraint makes alteration to the closeness of the states at the Fermi level. It is determined that under hydrostatical pressure a phonon spectrum is displaced toward high-frequencies (toughening of spectrum). The numeral estimation of the Debye temperature comports with by information, got by measuring of heat capacity of $NbSe_2$ single crystals. It is rotined that with the increase of hydrostatical pressure mean free path increases and $Nb_{1-x}Se_2Sn_x$ can examine in a clean limit in the Ginzburga-Landau theory

http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper_e.php?p=1244

ЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ЁМКОСТЬ - СТРУКТУРНЫЙ ПАРАМЕТР СИСТЕМ ТРАНСПОРТНОЙ СВЯЗИ

Прогонный А.Н., Придубков П.Я.

Украинская государственная академия железнодорожного транспорта

Исследовано стационарное электрическое поле материальной среды, показано, что диэлектрическая проницаемость вещественной среды является её удельной ёмкостью, установлена функциональная связь между удельной проводимостью вещественной среды и её диэлектрической проницаемостью, уточнено понятие электрическая ёмкость, обоснованы в соответствии с теорией поля энергетические соотношения в материальной среде, обеспечивающие эффективное использование структурного параметра электротехнических устройств электрической ёмкости в системах транспортной связи

<http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper.php?p=1251>

ELECTRIC CAPACITY - STRUCTURAL PARAMETRE OF SYSTEMS OF TRANSPORT COMMUNICATION

Progonnii A.N., Pridubkov P.Ya.

Ukrainian State Academy of Railway Transport

Stationary electric field of the material environment is investigated. It is shown that dielectric permeability of the material environment is its specific capacity, functional connection between specific conductivity of the material environment and its dielectric permeability is established, the concept electric capacity is specified, are proved according to the theory weeding power parities in the material environments, providing an effective utilization of structural parameter of electrotechnical devices of electric capacity in systems of transport communication

http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper_e.php?p=1251

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ БАЗЫ ДАННЫХ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ И ЭНЕРГИИ ДИССОЦИАЦИИ СВЯЗЕЙ

Репин А.А., Лебедев А.В., Орлов Ю.Д.

Тверской государственной университет

В докладе представлена база данных термодинамических характеристик органических соединений, на основе которой строится автоматизация расчетных методов предсказания энтальпий образования и энергий диссоциации связей. Дополнение базы данных модулями расчетного прогнозирования отсутствующих в ней величин дает более мощный инструмент получения количественной информации по энтальпиям образования органических соединений и энергиям диссоциации связей в них

<http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper.php?p=1234>

USE OF A DATABASE OF THERMODYNAMIC CHARACTERISTICS OF ORGANIC CONNECTIONS FOR FORECASTING OF AN ANTALPY OF FORMATION AND ENERGY OF DISSOCIATION OF COMMUNICATIONS

Repin A.A., Lebedev A.V., Orlov Yu. D.

Tver State University

In the report is presented the database of thermodynamic characteristics of organic connections on which automation of settlement methods of a prediction of antalpy of formations and energies of dissociation of communications is bases. Addition of a database with modules of settlement forecasting of sizes absent in it gives more powerful tool of reception of the quantitative information about antalpies of formation of organic connections and energies of dissociation of communications in them

http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper_e.php?p=1234

ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОГО ГИДРОСТАТИЧЕСКОГО ДАВЛЕНИЯ НА ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЛАБИЛЬНОЙ КОМПОНЕНТЫ В МОНОКРИСТАЛЛАХ $\text{Ho}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7.5}$ НЕДОДОПИРОВАННОГО СОСТАВА

Вовк Р.В., Завгородний А.А., Назиров З.Ф., Оболенский М.А.

Харьковский национальный университет им В.Н.Каразина

В работе исследовано влияние высокого гидростатического давления на электросопротивление в ab-плоскости монокристаллов $\text{Ho}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7.5}$ с недостатком кислорода. Установлено, что индуцируемое высоким давлением перераспределение лабильного кислорода приводит к усилению фазового расслоения, что сопровождается процессами структурной релаксации и восходящей диффузии в объеме экспериментального образца. Высказано предположение о том, что зарождение низкотемпературной (обедненной кислородом) фазы может происходить на границах двойников

<http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper.php?p=1242>

EFFECT OF HIGH HYDROSTATIC PRESSURE ON REDISTRIBUTION OF LABILE COMPONENTS IN UNDERDOPED $\text{Ho}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7.5}$ SINGLE CRYSTALS

Vovk R.V., Zavgorodniy A.A., Nazirov Z.F., Obolenskii M.A.

V.N.Karazin Kharkov National University

The effect of high hydrostatic pressure on the electric resistance in the ab-plane of the oxygen deficient $\text{Ho}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7.5}$ single crystals is investigated. It is shown that the pressure induced redistribution of the labile oxygen results to the strengthening of the phase immiscibility in layers. This process is accompanied with structural relaxation and ascending diffusion processes within the volume of the experimental sample. Supposition is outspoken that the origin of low temperature (oxygen deficient) phase can take a place on the twin boundaries

http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper_e.php?p=1242

РАЗРАБОТКА ФОРМАТОВ ХРАНЕНИЯ ДАННЫХ РАДИОЗОНДИРОВАНИЯ ИОНОСФЕРЫ

Щирый А.О.

Марийский государственный университет

Для сохранения оцифрованного сигнала радиозондирования ионосферы выбран формат WAV. Оцифрованный сигнал хранится аналогично звуковым данным; хранение параметров сеанса реализовано посредством chunk.a INFO. Для хранения ионограмм выбран формат PNG. Основные данные ионограммы (спектрограмма) помещены в виде, готовом для просмотра стандартными программами просмотра картинок; для хранения параметров сеанса используется секция zTXt; возможность прямого доступа к данным спектрограммы при этом достигается путем сохранения в zTXt значений смещений спектрограммы на изображении

<http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper.php?p=1227>

FORMATS DEVELOPMENT FOR IONOSPHERIC CHIRPSOUNDING DATA

Schiriy A.O.

Mari State Technical University

For preservation of the digitized signal of radio sounding of an ionosphere format WAV is chosen. The digitized signal is stored to similarly sound data; storage of parameters of a session is realized by means of chunk.a INFO. For storage of ionograms format PNG is chosen. The Specification of ionogram (spectrogram) is placed in a kind, which is ready for the viewing by standard browsers of pictures; for storage of parameters of a session the section zTXt is used; possibility of direct access to the spectrogram data is thus reached by preservation in zTXt values of displacement of the spectrogram on the image

http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper_e.php?p=1227

РЕГУЛЯЦИЯ АПОПТОЗА НЕЙРОСЕКРЕТОРНЫХ КЛЕТОК ГИПОТАЛАМУСА ПРИ СТАРЕНИИ

Бажанова Е.Д., Макарова К.А., Белостоцкая Г.Б., Попович И.Г.

Институт эволюционной физиологии и биохимии им.И.М.Сеченова РАН

Выявлено подавление p53-зависимого апоптоза нейронов у ускоренно стареющих трансгенных мышей со сверхэкспрессией онкопротеина HER2/neu. Обнаружена возможная причина блокирования p53-опосредуемого апоптоза - низкая экспрессия гена WRN (ген синдрома Вернера, вызывающий преждевременное старение), регулирующего синтез онкосупрессора p53, и дисбаланс синтеза p21, pin1. Результатом является низкий уровень апоптоза клеток при старении и, как следствие, высокий уровень канцерогенеза у трансгенных мышей, в сравнении с животными дикого типа

<http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper.php?p=1236>

APOPTOSIS REGULATION OF HYPOTHALAMIC NEUROSECRETORY CELLS IN AGING

Bazhanova E.D., Makarova K.A., Belostotskaya G.B., Popovich I.G.

I.M.Sechenov Institute for Evolutional Physiology and Biochemistry of Russian Academy of Sciences

We obtained suppression of p53-mediated apoptosis in accelerated senescent transgenic mice with overexpression oncoprotein HER2/neu. The cause of it's suppression is low expression of WRN (gene of Werner syndrome, progeria), which regulates synthesis of oncosuppressor p53. besides, we found the misbalance of p21 and pin1 synthesis. These changes lead to low apoptosis in aging and, consequently, high level of carcinogenesis in transgenic mice, compared with wild type mice.

http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper_e.php?p=1236

**О ПРОСТРАНСТВЕННОМ РАСПРЕДЕЛЕНИИ
ВЕКТОРА НАПРЯЖЁННОСТИ В ОБЪЁМЕ
РЕЛЬСОВЫХ НИТЕЙ**

Прогонный А.Н., Придубков П.Я.

Украинская государственная академия
железнодорожного транспорта

**ABOUT SPATIAL DISTRIBUTION OF VECTOR OF
INTENSITY IN VOLUME OF RAIL THREADS**

Progonnii A.N., Pridubkov P.Ya.

Ukrainian State Academy of Railway Transport

Исследовано стационарное электрическое поле рельсовых нитей. Показано, что рельсовые цепи относятся к цепям с распределенными параметрами, у которых закон распределения тока заранее не известен, а вектор напряженности электрического поля может быть определен как градиент скалярного потенциала. Для нахождения скалярного потенциала необходимо найти решение уравнения Пуассона, учитывая, что на граничных поверхностях функция потенциала изменяется непрерывно, а ее градиент претерпевает разрыв. Установлена аналитическая зависимость пространственного распределения вектора напряженности стационарного электрического поля в вещественной среде от пространственного распределения вектора плотности тока и электрических свойств этой среды

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1250>

Stationary electric field of rail threads is investigated. It is shown that rail chains concern chains with the distributed parameters at which the law of distribution of a current isn't known in advance, and the vector of intensity of electric field can be defined as a gradient of scalar potential. For a finding of scalar potential it is necessary to find the decision of the equation of Poisson, considering that on boundary surfaces potential function changes continuously, and its gradient undergoes rupture. Analytical dependence of spatial distribution of a vector of intensity of stationary electric field in the material environment from spatial distribution of a vector of density of a current and electric properties of this environment is established

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1250

**ПЕРЕХОД МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИК И ТЕМПЕРАТУРА
ОТКРЫТИЯ ПСЕВДОЩЕЛИ В
НЕДОДОПИРОВАННЫХ КИСЛОРОДОМ
МОНОКРИСТАЛЛАХ $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$: ВЛИЯНИЕ
ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ**

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

Харьковский национальный университет им
В.Н.Каразина

**METAL – DIELECTRIC TRANSITION AND THE
PSEUDO-GAP TEMPERATURE RANGE IN OXYGEN
DEFICIENT $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ SINGLE CRYSTALS:
EFFECT OF HIGH PRESSURE**

Vovk R.V., Obolenskii M.A., Zavgorodniy A.A.

V.N.Karazin Kharkov National University

В работе исследовано влияние высокого гидростатического давления на электросопротивление в ab-плоскости монокристаллов $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ с недостатком кислорода. Установлено, что индуцируемое высоким давлением перераспределение лабильного кислорода приводит к усилению фазового расслоения, которые сопровождаются процессами структурной релаксации и восходящей диффузии в объеме экспериментального образца. При этом происходит существенное смещение температурных участков, отвечающих переходам вида металл-диэлектрик и режима реализации псевдощелевой аномалии

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1247>

The effect of high hydrostatic pressure on the electric resistance in the ab-plane of the oxygen deficient $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ single crystals is investigated. It is shown that the pressure induced redistribution of the labile oxygen results to the strengthening of the phase deposition in layers. This process is accompanied with structural relaxation and ascending diffusion processes within the volume of the experimental sample. We observe a significant displacement of the temperature range that corresponds to metal-dielectric type transitions and the pseudo-gap realization regime

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1247

СЕКЦИЯ 6

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

SECTION 6

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

ОЦЕНКА ДАВЛЕНИЯ НАБОРА НА ГЕН СЕЛЕНСОДЕРЖАЩЕЙ ГЛУТАТИОНПЕРОКСИДАЗЫ Искусных И.Ю.

Воронежский государственный университет

Используя методы сравнительной геномики была проведена оценка давления естественного отбора на ген *Gpx1* после эволюционного расхождения человека и шимпанзе. Степень давления естественного отбора оценивали по отношению несинонимичных (dN) замен нуклеотидов к синонимичным (dS). Компьютерный анализ позволил установить, что отношение dN/dS имеет значение 0,001, которое намного меньше единицы. Таким образом, можно предположить, что отбор, влиявший на *Gpx1*, был стабилизирующим

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1226>

ESTIMATE OF SELECTION PRESSURE ON SELENIUM DEPENDENT GLUTATHIONE PEROXIDASE GENE Iskusnyh I.Yu.

Voronezh State University

It was investigated evolutionary pressure of natural selection on *Gpx1* gene after evolutionary differences Pan troglodytes and Homo sapiens by comparative genomics methods. The pressure level of natural selection was estimated by relation of quantity of nonsynonymous (dN) and synonymous substitution (dS). The computer analysis was showed, that dN/dS relation is 0,001, which much less than 1. Thus, it can be expected, that natural selection is stabilizing

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1226

ЧЕЛОВЕЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ ОТДЕЛЬНОГО РАБОТНИКА И ТРУДОВОГО КОЛЛЕКТИВА ПРЕДПРИЯТИЯ

Ревуцкий Л.Д.

Информационное агентство "ИВИС"

Для оценки человеческого потенциала отдельного работника и всего трудового коллектива предприятий предлагается использовать соответствующие системы их сбалансированных ключевых производственных, экономических и социальных показателей. Указаны литературные источники, в которых обстоятельно представлены методы определения всех рекомендуемых показателей. Особое внимание уделено вопросу оценки человеческого капитала трудящихся на предприятии - одного из важнейших показателей их человеческого потенциала. Управление уровнем использования человеческого потенциала предприятия позволяет осуществлять поэтапную нормализацию результативности и эффективности его производственной и коммерческой деятельности, повышать качество и конкурентоспособность выпускаемой им продукции

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1254>

POTENTIAL OF THE SEPARATE WORKER AND LABOR COLLECTIVE OF THE ENTERPRISE

Revuckiy L.D.

Information agency "EVIS"

The concept, terms and indicators of the human capital of the enterprises are considered. Indicators of the live and cumulative human capital of the enterprise differ, methods of calculation of size of these indicators are offered. The special attention in article is given a question of the nomenclature and definition of size of indicators of productivity and efficiency of use of the human capital at the enterprises. Among priority indicators of the accepted nomenclature indicators of return and profitability of the human capital of the enterprises, and also level of use of their social potential estimated at corresponding costs of involved work are named. Monitoring and control of these indicators allows a management of the enterprises to make the well-founded, highly effective administrative decisions

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1254

ЗАКОНЫ РОБОТОТЕХНИКИ: НОВАЯ ПАРАДИГМА**Гришин Е.А.**

Независимый консультант

В статье предлагается альтернативный подход к разрешению проблемы неуправляемости «взрывного» развития исследований и технологий в области «умных» машин. Подход основывается на конструктивной критике существующей парадигмы робототехники, известной как «три закона робототехники» писателя-фантаста А.Азимова

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1253>

LAWS OF ROBOTICS: A NEW PARADIGM**Grishin E.A.**

Независимый консультант

This article proposes an alternative approach to solving problems of uncontrollable «explosive» research and technology development in the field of intelligent machines. Approach is based on the constructive criticism of the existing paradigms of robotics, known as the «three laws of Robotics» writer-fiction author A. Asimov

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1253

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ В СИСТЕМЕ «DRUG» НОВЫХ СВОЙСТВ ИЗВЕСТНЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ: ЭЛНАПРИЛА, ЛИЗИНОПРИЛА, МОЭКСЕПРИЛА, ДИЛТИАЗЕМА, ЦЕТРИНА, ГИДРОКСИЗИНА**Вотинцев Н.П., Погребняк А.В., Ивашев М.Н.**

Пятигорская государственная фармацевтическая академия

Поиск неизвестных областей использования уже применяемых лекарственных препаратов имеет ряд преимуществ перед внедрением новых органических соединений, главные из которых: известна токсичность, отрицательные побочные эффекты и пути их снижения; определены физико-химические свойства; изучены метаболические превращения и пути элиминации из организма; уточнена область амбулаторного и/или клинического применения; у врачей и пациентов отсутствует психологический барьер, обычно сопровождающий внедрение нового препарата

<http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper.php?p=1263>

FORECASTING IN SYSTEM "DRUG" OF NEW PROPERTIES OF KNOWN MEDICAL PRODUCTS: ANAPRILIN, LIZINOPRIL, MOAKZEPRIL, DILTIAZEM, TZETRIN, GIDROKSIZIN**Votintsev N.P., Pogrebnyak A.V., Ivashev M.V.**

Pyatigorsk State Pharmaceutical Academy

Search of unknown areas of use of already applied medical products has a number of advantages before introduction of new organic connections, the main things from which: toxicity, negative by-effects and ways of their decrease is known; physical and chemical properties are defined; metabolic transformations and ways of conclusion from an organism are studied; the area of out-patient and-or clinical application is specified; doctors and patients don't have the psychological barrier usually accompanying introduction of a new preparation

http://www.ivtn.ru/2010/conf/enter/paper_e.php?p=1263

СЕКЦИЯ 7**ОПТИМАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ, ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА****SECTION 7****OPTIMUM PROCEDURES AND DESIGN OF EXPERIMENTS****ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА И ВЫСОКОГО
ГИДРОСТАТИЧЕСКОГО ДАВЛЕНИЯ НА ЭНЕРГИЮ
АКТИВАЦИИ ПРОЦЕССОВ РЕЛАКСАЦИИ
ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ В МОНОКРИСТАЛЛАХ
YBaCuO****Вовк Р.В., Оболенский М.А., Бондаренко А.В.,
Самойлов А.В.**Харьковский национальный университет им
В.Н.Каразина**EVOLUTION OF ACTIVATION ENERGY OF
RELAXATION PROCESSES OF ELECTRICAL
RESISTIVITY UNDER INFLUENCING OF ANNEALING
AND HIGH HYDROSTATICAL PRESSURE IN YBaCuO
SINGLE-CRYSTAL****Vovk R.V., Obolenskii M.A., Bondarenko A.V.,
Samoilov A.V.**

V.N.Karazin Kharkov National University

В работе исследована эволюция энергии активации релаксационных процессов кислороддефицитных соединений YBaCuO в условиях приложения высокого гидростатического давления до 14 кбар и отжига при комнатных температурах. Полученные значения энергии активации находятся в разумном соответствии со значениями энергии активации самодиффузии кислорода, что подтверждает вывод о том, что релаксация электросопротивления под влиянием внешних факторов обусловлена перераспределением кислорода

<http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper.php?p=123>

Evolution of activation energy of relaxation processes of the oxygen deficit compound YBaCuO underin high hydrostatical pressure to 14кбар and annealing at room temperatures is investigated. Value of this activation energy are in reasonable accordance with the values of activation energy of self-diffusion of oxygen. That confirms a conclusion that relaxation of electrical resistivity under influencing of external factors is conditioned by the redistribution of oxygen

http://www.ivtn.ru/2010/confs/enter/paper_e.php?p=123

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

Общие проблемы и перспективы использования информационных и компьютерных технологий в науке

SECTION 1

General problems and prospects of computer applications in science

6**СЕКЦИЯ 2**

Компьютерные вычисления, их организация (сети и параллельные вычисления)

SECTION 2

Computing and computing management
(networks and parallel computation)

7**СЕКЦИЯ 3**

Моделирование, численные эксперименты

SECTION 3

Computer simulation

9**СЕКЦИЯ 4**

Визуализация в научных исследованиях

SECTION 4

Visualization in scientific researches

15**СЕКЦИЯ 5**

Обработка данных, базы данных, анализ данных

SECTION 5

Data processing, databases and data analysis

17**СЕКЦИЯ 6**

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

SECTION 6

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

23**СЕКЦИЯ 7**

Оптимальные методы, планирование эксперимента

SECTION 7

Optimum procedures and design of experiments

25

ЗАЯВКА НА УЧАСТИЕ В РАБОТЕ ИВТН-2011

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

Тезисы и/или расширенный доклад перешлите по адресу: org@ivtn.ru

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

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

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

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

IVTN-2011 APPLICATION FORM

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

Your theses and/or enlarged report please send by E-mail: org@ivtn.ru.

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

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

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

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

**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В РЕШЕНИИ
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ И ПРИКЛАДНЫХ НАУЧНЫХ ЗАДАЧ
Сессия ИВТН-2010**

**COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENTIFIC RESEARCHES
IVTN-2010 Session**

Сборник материалов
The Proceedings

Ответственные за выпуск

Компьютерная верстка: *Куприна Ю.*

Перевод: *Умеренкова Я.*

Дизайн обложки: *Котельников Д.*

Редактор: *Габусу П.*

Editorial board

Make-up: *Kuprina Yu.*

Translators: *Umerenkova Ya.*

Design: *Kotelnikov D.*

Editor: *Gabusu P.*

ИВТН.ru

Интернет-конференции
Информационно-Вычислительные
Технологии в Науке

IVTN.ru – WEB Conferences
Computer Applications in Science

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

<http://www.ivtn.ru>