ISSN 2220-7864

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

Сессия ИВТН-2013

●

COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENTIFIC RESEARCH

IVTN-2013 Session

Сборник материалов
The Proceedings

Москва – 2013
Moscow - 2013

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-2013

The Organizational committee thanks all of the participants of the IVTN-2013 session

Сборник материалов сессии ИВТН-2013 содержит аннотации докладов, а также тезисы, представленных на электронную конференцию «Информационно-вычислительные технологии в решении фундаментальных и прикладных научных задач» в 2013 году. Среди докладов работы научных коллективов о моделировании и вычислениях, исследовании и разработках, а также о научных проблемах и перспективах в информационных и компьютерных технологиях.
Полные тексты докладов доступны на сайте ИВТН.ru (http://www.ivtn.ru).

The Proceeding of IVTN-2013 session contains annotations of the reports and abstracts presented on web-conference « Computer Applications in Science research» in 2013. Among the reports of the research teams for research and development, modeling and computation, as well as academic problems and prospects in information and computer technologies.
Full texts of reports are accessible on site IVTN.ru (http://www.ivtn.ru).

Уважаемые коллеги!

Представляем вашему вниманию Сборник материалов ИВТН-2013, который содержит каталог аннотаций докладов на двух языках, с указанием постоянного адреса полной версии статьи на сайте ИВТН.ru в Интернете, а также тезисы заявленных на конференцию докладов.

Для ссылок на опубликованные тезисы и доклады авторов за прошедшие и текущие секции электронных конференций ИВТН.ru, Вы также можете использовать новый раздел "Библиотека ИВТН.ru", расположенный по адресу: http://ivtn.ru/library/index.php, где работы находятся в открытом доступе в соответствии с годом выхода публикации.

Организационный комитет ИВТН.ru выражает благодарность всем участникам конференции за предоставленные тезисы и расширенные доклады и надеется на дальнее плодотворное сотрудничество.

До встречи на конференции ИВТН-2014!

С уважением,

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

Dear colleagues!

We bring forward proceedings of the Session IVTN-2013, which contains a catalog of abstracts in both languages with instructions of the permanent address of the full report version at web-site IVTN.ru in Internet, and also theses submitted for the conference reports.

To refer to the published abstracts and papers of the authors in the past and current partitions electronic conferences IVTN.ru, You can also use a new section "IVTN.ru Library", located at the address: http://ivtn.ru/library/index.php, where works are in the public domain in accordance with the year of publication.

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

To a meeting at conference IVTN-2014!

Sincerely yours,

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

ИВТН-2013
IVTN-2013

●

ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В НАУКЕ

COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENCE

Организаторы
Providers

Конференции ИВТН-2013 организованы по инициативе НВК "ВИСТ", при поддержке научных центров и институтов Российской Академии Наук и Российской Академии Медицинских Наук.

The IVTN-2013 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 2

КОМПЬЮТЕРНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ, ИХ ОРГАНИЗАЦИЯ (СЕТИ И ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ)

SECTION 2

COMPUTING AND COMPUTING MANAGEMENT (NETWORKS AND PARALLEL COMPUTATION)

ПРОБЛЕМЫ АЛГОРИТМИЗАЦИИ ВЫЧИСЛЕНИЯ БОЛЕЕ ВЕРОЯТНЫХ В СРЕДНЕМ ВЕЛИЧИН КРИТЕРИЕВ В ПЛП-ПОИСКЕ

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

Рассматриваются основные идеи планируемого ЛП-поиска (ПЛП-поиска) и показано, что для реальных параметров вычислительных экспериментов можно заменить действительное значение дисперсии выборки в произвольном сечении ее оценкой. Рассматриваются проблемы, возникающие при выборе числа сочетаний при оценке более вероятных в среднем величин критериев, связанные с противоречием между желаемой точностной вероятностной оценкой и временем ее получения. Приведены результаты применения предлагаемого алгоритма и вариации в его использовании на ряде тестовых примеров

PROBLEMS OF THE ALGORITHMIZATION OF THE CALCULATION OF THE MORE PROBABLE ON AVERAGE VALUES OF CRITERIA IN THE PLP-SEARCH

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

The basic ideas of the planned LP- search (PLP- search) are examined and it is shown that for the real parameters of computational experiments it is possible to replace the actual value of the dispersion of sample in the arbitrary section with its estimation. Are examined the problems, which appear during the selection of the number of combinations during the estimation of the more probable on average values of criteria, connected with the contradiction between the desired precision probabilistic estimation and the time of its obtaining. Are given the results of applying of the proposed algorithm and variation in its use in a number of test examples

Общая идея построения более вероятного значения оценки математического ожидания гипотетической генеральной совокупности основывается на классическом принципе теории вероятностей, говорящем о тот, что распределение сумм случайных величин, имеющих конечные значения дисперсий, независимо от характера их исходных распределений, стремится к нормальному при неограниченном увеличении числа этих сумм [1,2]. Конечно, сочетание слов «более вероятное» сохраняет неустранимую неопределенность в величине среднего генеральной совокупности. Это обстоятельство компенсируется, в значительной мере, выбором значений двух параметров: величиной доверительного интервала и соответствующей ему величиной доверительной вероятности.

Применительно к планируемому ЛП-поиску (ПЛП-поиску) [3-6] общая идея состоит в следующем. Для каждого *k*-го критерия качества проектируемого (исследуемого) объекта имеется $\sum_{j=1}^{J} M_{kj}$ выборок $\{\Phi_{kji_j l_{ki_j}}\}$, где: $\Phi_{kji_j l_{ki_j}}$ - l_{ki_j} -ое значение *k*-го критерия на i_j -м уровне *j*-го параметра; $l_{ki_j} = \overline{1, \mathrm{L}_{ki_j}}$, а L_{ki_j} - число членов выборки на i_j -м уровне *j*-го параметра по *k*-му критерию; $k = \overline{1, K}$, а *K* - число анализируемых критериев качества; $j = \overline{1, J}$, а *J* - число варьируемых параметров; $i_j = \overline{1, M_{kj}}$, а M_{kj} - число уровней *j*-го параметра по *k*-му критерию. Из множеств $\{\Phi_{kji_j l_{ki_j}}\}$ в ПЛП-поиске формируются подмножества $\{\bar{\Phi}_{kji_j}\}$ средних значений, необходимых для проведения однофакторного дисперсионного анализа. Здесь $\bar{\Phi}_{kji_j}$ - среднее значение *k*-го критерия на i_j -м уровне *j*-го параметра $\bar{\Phi}_{kji_j} = (\mathrm{L}_{ki_j})^{-1} \sum_{l_{ki_j}}^{\mathrm{L}_{ki_j}} \Phi_{kji_j l_{ki_j}}$.

График функции $\bar{\Phi}_{kji_j}(\alpha_{i_j})$ в сопоставлении со значением $\bar{\Phi}_k$ - общим средним значением *k*-го критерия, полученным по выборке из N_0 вычислительных экспериментов, позволял эмпирически (чаще всего, визуально) назначать новые области поиска наилучших решений по *k*-му критерию. Однако неучет того факта, что значения $\bar{\Phi}_{kji_j}$ носят выборочный характер, часто приводят к необоснованному оптимизму при выборе новых пределов варьирования параметра α_j и, что самое главное, к раздражительной реакции пользователя ПЛП-

поиска. Хотелось бы побольше «детерминизма», хотя бы и в среднем. Можно ли было этого достичь, не увеличивая общего числа N_0 вычислительных экспериментов? Можно, если воспользоваться общей идеей построения более вероятного среднего. Суть предлагаемых алгоритмов вычисления более вероятных в среднем величин критериев состоит в следующем. Имеется выборка из L_{ki_j} значений $\Phi_{kji_jl_{ki_j}}$. Организуем всевозможные суммы (а, далее, средние этих сумм) из элементов этой выборки. Как известно [7], число всевозможных сочетаний M_{ki_j} из элементов этой выборки равно

$$M_{ki_j} = (\sum_{m=2}^{L_{ki_j}-1} C^m_{L_{ki_j}}) = 2^{L_{ki_j}} - (L_{ki_j} + 2) \quad (1)$$

без учета среднего значения исходной выборки и

$$M_{ki_j} = 2^{L_{ki_j}} - (L_{ki_j} + 1) \quad (2)$$

с учетом этого среднего значения. Уже при $L_{ki_j} \geq 8$ число $M_{ki_j} \geq 246$. Поэтому с ростом L_{ki_j} статистика M_{ki_j} растет быстро и появляется возможность использовать более “качественные” суммы, т.е. организовать суммы из 10 и более элементов, а не из 2, 3 и т.д. Это обстоятельство, конечно, учитывается при программной реализации алгоритма.

Обозначим более вероятные в среднем значения *k*-го критерия на i_j -ом уровне *j*-го параметра через a_{kji_j}. Тогда рассматривая a_{kji_j} и σ_{kji_j} как неизвестные параметры нормального распределения и решая уравнения правдоподобия [1], получим несмещенные и эффективные оценки этих параметров:

$$a_{ki_j} = (M_{ki_j})^{-1} \sum_{m_{ki_j}}^{M_{ki_j}} \bar{\Phi}_{ki_j m_{ki_j}} = \bar{\Phi}^{BB}_{ki_j} \quad (3)$$

и

$$\sigma^2_{ki_j} = \frac{1}{M_{ki_j} - 1} \sum_{m_{ki_j}}^{M_{ki_j}} (\bar{\Phi}_{ki_j m_{ki_j}} - \bar{\Phi}^{BB}_{ki_j})^2 = (S^{BB}_{ki_j})^2, \quad (4)$$

где $\bar{\Phi}_{ki_j m_{ki_j}}$ - средние значения частных сумм, составленных из *m* элементов в L_{ki_j} членов ($m = \overline{1, L_{ki_j} - 1}$). При этом доверительным интервалом для a_{kji_j} будет интервал ($\bar{\Phi}^{BB}_{ki_j} - S^{BB}_{ki_j} c_\alpha, \bar{\Phi}^{BB}_{ki_j} + S^{BB}_{ki_j} c_\alpha$), где $c_\alpha = t_\alpha \sqrt{M_{ki_j}}$, а t_α - значение интеграла вероятности при данном значении доверительной вероятности *P* = 1-α. Так при α = 0,01, M_{ki_j} = 1024 и t_α = 2,58, получим c_α = 2,58/32 ≈ 0,0806. Отсюда $a_{ki_j} \in (\bar{\Phi}^{BB}_{ki_j} - 0,0806 S^{BB}_{ki_j}, \bar{\Phi}^{BB}_{ki_j} + 0,0806 S^{BB}_{ki_j})$. Если же M_{ki_j} =10^4, то при том же значении α = 0,01 находим, что $a_{ki_j} \in (\bar{\Phi}^{BB}_{ki_j} - 0,0258 S^{BB}_{ki_j}, \bar{\Phi}^{BB}_{ki_j} + 0,0258 S^{BB}_{ki_j})$.

И для программной реализации алгоритма, и в целях научной добросовестности следует объяснить, почему при вычислении доверительного интервала a_{kji_j} мы используем значения $S^{BB}_{ki_j}$, а не $\sigma^2_{ki_j}$ (как правило, неизвестное). Дело в том, что и для $\sigma^2_{ki_j}$ можно сразу записать четыре неравенства [8,9], которые выполняются одновременно с вероятностью 1-2α:

$$(\sigma_{ki_j} / \lambda) < z_1 S^{BB}_{ki_j} < \sigma_{ki_j} < z_2 S^{BB}_{ki_j} < \lambda \sigma_{ki_j}, \quad (5)$$

где λ = 1+*q*, а *q* - уровень относительной погрешности в %, устраивающий исследователя [8] $z_1 = \sqrt{M_{ki_j} / \chi^2_{M_{ki_j};\alpha/2}}$, $z_2 = \sqrt{M_{ki_j} / \chi^2_{M_{ki_j};1-\alpha/2}}$, а $\chi^2 = (S^{BB}_{ki_j})^2_1 + (S^{BB}_{ki_j})^2_2 + ... + (S^{BB}_{ki_j})^2_n -$ случайная величина, подчиненная χ^2 -распределению с ν степенями свободы ($\nu = M_{ki_j}$, если a_{kji_j} известна, и $\nu = M_{ki_j} - 1$, если этот параметр неизвестен). И если $M_{ki_j} \to \infty$, то z_1 и z_2 в (5) стремятся к 1. Реально это положение можно проиллюстрировать, выписав из [9, табл. 3.3, с. 59] часть таблицы, где для ряда величин P = 1-2α и соответствующих чисел степеней свободы ν указаны числовые значения λ.

	***P* = 1-2α**			
ν	0,50	0,90	0,95	0,99
100	1,100	1,263	1,321	1,443
1000	1,031	1,076	1,092	1,122
5000	1,014	1,033	1,040	1,053
10000	1,010	1,024	1,028	1,037

Из этой таблицы следует, что уже при ν ≥ 100 (т.е. фактически при $M_{ki_j} \geq 10^3$) значения λ и 1/λ стремятся к 1 уже даже при большой величине *P*. И, например, при ν ≥ 10000 и *P* = 0,99 (т.е. при α = 0,005) крайние границы неравенств в (5) приобретают соответственно значения 0,964 $\sigma_{kji_j}\theta$ и 1,037 σ_{kji_j}. И так как в реализуемом алгоритме [10] мы всегда будем иметь дело с выборками, у которых $M_{ki_j} \geq 10^3$ (т.е. $L_{ki_j} \geq 10$), то это избавляет

нас от необходимости реализовывать в программе построение доверительного интервала для $S_{ki_j}^{BB}$, т.е. будем молчаливо предполагать, что $(S_{ki_j}^{BB})^2 \approx \sigma_{ki_j}^2$. Однако воспользоваться формулой (3) для получения более вероятных значений a_{ki_j}, вычислив все сочетания в соответствии с формулой (1) (или (2)) нельзя, так как показано, что $(\text{Ь}_{ki_j})^{-1}\sum_{l_{ki_j}}^{\text{Ь}_{ki_j}}\Phi_{kjl_jl_{ki_j}} = [2^{\text{Ь}_{ki_j}} - (\text{Ь}_{ki_j}+2)]^{-1}(\sum_{l_{ki_j}}^{\text{Ь}_{ki_j}}\Phi_{kjl_jl_{ki_j}})(\sum_{m=2}^{\text{Ь}_{ki_j}-1}\frac{1}{m}C_{\text{Ь}_{ki_j}-1}^{m-1})$.

Конечно, при больших значениях Ь_{ki_j} (например, при $\text{Ь}_{ki_j} \geq 15$), когда величины M_{ki_j} достигают значений в несколько десятков тысяч единиц, воспользоваться формулой (3) можно, использовав только часть сочетаний. Для получения более вероятных средних значений a_{ki_j} был рассмотрен и другой алгоритм. Пусть величина y_u принадлежит нормальному распределению (a, σ). Тогда можно записать, что

$$\ln y_u = \ln\frac{A}{\sigma} - \frac{(x_u - a)^2}{2\sigma^2}. \quad (6)$$

Подставляя в (6) значения (y_u, x_u) в u-ой, u+1-ой и в u+2-ой точках, решая полученную таким образом систему уравнений, найдем:

$$\sigma^2 = (2\Delta)^{-1}(x_u - x_{u+2})(x_{u+1} - x_u)(x_{u+2} - x_{u+1}) \quad (7)$$

и

$$a = (2\Delta)^{-1}[(x_{u+2}^2 - x_{u+1}^2)\ln\frac{y_u}{y_{u+1}} - (x_{u+1}^2 - x_u^2)\ln\frac{y_{u+1}}{y_{u+2}}], \quad (8)$$

где $x_u < x_{u+1} < x_{u+2}$, а $\Delta = (x_{u+2} - x_{u+1})\ln\frac{y_u}{y_{u+1}} - (x_{u+1} - x_u)\ln\frac{y_{u+1}}{y_{u+2}}$. Для Δ = const выводится условие, когда $\Delta < 0$ (что необходимо для работоспособности формул (7) и (8). Обозначим $x_{u+2} - x_{u+1} = \Delta_{u+1}$, а $x_{u+1} - x_u = \Delta_u$. Тогда при $\Delta < 0$ имеем:

$\ln(\frac{y_u}{y_{u+1}})^{\Delta_{u+1}} - \ln(\frac{y_{u+1}}{y_{u+2}})^{\Delta_u} < 0$, далее $\ln\frac{(y_u)^{\Delta_{u+1}}(y_{u+2})^{\Delta_u}}{(y_{u+1})^{\Delta_{u+1}+\Delta_u}} < 0$ или $(y_u)^{\Delta_{u+1}}(y_{u+2})^{\Delta_u} < (y_{u+1})^{\Delta_{u+1}+\Delta_u}$. При Δ_u =const для $\forall u$ получим:

$$y_u y_{u+2} - y_{u+1}^2 < 0. \quad (9)$$

Для уменьшения влияния выбросов на величину a, рассчитываемую по (8), условие (9) заменим более надежным $y_u y_{u+2} - y_{u+1}^2 \leq -\varepsilon_u$, где $0 < \varepsilon_u << 1$.

Построив гистограмму распределения средних величин из выборки в M_{ki_j} членов по s разрядам, мы можем последовательно, пользуясь формулами (7) и (8), обойти всю гистограмму, и тогда $u = \overline{1, s-2}$. А можем перебрать последовательно все разряды гистограммы, используя по три разряда в каждом вычислении. В обоих вариантах искомые оценки получаются как результат усреднения по множеству величин, полученных с помощью формул (7) и (8). Конечно, точность в определении a_{nkJ} ($a_{nkJ} \equiv \tilde{a}$) зависит как от величины M_{ki_j} (чем больше значение M_{ki_j}, тем точнее определяется величина a_{nkJ}), так и от числа разрядов s при построении гистограммы по выборке из M_{ki_j} членов. Возникает проблема такого выбора s, чтобы построенная гистограмма достаточно хорошо аппроксимировала неизвестное нормальное распределение, тем самым способствуя более точному определению координат вершины нормального распределения, т.е. искомой величины a_{nkJ}. Иначе говоря, нужен критерий оптимального выбора величины s. Сформируем такой критерий оптимальности на основе следующей леммы из [11, с. 411]: уклонение гистограммы случайной величины от графика ее плотности в метрике Q^2, когда эта плотность имеет ограниченную вторую производную, в лучшем случае имеет порядок $(M_{ki_j})^{-1/3}$ (соответственно, квадрат нормы уклонения - порядок $(M_{ki_j})^{-2/3}$), и он достигается при числе интервалов группировки $s \approx (M_{ki_j})^{-1/3}$. Интерес представляют и более вероятные в среднем значения k-го критерия в каждой из n-х J-мерных точек ($n = \overline{1, N_0}$) на предмет выявления потенциально экстремальных точек (min или max). В этом случае в каждой n-ой точке мы имеем совокупность средних значений $\{a_{ki_j}\}$, также являющихся выборкой из нормальной совокупности с параметрами a_{nkJ} и σ_{nkJ}, где $n = \overline{1, N_0}$. Оценки этих параметров вычислим аналогично (3) и (4) $a_{nkJ} = (J)^{-1}\sum_{j=1}^{J}a_{ki_j} = (JM_{ki_j})^{-1}\sum_{j=1}^{J}\sum_{m_{ki_j}=1}^{M_{ki_j}}\bar{\Phi}_{nkJ}^{BB}$,

и $\sigma_{nkJ}^2 = (JM_{ki_j} - 1)^{-1}[\sum_{j=1}^{J}\sum_{m_{ki_j}=1}^{M_{ki_j}}\bar{\Phi}_{ki_jm_{ki_j}}^2 - (JM_{ki_j})(\bar{\Phi}_{nkJ}^{BB})^2] = (S_{nkJ}^{BB})^2$.

Конечно, при реальных значениях M_{ki_j} (≥ 1000) и J ≥ 2 оценка

$$(S_{nkJ}^{BB})^2 \approx (JM_{ki_j})^{-1}(\sum_{j=1}^{J}\sum_{mki_j}^{M_{ki_j}}\tilde{\Phi}^2_{ki_j m_{ki_j}}) - (JM_{ki_j})(\bar{\Phi}_{nkJ}^{BB})^2$$

уже является приемлемой по точности.

Литература

1. *Ван дер Варден Б.Л.* Математическая статистика. М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1965. 435 с.
2. *Михог Г., Урсяну В.* Выборочный метод и статистическое оценивание. М.: Финансы и статистика, 1985. 245 с.
3. *Статников И.Н., Андреенков Е.В.* ПЛП-поиск – эвристический метод решения задач математического программирования. – М.: ИИЦ МГУДТ, 2006г. – 140 с.
4. *Статников И.Н., Фирсов Г.И.* Использование ПЛП-поиска в задачах обработки результатов вычислительного эксперимента // Информационно-вычислительные технологии в решении фундаментальных проблем и прикладных научных задач. Сессия ИВТН-2004. Сборник материалов. - М.: NC Group / НВК “Вист”, 2004. - С.51.
5. *Статников И.Н., Фирсов Г.И.* О дополнительных возможностях в алгоритмах ПЛП-поиска при проведении вычислительных экспериментов // Информационно-вычислительные технологии в решении фундаментальных проблем и прикладных научных задач. Сессия ИВТН-2007. Сборник материалов. - М.: NC Group / НВК “Вист”, 2007. - С.17.
6. *Статников И.Н., Фирсов Г.И.* О некоторых инструментальных возможностях ПЛП-поиска // Информационно-вычислительные технологии в решении фундаментальных проблем и прикладных научных задач. Сессия ИВТН-2009. Сборник материалов. - М.: НВК “Вист”, 2009. - С.19.
7. *Абезгауз Г.Г., Тронь А.П., Копенкин Ю.Н., Коровина И.А.* Справочник по вероятностным расчетам. М.: Воениздат, 1966. 408 с.
8. *Большев Л.Н., Смирнов Н.В.* Таблицы математической статистики. М.: Наука, 1965. 464 с.
9. *Оуэн Д.Б.* Сборник математических таблиц. М.: ВЦ АН СССР, 1973. 586 с.
10. *Статников И.Н., Фирсов Г.И.* ПЛП-поиск и его реализация в среде MATLAB // Проектирование инженерных и научных приложений в среде MATLAB. М.: ИПУ РАН, 2004. С.398-411.
11. *Ченцов Н.Н.* Статистические решающие правила и оптимальные выводы. М.: Наука, ГРФМЛ, 1972, 520 с.

http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1342 http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper_e.php?p=1342

ПОИСК БЕЛКОВ, РОДСТВЕННЫХ БЕЛКАМ СИНАПТОНЕМНОГО КОМПЛЕКСА: НЕОЖИДАННЫЕ ПОБОЧНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Гришаева Т.М.

Институт общей генетики им.Н.И.Вавилова РАН

В ходе in silico поиска белков, сходных с известными белками синаптонемных комплексов (СК) семи видов эукариот от дрожжей до мыши, в протеомах споровиков, пластинчатых, моллюсков, иглокожих и полухордовых выявлены белки, показывающие сходство не только с белками поперечных фибрилл СК, но и со случайными наборами аминокислот, генерированными на их основе. С-концевые фрагменты этих крупных белков формируют альфа-спирали и сходны по этому параметру с белками поперечных фибрилл СК

THE SEARCH OF PROTEINS RELATED TO THE SYNAPTONEMAL COMPLEX PROTEINS: UNEXPECTED BY-PRODUCT

Grishaeva T.M.

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

During the in silico search of proteins of synaptonemal complexes (SC) of seven eukaryotic species from yeast to mouse we found proteins in proteomes of Apicomplexa, Placozoa, Mollusca, Echinodermata, and Hemichordata showing similarity not only with proteins of SC transversal filaments, but also with random amino acid sets generated on their basis. The C-terminal fragments of these large proteins form coiled-coils and are similar in this parameter to proteins from SC transversal filaments.

Принципиальным отличием хромосом в клетках, делящихся путем мейоза, от хромосом в соматическом митозе является формирование в мейозе синаптонемных комплексов. Синаптонемный комплекс (СК) – это белковая структура, формирующаяся в профазе I деления мейоза между синаптирующими гомологичными хромосомами у подавляющего большинства эукариот [1-4]. На основе осевых элементов хромосом, соединяющих сестринские хроматиды и состоящих в основном из когезиновых белков, в профазе I мейоза строятся латеральные элементы СК, которые затем соединяются в единую структуру с помощью застёжки-«молнии» из поперечных фибрилл, пронизывающих центральное пространство СК. В середине центрального пространства перекрывающиеся «головки» поперечных фибрилл формируют центральный элемент СК.

Структурные элементы синаптонемных комплексов состоят из мейоз-специфичных белков. Белки поперечных фибрилл СК (табл.) у разных организмов не гомологичны между собой, однако имеют сходную вторичную структуру и частично сходные домены. Их N- и С-концевые фрагменты являются глобулярными, а бо̀льшая часть молекулы представляет собой протяжённую альфа-спираль (coiled-coil), которая позволяет этим белкам формировать палочковидные димерные структуры [1-5].

Белки центрального пространства синаптонемных комплексов (СК), их размеры и функциональные домены

Белки центрального пространства СК (длина молекулы)	Функциональные домены белков
Zip1 Sc* (875 а.к.)	SMC бактериальный, Smc, AAA_13
C(3)G Dm (744 а.к.)	2 бактериальных домена SMC (SMC_prok_B)
CORONA Dm (207 а.к.)	– (нет доменов)
SYP-1 Ce (489 а.к.)	Smc
SYP-2 Ce (213 а.к.)	–
SYP-3 Ce (224 а.к.)	SGNH_plant_lipase_like
SYP-4 Ce (605 а.к.)	–
ZYP1a At (871 а.к.)	2 бактериальных домена SMC
ZYP1b At (856 а.к.)	2 бактериальных домена SMC, PRK00409
SYCP1 Dr (537 а.к.)	SCP-1
SYCP1 Mm (993 а.к.)	SCP-1
SYCE1-like Dr (206 а.к.)	–
SYCE1 Mm (329 а.к.)	SMC бактериальный
SYCE2 Dr (187 а.к.)	–
SYCE2 Mm (177 а.к.)	–
SYCE3 Mm (88 а.к.)	–
TEX12 Af (135 а.к.)	–
TEX12 Mm (123 а.к.)	–

*Sc, Sp – дрожжи *Saccharomyces cerevisiae* и *Schizosaccharomyces pombe, Dm* – насекомое *Drosophila melanogaster, At* – растение *Arabidopsis thaliana*, *Ce* – нематода *Caenorhabditis elegans, Dr, Af* – рыбы *Danio rerio* и *Anoplopoma fimbria, Mm* – млекопитающее *Mus musculus*. Жирным шрифтом отмечены белки, формирующие поперечные фибриллы СК и имеющие сходную вторичную структуру.

Основной задачей данного исследования являлся поиск в протеомах разных групп эукариот белков, сходных с известными белками синаптонемных комплексов модельных видов эукариот. Частично результаты этой работы опубликованы [6-8]. В ходе исследования нами были получены нетипичные результаты, о которых мы расскажем в настоящем сообщении.

Всего нами было исследовано компьютерными методами около 11 млн. белков из протеомов всех основных групп эукариот. Объектами для сравнения с указанными выше белками были белки синаптонемных комплексов (СК) семи модельных видов эукариот от дрожжей до мыши (часть их приведена в таблице).

Аминокислотные последовательности белков СК искали в базах данных NCBI и UniProtKB/TrEMBL. Функциональные домены этих белков определяли с помощью программы CDART. В качестве контроля (для оценки степени сходства белков) использовали случайные аминокислотные последовательности, генерированные из оригинальных белков программой RandSeq (ExPASy Proteomics Server). С помощью программы NCBI Protein BLAST вели поиск сходных последовательностей в протеомах основных групп эукариот. Некоторые таксоны, для которых в базе данных имелось малое количество белков, были объединены в группы.

Параметры поиска программы Protein BLAST: Max. target sequences – 1000 или 5000, Expect threshold – 100, остальные – по умолчанию. Достоверность сходства характеризуется показателем E-value, означающим количество сходных белков, которые могут быть подобраны программой BLAST случайно. Показатель сходства Score (результат работы программы BLAST) учитывает три параметра**:** число совпадений аминокислот, число аминокислот одного типа и число так называемых gaps, т.е. тех случаев, когда в одном белке на данном месте есть аминокислота, а в другом она отсутствует. При анализе каждого белка СК сравнивали показатели сходства (Score) этого белка и его «случайного» аналога с белками из протеомов изучаемой группы эукариот. В случае близких показателей сходства для оригинального и «случайного» белков сравнивали средние значения их Score, для чего брали по 10 лучших результатов поиска. Сравнение проводили с помощью t-теста Стьюдента (t-test independent by variables) программы STATISTICA.

Значения Score зависят от длины молекулы, поэтому сравнивать эти показатели для белков разной величины не очень корректно. Однако сравнение их «по вертикали», т.е. для разных групп эукариот, вполне уместно. Кроме того, белки поперечных фибрилл СК, в основном, обладают сходными размерами.

При анализе сходства белков поперечных фибрилл синаптонемного комплекса (ПФ СК) с белками споровиков, пластинчатых, моллюсков, иглокожих и полухордовых нами обнаружены значимые показатели сходства не только для «оригинальных» белков, но и для полученных на их основе специальной программой случайных аминокислотных последовательностей, содержащих аминокислоты в тех же пропорциях, что и оригинальные белки, и имеющих ту же длину. Причём эти найденные белки были одинаковыми для «оригинальных» и «случайных» белков СК. Score для «случайных» (контрольных) последовательностей обычно не превышает 40, а во многих случаях и 30. В указанных же группах эукариот максимальные показатели сходства доходили до 70 (например, в случае SYCP1 мыши). При этом максимальные значения Score для «оригинальных» белков из разных протеомов были невысоки, но достоверны: 70-77 для Zip1, 63-70 для C(3)G, 56-83 для ZYP1a, 53-70 для ZYP1b, 67-99 для SYCP1 мыши, 44-66 для SYCP1 рыбы и от 50 до 68 для белка SYP-1 нематоды. Значения E-value были достаточно высоки: например, для «оригинальных» белков пластинчатых они составляли от e^{-9} до e^{-18}, для «случайных» – от e^{-07} до e^{-12}.

Для того, чтобы выяснить природу данного феномена, мы провели доменный анализ белков из протеомов указанных групп, показавших высокое сходство с белками ПФ СК и их «случайными» аналогами, а также определили их вторичную структуру. Таких белков было немного, у моллюсков, полухордовых и иглокожих вообще по одному. Во всех протеомах эти белки отличались большой длиной (от 3906 а.к. у полухордовых до

7710 а.к. у пластинчатых). Сходством с белками СК обладали лишь С-концевые фрагменты этих белков. На них мы и сосредоточили своё внимание.

По доменному составу С-концевые фрагменты этих особых белков немного различались. Так, у моллюсков выявлены функциональные домены миозина 10 и GCC2_GCC3. У споровиков имеется домен Smc, отвечающий за клеточное деление и расхождение хромосом. У полухордовых найдены домены GCC2_GCC3 и Trichoplein, у иглокожих – Trichoplein, у пластинчатых – много разных доменов, в том числе два Trichoplein и домены миозина. Очень важными являются также домены SMC, структурирующие хроматин и рекрутирующие другие белки. Они присутствуют у некоторых белков СК (табл.). Замечательным является то, что все эти домены (т.е. соответствующие участки белка) формируют выраженную альфа-спираль, как и белки поперечных фибрилл СК. Домен Trichoplein интересен ещё и тем, что в его аннотации присутствуют слова «мейоз-специфичный ядерный структурный белок».

Мы провели «обратный» BLAST для некоторых белков. Так, мы искали белки из протеомов мыши и дрозофилы, сходные с белками XP_002107637.1 и XP_002111687.1 пластинчатого Trichoplax adhaerens. За одним исключением, сходство с белками мыши и дрозофилы показали С-концевые фрагменты обоих белков. Первый белок сходен, в основном, с разными миозинами из обоих изученных протеомов. Второй белок также сходен с миозинами из протеома мыши, а в протеоме дрозофилы с ним сходны разные цитоплазматические линкерные белки и миозины. И миозины, и линкерные белки имеют в своём составе альфа-спиральные домены (наши данные).

В литературе ранее отмечалось, что белки ПФ СК при биоинформатическом анализе группируются с так называемыми интермедиатными белками, к которым относятся белки ядерной ламины и ядерного матрикса, полярного тельца веретена, тяжёлая цепь миозина и некоторые другие белки. Они образуют альфа-спиральную структуру, а все альфа-спирали имеют около 20% сходства между собой за счёт повторяющихся «реперных» гидрофобных аминокислот [9-11]. Это явление мы и наблюдаем в данном случае.

Почему же выявленные нами белки у некоторых групп эукариот сходны не только с белками поперечных фибрилл СК, но и со случайными наборами аминокислот, генерированными на основе «оригинальных» белков? Возможны два объяснения. (1) Сочетание аминокислот в «случайных» аналогах белков СК за счёт повторов, характерных для альфа-спиралей оригинальных белков, оказалось похожим на сами белки СК. (2) В процессе машинной сборки секвенированных геномов и соответствующих протеомов произошли сбои, и С-концевые фрагменты найденных нами белков, которых в протеомах совсем немного, на самом деле представляют собой белки поперечных фибрилл СК или какие-либо ещё интермедиатные белки. Эта гипотеза возникла потому, что альфа-спиральные белки имеются во многих протеомах, а наблюдаемый нами феномен выявлен только для считанных белков из некоторых протеомов эукариот.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №13-04-02071-а.

Литература

1. *Heyting C.* Synaptonemal complex: structure and function // Curr. Opin. Cell Biol. 1996. V.8. P. 389-396.
2. *Пенкина М.В., Карпова О.И., Богданов Ю.Ф.* Белки синаптонемного комплекса – специфические белки мейотических хромосом // Молекулярная биология. 2002. Т.36. №3. С. 1-11.
3. *Page S.L., Hawley R.S.* The genetics and molecular biology of the synaptonemal complex // Annu. Rev. Cell Dev. Biol. 2004.V.20. P. 525-558.
4. *Anuradha S., Muniyappa K.* Molecular aspects of meiotic chromosome synapsis and recombination // Progress in Nucleic Acid Research and Molecular Biology. 2005. V.79. P. 49-132.
5. *Bogdanov Y.F., Grishaeva T.M., Dadashev S.Y.* Similarity of the domain structure of proteins as a basis for the conservation of meiosis // Intern. Rev. Cytol. 2007. V.257. P. 83-142.
6. *Гришаева Т.М.* К вопросу об эволюции мейоза: как возникли белки синаптонемного комплекса эукариот? // Актуальные проблемы современной науки 2012. Межвузовский сборник научных трудов с материалами 7-ой телеконференции. Томск: ООО «Крокус», 2012. С. 55-57.
7. *Гришаева Т.М.* Поиск методами *in silico* белков, сходных с известными белками синаптонемного комплекса, в протеомах мхов, высших грибов и простых Metazoa // Тезисы на конференции on-line «ИВТН-2012» (http://www.ivtn.ru/2012/pdf/t12_29.pdf).
8. *Гришаева Т.М.* Поиск белков, родственных белкам синаптонемного комплекса, в протеомах разных групп эукариот от простейших до губок и червей // Актуальные проблемы современной науки 2013. Межвузовский сборник научных трудов с материалами X телеконференции. Т. II. № 1. Томск: ООО «Крокус», 2013. С. 77-79.
9. *Meuwissen R.L.J., Offenberg H.H., Dietrich A.J.J., Riesewijk A., van Iersel M., Heyting C.* A coiled-coil related protein specific for the synapsed regions of meiotic prophase chromosomes // EMBO J. 1992. V.11. P. 5091-5100.
10. *Богданов Ю.Ф., Дадашев С.Я., Гришаева Т.М.* Сравнительная геномика и протеомика дрозофилы, нематоды Бреннера и арабидопсиса. Идентификация функционально сходных генов синапсиса мейотических хромосом // Генетика. 2002. Т.38. №8. С. 1078-1089.
11. *Bogdanov Yu.F., Dadashev S.Ya., Grishaeva T.M*. *In silico* search for functionally similar proteins involved in meiosis and recombination in evolutionarily distant organisms // *In silico* Biology. 2003. V.3. #.1-2. P. 173-185.

СЕКЦИЯ 3

МОДЕЛИРОВАНИЕ, ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

SECTION 3

COMPUTER SIMULATION

МАТЕМАТИКА И ГРАММАТИКИ ГЕНЕТИЧЕСКИХ СТРУКТУР ЖИВЫХ СИСТЕМ

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

Это книга не обычна. Она рассматривает математический аппарат (как полагает автор), существовавший до построения жизни на Земле и явившийся основой синтеза генов и других структур живых систем. Рассматриваются отдельные математические вопросы (аспекты), связанные с восстановлением природных грамматик синтеза генетических структур мРНК, других структур живого. Но эта книга не математическая. В ней читатель не найдет строгих математических доказательств. Этого и не требуется. В ней намечены основные вопросы математики минимально необходимые для понимания основ построений живой Природы

MATHEMATICS AND GRAMMARS OF GENETIC PATTERNS OF LIVING SYSTEMS

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

This book is unusual. It considers the mathematical tool (as the author believes) which existed prior to the life on Earth creation and was the synthesis basis of genes and other living system structures. Separate mathematical issues (aspects) connected with the recovery of nature grammars of mRNA genetic patterns synthesis, other living structures are reviewed. But this book is not a mathematic one. The reader will not find here any strict mathematical proofs. But this is not required. Main issues of mathematics that are minimum required for the understanding of wild life creating fundamentals are indicated in it

«Математика и грамматики генетических структур живых систем».
Нижний Новгород, Издания генетиков и биофизиков России, 2012, С. 516.
ISBN 978-5-9904043-1-1
С. 496.

Это книга не обычна. Она рассматривает математический аппарат (как полагает автор), существовавший до построения жизни на Земле и явившийся основой синтеза генов и других структур живых систем. Рассматриваются отдельные математические вопросы (аспекты), связанные с восстановлением природных грамматик синтеза генетических структур мРНК, других структур живого. Но эта книга не математическая. В ней читатель не найдет строгих математических доказательств. Этого и не требуется. В ней намечены основные вопросы математики минимально необходимые для понимания основ построений живой Природы.

В монографии автор проводит линию от Латинских квадратов, Латинских гиперквадратов, их графического представления, многозначной логики, симметрии, далее к построениям в живой Природе. Математический аппарат позволяет расширить построения живой Природы.

В работах по генетике автора показано, что основы жизни – участки генов мРНК строятся на строгих математических основах – грамматиках синтеза живого. Гены простейших живых организмов были созданы на базе тех же строгих математических законов, что и все последующие организмы. Хотя структуры генов совершенствовались. Для нас следствием этого является то знание, что ни менее миллиарда лет назад, по космическим меркам небольшой срок, была создана математика, физика и химия, явившиеся основой синтеза живого на Земле. Далее были созданы грамматики. Структуры ДНК появились позднее, но и они вписались в те же математические и биохимические структуры. В результате исследований автором был открыт (как полагает автор) и сформулирован целый ряд законов природы. Показано, что симметрия – основа многих ее построений.

Автором показано, что сегодня все живые организмы вписываются в единую таблицу систематизации грамматик, что говорит о единой развивавшейся концепции создания живого на Земле или, что тоже, искусственном происхождении всей живой природы планеты Земля. Грамматики незначительно отличаются друг от друга, но достаточно, чтобы синтез генов разных организмов был наиболее благоприятен и разнообразен. Показана вариабельность и многослойность генов и их намного большая содержательность, чем мы полагали ранее.

Результаты работ автора говорят о том, что живая природа Земли, по крайней мере, вторична, а наше экологическое поведение должно вписываться в единую природную концепцию жизни на планете Земля. В противном случае мы – люди можем оказаться на Земле лишними.

Эта книга написана для того, чтобы передать всем желающим то, что понял автор, чтобы они восприняли и продолжили его представление о живой Природе.

В книге использован метод развития, разработанный автором, через последовательное дискретное

моделирование с наибольшим учетом свойств исходного моделируемого объекта.
Книга предназначена ученым – генетикам, ученым – биофизикам, работникам НИИ различных областей знаний в том числе, занимающимися проблемами нано-технологий, преподавателям вузов, аспирантам, студентам биологам, медикам, математикам, философам, специалистам, занимающимся генной инженерией и просто интересующимся проблемой происхождения жизни на планете Земля. Книга, думаю, будет интересна специалистам, занимающимися религиями Мира. Может служить учебником для комплексных специальностей университетов по направлению "Синтез живых систем".

http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1332 http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper_e.php?p=1332

О ПРИМЕНЕНИИ GPU NVIDIA АРХИТЕКТУРЫ KEPLER

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

Дан анализ архитектурно-технических характеристик и производительности GPU Nvidia Kepler GK110 . Измерена производительность GPU K20c в среде CUDA-5.5. K20c был установлен в PCI-E v.2 x16, как и Nvidia C2050 предыдущей архитектуры Fermi. Скорость обменов данными K20c с хостом составила около 6.4 Гбайт/с, в C2050 - порядка 6 Гбайт/с. Ускорение нашей квантовохимической программы расчета методом PDM при переходе к K20c составило около 2 раз, но при поддержке PCI-E v.3 было бы заметно выше

ABOUT USING OF NVIDIA GPU WITH KEPLER ARCHITECTURE

Kuzminsky M.B., Andreev A.M.
N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian Academy of Sciences

Architecture, technical characteristics and performance of GPU Nvidia Kepler GK110 was analyzed. GPU K20c performance under CUDA-5.5 was measured. K20c as also Nvidia C2050 with previous Fermi architecture uses PCI-E v 2. x16. K20 - host throughput found is about 6.4 GB/s, for C2050 - about 6 GB/s. Speedup of our quantum chemical program for PDM method is about 2 times, for PCI-E v.3 might be noticeable higher

GPU Nvidia архитектуры Kepler (K20, K20X, K40) являются мировыми лидерами производительности с плавающей запятой. В работе дан краткий анализ архитектурно-технических характеристик GPU Kepler на базе процессора GK110 и приведены некоторые данные об их производительности, в т.ч. полученные авторами.
Пиковая производительность этих GPU лежит в диапазоне 1.2-1.4 TFLOPS с двойной точностью (до 4.3 TFLOPS с одинарной точностью) в зависимости от модели, емкость главной памяти – от 5 до 12 Гбайт, пропускная способность – от 208 до 288 Гбайт/с. GPU подсоединяются к хосту через разъем PCI-E v.2 x16, за исключением K40, где применяется в 2 раза более быстрый канал PCI-E v.3 x16.
Пиковая производительность GPU на типичной для HPC-приложений двойной точности в разы превосходит пиковую производительность типичных для кластеров двухпроцессорных серверов при использовании в последних самых мощных серверных процессоров x86-64 Intel и AMD. Поэтому измерения производительности GPU Kepler представляет большую актуальность.
Такие измерения производительности для HPC можно отнести к одному из трех уровней: низшему, где производятся измерения отдельных технических характеристик GPU; среднему – где измерения относятся к универсальным математическим алгоритмам (например, умножение матриц или тесты Linpack); и к верхнему – на котором измеряется производительность различных приложений. Проведенные нами измерения относятся ко всем уровням и были выполнены в среде OpenSUSE 12.3 и Nvidia CUDA-5.5 на сервере с Intel Xeon E3-1240 и GPU K20c. Использовался также компилятор PGI Accelerator Fortran 13.10 с CUDA-расширениями.
На низшем уровне нами померена, в частности, пропускная способность обменов данными GPU-хост. Она составила около 6.4 Гбайт/с в каждом направлении. Наши более ранние данные для Nvidia C2050 с предыдущей архитектурой Fermi [1] дали около 6 Гбайт/с, что лишь немного ниже. В конечном счете это лимитируется пропускной способностью PCI-E (пиковая - 8 Гбайт/с), поэтому для приложений с большим обменом данными с хостом актуальна поддержка PCI-E v.3, имеющаяся в K40.
Для тестов среднего уровня отметим LU-декомпозицию на K40c, выполненную в пакете MAGMA [2]. На размерности матрицы 36K GPU обгоняет двухпроцессорный сервер с двумя 8-ядерными процессорами Xeon E5-2670/2.6 ГГц примерно в 4 раза, при размерности 2K быстродействие уже близко. На известной программе молекулярной динамики AMBER ускорение K20X относительно Intel Sandy Bridge около 8, на 80% быстрее Tesla M2090 [3].
Наши измерения для верхнего уровня были проведены для Nvidia Tesla C2050 и K20c по программе, реализующей квантовохимический метод PDM прямого построения матрицы плотности по фокиану в ортогональном базисе. Программа написана на Fortran-9X с CUDA-расширениями для создаваемого нами быстродействующего приближенного метода DFT (может использоваться и с полуэмпирическими методами типа AM/1) и для сверхбольших молекул обеспечивает линейное масштабирование времени расчета с размером системы при использовании технологии разреженных матриц с блочным портретом. Для молекулы полиглицина с базисом размерностью около 2.8 тысяч орбиталей ускорение на K20c по сравнению с C2050 составило около 2 раз (зависит от размера блока).
Время обменов данными с хостом почти не поменялось относительно C2050 и для блоков размерностью 200 составило 40% общего времени расчета. Это говорит о важности применения в GPU Kepler нового стандарта PCI-E v.3.
Работа поддержана РФФИ, проект 11-07-00470а.

Литература

1. *Кузьминский М.* GPU для HPC — время пришло//Открытые системы. 2011. №6. С.11-14
2. *Dongarra J., Dong T., Gates M., Haidar A., Tomov S., Yamazaki I.* MAGMA: a New Generation of Linear Algebra Libraries for GPU and Multicore Architectures http://icl.utk.edu/projectsfiles/magma/pubs/MAGMA_1.4.pdf
3. NVIDIA Tesla® K20-K20X GPU Accelerators Benchmarks. Application Performance Technical Brief., Nvidia, Nov. 2012

http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1341 http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper_e.php?p=1341

ГЕОЭКОЛОГИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ОСВОЕНИЯ ТРУДНОИЗВЛЕКАЕМОЙ НЕФТИ

Ященко И.Г.
Институт химии нефти СО РАН

Объемы добычи и потребления нефти как наиболее технологичного и экологичного вида топливного сырья, неуклонно возрастают. Расширяются и области его промышленного использования, особенно в таких отраслях, как транспорт, полимерная нефтегазовая химия, металлургия и пр. Одновременно с ростом добычи нефти истощается наиболее качественная часть ее ресурсов. Включаются в разработку трудноизвлекаемые запасы, которые увеличивают экологические последствия при их добычи. В статье определены критерии отнесения нефтей к трудноизвлекаемым. С использованием базы данных по физико-химическим свойствам нефти проведен анализ пространственного распределения трудноизвлекаемых нефтей основных нефтегазоносных бассейнов мира, выявлены особенности физико-химических свойств, как нефтей с аномальными свойствами, так и нефтей в сложных условиях залегания (большая глубина, аномальные пластовые температуры, неблагоприятные коллекторы).Данные исследования могут испол! ьзованы для прогноза ареалов планетарного распространения месторождений с трудноизвлекаемыми нефтями в России и основных нефтегазоносных бассейнах мира и определения основ стратегии превентивной защиты окружающей среды при освоении трудноизвлекаемых нефтей. Полученные результаты могут быть использованы при разработке новых экологически безопасных и усовершенствовании существующих методов и технологий нефтедобычи, транспортировки нефтей с аномальными физико-химическими свойствами, а также при решении других задач нефтяной отрасли

GEOECOLOGIC ASPECTS OF TIGHT OIL DEVELOPMENT

Yaschenko I.G.
Institute of Petroleum Chemistry, Siberian Division of Russian Academy of Sciences

Output and consumption of oil as the most processable and ecofriendly type of fuel material increase consistently. Its industrial usage fields especially such branches as transport, polymeric oil-and-gas chemistry, metal industry, etc. are being expanded. However the most qualitative part of its resources runs out simultaneously with the oil development growth. Hard-to-recover resources which increase the environmental consequences at their production are included into the development. The article defines the criteria of oils assignment to the tight ones. Analysis of spatial distribution of tight oils of main world oil-and-gas basins was executed, physicochemical characteristics of both the oils with anomalous properties and oils with the occurrence complex environment (big depth, anomalous formation temperatures, unfavorable reservoirs) were revealed with the usage of data base of oil physical and chemical properties. These researches can be used for the forecast of the planet deposits distribution areas with tight oils in Russia and main world oil-and-gas basins and for determination of bases of the environment protection strategies in case of tight oils development. Received results can be used for the designing of new ecofriendly and improvement of existing methods and technologies of oil development, transportation of oils with anomalous physical and chemical properties as well as for the solving of other oil industry problems

В связи с исчерпанием запасов легкодоступной маловязкой нефти как в нашей стране, так и в мире наблюдается рост доли трудноизвлекаемых запасов в общем нефтяном балансе. К трудноизвлекаемым относятся запасы нефти, заключенные в геологически сложнопостроенных пластах и залежах или представленные малоподвижной нефтью (например, с высокой вязкостью и высоким содержанием твердых парафинов). Они характеризуются сравнительно низкими дебитами скважин, обусловленными низкой продуктивностью пластов, неблагоприятными условиями залегания нефти (газонефтяные залежи, глубина более 4500 м и др.) или аномальными физико-химическими свойствами.

В настоящее время официально утвержденных критериев выделения трудноизвлекаемых запасов нет. Автором представлен перечень основных критериев выделения трудноизвлекаемых запасов нефти, согласно которым к трудноизвлекаемым можно относить запасы нефтей с ниже перечисленными свойствами и условиями залегания:

- с аномальными физико-химическими свойствами (высокие вязкость и плотность, высокое содержание парафинов, смол и асфальтенов);

заключенные в слабопроницаемых коллекторах и в водонефтяных и газонефтяных зонах;

- с высокой газонасыщенностью (более 200 $м^3$/т) либо при наличии в растворенном и/или свободном газе агрессивных компонентов (сероводород, углекислота) в количествах, требующих применения специального

оборудования при бурении скважин и добыче нефти;
залегающих на больших глубинах (более 4500 м);
- с пластовой температурой 100 °С и выше либо менее 20 °С (из-за низкой разницы между пластовой температурой и температурой застывания парафина и смол);
с высокой степенью обводненности залежей (до 75- 80 %).
В последние годы растет добыча трудноизвлекаемой нефти (ТИН) с аномальными физико-химическими свойствами - парафинистой, смолистой, вязкой и тяжелой. Запасы тяжелой и вязкой нефти в несколько раз превышают запасы маловязкой нефти (810 и 162 млрд. т, соответственно) и являются важнейшей частью сырьевой базы нефтяной отрасли в России и в других нефтедобывающих странах мира. Наиболее крупными запасами тяжелой и вязкой нефти располагают Канада и Венесуэла, значительные запасы имеют Мексика, США, Россия, Кувейт и Китай. На территории России запасы нефти с вязкостью более 35 мм^2/с составляют 7,3 млрд. т, большая часть которых сосредоточена в республиках Коми, Татарстан и в Тюменской области. В общем балансе вязких нефтей значительная доля приходится на парафинистые нефти, вязкость и высокая температура застывания которых обусловлена высоким содержанием парафина. Доля парафинистой нефти также значительна и составляет более 25 % от всех нефтей мира.
Вовлечение в разработку нефти с аномальными физико-химическими свойствами требует развития методов увеличения нефтеотдачи такой нефти. А это в свою очередь вызывает необходимость выявления закономерностей изменения физико-химических свойств в зависимости от геолого-геофизических и термобарических условий их залегания. Разработка новых и усовершенствование существующих технологий извлечения и транспорта нефти с аномальными физико-химическими свойствами требует получения знаний об особенностях физико-химических свойств и условий залегания ТИН. В связи с этим целью настоящего доклада явилось изучение особенностей физико-химических свойств и условий залегания ТИН.
Основу анализа свойств ТИН составила выборка от 50 до 5000 образцов ТИН из базы данных (БД) по физико-химическим свойствам нефти Института химии нефти СО РАН, которая в настоящее время включает описания 22180 образцов нефти. Более подробно данная информация представлена в табл. 1.

Таблица 1 - Количественная характеристика описаний трудноизвлекаемых нефтей в БД

Трудноизвлекаемая нефть		Объем выборки из БД	Количество нефтегазоносных бассейнов	Количество месторождений
Нефть с аномальными свойствами	Тяжелая (плотность более 0,88 г/см^3)	5104	119	1725
	Вязкая (вязкость более 35 мм^2/с при 20 ^{0}С)	2510	63	892
	Сернистая (содержание серы более 3 %)	865	40	358
	Смолистая (содержание смол более 13 %)	2030	52	702
	Парафинистая (содержание парафинов более 6 %)	2327	58	807
	С высокой газонасыщенностью (более 500 м^3/т)	51	22	39
	С низкой газонасыщенностью (менее 200 м^3/т)	2668	67	1090
	С высоким содержанием сероводорода (более 5%)	81	20	57
Нефть в сложных условиях залегания	В слабопроницаемых коллекторах (менее 0,05мдм^2)	479	33	345
	В коллекторах с низкой пористостью (менее 8 %)	96	12	63
	Большие глубины залегания (более 4500 км)	407	25	206
	Пластовая температура выше 100 ^{0}С	839	47	438
	Пластовая температура ниже 20 ^{0}С	316	35	169

Установлено при анализе физико-химических свойств нефти с аномальными свойствами (тяжелая, вязкая, сернистая, парафинистая и смолистая), что такие нефти относятся к вязким (особенно сернистые нефти), высокосмолистым и среднепарафинистым (за исключением парафинистой нефти, которая являются высокопарафинистой и малосернистой), с низким содержанием фракций и газовым фактором. Газовый фактор аномальной нефти изменяется от 22 до 104 м^3/т, что также является одним из критериев ТИН. Пластовые температуры залежей изменяются от 34 до 72 ^{0}С.
К трудноизвлекаемой нефти относится нефть с газовым фактором ниже 200 м^3/т и выше 500 м^3/т. Рассмотрим физико-химические свойства нефти с низким газосодержанием. Физико-химические свойства рассматриваемой нефти следующие: относится к нефти со средней плотностью, высоковязкой, сернистой, среднепарафинистой, среднесмолистой и малоасфальтеновой, со средним содержанием фракций. Нефть с высоким газосодержанием (более 500 м^3/т) относится к легкой, маловязкой, малосернистой, умеренно парафинистой, малосмолистой и малоасфальтеновой, с высоким содержанием фракций.
Наличие в нефти химически агрессивного сернистого газа концентрацией более 5 % также осложняет добычу нефти, несет коррозийную нагрузку на оборудование, увеличивая тем самым экологическую опасность нефтедобычи, требуя применения специального оборудования при бурении скважин и добыче нефти. Такая нефть является нефтью средней плотностью и повышенной вязкости, сернистой, среднепарафинистой, среднеасфальтеновой и умеренно смолистой, с низкой газонасыщенностью.
В перечень основных критериев выделения трудноизвлекаемых запасов нефти входит аномальная пластовая температура - выше 100 °С либо ниже 20 °С. Знание значения пластовой температуры важно для экологической оценки свойств нефти. Установлено, что нефти в высокотемпературных пластах являются легкими, со средней вязкостью, малосернистыми, малосмолистыми и малоасфальтеновыми, но умеренно парафинистыми. Однако нефть в низкотемпературных пластах качественно отличается своими свойствами -

повышенной плотностью, сверхвязкостью, средним содержание серы, парафинов, асфальтенов, повышенным содержание смол и с низким газосодержанием.
Глубокозалегающие нефти (более 4500 м) также относятся к трудноизвлекаемой нефти. В среднем глубокозалегающие нефти могут быть отнесены к легким, с повышенной вязкостью, среднесернистым, среднепарафинистым, малосмолистым, малоасфальтеновым, с высоким содержанием фракции н. к. 200 ^{0}C и средним содержанием фракции н. к. 300 ^{0}C. Выявлено высокое газосодержание.
Трудноизвлекаемой нефтью в соответствии с перечнем считается нефть, заключенные в неблагоприятных коллекторах, к которым относятся слабопроницаемые (проницаемость менее 0,05 мкм^2) и низкопористые (пористость менее 8 %). В среднем эти нефти могут быть отнесены к нефти со средней плотностью, сверхвязкой, сернистой, среднепарафинистой, среднесмолистой, среднеасфальтеновой, с высоким содержанием фракции н. к. 200 ^{0}C и средним содержанием фракции н. к. 300 ^{0}C и с низким газосодержанием в нефти.
Таким образом, с использованием базы данных по физико-химическим свойствам нефти проведен анализ пространственного распределения трудноизвлекаемой нефти основных нефтегазоносных бассейнов мира, выявлены геоэкологические особенности физико-химических свойств, как нефти с аномальными свойствами, так и нефти в сложных условиях залегания (большая глубина, аномальные пластовые температуры, неблагоприятные коллекторы).

http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1335 http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper_e.php?p=1335

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ГРАФЕНА SIC

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

В работе представлены результаты расчетов равновесной геометрии и зонной структуры графена карбида кремния. Показано, что графен SiC является прямозонным полупроводником с шириной запрещенной зоны, равной 2,81 эВ

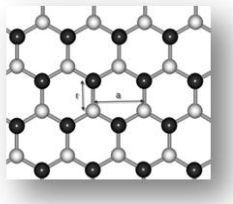
ELECTRONIC STRUCTURE OF SIC GRAPHENE

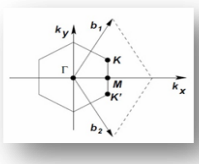
Svechnikov A.B.
National Research Centre "Kurchatov Institute"

Presented are the results of our calculations of equilibrium geometry and band structure of silicon carbide graphene. It has been shown that graphene SiC is a direct-gap semiconductor with a band gap equal to 2.81 eV

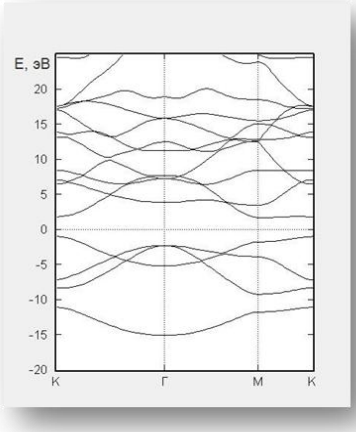
В работе представлены результаты расчетов равновесной геометрии и зонной структуры графена карбида кремния. Показано, что графен SiC является прямозонным полупроводником с шириной запрещенной зоны, равной 2,81 эВ.
Интерес к двухмерным кристаллическим структурам обусловлен заметными успехами в исследовании свойств углеродного графена, "лауреата" нобелевской премии по физике 2010 года . Уже реализованы прототипы будущих устройств, так называемой посткремниевой эпохи, на основе графена. Например, жидкокристаллические дисплеи, солнечные батареи, транзисторы и газовые сенсоры.
В данной работе представлены результаты теоретических исследований геометрической структуры и электронных свойств аналога углеродного графена, образованного путем чередования атомов кремния и углерода, и стехиометрического по составу. На данный момент графен SiC (рис.1 а) не синтезирован в лаборатории, однако, после получения нанотрубок SiC [1], есть все основания ожидать этого события в ближайшей перспективе. Точные квантово-химические расчеты физических свойств графена SiC представляют безусловный интерес, поскольку обладают предсказательной силой.

а)





в)



б)

Рис.1 Геометрическая структура графена SiC (а) , зонная структура (б) , зона Бриллюэна (в).

Равновесная геометрическая структура двухмерной решетки SiC была найдена путем минимизации полной энергии модельных кластеров, максимальный размер которых составлял 700 атомов. Свободные связи по периметру кластеров насыщались атомами водорода. Полная энергия вычислялась в полуэмпирическом

квантово-химическом приближении PM6 [2]. После статистической обработки результатов была определена равновесная длина связи между ближайшими атомами Si и C в графене, r = 0,1713 нм, соответствующая постоянная решетки a = 0,2967 нм. Следовательно, плоская решетка карбида кремния характеризуется плотной упаковкой атомов, сравнимой с трехмерными решетками (3C, 6H, 4H), где r = 0,189 нм.
Следующим шагом был расчет зонной структуры равновесной решетки графена SiC. Для этой цели был использован открытый код ABINIT [3], оптимизированный для имеюще-гося в распоряжении вычислительного кластера. Расчет проводился неэмпирическим мето-дом теории функционала плотности (DFT), в рамках приближения локальной плотности (LDA) и в базисе PAW (projector augmented waves). Результат расчета представлен на рис.1 б).
Анализ зонной структуры показывает, что графен SiC является широкозонным полупроводником. Потолок валентной зоны (π) и дно зоны проводимости (π*) располагаются в точке симметрии K (2π/[3r], 2π/[33/2r]) зоны Бриллюэна (рис. 1в). Анализ распределения плотности состояний показал, что в образовании π- и π*- зон участвуют pz- орбитали атомов Si и C. Максимум валентной зоны (σ) в точке симметрии Г(0, 0) сформирован s-, px-, py- орбиталями атомов графена. Ширина запрещенной зоны Eg = 2,81 эВ, попадает в диапазон 2,36 эВ (SiC 3C) ÷ 3,28 эВ (SiC 4H) соответствующих значений для объемных кристаллических структур карбида кремния. Отметим важную особенность электронной структуры гра-фена SiC, он является прямозонным полупроводником в отличие от непрямозонных политипов кристаллического карбида кремния.

Литература

1. *Xie Z., Tao D., Wang J.* Synthesis of silicon carbide nanotubes by chemical vapor deposition // J Nanosci Nanotechnol., 2007. V.7. P.647-652.
2. *Stewart J. J. P.* Optimization of Parameters for Semiempirical Methods V: Modification of NDDO Approximations and Application to 70 Elements // J. Mol. Modeling., 2007. V.13. P.1173-1213.
3. *Gonze X., Amadon B., Anglade P.-M. etc. ABINIT* : First-principles approach of materials and nanosystem properties // Computer Phys. Commun., 2009. V.180. P.2582-2615.

http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1343 http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper_e.php?p=1343

РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН НАНОТРУБОК ZIGZAG SIC

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

Представлены результаты неэмпирических расчетов энергетических зон однослойных и двухслойных нанотрубок zigzag SiC. Построена зависимость ширины запрещенной зоны от размера нанотрубок. Проведен анализ влияния состава двухслойных нанотрубок SiC на их энергетические характеристики

BAND STRUCTURE CALCULATION OF ZIGZAG SIC NANOTUBES

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

The results of ab initio calculations of the energy bands of single- and double-walled zigzag SiC nanotubes are presented. We built nanotube size dependence of the band gap. The influence of double-walled SiC nanotubes composition on their energy characteristics was analyzed

В данной работе исследованы зависимости электронных спектров однослойных и двухслойных нанотрубок SiC от их поперечных размеров. Была выбрана структура zigzag (n, 0), характерной особенностью которой является наличие связей Si-C, направленных параллельно оси нанотрубки. Атомы кремния и углерода чередуются, занимая вершины шестиугольников. В пределе больших значений параметра хиральности n, a соответственно и радиуса, локальная геометрия нанотрубки повторяет решетку графена SiC.
Расчет электронной структуры zigzag нанотрубок (n, 0) SiC проводился методом теории функционала плотности (DFT) в приближении локальной плотности (LDA) с помощью открытого кода ABINIT [1]. Параметр хиральности n изменялся от 3 до 20, a радиус нанотрубок от 0,1507 нм до 0,94 нм соответственно. Равновесные геометрические параметры определялись путем минимизации полной энергии, в качестве базиса использовались PAW (projector augmented waves).
На рис.1(а,б) показаны энергетические зоны нанотрубок SiC (6, 0) и (10, 0) в окрестности уровня Ферми. Точки симметрии Г(0, 0) и Z(π/a, 0), где a - постоянная "решетки", представляют одномерную зону Бриллюэна. Обе нанотрубки являются прямозонными полупроводниками с шириной запрещенной зоны (Eg) 0,661 эВ и 1,881 эВ соответственно.

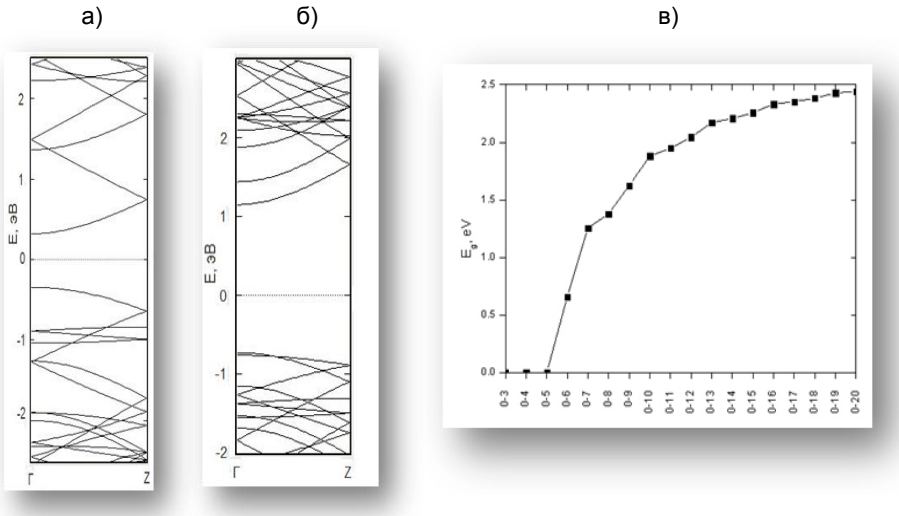
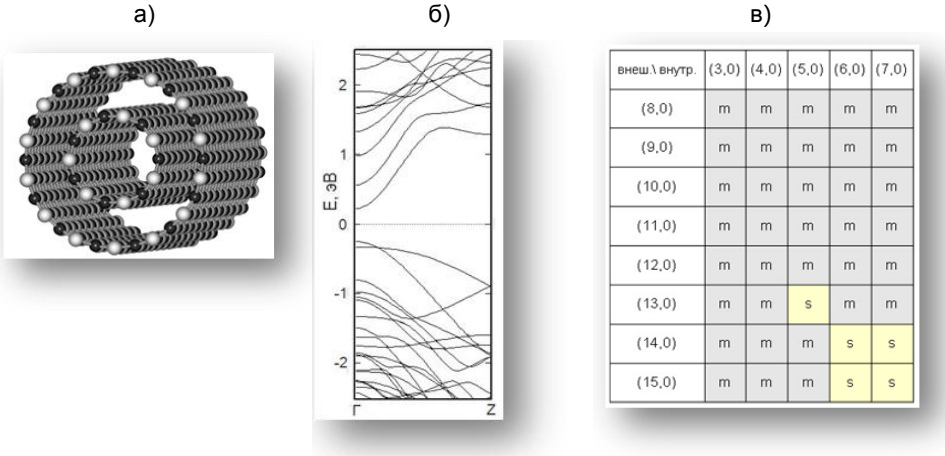


Рис.1 Зонная структура нанотрубок SiC, а) (6, 0), б) (10,0), в) зависимость ширины запрещенной зоны от поперечного размера нанотрубок zigzag.

Зависимость ширины запрещенной зоны от размера нанотрубок SiC показана на рис.1 (в). Нанотрубки с наименьшими радиусами (n < 5) являются проводниками. Промежуточное положение занимает структура (5, 0) с нулевой Eg, как у графена углерода. Дальнейшее увеличение поперечного сечения нанотрубок (n > 5) ведет к монотонному, логарифмическому росту Eg. Горизонтальной асимптотой графика функции Eg(n) является прямая E = Eg*, где Eg*- ширина запрещенной зоны графена SiC, равная 2,812 эВ (расчет выполнен нами, тем же методом).

Двухслойные нанотрубки SiC крайне слабо изучены. В данной работе мы попытались ответить на вопрос, как комбинация параметров хиральности n1 и n2, внутренней (n1,0) и внешней (n2,0) монослойных нанотрубок SiC, влияет на электронные свойства многослойных (n1,0)@ (n2,0) нанотрубок. На рис.2(а) изображен фрагмент двухслойной (7,0)@(14,0) zigzag нанотрубки SiC. Поскольку межатомные расстояния Si-C во внутренней и внешних нанотрубках практически совпадают, элементарные ячейки двухслойных нанотрубок не слишком велики, тем самым облегчая расчеты . Анализ зонной структуры, представленный на рис.2(б), показывает, что нанотрубка (7, 0)@(14,0) SiC является прямозонным полупроводником, где Eg = 0,469 эВ. Для сравнения приведем величины Eg для составляющих моноатомных нанотрубок, Eg[(7,0)] = 1,258 эВ и Eg[(14,0)] = 2,207 эВ. Несмотря на большое расстояние между нанотрубками (0,346 нм), наблюдается их связывание (в англ. источниках coupling), которое, как и в случае графита, существенно изменяет электронные свойства многослойной структуры. В данном случае в разы уменьшая ширину запрещенной зоны.



внеш.\ внутр.	(3,0)	(4,0)	(5,0)	(6,0)	(7,0)
(8,0)	m	m	m	m	m
(9,0)	m	m	m	m	m
(10,0)	m	m	m	m	m
(11,0)	m	m	m	m	m
(12,0)	m	m	m	m	m
(13,0)	m	m	s	m	m
(14,0)	m	m	m	s	s
(15,0)	m	m	m	s	s

Рис.2 а) строение двухслойной (7,0)@(14,0) zigzag нанотрубки SiC, б) зонная структура (7,0)@(14,0), в) электронные свойства двухслойных zigzag нанотрубок SiC (m - проводник, s - полупроводник).

Дальнейшие исследования показали, что граница раздела между двухслойными нанотрубками SiC проводниками (m) и полупроводниками (s) расположена, как показано на рис. 2(в). Пары однослойных нанотрубок с малым поперечным размером образуют двухслойные с металлическим типом проводимости. Крайнее положение занимают полупроводниковые нанотрубки (5,0)@(13,0) и (6,0)@(14,0), для которых Eg равны 0,369 эВ и 0,486 эВ соответственно.

Литература

1. *Gonze X., Amadon B., Anglade P.-M. etc. ABINIT* : First-principles approach of materials and nanosystem properties // Computer Phys. Commun., 2009. V.180. P.2582-2615.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ПЕРЕХОДОВ В ОДНОЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМАХ

Островский Н.В.
Вятский государственный университет

В докладе обсуждается динамическая модель, описывающая переход электрона с нижней орбиты на верхнюю. Модель включает передачу энергии от импульса электромагнитного излучения (фотона) электрону, изменение радиуса орбиты электрона и связанных с ним параметров.

SIMULATION OF ELECTRONIC TRANSITIONS IN ONE-ELECTRON SYSTEMS

Ostrovskiy N.V.
Vyatka State University

In the report is discussed a dynamic model, described an electron transition from lower orbit to upper. The model includes the transfer of energy from impulses of electromagnetic radiation (photon) to electron, change of electron orbit radius and related parameters.

В докладе приводится описание и результаты расчётов модели перехода электрона с низшей стационарной орбиты на высшую под действием импульса электромагнитного излучения (фотона). При этом используется представление об электроне-волне, движущемся по круговой орбите, удовлетворяющей постулатам Н. Бора.
Для детализации процесса передачи энергии от импульса электромагнитного излучения к электрону введена функция текущей мощности излучения [1]:

$$P(t) = h\nu^2\left[1+\cos\left(2\pi\nu t-\pi\right)\right], \quad (1)$$

где: *h* –постоянная Планка, ν – частота излучения. Интеграл от *P*(*t*) за период времени $\Delta t = 1/\nu$ равен *h*ν.
Полученная электроном энергия расходуется на работу против силы электростатического притяжения. Как следует из модели Бора конечное значение радиуса орбиты r_2 связана с начальным значением радиуса r_1 и величиной орбиты A_{12} соотношением:

$$r_2 = \frac{1}{1/r_1 - A_{12}/Ze^2}, \text{ где Z – заряд ядра.} \quad (2)$$

Из теории Бора также следует, что по завершении процесса увеличения радиуса орбиты должно произойти увеличение момента количества движения электрона (углового момента) пропорционально изменению номера орбиты. Это событие требует определённого количества энергии, которую мы назовём энергией квантового скачка:

$$\Delta E_{K,QJ} = \frac{Ze^2}{2}\left(\frac{r_b - r_a}{r_b^2}\right), \quad (3)$$

где *a* и *b* начальный и конечный номера орбит.
Для того, что бы объяснить накопление электроном необходимого количества энергии, автором введено понятие внутренней энергии электрона или энергии деформации электронной орбиты (E_{Def}). Текущая величина этой энергии рассчитывается по уравнению, аналогичному уравнению (3). Тогда величина работы против силы электростатического притяжения будет определяться соотношением [1]:

$$A_{12} = P(t)dt - \Delta E_{K,12} - \Delta E_{Def,12}, \quad (4)$$

где $\Delta E_{K,12}$ – изменение кинетической энергии электрона при увеличении радиуса орбиты от r_1 до r_2.
Возможности модели проиллюстрированы расчётами для переходов 1=>2, 1=>3 и 2=>3 в атоме водорода и для перехода 1=>2 в ионе гелия.

Литература

1. *Островский Н.В.* Об энергии импульса электромагнитного излучения (электронный переход в атоме водорода).// Труды VII Международного симпозиума по электромагнитной совместимости и электромагнитной экологии. Санкт-Петербург, 26-29 июня 2007 г. – СПб: издательство Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета «ЛЭТИ», 2007, с. 218-221.

http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1354 http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper_e.php?p=1354

МОДЕЛЬ ПОСУТОЧНОЙ ДИНАМИКИ ^{90}SR В ПОЧВЕ И ДРЕВЕСНОМ ЯРУСЕ ДУБРАВЫ

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

Построена модель посуточной динамики ^{90}Sr в экосистеме дубравы. Модель состоит из 4-х модулей, в которых отображается динамика органического вещества, содержания Ca и ^{90}Sr в основных компонентах древостоя и почве. Поведение ^{90}Sr определяет динамика органического вещества. ^{90}Sr распределяется между компонентами дерева

MODEL OF THE DAILY DYNAMICS OF ^{90}SR IN THE SOIL AND WOOD FLOOR OF OAK FOREST

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

A model of the daily dynamics of ^{90}Sr in the oak ecosystem. The model consists of 4 modules, which shows the dynamics of organic matter, the content of Ca and ^{90}Sr in the main components of wood stand and soil. Organic matter dynamics determines the ⁹⁰Sr behavior. ^{90}Sr allocated between the components of a tree like the chemical analogue - Ca.

подобно своему химическому аналогу – Ca. Проведены численные эксперименты по имитации ряда возможных радиологических ситуаций. Дано определение роли почвы и компонентов древесной растительности и потоков между ними в биологическом круговороте ^{90}Sr

Numerical experiments on imitation of a number of possible radiological emergencies. The definition of the role of soil and the components of the wood vegetation and flows between them in the biological cycle of ^{90}Sr

В рамках дальнейшей реализации проекта ECORAD построена имитационная модель посуточной динамики ^{90}Sr в экосистеме дубравы. Работа с предшествующей версией модели, в которой процессы поведения радионуклида воспроизводились с шагом в 1 год [1], выявила недостаточную функциональность алгоритма при столь крупном шаге. В первую очередь это выразилось в невозможности учета взаимного компенсирования встречных потоков, а следовательно в очень приближенной оценке их интенсивности. При таком шаге по времени нельзя было также учесть наличие обратных, регуляторных связей между компонентами древостоя и адекватно воспроизвести перераспределение ^{90}Sr между ними.
При построении модели за основу был использован алгоритм нашей модели посуточной динамики ^{137}Cs в аналогичной экосистеме [2], переработанный с учетом различий в поведении радиоцезия и ^{90}Sr в почве и растительном покрове. Модель состоит из 4-х модулей, в которых отображается почасовая динамика углерода органического вещества и посуточная динамика содержания Ca и ^{90}Sr в основных компонентах древостоя (листва, ветви крупные и мелкие, древесина ствола, кора наружная (корка или ретидом) и внутренняя (флоэма или луб), корни крупные и мелкие) и содержания форм биологически доступного и недоступного ^{90}Sr в почве. Идентификация параметров модели и ее проверка проводились с использованием данных по поведению ^{90}Sr в лесных экосистемах лиственных лесов, расположенных на территориях Кыштымской и Чернобыльской радиационных катастроф.
Основные положения использованного алгоритма:
-рассматривается отдельно наружное и внутреннее загрязнение компонентов древостоя;
- физический носитель радионуклида – органическое вещество, динамика которого в первую очередь и определяет поведение ^{90}Sr;
- ^{90}Sr распределяется между компонентами дерева подобно своему химическому аналогу - Ca;
- используется фиктивный, всегда «пустой» компонент – распределительный пул, после поступления в который ^{90}Sr из почвы или других компонентов древостоя, радионуклид сразу распределяется между структурными частями древостоя в соответствии с двумя предыдущими положениями.
Модель точечная, детерминированная с элеменами стохастичности (для правдоподобного воспроизведения метеорологических условий используются рандомизация и вероятностные закономерности выпадения атмосферных осадков, определенные мной для данного региона по многолетним данным). Модель реализована в Visual Basic. Выдача результатов моделирования осуществляется в текстово-цифровом или графическом виде.
С моделью были проведены численные эксперименты по имитации ряда возможных радиологических ситуаций. С помощью данной модели рассчитана многолетняя динамика содержания ^{90}Sr в компонентах древостоя и почве и величин потоков между ними, суммированных по годам. Дано определение роли почвы и компонентов древесной растительности и потоков между ними в биологическом круговороте этого радионуклида.

Литература

1. *Мамихин С.В., Никулина М.В.* Имитационная модель поведения ^{90}Sr в почве и древесном ярусе соснового леса // Радиационная биология. Радиоэкология., т. 45, №4, 2005, с. 218 – 226.
2. *Мамихин С.В., Никулина М.В., Манахов Д.В.* Механизмы сезонной и мно-голетней динамики радиоактивных изотопов цезия в экосистеме дубового леса // Проблемы радиоэкологии и пограничных дисциплин /Ред. Мигунов В.И., Трапезников А.В.. Вып.6. Заречный, 2005. С. 292 – 308.

http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1330 http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper_e.php?p=1330

МОДЕЛЬ ИЗМЕНЕНИЯ ПОТЕНЦИАЛА ДЕЙСТВИЯ В НЕРВНОМ ВОЛОКНЕ

Богатов Н.М., Григорьян Л. Р., Понетаева Е. Г.
Кубанский государственный университет

Представлено обобщение модели распространения потенциала действия с учетом генерации потенциала в каждом участке волокна. Проанализирован характер изменения формы импульсного сигнала в процессе распространения. Показано, что механизм распределенной генерации заряда в нервном волокне приводит к уменьшению фазовой скорости распространения сигнала. В процессе распространения происходит уменьшение амплитуды и увеличение ширины импульса потенциала действия

MODEL OF CHANGES OF THE ACTION POTENTIAL IN NERVE FIBER

Bogatov N.M., Grigoyan L., Ponetaeva E.
Kuban State University

This article introduces generalization of the action potential spreading model which considers generation of the action potential in each segment of the nerve fiber. Behavior of the impulse signal waveform during the propagation process was analyzed. A mechanism of distributed generation of the charge in nerve fiber results in decrease of phase velocity of signal spreading rate. Amplitude of the action potential decreases and pulse width increases in the action potential propagation process

Электрическая природа нервного импульса доказана в работах Ходжкина, Хаксли с сотрудниками [1 – 3]. Моделирование биоэлектрических явлений – одно из современных направлений изучения процессов, протекающих в живых электровозбудимых структурах [4, 5]. В работе [6] разработана солитонная модель изменения трансмембранного потенциала нервного волокна при распространении по нему возбуждения. Точное аналитическое решение задачи распространения нервного импульса в рамках модели Ходжкина-Хаксли на основе интегрального преобразования Лапласа и теоремы Эфроса, когда входной импульс возбуждения отклоняется от ступенчатой функции Хевисайда, получено в [7].

Целью данной работы является обобщение модели распространения потенциала действия с учетом генерация потенциала в каждом участке волокна и анализ изменения сигнала, когда форма импульса возбуждения соответствует реально наблюдаемой.

В результате моделирования распространения потенциала действия с учетом генерации потенциала на каждом участке волокна показано, что генерация заряда в нервном волокне обусловливает увеличение эффективной длины и уменьшение фазовой скорости распространения сигнала, так что эффективное время распространения сигнала возрастает. Отсюда следует, что механизм распределенной генерации заряда в нервном волокне не выгоден, так как приводит к замедлению реакции биологического объекта.

Характерными закономерностями являются уменьшение амплитуды и увеличение ширины импульса потенциала действия. Сигнал, содержащий только низкочастотные составляющие, сохраняет свою форму в каждом координатном сечении, уменьшаясь по амплитуде. Увеличение ширины и асимметрии импульсного сигнала в процессе распространения обусловлено суперпозицией высоких частот.

Типичный импульс возбуждения имеет знакопеременную форму. В этом случае координатная зависимость потенциала действия во временных сечениях $t' = const$ может иметь как монотонный, так и немонотонный характер, обусловленный формой возбуждающего импульса, а также тенденциями уменьшения амплитуды и увеличения ширины импульса потенциала действия в процессе распространения по нервному волокну.

Литература

1. *Hodgkin A. L., Rushton W. A. H.* The electrical constants of a crustacean nerve fibre // Proc. Roy. Soc. London. 1946. Ser B. V. 133. P. 444-479.
2. *Hodgkin A. L., Huxley A. F. A* quantative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve // J. Physiol. (London). 1952. V. 117. N4. P. 500-544.
3. *Frankenhaeuser B., Huxley A.* The action potential in the myelinated nerve fibre of Xenopus Laevis as computed on the basis of voltage clamp data // J.Physiol. 1964. N2. P. 302-315.
4. *Abbott L. F., Kepler T. B.* Model neurons: from Hodgkin-Huxley to Hopfield // Statistical Mechanics of Neural Networks, L. Garrido, ed., no. 368 in Lecture notes in Physics, Springer-Verlag, 1990. P. 5-18.
5. *Dominique Debanne.* Information processing in the axon // Nature Reviews Neuroscience. 2004. V.5. N4. P. 304-316.
6. *Максименко Е.В.* Об использовании математических методов в биологических исследованиях // Обозрение прикладной и промышленной математики. 2005. Т. 12. Вып. 2. С. 431-432.
7. *Селезов И.Т., Морозова Л.В.* Обобщение задачи возбуждения и распространения потенциала действия по нервному волокну // Прикладна гідромеханіка. 2010. Т. 12. N. 3. С. 75-83.

http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1333 http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper_e.php?p=1333

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИХ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ДЛЯ РАСЧЕТА ЭНТАЛЬПИЙ ОБРАЗОВАНИЯ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ

Зауэр Е.А.
Волгоградский государственный технический университет

THE USE OF SEMI-EMPIRICAL QUANTUM-CHEMICAL METHODS FOR CALCULATION OF ENTHALPIES OF FORMATION OF NITROGEN-CONTAINING POLYCYCLIC AROMATIC HYDROCARBONS IN THE GASEOUS PHASE

Zauer E.A.
Volgograde State Technical University

Сравнением рассчитанных полуэмпирическими квантово-химическими методами энтальпий образования ~20 азотсодержащих полициклических ароматических углеводородов и их экспериментальных значений в газовой фазе показано, что наилучшая корреляция между ними наблюдается при использовании метода AM1.

Comparison of experimental enthalpies of formation of about 20 nitrogen-containing polycyclic aromatic hydrocarbons in the gaseous phase with those calculated by semiempirical quantum- chemical methods has shown that AM1 approximation ensures the best agreement between experimental and calculated values.

Квантово-химические методы расчета широко используются для определения энтальпий образования соединений разных классов. Они особенно удобны для расчетов больших молекул.

В данной работе с помощью полуэмпирических квантово-химических методов выполнен расчет энтальпий образования азотсодержащих полициклических ароматических углеводородов (NПАУ) в газовой фазе.

Для выбора метода квантово-химического расчета с помощью программы MOPAC, в которую входят методы PM3, MINDO, AM1 и MNDO, были выполнены полная оптимизация геометрии и рассчитаны энтальпии образования порядка 20 NПАУ, для которых известны экспериментальные значения энтальпий образования в газовой фазе.

Анализ полученных результатов показал, что наилучшая корреляционная связь между экспериментальными и расчетными значениями энтальпий образования имеет место при использовании метода AM1. Зависимость носит линейный характер и может быть использована для прогнозирования энтальпий образования NПАУ в газовой фазе, экспериментальные значения для которых не определены.

http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1349 http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper_e.php?p=1349

ТАМОКСИФЕН – НОВЫЕ МОЛЕКУЛЯРНЫЕ МЕХАНИЗМЫ ДЕЙСТВИЯ

Дудко Е.А., Раманаускайте Р.Ю., Вихлянцева Н.О., Коломийцев С.Д., Богуш Т.А.
Российский Онкологический Научный Центр им. академика Н.Н.Блохина РАМН

Экспериментальные работы, раскрывающие новые биологические эффекты воздействия тамоксифена на опухолевые клетки, экспрессирующие и неэкспрессирующие эстрогеновые рецепторы, позволяют по-новому взглянуть на хорошо известный препарат. В докладе представлены данные о мишенях тамоксифена, блокирование которых вызывает ингибирование роста опухолевых клеток и ангиогенеза, стимулирование апоптоза, ингибирование механизма множественной лекарственной резистентности и торможение метастазирования

TAMOXIFEN - THE NEW MOLECULAR MECHANISMS OF ACTION

Dudko E., Ramanauskayte R., Vikhlyantseva N., Kolomiytsev S., Bogush T.
N.N.Blokhin Russian Oncological Scientific Center of Russian Academy of Medical Sciences

Experimental works demonstrating new biological action of tamoxifen on tumor cells, expression and non-expression estrogen receptors, allow us to take a fresh look at this well-known preparation. The report presents data on tamoxifen targets which blocking causes inhibition of tumor cells growth and angiogenesis, stimulation of apoptosis, inhibition of multi-drug resistance mechanism and inhibition of metastasis

Экспериментальные работы, раскрывающие всё новые и новые биологические эффекты воздействия тамоксифена на опухолевые клетки как экспрессирующие, так и неэкспрессирующие эстрогеновые рецепторы, позволяют по-новому взглянуть на, казалось бы, хорошо известный препарат. В обзоре описаны мишени тамоксифена, блокирование которых вызывает ингибирование роста опухолевых клеток и процесса ангиогенеза, стимулирование программированной смерти клеток (апоптоза, аутофагии и некроза), ингибирование механизма множественной лекарственной резистентности, торможение инвазии и метастазирования. Так как во всех случаях последствия взаимодействия тамоксифена с клетками являются прогностически благоприятными, как с точки зрения торможения роста опухоли и её метастазирования, так и с точки зрения чувствительности к лекарственной терапии, авторы рассматривают это как чрезвычайно важное «добавление» к антиэстрогенному эффекту тамоксифена. Приведены аргументы, которые позволяют считать стратегию длительной адъювантной терапии тамоксифеном, созданную ещё в 70 годах XX века профессором Craig V. Jordan для лечения рака молочной железы с позитивным статусом эстрогеновых рецепторов, применимой и для других опухолей. Это, прежде всего, описанный в последние годы факт экспрессии в солидных опухолях практически всех известных локализаций и гистологических типов эстрогеновых рецепторов бета, которые также являются мишенью тамоксифена. Авторы считают, что для полной реализации всех сторон биологической активности тамоксифена при длительной адъювантной терапии злокачественных новообразований разных локализаций, помимо оценки эстрогеновых рецепторов, необходим молекулярно-биологический отбор больных с учётом экспрессии других клеточных мишеней антиэстрогена.

http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1337 http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper_e.php?p=1337

БЕЛКИ МНОЖЕСТВЕННОЙ ЛЕКАРСТВЕННОЙ РЕЗИСТЕНТНОСТИ КАК МОЛЕКУЛЯРНЫЕ МИШЕНИ ТАМОКСИФЕНА, ОТЛИЧНЫЕ ОТ ЭСТРОГЕНОВЫХ РЕЦЕПТОРОВ

Дудко Е.А., Равчеева А.Б., Конухова А.В., Коломийцев С.Д., Богуш Т.А.
Российский Онкологический Научный Центр им. академика Н.Н.Блохина РАМН

Антиэстрогенный препарат тамоксифен (Там), показывая непревзойденную эффективность в лечении рака молочной железы, обладает также другими важными свойствами, одно из которых . преодоление множественной лекарственной резистентности. Показано, что взаимодействие Там с Pgp,MRP1 и LRP в опухолевых клетках может приводить к уменьшению связывания противоопухолевых препаратов с MDR-белками таким образом ингибируя множественную

MULTIDRUG RESISTANCE PROTEINS AS TAMOXIFEN MOLECULAR TARGETS DIFFERENT FROM ESTROGEN RECEPTORS

Dudko E., Ravcheeva A., Konyukhova A., Kolomiytsev S., Bogush T.
N.N.Blokhin Russian Oncological Scientific Center of Russian Academy of Medical Sciences

While demonstrating unsurpassed efficiency in breast cancer treatment the antiestrogenic preparation tamoxifen (Tam) also exhibits other important properties one of which is overcoming of multi-drug resistance. It is shown that interaction of Tam with Pgp,MRP1 and LRP in tumor cells can lead to reduction of anticancer drugs binding with MDR-proteins thus inhibiting the multi-drug resistance by reducing of medicines transportation from cells

лекарственную резистентность путем уменьшения транспорта лекарств из клеток

Цель: Антиэстрогенный препарат тамоксифен (Там), показывая непревзойденную эффективность в лечении рака молочной железы, обладает также другими важными свойствами, одно из которых – преодоление множественной лекарственной резистентности. Размышляя над причинами этого феномена, мы предположили, что механизм такого эффекта – связывание Там с транспортерами, выбрасывающими из клетки лекарства и ассоциированными с множественной лекарственной резистентностью (MDR), а также с белком частиц “vaults” LRP.
Материалы и методы: С помощью проточной цитофлуориметрии исследовано влияние Там на связывание моноклональных антител (АТ) с Pgp (4E3), MRP1 (MRPm5), а также LRP (LMR5) в клеточных культурах с гиперэкспрессией этих белков: Т-лимфобластном лейкозе линии Jurkat и раке шейки матки линии HeLa. Средняя флуоресценция и количество окрашенных АТ клеток рассчитывали по отношению к изотипическому контролю.
Результаты: 1. При инкубации клеток с АТ интенсивность флуоресценции и количество окрашенных клеток значительно увеличивались. 2. Тамоксифен никак не влиял на окрашивание клеток изотипическими антителами. 3. При инкубации клеток с Там в концентрации 50x10-6M изменялось взаимодействие АТ с белками. Изменение средней специфической флуоресценции, а также количества окрашенных клеток для разных MDR-маркеров происходило не одинаково. Воздействие тамоксифена приводило к уменьшению параметров окрашивания MRP1 и LRP более чем в 2 раза. Тогда как параметры окрашивания Pgp, наоборот, увеличивались после воздействия Там: специфическая флуоресценция и количество окрашенных клеток были больше приблизительно в 4 раза.
Выводы: Полученные данные являются прямым свидетельством взаимодействия Там с Pgp, MRP1 и LRP в опухолевых клетках. Такой эффект Там должен приводить к уменьшению связывания противоопухолевых препаратов с MDR-белками таким образом ингибируя множественную лекарственную резистентность путем уменьшения транспорта лекарств из клеток. Это может служить подтверждением нашего предположения, что взаимодействие Там с Pgp, MRP1 и LRP является одной из причин преодоления резистентности при воздействии Там в клинике. Это заключение справедливо только для опухолей экспрессирующих MDR-фенотип, что может объяснить невозможность увеличить чувствительность опухолевых клеток у некоторых пациентов.
Поддержано РФФИ и стипендией Президента РФ (№13-04-011004-а и №12-04-00028-а; СП-376.2012.4).

http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1338 http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper_e.php?p=1338

ПОЛОВЫЕ РАЗЛИЧИЯ ЭКСПРЕССИИ ЭСТРОГЕНОВЫХ РЕЦЕПТОРОВ БЕТА В ТКАНИ НЕМЕЛКОКЛЕТОЧНОГО РАКА ЛЕГКОГО

Дудко Е.А., Шатурова А.С., Богуш Т.А.
Российский Онкологический Научный Центр им. академика Н.Н.Блохина РАМН

GENDER DIFFERENCES OF ESTROGEN RECEPTOR BETA EXPRESSION IN NON-SMALL CEL LUNG CANCER

Dudko E., Shaturova A., Bogush T.
N.N.Blokhin Russian Oncological Scientific Center of Russian Academy of Medical Sciences

Эстрогеновые рецепторы бета (ЭР бета) являются благоприятным прогностическим маркером течения немелкоклеточного рака легкого (НМРЛ). ЭР бета в опухолевой ткани может быть одной из причин половых различий в прогнозе заболевания. Показано, что, по меньшей мере, половина пациентов с НМРЛ характеризуется высоким и средним уровнем экспрессии ЭР бета. Более высокий уровень экспрессии ЭР бета в опухолях женщин, по сравнению с мужчинами, может быть одной из причин половых различий в течении НМРЛ

Estrogen receptors beta (ER beta) are a predictive marker of non-small cells lung cancer (NSCLC) development. ER beta in tumor tissue can be one of the causes of sexual dimorphism in the disease prognosis. It was demonstrated that at least half of the patients with NSCLC were characterized by high and middle level of ER beta expression. The higher ER beta expression level in women tumors (in comparison to men) can be one of the causes of sexual dimorphism in NSCLC development

Цель: Эстрогеновые рецепторы бета (ЭР бета) являются благоприятным прогностическим маркером течения немелкоклеточного рака легкого (НМРЛ). Более того, в опытах in vitro было продемонстрировано ингибирование антиэстрогенами пролиферации клеток, экспрессирующих ЭР бета. Очевидно, что ЭР бета являются важным патогенетическим фактором НМРЛ и мишенью для антиэстрогеновой терапии. Имея в виду различное течение НМРЛ у мужчин и женщин, мы предположили, что разный уровень экспрессии ЭР бета в опухолевой ткани может быть одной из причин половых различий в прогнозе заболевания. Нами был разработан иммунофлуоресцентный метод количественного определения экспрессии ЭР бета, который и был использован для анализа ткани НМРЛ.
Материалы и методы: Хирургические биопсийные образцы НМРЛ 32 пациентов (16 мужчин и 16 женщин) были проанализированы иммунофлуоресцентным методом с использованием проточной цитофлуориметрии. Одноклеточные суспензии, полученные из опухолевого материала, инкубировали с первичными антителами (специфичным к ЭР бета 14C8 или изотипическими IgG2a, Abcam) в течение ночи, и с вторичными FITC-конъюгированными антителами (F2772, Sigma) в течение 1,5 ч. Средняя флуоресценция клеток и число окрашенных клеток анализировали с помощью программы WinMDI и статистического критерия Колмогорова-Смирнова. Экспрессия ЭР бета оценивалась как отношение специфического параметра к изотипическому.

Результаты: В целом экспрессия ЭР бета обнаружена в ткани НМРЛ 80% пациентов. Высокий уровень экспрессии ЭР бета (более чем в 50% клеток) чаще выявлялся в опухоли женщин, чем мужчин – в 31 и 6% пациентов, соответственно. Средний уровень экспрессии ЭР бета (в 30 49% клеток) также чаще обнаруживался у пациентов женского пола, чем мужского – в 50 и 31% случаев, соответственно. Напротив, низкий уровень экспрессии ЭР бета (менее чем в 29% клеток) чаще обнаруживался в НМРЛ мужчин (63%), а не женщин (19%). Аналогичные половые различия были показаны и для высокой, и для низкой интенсивности экспрессии ЭР бета.
Выводы: НМРЛ большинства пациентов характеризуется экспрессией ЭР бета. По меньшей мере, половина пациентов с НМРЛ характеризуется высоким и средним уровнем экспрессии ЭР бета. Более высокий уровень и интенсивность экспрессии ЭР бета в опухолях женщин, по сравнению с мужчинами, может быть одной из причин половых различий в течении НМРЛ.
Поддержано РФФИ и стипендией Президента РФ (№13-04-011004-а и №12-04-00028-а; СП-376.2012.4 и СП-359.2012.4).

http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1339 http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper_e.php?p=1339

МАРКЕР МНОЖЕСТВЕННОЙ ЛЕКАРСТВЕННОЙ РЕЗИСТЕНТНОСТИ PGP КАК ПАТОГЕНЕТИЧЕСКИ ФАКТОР НЕМЕЛКОКЛЕТОЧНОГО РАКА ЛЕГКОГО

Дудко Е.А., Семаков А.В., Раманаускайте Р.Ю., Вихлянцева Н.О., Богуш Т.А.
Российский Онкологический Научный Центр им. академика Н.Н.Блохина РАМН

Р-гликопротеин (Pgp) . АТФ-зависимый транспортный белок, способный вызывать развитие множественной лекарственной резистентности. При сравнении экспрессии Pgp в нормальной и опухолевой ткани лёгкого получены следующие результаты. Увеличение уровня Pgp в НМРЛ по сравнению с НТЛ, отсутствие различий экспрессии Pgp между НМРЛ и НТЛmts, а также снижение параметров в НТЛ по сравнению с НТЛmts говорит о том, что значение уровня и интенсивности экспрессии Pgp . важный патогенетический фактор НМРЛ

MULTIDRUG RESISTANCE MARKER PGP AS A PATHOGENETIC FACTOR OF NON-SMALL CELL LUNG CANCER

Dudko E., Semakov A., Ramanauskayte R., Vikhlyantseva N., Bogush T.
N.N.Blokhin Russian Oncological Scientific Center of Russian Academy of Medical Sciences

P- glycoprotein (Pgp) is an ATP-sensitive transport protein that can cause multi-drug resistance development. The following results were received after comparison of Pgp expression in normal and tumor lung tissue. Increase of Pgp level in NSCLC in comparison with normal lung tissue (NLT), lack of Pgp expression differences between NSCLC and NLTmts as well as parameters reduction in NLT in comparison with NLTmts indicates that Pgp expression level and intensity is an important pathogenetic factor of NSCLC

Цель: Р-гликопротеин (Pgp) – АТФ-зависимый транспортный белок с широкой субстратной специфичностью. Pgp предотвращает воздействие как канцерогенов из окружающей среды на клетки нормальных тканей, так и накопление лекарственных препаратов в клетках опухоли, вызывая развитие множественной лекарственной резистентности. Чтобы понять, является ли Pgp фактором, участвующим в канцерогенезе, мы сравнили параметры экспрессии Pgp в клетках нормальной ткани, окружающей опухоль (НТЛ), немелкоклеточного рака легкого (НМРЛ) и обе эти группы с параметрами в нормальной ткани, окружающей метастазы в легком опухоли другой первичной локализации (НТЛmts). Мы считаем, что НТЛmts интактна с точки зрения первичного канцерогенза и является самым подходящим контролем при сравнении с НМРЛ и НТЛ.
Материалы и методы: Клеточные суспензии, приготовленные из хирургических биопсиных образцов НМРЛ (100), НТЛ (92), НТЛmts (33), были проанализированы с использованием проточной цитофлуориметрии. Окрашивание проводили FITC-конъюгированными моноклональными антителами к внешнему эпитопу белка Pgp (клон 17F9). FITC-конъюгированный мышиный IgG2b в эквивалентных концентрациях использовали в качестве изотипического контроля (оба антитела Becton Dickinson). Средняя флуоресценция клеток и количество окрашенных клеток были определены с помощью программы WinMDI и статистического теста Колмогорова-Смирнова. Экспрессия Pgp оценивалась по двум параметрам: интенсивности (отношению специфической и изотипической флуоресценции клеток) и уровню экспрессии Pgp (проценту специфически окрашенных клеток).
Результаты: 1. Отмечено увеличение экспрессии Pgp в НМРЛ по сравнению с НТЛ; медианы уровня экспрессии маркера составили 48 и 32% (p=0,02) соответственно, медианы интенсивности различались в 1,4 раза (p=0,04). 2. Было показано, что нет различий по уровню (p=0,05) и интенсивности (p=0,03) экспрессии Pgp между клетками НМРЛ и НТЛmts. 3. Параметры экспрессии Pgp были снижены в НТЛ, по сравнению с НТЛmts (p□0,01 – для уровня; p=0,01 – для интенсивности).
Выводы: Увеличение уровня и интенсивности Pgp в НМРЛ по сравнению с НТЛ, отсутствие различий экспрессии Pgp между НМРЛ и НТЛmts, а также снижение параметров в НТЛ по сравнению с НТЛmts говорит о том, что значение уровня и интенсивности экспрессии Pgp – важный патогенетический фактор НМРЛ. Также мы считаем, что снижение параметров экспрессии Pgp в НТЛ может быть существенным фактором, способствующим процессу легочного канцерогенеза.
Поддержано РФФИ и стипендией Президента РФ (№13-04-011004-а и №12-04-00028-а; СП-376.2012.4).

http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1340 http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper_e.php?p=1340

ВЛИЯНИЕ НАНОПОКРЫТИЙ НА БИОЭЛЕКТРОГРАФИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ЧЕЛОВЕКА

Каменская В.Г., Деханова И.М., Томанов Л.В., Суворов А.И.
Российский государственный педагогический университет имени А.И.Герцена

В работе представлены результаты изучения влияния картин с нанопокрытием оксидом меди на биоэлектрографические параметры 28 девушек, ГРВ-записи создавались дважды в ходе эксперимента: на входе как показатели фонового состояния, после 30 минутной экспозиции картин с нанопокрытием Установлено достоверное увеличение площади свечения, уменьшение коэффициента формы в записях без фильтра при экспозиции двух полотен по сравнению с фоновыми параметрами

INFLUENCE OF NANOCOATINGS ON HUMAN BIOELECTROGRAHIC PARAMETERS

Kamenskaya V., Dekhanova I., Tomanov L., Suvorov A.
A.I.Herzen State Pedagogical University of Russia

The work presents the results of studies of the influence of pictures with nanocoating of copper oxide on bioelectrographic parameters of 28 girls A significant growth of the glow area and a decrease of the form coefficient in the series without filter at exposure of all canvases in comparison with the background parameters have been established

В работе представлены результаты изучения влияния картин с нанопокрытием оксидом меди на биоэлектрографические параметры 28 девушек, участвующих в различных ситуациях учебной и когнитивной деятельности. ГРВ-записи создавались дважды в ходе эксперимента: на входе как показатели фонового состояния, после 30 минутной экспозиции картин с нанопокрытием двух цветовых композиций: красной и синей, содержащей изображения цветов. ГРВ-записи обрабатывались в программах Energy и Laboratory в двух режимах регистрации (с фильтром и без фильтра), проводился сравнительный анализ фронтальных площади свечения, коэффициента формы, симметрии, энтропии, фрактальности по изолинии после экспозиции по сравнению с параметрами фонового состояния. Помимо ГРВ-записей фиксировалось психоэмоциональное и функциональное состояние испытуемых с помощью теста цветового предпочтения М.Люшера: вегетативный коэффициент (ВК) и отклонение от аутогенной нормы Вальнефера.
Установлено достоверное увеличение площади свечения, уменьшение коэффициента формы в записях без фильтра при экспозиции двух полотен по сравнению с фоновыми параметрами. Неслучайным образом увеличивается симметрия в записях без фильтра и коэффициент формы в записях с фильтром при воздействии полотна с красного цвета.
Многомерный факторный анализ, выполненный на массиве всех параметров, включающих ВК и отклонении от аутогенной нормы, удалось выполнить только по красной картине, т. к. влияние синей картины отличается более выраженной групповой вариативностью. Факторный анализ дал трехфакторное решение, три главных фактора которого включают 79% общей дисперсии. Первый и третий главных фактора (ГФ) содержат основные ГРВ-параметры до и после экспозиции, что свидетельствует о тесной связи биоэлектрографических параметров до и после экспозиции картин. Второй ГФ включает ВК и отклонения от аутогенной нормы и энтропию в записях без фильтра после воздействия красной картины. Это позволяет заключить, что психоэмоциональное и функциональное состояния тесно коррелируют с энтропией свечения как информационной составляющей свечения.
В целом полученный материал позволяет утверждать о позитивном воздействии картин с нанопокрытием на функциональное состояние и адаптационный ресурс человека после 30 минутной экспозиции. Улучшение субъективных показателей находит свое отражение в динамике объективных показателей ГРВ-свечения.

http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1345 http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper_e.php?p=1345

МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ НАДЕЖНОСТИ ПРОФЕССИОНАЛЬНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ АВИАЦИОННОЙ ТЕХНИКИ

Сомов М.В., Харитонов В.В.
Государственный летно-испытательный центр имени В.П.Чкалова

Изложена методика оценивания надежности профессиональной деятельности авиационных техников, подвергающихся воздействию авиационного шума, рассчитанная оценка должна использоваться в качестве критерия эффективности средств индивидуальной и коллективной защиты от таких факторов.

SURVEY METODOLOGY RELIABILITY PROFESSIONAL ACTIVITIES AERONAUTICAL ENGINEERING

Somov M.V., Haritonov V.V.
State flight-testing center of the Chkalov

The technique of estimating the reliability of the professional activity of aviation technicians affected by aircraft noise, calculated assessment should be used as a criterion for the effectiveness of individual and collective protection against such factors.

Установлено, в частности, что ошибочные и несвоевременные действия персонала при управлении сложными техническими объектами вызывают до 40% неблагоприятных исходов при испытаниях ракет, более 60% тяжелых происшествий на транспорте, до 80% аварий и катастроф в авиации [1, 2].
Эффективность профессиональной деятельности оператора по качеству его функционирования в производственном процессе, точности и своевременности действий, по достижению поставленных задач, т.е.

по конечному результату деятельности, характеризуются профессиональной надежностью.
Одной из причин снижения профессиональной надежности оператора является превышение на рабочем месте допустимых уровней физико-химических факторов (ФХФ) условий деятельности, обоснованных результатами физиолого-гигиенических исследований [3].
В работе [4] изложена концепция потенциальной ненадежности действий (ПНД) как вероятностной меры степени влияния на оператора ФХФ. Количественной основой этой меры является риск возникновения неблагоприятного эффекта (срыв деятельности, ошибочные действия). Поэтому были проведены теоретико-экспериментальные исследования потенциальной надежности действия авиационных специалистов, обслуживающих различные летательные аппараты.
Одним из ФХФ неблагоприятного действия на человека, обслуживающего авиационную технику (АТ), является шумовое воздействие.
Известно, что под воздействием шума надежность действий человека, выполняющего операторскую деятельность, снижается. Согласно [5], надежность человека-оператора – это его свойство сохранять способность осуществлять определенную деятельность с требуемым качеством в течение требуемого интервала времени, сохраняя требуемый уровень производительности. Нарушение деятельности является событием, имеющим определенную вероятность. В работе [4] эта вероятность определена как потенциальная ненадежность действия. В результате обработки данных экспериментальных исследований с использованием методов математической статистики получена математическая модель, описывающая зависимость ПНД от уровня звука, воздействующего на ИТС в течение летной смены, при подготовке ЛА к полетам, при опробовании двигателей после выполнения на АТ регламентных работ.
Структура этой модели представлена композицией двух усеченных нормальных функций распределения. Параметрами модели являются оценки математических ожиданий усеченных распределений M_1, M_2 и их среднеквадратические (стандартные) отклонения σ_1, σ_2 [6,7]. Параметрическая идентификация позволила определить параметры модели. Их численные значения равны: M_1=134,02; M_2=116,03; σ_1=42,00; σ_2=8,67; T=111,33. Оценку ПНД при работе в условиях, сопряженных с воздействием авиационного шума (L, дБА) рассчитывают как

$$ПНД=1–(0,0003167e^{0,061112L}+1,10521).$$

В целях установления влияния шума, действию которого подвергаются авиационные техники, обслуживающие самолеты и вертолеты различных родов авиации ВС РФ в течение летной смены, на их профессиональную работоспособность были составлены циклограммы работы ИТС, подвергающегося воздействию шума при работе авиадвигателей во время проведения полетов, при опробовании двигателей после выполнения на ЛА регламентных работ [8].
Основными элементами циклограммы являлись:
- время от момента запуска авиадвигателей ЛА до момента его выруливания со стартовой площадки;
- количество вылетов ЛА за летную смену;
- время, необходимое для подготовки самолета (вертолета) к полету специалистами других профессий, которые работают только со вспомогательным оборудованием.
Характеристикой непостоянного шума на рабочих местах является эквивалентный уровень звука в дБА. Эквивалентный (по энергии) уровень звука непостоянного шума $L_{экв}$- величина, равная уровню звука L_A постоянного шума, который имеет такое же среднеквадратичное звуковое давление, что и данный непостоянный шум в течение неопределенного интервала времени [9].
Таким образом, если известны циклограммы работы ИТС и характеристики шума на рабочих местах ИТС, можно посчитать по вышеприведенной методике вероятность потенциальной ненадежности действия авиационных специалистов, обслуживающих различные типы летательных аппаратов.
В табл. 1 приведены значения ПНД авиационных техников, подвергающегося воздействию шума от работы двигателей во время обеспечения полетов.

Таблица 1 – Оценки ПНД авиационных техников во время обеспечения полетов

Вид авиации	Время работы двигателей от запуска до выруливания, мин	Количество вылетов за летную смену	Общее время за летную смену	Уровень шума $L_{экв}$, дБА	ПНД, отн. ед
Истребительная	5-7	2-6	15-42	94-114	0,17-0,38
Фронтовая	7	3	21	107	0,21
Штурмовая	10-11	3-4	30-44	116-118	0,35-0,47
Дальняя	10-25	1-3	10-75	96-114	0,18-0,38
Военно-транспортная	8-15	2-4	16-60	105-112	0,24-0,31
Армейская	3-8	3-4	9-32	102-111	0,22-0,29

Из таблицы видно, что риск возникновения неблагоприятного эффекта наиболее выражен при обслуживании и подготовке к полетам АТ штурмовой, истребительной и дальней авиации (ПНД составляет до 38 – 47%).
В проведенном исследовании были использованы математические модели расчета оценки ПНД у авиационных специалистов, подвергающихся воздействию высокоинтенсивного шума во время летной смены.

Результаты исследования позволяют сделать заключение о прикладной значимости математической модели расчета вероятности ПНД, целесообразности её использования для оценивания ПНД авиационных техников при воздействии авиационного шума, образующегося на рабочих местах при обслуживании летательных аппаратов, и в качестве критерия эффективности средств индивидуальной и коллективной защиты от шума.

Литература

1. *Бодров В.А.* Психология и надежность: Человек в системах управления техникой. / В.А.Бодров, В.Я.Орлов. М.: ИП РАН, 1988. 288 с.
2. *Ушаков И.Б.* Паттерны функциональных состояний оператора. / И.Б.Ушаков, А.В.Богомолов, Ю.А.Кукушкин. М.: Наука, 2010. 390 с.
3. *Ушаков И.Б.* Потенциальная ненадежность действий оператора как характеристика с степени влияния физико-химических факторов условий деятельности / И.Б.Ушаков, Ю.А.Кукушкин, А.В.Богомолов, В.Н.Карпов // Безопасность жизнедеятельности. 2001. №1. С.24 – 29.
4. *Ушаков И.Б.* Физиология труда и надежность деятельности человека. / И.Б.Ушаков, А.В.Богомолов, Ю.А.Кукушкин. М.: Наука, 2008. 318 с.
5. *Энциклопедический* справочник по авиационной эргономике и экологии. М.: Изд-во ИП РАН, 1997.508 с.
6. *Богомолов А.В.* Диагностика состояния человека: математические подходы / А.В.Богомолов, Л.А.Гридин, Ю.А.Кукушкин, И.Б.Ушаков. М.: Медицина, 2003. 464 с.
7. *Кукушкин Ю.А.* Методика оценивания умственной работоспособности и надежности профессиональной деятельности специалистов, подвергающихся воздействию авиационного шума / Ю.А.Кукушкин, С.К.Солдатов, В.Н.Зинкин и др. // Биомедицинская радиоэлектроника. 2008. №1-2. С.50 – 56.
8. *Щербаков С.А.* Методическое обеспечение и результаты исследования акустической обстановки на рабочих местах специалистов, подвергающихся воздействию авиационного шума / С.А.Щербаков, Ю.А.Кукушкин, С.К.Солдатов и др. // Биомедицинская радиоэлектроника. – 2007. – №12. С. 21–27.
9. *Измеров Н.Ф*. Человек и шум. / Н.Ф.Измеров, Г.А.Суворов, Л.В.Прокопенко. М.: ГЕОТАР-МЕД, 2001.384 с.

http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1347 http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper_e.php?p=1347

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ БИОМЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ЛЕВОЙ КОРОНАРНОЙ АРТЕРИИ ЧЕЛОВЕКА

Зарецкий А.П.
Московский государственный технический университет им. Н.Э.Баумана

Представлены результаты математического моделирования биомеханических характеристик левой коронарной артерии, проведенного для синтеза системы поддержки принятия решений кардиохирургом.

MATHEMATICAL MODELING OF BIOMECHANICAL PARAMETERS OF THE LEFT CORONARY ARTERY OF HUMAN

Zareckij A.P.
The Bauman Moscow State Technical University

The results of mathematical modeling of biomechanical characteristics of the left coronary artery, conducted for the synthesis of a decision support a heart surgeon.

Одной из важных проблем медицинской информатики является разработка систем поддержки принятия решений о целесообразности и тактике оперативных хирургических вмешательств. К числу наиболее значимых социально значимых заболеваний, часто требующих оперативного вмешательства, является стеноз левой коронарной артерии (ЛКА). Существенным для обеспечения поддержки принятия названных решений является математическое моделирование биомеханических характеристик стенозированной артерии и различных вариаций геометрических характеристик стеноза.

Биомеханические параметры и геометрические характеристики, являющиеся исходными данными для моделирования, представлены в [1]. На основе этой информации построен каркас модели, из которого выделен интересующий участок ЛКА при условии допущений: толщина стенозированного участка в продольном и окружном направлениях одинакова; механические параметры стенозированной стенки сосуда идентичны биомеханическим параметрам анатомически нормальной стенки ЛКА; стеноз является осесимметричным в продольном и окружном направлениях; давление в месте стеноза принимается большим на 15%, чем на других участках ЛКА.

Затем создан каркас стенозированной ЛКА с учетом его геометрических особенностей [1]. По результатам анализа клинических рекомендаций по стентированию сосудов [2], сделан вывод о том, что целесообразным является варьирование таких характеристик, как отношение диаметра стенозированного участка к диаметру анатомически нормального участка, радиус кривизны переходного сегмента, длина стеноза расположение стеноза относительно начала сосуда. Анализ построенной математической модели каркаса стенозированной ЛКА показывает, что минимумы всех биомеханических параметров (перемещения, деформации и напряжения) имеют локализацию, симметричную относительно середины ЛКА. Важно отметить, что максимумы биомеханических параметров расположены на внутренней оболочке ЛКА – интиме, что является доказательством важности учета при моделировании комплекса «интима-медиа».

Следующим шагом моделирования было исследование зависимости максимальных биомеханических параметров при изменении процента сужения сосуда, или степени стеноза, а также его удаления от начала

сосуда.
Такое моделирование, основанное на формальных оценках стеноза (coronary stenosis index – CSI) [3], выполнено с фиксированным внутренним диаметром анатомически нормального просвета ЛКА, с последующим сравнением полученных зависимостей максимальных биомеханических параметров при изменении CSI и удалённости стеноза от начала ЛКА. Важно отметить, что давление в стенозированном участке считается постоянным, несмотря на гемодинамические особенности, происходящие в ЛКА с увеличеснием CSI.
Как отмечалось в ранних работах, давление не вносит серьёзных изменений ни в один из биомеханических параметров ЛКА, поэтому принятое допущение о постоянстве давление признано корректным. Моделирование проводили при изменении CSI от 10% до 90% с шагом в 10% (такой шаг удовлетворяет условиям поставленной задачи). Протяжённость стеноза принята равной 10 мм, при этом длина сосуда считалась равной 50 мм.
Анализируя результаты, можно сделать вывод, что лишь при степени стеноза 90% наблюдается скачок всех биомеханических параметров. В целом же, необходимо отметить, что полученные результаты коррелируют с прогнозируемыми. Необходимо заметить, что при всех значениях zst и CSI отмечены максимумы биомеханических параметров именно на границе (на внешней или внутренней поверхностях) стенозированного участка и анатомически нормального, что служит косвенной предпосылкой к необходимости коррекции стенозированного участка ЛКА стентом длины, превышающей длину стеноза.
Косвенным доказательством необходимости применения стентов, имеющих длину большую, чем длина стеноза является то, что максимум биомеханических параметров имел локализацию на стыке стенозированного и анатомически нормального участка.
Важным фактором, обусловливающим гемодинамическую этимологию стеноза, является так называемая «форма стеноза» [4]. Иными словами, радиус кривизны переходного от нормального к стенозированному участка является одним из факторов, влияющих на гемодинамику потока, что обусловливает и объем данных, необходимых оперирующему кардиохирургу. Ввиду гемодинамической важности оценки переходного участка [5], проведено исследование зависимости максимальных биомеханических параметров от изменяющегося радиуса кривизны переходного участка и длины стеноза.
Анализируя результаты, показано, что при изменении длины и радиуса максимальное изменение перемещений составляет 4.5%, деформаций – 5% и напряжений – 3%. Представленные результаты могут свидетельствовать о незначительном влиянии таких геометрических характеристик, как длина стеноза и радиус переходного участка, на биомеханические характеристики стенозированного сосуда. Однако необходимо подчеркнуть, что в проведенном исследовании, связанным с изменением геометрических характеристик, максимум всех биомеханических параметров (перемещения, деформации, напряжения) наблюдается именно на переходном участке (стыке) от нормальному к стенозированному участкам.
Результаты позволили сделать вывод о том, что влияние граничных условий на моделирование стеноза и его нагрузочного влияния на стент несущественно. Кроме того, доказано влияние длины стеноза, радиуса кривизны переходного участка и степени стеноза на биомеханические параметры сосуда, которые будут являться нагрузочными факторами для стента при операции.

Литература

1. *Парашин В.Б., Зарецкий А.П.* Биомеханическое моделирование осесимметричного стеноза левой коронарной артерии // Российский журнал биомеханики. 2013. Т. 17. № 2 (60). С. 21-30.
2. *Serruys P.W., Morice M.C., Sousa J.E. et al.* The RAVEL study: a randomized study with the sirolimus coated Bx velocity balloonexpandable stent in the treatment of patients with de novo native coronary artery lesions // Eur. Heart J. 2001. V. 22, 484. P. 2624.
3. *Van den Brand M.J., Rensing B.J., Morel M.A. et al.* The effect of completeness of revascularization on event-free survival at one year in the ARTS trial // J. Am. Coll. Cardiol. 2002. V. 39. P. 559–564
4. *Зарецкий А.П.* Численное моделирование стеноза коронарной артерии // Молодежный научно-технический вестник, эл. № ФС77-51038. 2012. http://sntbul.bmstu.ru/doc/475703.html
5. *Зарецкий А.П., Парашин В.Б.* Численное моделирование коронарного кровотока // Доклады VIII Российско-Баварской конференции по Биомедицинской инженерии. 2012. С. 234-238.

http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1352 http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper_e.php?p=1352

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА В ПОЛЕ СИЛ ТЯЖЕСТИ

Крылов А.Ф., Тен Г.Н.
Российская Академия народного хозяйства и государственной службы, Поволжский институт управления им. П.А. Столыпина

THERMODYNAMIC FUNCTIONS OF THE IDEAL GAS IN THE GRAVITY FIELD

Krylov A.F., Ten G.N.
The Russian Academy of National Economy and Public Administration, Volga Management Institute

Записаны основные уравнения и соотношения для вычисления термодинамических функций идеального газа в поле сил тяжести.

Written basic equations and relations for calculation thermodynamic functions of ideal gas in gravity field.

Записаны основные уравнения и соотношения для вычисления термодинамических функций идеального газа в поле сил тяжести.

В уравнении для квазистатических процессов

$$\delta Q = dU + \delta W \qquad (1)$$

присутствует функция состояния – внутренняя энергия U, определяемая в случае идеального газа в отсутствии поля сил тяжести через температуру соотношением

$$U = CvT, \qquad (2)$$

где Cv – теплоемкость при постоянстве объема, равная в случае одноатомного газа (3/2)kN (N- полное число частиц в системе). Элементарная работа, по определению [1], есть дифференциальная форма $\sum Aidai$, в общем случае не приводящаяся к полному дифференциалу какой-либо функции, аргументами которой являются температура и внешние параметры ai (i = 1,2, …). Учитывая, что элементарное количество теплоты, получаемое системой при квазистатических процессах, связано с полным дифференциалом энтропии как функции состояния соотношением δQ=TdS, дифференциальное уравнение можно записать как

$$dS = (1/T)[d(CvT) + (kNT/V)dV]. \qquad (3)$$

Пусть мы имеем заполненный газом сосуд, имеющий форму цилиндра радиуса R с подвижным поршнем, положение которого характеризуется расстоянием h между ним и основанием цилиндра. Тогда уравнение (3) можно представить в виде

$$dS = (1/T)[d(CvT) + (kNT/h)dh]. \qquad (4)$$

Результатом интегрирования уравнения (4) является функция

$$S = Cv\ LnT + kNLnh.$$

При наличии поля сил тяжести с тем же газом в вертикально расположенном цилиндрическом сосуде решение аналогичной задачи усложняется. Выражение внутренней энергии идеального газа, согласно ее определению [1], своей структуры не меняет. Согласно определению элементарной работы

$$\delta W = \sum Aidai \qquad (5)$$

где под ai понимают все внешние параметры, в том числе и напряженности внешних силовых полей. Напряженность поля сил земного тяготения (ускорение свободного падения g) является внешним термодинамическим параметром. Если макросистема не перемещается вдоль земного меридиана, ускорение свободного падения неизменно. В этом случае, согласно (5),

$$W = Fdh , \qquad (6)$$

где F – сила давления, действующая со стороны газа на поршень.
Сила давления вычисляется как

$$F = Ph\ (\ \pi R2). \qquad (7)$$

Распределение давления внутри столба газа по высоте связано с распределением частиц газовой системы и описывается формулой

$$Ph = kTno\ exp(-mg/kT), \qquad (8)$$

в которой no – плотность числа частиц около основания цилиндра.
Вычисление F приводит к результату:

$$F = [kNT\ (-mg/kT)exp(-\ mgh/kT)]/[exp(-mgh/kT)\ -\ 1], \qquad (9)$$

т.е.

$$F=Tf(T,h). \qquad (10)$$

Таким образом, в рассматриваемом примере уравнение

$$\delta Q = dU + \delta W$$

принимает вид

$$\delta Q=CvdT+Tf(T,h)dh. \qquad 11)$$

Поскольку равенство δQ = TdS носит универсальный характер,
дифференциальная форма

$$(1/T)[CvdT+Tf(T,h)dh] \qquad (12)$$

также должна быть полным дифференциалом S(T,h). Но выражение d(Cv LnT) + f(T,h)dh привести к полному дифференциалу функции аргументов T,h нельзя.
Это обстоятельство можно объяснить тем, что определение элементарной работы в термодинамике соотношением (2) приемлемо только в отсутствии внешнего поля сил тяжести или в тех случаях, когда эффектами, возникающими по причине гравитационного воздействия на макросистему, можно пренебречь.
Если же газовая макросистема находится в гравитационном поле, количество теплоты, получаемое системой (для определенности, положительное), идет на изменение внутренней энергии и на совершение работы над телом, определяющим положение поршня (для определенности, при расширении), а также на совершение работы против сил тяжести. Это приводит к увеличению потенциальной энергии (П) макросистемы в гравитационном поле и допускает представление

$$П = gX(g,T,h) . \qquad (7)$$

Следовательно,

$$\delta W = Fdh\ + gdX(g,T,h) , \qquad (8)$$

а объединенное уравнение термодинамики принимает вид уравнения

$$TdS = d(CVT) + Fdh\ + gdX(g,T,h) ,$$

позволяющего получить выражение для энтропии идеального газа, находящегося в поле сил земного тяготения.

Литература

1. *Базаров И.П.* Термодинамика. – М.: Высшая школа, 1991.-376 с.

http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1350 http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper_e.php?p=1350

СЕКЦИЯ 4

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ В НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

SECTION 4

VISUALIZATION IN SCIENTIFIC RESEARCHES

МАТРИЧНАЯ ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ЧИСЛОВЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ

Смирнов В.В., Спиридонов Ф.Ф.
Бийский технологический институт

В работе решается задача визуализации числовых последовательностей средствами компьютерной алгебры. Рассмотрены матрицы, элементами которых являются простые числа и составные числа определённого вида. Числовые матрицы представлены последовательно с возрастанием числа столбцов. Позиционно расположение чисел в матрицах схоже по одному из сомножителей. Таким образом, для специальных составных чисел визуально образуется порядок. При этом последовательности составных чисел порождаются простым числом. Эти последовательности не совпадают.

MATRIX VISUALIZATION OF NUMERICAL SEQUENCES

Smirnov V.V., Spiridonov F.F.
Biysk Tehnological Institute

The authors solve the problem of visualizing numerical sequences using computer algebra . Consider the matrix whose elements are prime numbers and composite numbers of a particular type . Numerical matrices are presented consistently with increasing number of columns. Position location numbers in matrices similar to one of the factors. Thus, the composite numbers for special visual image order. When this composite sequence number generated by a prime number . These sequences are not identical.

Развивая работы [1-3] авторы решают задачу визуализации числовых последовательностей средствами компьютерной алгебры. Рассмотрены матрицы, элементами которых являются простые числа и составные числа определённого вида. Числовые матрицы представлены последовательно с возрастанием числа столбцов. Позиционно расположение чисел в матрицах схоже по одному из сомножителей. Таким образом, для специальных составных чисел визуально образуется порядок. При этом последовательности составных чисел порождаются простым числом. Эти последовательности не совпадают. Наглядность представления достигается изображением матриц на цилиндрах (рисунок 1).

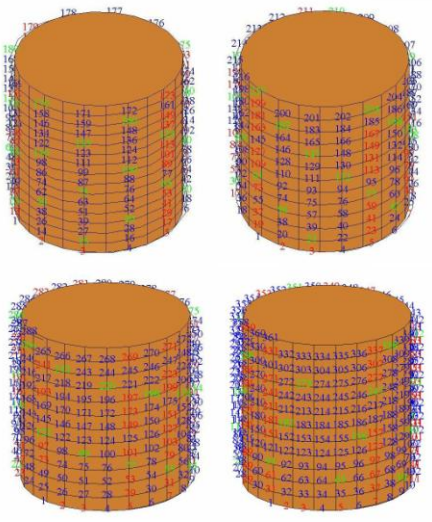


Рис.1. Визуализация числовых с помощью цилиндров

Предложенные инструменты визуализации числовых матриц способствуют более глубокому пониманию структур упорядоченных числовых последовательностей и экономят время вычислителя.

Литература

1. *Смирнов В.В., Спиридонов Ф.Ф.* Компьютерная математика в исследовании простых чисел. // Современные научные исследования и инновации. – Февраль, 2013 [Электронный ресурс]. URL: http://web.snauka.ru/issues/2013/02/20410

2. *Смирнов В.В., Спиридонов Ф.Ф.* Maple-инструменты исследования простых чисел-близнецов. // Современные научные исследования и инновации. – Февраль, 2013 [Электронный ресурс]. URL: http://web.snauka.ru/issues/2013/02/22270
3. *Смирнов В.В., Спиридонов Ф.Ф.* Визуализация компактного представления распределения простых чисел на плоскости. // Современные научные исследования и инновации. – Март, 2013 [Электронный ресурс]. URL: http://web.snauka.ru/issues/2013/03/22562

http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1353 http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper_e.php?p=1353

СЕКЦИЯ 5

ОБРАБОТКА ДАННЫХ, БАЗЫ ДАННЫХ, АНАЛИЗ ДАННЫХ

SECTION 5

DATA PROCESSING, DATABASES AND DATA ANALYSIS

БИОМЕДИЦИНСКАЯ ОНТОЛОГИЯ НОРМАЛЬНЫХ ФИБРОНЕКТИНОВ И ЕГО МУТАНТНЫХ ТРАНСКРИПТОВ, ПОЛУЧЕННЫХ *ИН СИЛИКО*

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

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

BIOMEDICAL ONTOLOGY OF NORMAL FIBRONECTINS AND ITS MUTANT TRANSCRIPTS, OBTAINED *IN SILICO*

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

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

Биомедицинская онтология (БО) - становится реальным инструментом в геномных и протеомных исследованиях, где анализ сложных системных данных в разрозненных ресурсах научных данных и аннотаций специализировнных БД может быть интегрирован в онтологические связи благодаря современным возможностям биоинформационных технологий. Существующие и развивающиеся онтологии таких данных имеют тенденцию к возрастающему увеличению в течении 5-7лет.Здесь сосредоточены данные, описывают различные видовые свойства генома и его взаимодействия с протеомом, которые могут быть отражены на структурном и др. уровнях у белков в их онтологическом развитии (фенотипа и генотипа).
Используя эту возможность мы исследовали функции фибронектинов (Фн) , которые представили в виде генно-онтологических связей в соответствии с их различными наборами логики реализуемыми ин виво за счет альтернативного сплайсинга семи мРНК для гена 1 Фн. Для анализа в настоящем исследовании и ранее использовали линейку программ, начиная от ранних - RiboWeb, EcoCyc,MBO,GO,TaO(DLs) до высокотехнологичных и с равитыми модулями решения биоинформационных задач -таких как SOBA, Cytoscape и их большими и самостоятельно развивающимися модулями – Proteomics, IDEntifications database (PRIDE) и др. Сейчас уже наметилась тенденция их взаимодействия с БД клинического описании я формализованной патологии для постановки диагноза. Такую оценку в клиническом отношении выполняют БД: SNOMED CT и ICD10.Появился даже научный журнал: « Клиническая биоинформатика».(1)
Ситуация и тенденция развития данных МО в наборе онтологических данных с описательного уровня белков

и их изоморфных состояний стала активно меняться в сторону установления связей и отношений с определенными физиологическими и патологическим состояниям.
Ранние программы медицинской онтологии содержали только алгоритмы формальной логики или в лучшем случае - алгоритмы дескриптивной логики – например TaO(DLs).
Развитые программ МО, уже содержат элементы интеллектуальной логики. В сетевых вариантах взаимодействий таких логик высокого уровня, используется активно экпертным сообществом и теперь уже для постановки диагноза и прогноза.
Технология анализа текста постоянно совершенствуется, приближаясь к семантическим задачам. Более того уровень их развития и возможности для принятия решений уже позволяют их рекомендовать практической медицине. Они могут быть использованы и научным сообществом для анализа схем сетевых аннотаций, с помощью которых та или иная исследовательская группа может устанавливать направленность постановки новых экспериментов в направлениях родственных данной группе и\или отличных от нее. Таким образом, для экспертных групп и руководителей проектов возникает новая качественная возможность оценки своей стратегии исследований и корректировки бюджета исследований на перспективу.
Используя, перечисленные достоинства программ МО и БД, мы поставили задачу использовать определенную их подборку для вычислительного эксперимента, по проблеме, которую мы постоянно развиваем, начиная с 1980 г. в экспериментальных условиях и с 1990 г. вычислительными ресурсами и возможностями БД и биоинформационных центров Европы и США, частично Японии.
В докладе будет подробно изложена эволюция этого движения и развитие идеи исследования.
Нами использованы, ранее полученные собственные данные в области экспериментальной биохимии и биоинформатики, для создания логики и стратегий вычислительных подходов к решаемой задаче и проверки ее на основе ранее разработанной теории – самоорганизующихся систем в биологии [2-4].
На основе исследований генномной и протеомной онтологии фибронектинов (Фн) нами показана возможность отслеживания, формирующихся концептов сигнальных сетей, отражающих цикличность состояний, связанных с эволюционно-морфологическим развитием этих кластеров активности Нам удалось создать и решить ряд теоретических проблем для данного кластера взаимодействий и на этом основании показать их значения для практической медицины.
Компоненты и модули PRotein Ontology(PRO) охватывают как аналитику и классификацию белков на основе эволюционных отношений. При этом белки представлены в нескольких формах: генной - со связями белков по их семействам и сигнальным связям соответственно их онтологическому статусу и дополнены изоморфными вариантами. Разделенность таких баз данных и их логика, показана нами на рис.1 из которой выбраны тропы реализации экспрессии фибронектинов и его изоформ, для определения онтологического уровня и зависимостей функционирования.

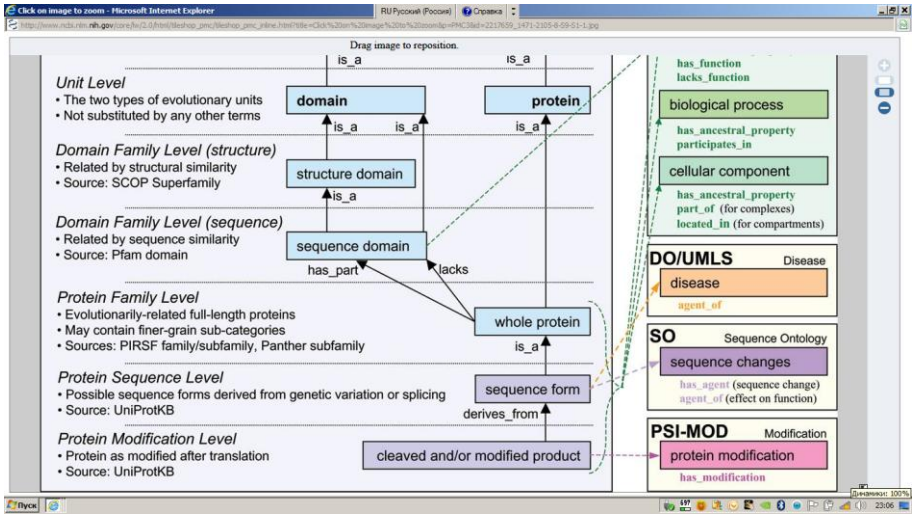


Рис.1. Часть общей логики и стратегии МО для выбора онтологических связей фибронектина и его молекулярных взаимодействий реализуемых на уровне модуляции и в патологических состояниях.

В нашем исследовании мы показываем возможности использовать комплекса программ медицинской онтологии для анализа протеома и генома в сочетании с переходом от анализа молекулярных состояний к их роли в патологических состояниях на уровне целого организма.
Нами сравнены варианта альтернативного сплайсинга мРНК по их ко-доминантным вариантам гена FN1 БД SOBA - по экпрессии дистантных участков в двух вариантах адаптации клеток к условиям, побуждающим протеом реализовать свой обычный вариант альтернативного сплайсинга и вариант сплайсирования при появлении у клеток профиля адаптации к усилению пролиферации.
На материале, полученных образцов транскриптов, для Фн 7 различных мРНК in silico. При их выравнивании было установлена общая онтологичесая последовательность - MIFEKHGFRRTTPP. Она также присутствует в составе транскриптов домена Фн тип 3 и РНК Fn27.(6). В докладе будет изложена концептуальная логика такой связи – быть сразу причиной двух разнонаправленных процессов клеточной коммуникации.

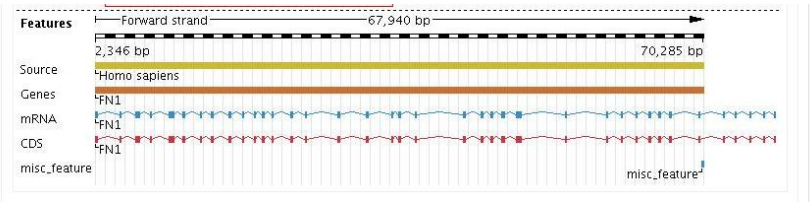


Рис.2. Картирование гена FN1 и его мРНК у человека.

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

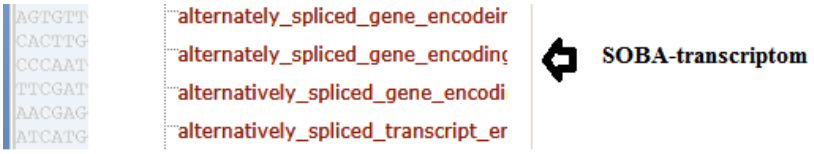


Рис.3. Модуль SOBA- транскриптом, использованный нами для получения альтернативно сплайсированных транскриптов.(ин силико.)

Анализ полученных нами данных в PICR – идентификаторе перекрестно-реферируемого сервиса, дает возможность последовательно раскрыть наличие аминокислотных последовательностей (АП) у разных видов животных и человека при различных состояниях их вовлечения в связанных с этой последовательностью патологий. (рис. 4) (внизу).

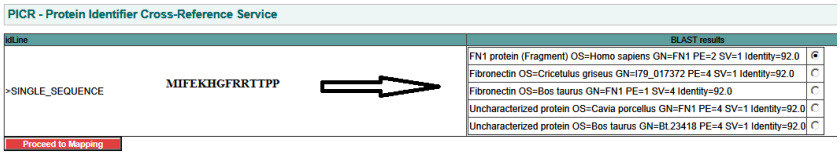


Рис.4.Результат анализа последовательности (пептида) MIFEKHGFRRTTPP в PIKR.(Protein Identifier Cross-reference Service)

Как видно из приведенного на рис.4 – вовлеченных сюда видов животных и человека, последние две позиции еще никак не охарактеризованы.
Последняя позиция находится в настоящее время в нашей интенсивной разработке на инициативных началах (sic!).
Значение таких исследований имеет, как научную перспективу, так и клиническое значение в персональной медицине (при полной идентификации генома данного человека). В таких случаях возмжен прогнор развития онкологического процесса на той стадии, когда еще нет клинических признаков заболевания и можно предпринять «превентивные» меры для их блокировки.

Литература

1. *Baker, P. G Goble, C.A. Bechhofer, S. Paton, N.W. Stevens, R. and A Brass.* An Ontology for Bioinformatics Applications. Bioinformatics, 15(6):510-520, 1999.
2. *Fedotov A.V., Dyakonov L.P.* European Journal of Cell Biology v.74, p.67, 1997.
3. *Fedotov A, Ovcharuk I.* Research of the mechanism of self-assembly fibronectins in modelling system, 2004.DOI:10.1240/sav_gbm_2004_h_000715
4. *Федотов А.В. Овчарук И.Н.* ЭВОЛЮЦИЯ, СТРУКТУРА И МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФИБРОНЕКТИНОВЫХ МОТИВОВ Материалы ИВТН,2004 http://www.ivtn.ru/2004/biomedchem/enter/paper.php?p=117
5. *Федотов А.В., Винтер В.Г., Овчарук И.Н.* КОМПЬЮТЕРНЫЙ АНАЛИЗ ДИСТАНТНЫХ АМИНОКИСЛОТНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ В СТРУКТУРЕ ФИБРОНЕКТИНОВ. Материалы ИВТН-2003, http://www.ivtn.ru/2-session/enter/paper_e.phtml?r=10
6. *Helen Y. Wang, Juhua Zhou, Kuichun Zhu, Adam I. Riker, Francesco M. Marincola, Rong-Fu Wang* Identification of a Mutated Fibronectin As a Tumor Antigen Recognized by CD4+T Cells: Its Role in Extracellular Matrix Formation and Tumor Metastasis J Exp Med. 2002 June 3; 195(11): 1397–1406. doi: 10.1084/jem.20020141

http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1329 http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1329

МЕТОДИКА МОНИТОРИНГА СОСТОЯНИЯ ОПЕРАТОРА ЭРГАТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

Алёхин М.Д., Корчагина Д.А., Демендеев А.А., Темляков А.Ю.
Московский государственный технический университет им. Н.Э.Баумана

METHOD OF CONDITTION MONITORING ERGATIC SYSTEM OPERATOR

Alehin M.D., Korchagina D.A., Demendeev A.A., Temlyakov A.Yu.
The Bauman Moscow State Technical University

В статье изложена методика биорадиолокационного монито-ринга состояния оператора эргатической

The article describes a technique bioradiolokatsionnogo monitoring of the operator ergatic system to permit such

системы для обеспечения возможности учета такой оценки в контуре управления в реальном времени. Обработка сигналов о состоянии оператора основана на совместном применении искусственных нейронных сетей и вейвлет-анализа

accounting estimates in the control loop in real time. Signal processing on the state of the operator based on the joint use of artificial neural networks and the wavelet analysis

В настоящее время не вызывает сомнений, что опасные состояния операторов эргатических систем (ЭС): утомление, монотония, гипокинезия, нервно-эмоциональное напряжение и др. существенно снижают функциональную надежность их профессиональной деятельности, обусловливая риски нештатных и опасных ситуаций. Так, в частности, Международная организация гражданской авиации определяет утомляемость как состояние пониженной умственной или физической работоспособности в результате нарушений сна или длительного бодрствования, фазы суточного ритма или рабочей нагрузки, которое ухудшает работоспособность операторов летного состава и снижает надежность деятельности летчика. При этом наиболее распространенными нарушениями, приводящими к дневной сонливости и повышенной утомляемости операторов, являются расстройства дыхания во сне.

Исследования показали целесообразность применения для дистанционного биорадиолокационного мониторинга (БМ) состояния человека биорадиолокационных технологий, для реализации которых разработаны аппаратно-программные комплексы (АПК), удовлетворяющие требованиям, предъявляемым к аппаратуре биорадиолокационного мониторинга состояния оператора ЭС [1-2]. Практическое применение таких АПК требует реализации автоматизированной обработки физиологических сигналов, являющихся нестационарными квазипериодическими и низкочастотными.

Общая процедура обработки сигналов о состоянии оператора эргатической системы

Процедура обработки и анализа БРЛ сигналов включает следующие основные этапы: предобработка; извлечение информативных признаков; распознавание паттернов БРЛ сигнала (ПБРЛС) [3 - 6].

На этапе предварительной обработки БРЛ сигналов для снижения уровня шумов и удаления случайных выбросов используется медианная фильтрация по методу скользящего среднего. При выделении информативных частотных диапазонов БРЛ сигналов эффективными являются полосовые фильтры Баттерворта с максимально плоской амлитудно-частотной характеристикой (АЧХ). Анализ ПБРЛС целесообразно проводить после использования процедур сглаживания и аппроксимации, используя на заключительных этапах предобработки, методы объединения квадратур БРЛ сигналов, в частности, арктангенсную и комплексную демодуляции.

На этапе извлечения информативных признаков БРЛ сигналов в практических приложениях биорадиолокационного мониторинга состояния ЭС наибольшую ценность представляют значения характерных частот регистрируемых БРЛ процессов за время наблюдения. Традиционно для этих целей используют дискретное преобразование Фурье (ПФ) при том допущении, что на анализируемом участке сигнал является стационарным. В дальнейшем по полученному спектру определяются максимумы, соответствующие значениям характерных частот регистрируемых БРЛ сигналов. В работах отечественных и зарубежных ученых отмечается, что использование оконного преобразования Фурье (ОПФ) при выборе оптимальных параметров окна позволяет получить информацию и о временной зависимости изменения частотных компонент БРЛ сигналов [4, 6].

Этап распознавания ПБРЛС в задачах биорадиолокационного мониторинга состояния ЭС является наиболее слабо исследованным и требует разработки с учетом особенностей решаемой прикладной задачи. Начальным этапом распознавания ПБРЛС является определение их информативных признаков. Показано, что перспективным направлением решения этой задачи является использование время-частотного (ВРЧ) анализа [3-6].

Особенности автоматизированного распознавания паттернов биорадиолокационных сигналов

На основе обобщения функциональных особенностей искусственных нейронных сетей (ИНС) прямого распространения обосновывается выбор базовой топологии ИНС для распознавания ПБРЛС - исходя из соображений конструирования ИНС минимальной сложности с возможностью использования широкого арсенала методов поиска оптимальных решений при относительно небольших аппаратных затратах оперативной памяти выбран многослойных перцептрон (МСП) с одним скрытым слоем и сигмоидальной функцией активации [5, 6].

Предложенный *метод распознавания ПБРЛС* на основе совместного использования ИНС и ВП, включает три основных этапа.

1) Во время предварительной обработки БРЛ сигналов производится фильтрация с использованием фильтров Баттерворта верхних (ФВЧ) и нижних (ФНЧ) частот, сглаживание медианным фильтром скользящего среднего и Z-нормализация данных.

2) Далее пространство признаков ПБРЛС формируется на основе последовательности абсолютных значений детализирующих коэффициентов ВП квадратурных компонент БРЛ сигналов.

3) Описание ПБРЛС подается на вход ИНС, на выходе которой регистрируется значение, соответствующее одному из выбранных классов состояний.

Исследование эффективности разработанной технологии

Сбор верифицированного массива БРЛ сигналов для исследования эффективности предложенных решений осуществлялся при проведении биорадиолокационного БРЛ мониторинга состояния ЭС параллельно с записью полной стандартной полисомнографии (ПСГ) [3-6].

Верификация сигналов осуществлялась следующим образом. Визуально анализировалась вся запись и если находился участок БРЛ сигнала длительностью более 10 с, потенциально похожий на один из характерных ПБРЛС, то он сравнивался с аналогичным по времени участком на записи ПСГ. Интерпретация результатов мониторинга выполнялась квалифицированными специалистами.

При исследовании информативности биорадиолокационного метода по сравнению со стандартным контактным методом мониторинга состояния ЭС в зависимости от принятия положительного или

отрицательного решения о наличии характерных ПБРЛС.
Алгоритм автоматизированного распознавания ПБРЛС на основе детализирующих коэффициентов 3-го уровня ВП по базису Симлет 13 для формирования пространства признаков и МСП с 9 скрытыми нейронами с настройкой по алгоритму Левенберга–Марквардта для классификации обеспечивает общую точность распознавания более 84% при величине ошибки второго рода менее 8%. Рассчитанные показатели чувствительности 69% и прогностической ценности положительного решения 72% о наличии ПБРЛС удовлетворяют рекомендациям по биорадиолокационному мониторингу состояния оператора ЭС, производимых машиностроительной и оборонной промышленностью.
Заключение
Разработанная методика биорадиолокационного мониторинга состояния оператора ЭС позволяет обеспечить диагностику опасных (для надежной профессиональной деятельности) состояний (утомление, монотония, гипокинезия, нервно-эмоциональное напряжение и др.), информативными для которой являются показатели состояния сердечно-сосудистой и дыхательной системы человека.
Следует отметить, что к настоящему времени создана аппаратура, обеспечивающая бесконтактную регистрацию физиологических сигналов, требуемых для обеспечения диагностики состояния оператора в реальном времени (биорадиолокаторы, актиграфы и др.). Разработанные методы и алгоритмы обработки информации впервые позволили обеспечить корректную математическую обработку физиологических сигналов без ограничения двигательной активности операторов ЭС при их регистрации за счет учета нестационарности и внутривидовой вариабельности сигналов при их обработке. Это, в свою очередь, существенно расширило потенциальные возможности бесконтактного мониторинга состояния оператора ЭС.
Приоритетными направлениями практического использования результатов исследования для обеспечения безопасности эксплуатации ЭС являются:
• обеспечение объективной диагностики выраженности опасных состояний оператора в процессе профессиональной деятельности в реальном времени для учета такой оценки в системах автоматического управления ЭС;
• реализация мониторинга функционального напряжения оператора при проведении тренажерной подготовки;
• объективизация исследования состояния сердечно-сосудистой и дыхательной системы оператора в процессе медицинского освидетельствования, в том числе, при выполнении функциональных нагрузочных проб, при исследованиях особенностей ночного сна и т.п.;
• оптимизация эргономического проектирования ЭС за счет обеспечения мониторинга состояния оператора на всех его этапах.
Таким образом, можно утверждать, что результаты исследования обеспечивают повышение надежности функционирования ЭС за счет обеспечения возможности бесконтактного мониторинга состояния оператора в интересах повышения функциональной надежности его профессиональной деятельности и учета оценки текущего состояния оператора в контурах управления ЭС.

Работа поддержана стипендией Президента РФ для молодых ученых и аспирантов, осуществляющих перспективные научные исследования и разработки по приоритетным направлениям модернизации российской экономики (СП-2061.2013.4).

Литература

7. *Бугаев А.С.* Дистанционный контроль параметров кардиореспираторной системы человека с помощью радиолокационных средств / А.С.Бугаев, И.А.Васильев, С.И.Ивашов // Биомедицинская радиоэлектроника. 2004. № 10. С. 24.
8. *Охотников Д.А.* Биорадиолокационный радиолокационный контроль состояния пилота при работе на тренажере / Д.А.Охотников // Вестник Московского авиационного института. 2010. Т. 17. № 3. С. 23.
9. *Алёхин М.Д.* Метод биорадиолокации в анализе перемещений грудной клетки при спокойном дыхании / М.Д.Алёхин, Л.Н.Анищенко, Д.А.Корчагина // Биомедицинская радиоэлектроника. - 2009. - №10. - С. 56-61.
10. *Алёхин М.Д.* Кратномасштабный вейвлет-анализ в формировании пространства признаков двигательных паттернов биорадиолокационного сигнала / М.Д.Алёхин, Л.Н.Анищенко, А.В.Журавлев // Радиотехника. 2011. №11. С. 20-25.
11. *Алёхин М.Д.* Процедура определения оптимальных параметров вейвлет-преобразования и нейросетевого классификатора для повышения эффективности распознавания паттернов нестационарных биорадиолокационных сигналов / М.Д.Алёхин // Нейрокомпьютеры: разработка, применение. 2012. №6. С. 46-54.
12. *Алёхин М.Д.* Исследование диагностической информативности биорадиолокационной пневмографии в биорадиолокационном скрининге синдрома апноэ во сне / М.Д.Алёхин [и др.] // Медицинская техника. 2013. №2. С. 36-38.

СЕКЦИЯ 6

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

SECTION 6

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

МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ СИСТЕМЫ ЭРГОНОМИЧЕСКОЙ ЭКСПЕРТИЗЫ СРЕДСТВ ЗАЩИТЫ ОТ АВИАЦИОННОГО ШУМА

Скуратовский Н.И.
Московский научно-исследовательский и проектный институт типологии, экспериментального проектирования

Изложены особенности методического обеспечения автоматизированной поддержки сбора и обработки информации при проведении эргономической экспертизы противошумных наушников и средств индивидуальной противошумной виброзащиты, применяемых для защиты от авиационного шума

METHODOLOGY OF THE AUTOMATED SYSTEM ERGONOMIC EXPERTISE MEANS OF PROTECTION AGAINST AIRCRAFT NOISE

Skuratovsky N.I.
Moscow Scientific-Research and Design Institute of typology and experimental design

Set out particular methods of automated support for collection and processing of information during the ergonomic expertise earplugs and personal anti-noise vibration protection applied for protection from aircraft noise

Одним из ключевых аспектов исследований по разработке средств защиты от авиационного шума является эргономическая экспертиза противошумов на всех этапах создания: от обоснования необходимости разработки до изготовления и проведения предварительных и государственных испытаний опытных образцов.
Для обеспечения объективной эргономической экспертизы необходимо, чтобы: методики исследования различных эргономических аспектов были взаимосогласованными; собираемые данные приводились к унифицированному виду; все данные и результаты анализа комплексируются в единой базе данных.
В интересах выполнения таких требований на всех этапах жизненного цикла средств индивидуальной защиты от авиационного шума реализована автоматизированная поддержка их эргономической экспертизы с помощью специально разработанного программного обеспечения.
Автоматизированная поддержка эргономической экспертизы противошумных наушников предполагает получение и свертку следующих объективных и субъективных показателей: эффективность защиты от шума октавных частот 125 Гц, 250 Гц, 500 Гц, 1000 Гц, 2000 Гц, 4000 Гц и 8000 Гц; звон (шум) в ушах, головная боль, шум и тяжесть в голове, снижение работоспособности, нарушение режима сна, массогабаритные характеристики, эффективность крепёжной системы, удобство использования, удобство хранения в неиспользуемом состоянии, качество оголовья, помехи профессиональной деятельности в наушниках, безопасность использования, сочетаемость с образцами экипировки, неприятные ощущения в околоушной области, покраснение кожи в околоушной области и достаточность снижения шума.
Автоматизированная поддержка эргономической экспертизы средств индивидуальной противошумной виброзащиты предполагает получение и свертку следующих объективных и субъективных показателей: снижение вибротактильной чувствительности, состояние кожи человека под средством индивидуальной защиты, влажность кожных покровов человека под средством индивидуальной защиты, массогабаритные характеристики, эффективность крепёжной системы, удобство (комфортность) использования, удобство хранения в неиспользуемом состоянии, отсутствие помех профессиональной деятельности в средстве индивидуальной защиты, безопасность использования средства индивидуальной защиты, сочетаемость средства индивидуальной защиты с другими элементами экипировки, неприятные ощущения при использовании средства индивидуальной защиты, защитные свойства средства индивидуальной защиты, удобство одевания/съема.
В результате взвешенной свертки показателей получают оценку коэффициента эргономичности средства индивидуальной защиты человека от авиационного шума.
Программные комплексы, реализующие описанные методики, позволяют стандартизировать процедуру эргономической экспертизы средств индивидуальной защиты от авиационного шума, вести базу данных эргономических экспертиз (первичной информации и интегральных оценок).

Используемые первичные показатели эргономического уровня противошумов показатели отобраны в качестве информативных по результатам теоретико-экспериментальных исследований по формированию тактико-технических требований к средствам защиты от авиационного шума и при проведении предварительных и государственных испытаний более 10 образцов таких средств на всех этапах их жизненного цикла.

http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1334 http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper_e.php?p=1334

СЕКЦИЯ 8

ДОКЛАДЫ, НЕ ВОШЕДШИЕ В ОСНОВНЫЕ СЕКЦИИ

SECTION 8

THE REPORTS, WHICH ARE NOT INCLUDED IN THE BASIC SECTIONS

ВЛИЯНИЕ СОБСТВЕННОГО ПИННИНГА НА ДИНАМИКУ МАГНИТНОГО ПОТОКА В МОНОКРИСТАЛЛАХ $YBA_2CU_3O_{7-\delta}$

Лотник Д.А., Соколов А.Н., Вовк Р.В.
Харьковский национальный университет им В.Н.Каразина

Динамика вихревой материи монокристалла $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ с однонаправленной системой двойниковых границ экспериментально изучена в широком диапазоне скоростей движения магнитного потока в наклонных магнитных полях. Показано, что при ориентации вектора магнитного поля в окрестности ab – плоскости, динамика магнитного потока вблизи температуры плавления вихревой решетки может быть описана теорией Андерсона – Кима, а с понижением температуры - теорией коллективного пиннинга на мелкомасштабных дефектах или моделью вихревого стекла. Собственный пиннинг, обусловленный слоистой кристаллической структурой материала, оказывает влияние на динамику магнитного потока, и это влияние возрастает по мере понижения температуры

THE EFFECT OF PINNING ON THE DYNAMICS OF MAGNETIC FLUX IN SINGLE CRYSTALS OF $YBA_2CU_3O_{7-\delta}$

Lotnik D., Sokolov A., Vovk R.
V.N.Karazin Kharkov National University

The dynamics of vortex matter in $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ single crystal with unidirectional twin boundaries is studied experimentally in a wide range of velocities of the magnetic flux in a tilted magnetic field. It is determined that with the orientation of the magnetic field vector in the locality of the ab-plane, the dynamics of the magnetic flux near the melting temperature of the vortex lattice can be described by the Kim-Anderson model and as the temperature is lowered, by the theory of collective pinning on small-scale defects or by the vortex glass model. The intrinsic pinning caused by the layered crystal structure of the material has an impact on the dynamics of magnetic flux and this effect increases with the decreasing of the temperature

Хорошо известно, что присутствие структурной анизотропии в высокотемпературных купратных сверхпроводниках (ВТСП) оказывает существенное влияние на их физические свойства [1-3]. Однако, ввиду наличия купратных слоев, некоторые из этих свойств не могут быть соотнесены с простой 3D-анизотропией. Такая специфика присуща не только ВТСП, но и традиционным (так называемым «холодным») сверхпроводящим материалам [4,5]. Слоистая структура также приводит к появлению некоторых интересных особенностей электромагнитных характеристик этих соединений. Например, при некоторой температуре T^* наблюдается 2D-3D переход [6,7], при котором длина когерентности ξ_c вдоль *c*-оси становится меньше расстояния между CuO_2 слоями. Также, при низких температурах в магнитном поле $H > H_{c1}$, приложенном вдоль слоев, вихрям может быть энергетически выгодно располагаться между двумя CuO_2 слоями. Как было установлено в [8], в наклонных магнитных полях вихри запираются (lock in режим) в ab-плоскости если угол наклона магнитного поля меньше некоторого критического $\theta < \theta_c$. Экспериментально реализация такого режима была подтверждена в соединениях $Tl_2Ba_2Cu_2O_8$ и $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$ [9,10]. В монокристаллах $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ такого рода исследования, как правило, осложнены присутствием двойниковых границ (ДГ), в свою очередь являющихся мощными центрами пиннинга [11-14] и дополнительным источником анизотропии [15]. В настоящей работе исследовано влияние слоистости структуры на собственный (intrinsic) пиннинг и динамику магнитного потока вихревой системы в монокристаллах $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ с заданной ориентацией ДГ, при которой минимизировано их влияние на рассеяние нормальных носителей транспортного тока.

Монокристаллы $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ выращивали по раствор-расплавной технологии в золотом тигле, согласно методике [7,15], при насыщении кислородом в соединениях $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ происходит тетра-орто структурный переход, который, в свою очередь, приводит к двойникованию кристалла, минимизирующего его упругую энергию. Для резистивных исследований отбирали тонкие кристаллы с проникающими ДГ, у которых имелись области с однонаправленными ДГ размером 0.5x0.5мм^2. Это позволяло вырезать из таких монокристаллов мостики с однонаправленными ДГ шириной 0.2мм и расстоянием между потенциальными контактами 0.3мм. Двойниковые границы внутри мостика были ориентированы в одном направлении. При этом мостик вырезали таким образом, чтобы вектор транспортного тока I_{ab} был параллелен плоскостям двойников, что позволяло минимизировать их влияние на рассеяние нормальных носителей транспортного тока. Электрические контакты создавали нанесением серебряной пасты на поверхность кристаллов с последующим подсоединением серебряных проводников и трехчасовым отжигом при температуре 200 °C в атмосфере кислорода. Проводники для токовых контактов изготавливали из фольги толщиной 0,1 мм и шириной 2 мм, а для потенциальных контактов использовали провод диаметром 0,05 мм. Такая технология позволяла получать малое переходное сопротивление электрических контактов и проводить резистивные измерения при транспортных токах до 1 А без

омического перегрева токовых контактов.
Измерения электросопротивления и вольт-амперных характеристик (ВАХ) проводили на постоянном токе. Магнитное поле до 12.7 кЭ создавали электромагнитом. Вращением магнита можно было изменять ориентацию поля относительно кристалла. Точность ориентации поля относительно образца не хуже 0,2°. Мостик монтировали в измерительной ячейке таким образом, чтобы вектор поля **H** всегда был перпендикулярен вектору транспортного тока ***j***. Температуру измеряли платиновым терморезистором, напряжение на образце и образцовом сопротивлении - нановольтметрами В2-38. Данные с вольтметров через интерфейс автоматически передавались на компьютер. Точность измерения температуры 0,005 К, стабильность температуры при измерениях ВАХ не хуже 0,01 К.
Как показал анализ резистивных переходов в сверхпроводящее состояние монокристалла $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ измеренных в нулевом магнитном поле и в поле H = 12.7 кЭ (вектор магнитного поля был ориентирован параллельно *ab* – плоскости кристалла), критическая температура кристалла составляла T_c =92.3 К, а ширина резистивного перехода $\Delta T_c \approx 0.3$ К. Эти значения свидетельствуют о высоком качестве кристаллов, а также о том, что дефицит кислорода δ не превышает значения 0.07 [7,16]. Резистивный переход в магнитном поле существенно уширен. Температуру T_M, связанную с плавлением вихревой решетки, мы определяли по низкотемпературному максимуму производной dρ(T)/dT [17]. Считается, что при $T > T_M$ фаза вихревой жидкости находится в незапиннингованном состоянии [11-14,17].
Проведенные измерения вольт-амперных характеристик (ВАХ) при $T > T_M$ показали, что в этой области температур ВАХ линейны, то есть вихревая система действительно находится в незапиннингованном состоянии [11-14]. При температурах ниже T_M ВАХ существенно нелинейны. Как известно [12], начальная нелинейность участков кривых обусловлена термоактивированным крипом магнитного потока, который имеет место в случае, когда сила Лоренца $F_L = IB$ (В – вектор магнитной индукции) меньше силы пиннинга $F_P = I_dB$, которая, в свою очередь, определяется критическим током депиннинга I_d.
Анализ тех же кривых в координатах log$E$ – J^{-1} показал, что начальные участки экспериментальных зависимостей спрямляются в этих координатах. Это свидетельствует о том, что согласно [11,12] динамика вихрей может быть описана теорией коллективного пиннинга на мелкомасштабных неоднородностях, либо моделью вихревого стекла.
К сожалению, режим вязкого течения магнитного потока в наших экспериментах достигнут не был и поэтому мы не смогли определить величину критического тока депиннинга путем экстраполяции линейного участка ВАХ в точку пересечения с осью абсцисс (динамический метод) [11]. Поэтому в качестве критерия определения критического тока была выбрана методика определения по напряженности электрического поля на образце E, равной 10^{-5}, 10^{-4} и 10^{-3} В/см, соответственно (статистический метод) [12]. Подставляя в уравнение :

$$E = E_0 \exp[U/T(1-J_c/J)] \quad (1)$$

значения критического тока J_c, определяемого по уровню напряженности электрического поля на образце, мы определили температурные зависимости потенциала пиннинга $U(T)$. Здесь, U - потенциал пиннинга, а E_0 – феноменологический параметр, физическая интерпретация которого зависит от рассматриваемой модели. Температурная зависимость потенциала пиннинга, определенная в рамках теории коллективного пиннинга (или вихревого стекла), для критерия определения критического тока $E = 10^{-4}$ В/см показала, что потенциал пиннинга уменьшается с понижением температуры. Здесь необходимо отметить, что, полученные нами, абсолютные значения $U_0 \approx 200$ К оказались примерно на порядок меньше значений полученных в рамках модели Андерсона- Кима [18].
Нами также были проведены измерения ВАХ при угле разориентации β вектора магнитного поля относительно *ab* – плоскости $\beta = 3°$. Согласно [12,17] при такой геометрии эксперимента исключается влияние собственного пиннинга на динамику магнитного потока. Как было установлено, вид ВАХ изменяется с понижением температуры: уменьшается крутизна кривых; меняется их плотность на фиксированном уровне напряженности во всем исследованном интервале токов. В логарифмических координатах, в непосредственной близости к T_M начальные участки характеристик спрямляются. По мере понижения температуры ВАХ все хуже описываются уравнением Андерсона – Кима [18]. В координатах log$E$ – J^{-1}, в области низких температур, ВАХ удовлетворительно описываются уравнением, предсказываемым теорией коллективного пиннинга на мелкомасштабных неоднородностях (или моделью вихревого стекла) [17]. Используя вышеуказанные критерии определения критического тока, нами были получены зависимости $J_c(T)$, которые имеют, так называемую, s-образную форму, достаточно резко возрастая при температурах ниже T = 86.5 К. При этом различия в величине критического тока в поле $H \| ab$ – плоскости кристалла по сравнению со значениями критического тока в наклонном поле (на одних и тех же температурных интервалах) увеличиваются с ростом напряженности уровня величины E, по которой определяли значение J_c. Следует отметить, что по мере понижения температуры это различие возрастает, что в свою очередь свидетельствует о возрастании вклада собственного пиннинга.
Таким образом, приведенная выше совокупность экспериментальных результатов, позволяет сделать вывод о том, что при ориентации вектора магнитного поля в окрестности *ab* – плоскости, динамика магнитного потока вблизи температуры плавления вихревой решетки может быть описана теорией Андерсона – Кима, а с понижением температуры - теорией коллективного пиннинга на мелкомасштабных дефектах или моделью вихревого стекла. Собственный пиннинг, обусловленный слоистой кристаллической структурой материала, оказывает существенное влияние на динамику магнитного потока, возрастающее по мере понижения температуры.

Литература

1. *Abrikosov A. A.* Usp. Fiz. Nauk 168, 683 (1998).
2. *Chroneos, A., Goulatis, I.L., Vovk, R.V.* Acta Chimica Slovenica, 54 (1), pp. 179-184 (2007).
3. *Vovk R. V., Vovk N. R., Shekhovtsov O. V., Goulatis I. L., Chroneos A.* // Supercond. Sci. Technol. 26 (2013) 085017.

4. *Klemm R.A., Luther A. and Beasley M.R.* Phys. Rev. B 12, 877 (1975)
5. *Schmidt V.V.* The Physics of Superconductors, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, (1997).
6. *Асламазов Л.Г., Ларкин А.И.* // ФТТ. –1968. – Т.10, №4. – С.1104-1111.
7. *Obolenskii, M.A., Vovk, R.V., Bondarenko, A.V., Chebotaev, N.N.*/ Low Temperature Physics, 32 (6), pp. 571-575 (2006) [Fizika Nizkikh Temperatur (2006), 32 (6), pp. 746-752].
8. *Feinberg D. and Villard C.* Phys. Rev. Lett. 65, 919 (1990).
9. *Chung D.H., Charparale M., Naughton M.J.* in Proceedings of the VIth Conference on Superconductivity, September 1992, Buffalo (AIP, New York, 1993)
10. *Martinez J.C. et al.* Phys. Rev. Lett. 69, 2276 (1992).
11. *Bondarenko, A.V., Shklovskij, V.A., Obolenskii, M.A., Vovk, R.V., Prodan, A.A., Pissas, M., Niarchos, D., Kallias, G.* / Physical Review *B* 58 (5), pp. 2445-2447 (1998).
12. *Bondarenko, A.V., Prodan, A.A., Obolenskiĭ, M.A., Vovk, R.V., Arouri, T.R.* / *Low* Temperature Physics, 27 (5), pp. 339-344 (2001) [Fizika Nizkikh Temperatur (Kharkov), 27 (5), pp. 463-470 (2001)].
13. *Bondarenko, A.V., Prodan, A.A., Obolenskii, M.A., Vovk, R.V., Pissas, M., Kallias, G., Niarchos, D., Arouri, T.R.* / Physica C 317-318, pp. 655-657 (1999).
14. *Kwok W.K. et.al. //* Phys. Rev. Lett. *69*, 3370 (1992)
15. *Vovk R.V., Obolenskii M.A., Nazyrov Z.F., Goulatis I.L., Chroneos A., Pinto Simoes V.M.* / Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 23 (6), pp. 1255-1259 (2012).
16. P.Schleger et al., Physica C 176, p.261 (1991).
17. *Vovk R.V., Nazyrov Z.F., Obolenskii M.A., Goulatis I.L., Chroneos A., Simoes V.M.P.* / Journal of Alloys and Compounds, 509 (13), pp. 4553-4556 (2011).
18. *Anderson P.W. , Kim Y.B.,* Rev. Mod. 36**,** 39 (1964).

http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1357 http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper_e.php?p=1357

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА АППРОКСИМАЦИЙ ПРИ АНАЛИЗЕ РАЗЛИЧНЫХ ВИДОВ ПОПЕРЕЧНОЙ ПРОВОДИМОСТИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ $Y_{1-X}PR_XBA_2CU_3O_{7-\Delta}$

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

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

THE USE OF THE METHOD OF APPROXIMATION IN THE ANALYSIS OF VARIOUS KINDS OF TRANSVERSE CONDUCTIVITY OF SINGLE CRYSTALS OF $Y_{1-X}PR_XBA_2CU_3O_{7-\Delta}$

Nazyrov Z., Vovk R., Vovk N., Sklyar V.
V.N.Karazin Kharkov National University

In the present study the influence of praseodymium doping on the conductivity across (transverse) the basal plane of high-temperature superconducting Y1-xPrxBa2Cu3O7-δ single crystals is investigated. It is determined that an increase of praseodymium doping leads to increased localization effects and the implementation of a metal – insulator transition Y1-xPrxBa2Cu3O7-δ, which always precedes the superconducting transition. The increase of the praseodymium concentration also leads to a significant displacement of the point of the metal - insulator transition to the low temperature region

Как известно [1-8], для соединения вида $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ существует принципиальное отличие в поведении температурных зависимостей электросопротивления измеренных в направлении базисной ab-плоскости $\rho_{ab}(T)$ и вдоль оси **c** $\rho_c(T)$. В то время как даже малое отклонение от стехиометрии по кислороду приводит к переходу от квазиметаллического к полупроводниковому поведению кривых $\rho_c(T)$, на зависимостях $\rho_{ab}(T)$, даже при значительном дефиците кислорода δ>0.5, в области относительно высоких температур сохраняется достаточно широкий линейный участок, свидетельствующий о стабильности интенсивности рассеяния нормальных носителей [4]. Качественно подобное поведение наблюдается в этом соединении и при допировании празеодимом [7,8], о чем более подробно будет сказано ниже. Характерной особенностью высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) является близость диэлектрического и сверхпроводникового состояний. В связи с этим возникает закономерный вопрос о взаимовлияние этих состояний и, в этом аспекте, какую роль играют эффекты локализации при возникновении сверхпроводимости в ВТСП? Как отмечалось выше, проводящие свойства соединений $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ можно относительно легко варьировать путем изменения содержания кислорода, а также посредством полной или частичной заменой составляющих компонент их изоэлектронными аналогами. При этом известно [9], что замена иттрия другими редкоземельными элементами практически не влияет на проводящие свойства соединения в нормальном и сверхпроводящем состоянии. Исключение представляет собой только замена иттрия на празеодим, так называемая «аномалия празеодима» [3,10-12]. Внесение даже малых (x ≈ 0,05) добавок празеодима в образцах $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-}\delta$ приводит к существенному ухудшению их проводящих свойств [12,13], которое выражается в понижении T_c, возрастании удельного сопротивления и усилении эффектов локализации. При достижении концентрации x ≈

0,6 сверхпроводимость в соединении полностью исчезает [3], и оно переходит в диэлектрическое состояние. В то же время при таком переходе кристаллическая структура и кислородный индекс соединения практически остаются неизменными. Это, в свою очередь, дает нам возможность плавного изменения соотношения между различными типами проводимости и, таким образом, более детального изучения электротранспортных процессов в экспериментальных образцах. С учетом вышесказанного, в настоящей работе была поставлена цель исследовать эволюцию проводимости поперек базисной ab-плоскости в монокристаллах $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ при различной степени легирования празеодимом в широком интервале концентраций $0 \le x \le 0,5$.

Монокристаллы $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ выращивали по раствор-расплавной технологии [6,14]. Для получения кристаллов с частичной заменой Y на Pr, $Y_{1-z}Pr_zBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, в начальную шихту добавляли Pr_5O_{11} в соответствующем процентном соотношении. Режимы выращивания и насыщения кислородом кристаллов $Y_{1-z}Pr_zBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, были такими же, как и для нелегированных монокристаллов [6,14]. Как начальные компоненты для выращивания кристаллов использовали соединения Y_2O_3, $BaCO_3$, CuO и Pr_5O_{11}. Характерные размеры кристаллов составляли 2.5x1.5x0.4 мм^3 (наименьший размер соответствовал направлению вдоль оси **c**). Электросопротивление измеряли по восьмиконтактной методике, описанной в [2]. Температуру измеряли платиновым терморезистором.

Как показал анализ температурных зависимостей сопротивления поперек базисной ab-плоскости, измеренных для монокристаллов $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ с различной степенью легирования празеодимом, по мере возрастания концентрации празеодима критическая температура уменьшается, а электросопротивление возрастает, что согласуется с литературными данными [10,11].

При этом следует отметить, что для концентрации празеодима ($0,0 \le x \le 0,34$), экспериментальные кривые сохраняют достаточно широкий температурный участок с квазиметаллическим характером зависимости $\rho_c(T)$. При последующем росте концентрации празеодима эти кривые приобретают ярко выраженный вид с характерным термоактивационным поведением, что свидетельствует об усилении роли локализационных эффектов.

В координатах $\ln\rho_{ab}$ – 1/T экспериментальные кривые спрямляются в достаточно широком температурном интервале, что соответствует их описанию посредством аналитического соотношения:

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

где Δ - некоторая энергия активации.

В то же время, при понижении температуры ниже некоторого характерного значения начинается систематическое отклонение экспериментальных точек от линейной зависимости, что, согласно [15], может служить признаком реализации в системе перехода металл - диэлектрик (МД) «андерсоновского» типа. Как известно из литературы [15], переход Андерсона может происходить также и в веществах, которые не являются аморфными, но которые, одновременно, имеют определенную степень неупорядоченности. В соединениях системы 1-2-3 роль такого фактора может играть как разупорядочения лабильной компоненты [9,16], так и индуцированная допированием празеодимом частичная кластеризация экспериментального образца [17].

В работе [18] для анализа экспериментальных кривых $\rho_{ab}(T)$ была предложена формула:

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

где первое слагаемое описывает металлический или полупроводниковый температурный ход сопротивления в нормальном состоянии, а второе - флуктуационную сверхпроводимость, возникающую при температуре выше резистивного перехода в сверхпроводящее состояние [19]; *n* и *1-n* – доли металлической и полупроводниковой проводимостей, соответственно. Флуктуационная парапроводимость для этих экспериментальных кривых более детально анализируется нами в [19]. При этом следует отметить, что все подгоночные параметры, использованные в нашем анализе, являются линейными формулами одного из них, который фактически совпадает со значениями концентрации празеодима в наших образцах. Т.о. можно сделать вывод о том, что в нашем случае формула (2), как и в работе [18], по существу является однопараметрической.

Используя значения параметров, полученных из анализа наших кривых посредством формулы (2), мы, по методике [18], разделили вклады, соответствующие металлической и полупроводниковой составляющей проводимости для всех исследованных образцов. Температурные зависимости $\sigma_{мет}(T)$ и $\sigma_{п.п}(T)$, рассчитанные по формулам (3) [18] с использованием вышеуказанных параметров:

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

показали, что несмотря на то, что с увеличением концентрации празеодима доля полупроводниковой составляющей возрастает, сверхпроводящий переход всегда наступает после того, как начинает выполняться неравенство $\sigma_{мет} > \sigma_{п.п}$. Иными словами, можно сделать вывод о том, что в образцах $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ сверхпроводящему переходу всегда предшествует переход металл – диэлектрик.

Если за точку перехода металл – диэлектрик условно принимать температуру $T_{мд}$, при которой $\sigma_{мет} = \sigma_{п.п}$, то можно видеть, что увеличение концентрации празеодима приводит к существенному смещению $T_{мд}$ в область низких температур.

В заключение кратко просуммируем результаты, полученные в настоящей работе. Увеличение степени допирования празеодимом в образцах $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ приводит к усилению эффектов локализации и реализации в системе перехода вида металл – диэлектрик, который всегда предшествует сверхпроводящему переходу. Увеличение концентрации празеодима приводит к существенному смещению точки перехода $T_{ми}$ в область более низких температур, что, по-видимому, связано с увеличением доли полупроводникового вклада в проводимость экспериментальных образцов.

Литература

1. *Abrikosov A. A.,* Usp. Fiz. Nauk 168, 683 (1998).
2. *Vovk R.V., Obolenskii M.A., Bondarenko A.V., Goulatis I.L., Samoilov A.V., Chroneos A.I., Pinto Simoes V.M.,* J. Alloys Compd. 464, 58 (2008).
3. *Ginzberg D. M.* (ed.), Physical Properties of High Temperature Superconductors I, World Scientific, Singapore (1989).
4. *Stojkovic B.P. and Pines D.,* Phys. Rev. B 55, 8567 (1997).
5. *Vovk R.V., Obolenskii M.A., Zavgorodniy A.A., Goulatis I.L., Chroneos A.I., Mater J.* Sci.: Mater. Electron. 20, 858 (2009).
6. *Obolenskii M.A., Vovk R.V., Bondarenko A.V., Chebotaev N.N.* / Low Temperature Physics (2006) 32 (6) , pp. 571-575. [M.A.Obolenskii, R.V.Vovk, A.V.Bondarenko, and N.N.Chebotaev / Fiz. Nizk. Temp., v.32, №6, p.746-752 (2006)].
7. *Bondarenko AV, Shklovskij VA, Obolenskii MA, et al.* // Physical Review B Volume: 58 Issue: 5 P. 2445-2447 (1998).
8. *Vovk R. V., Vovk N. R., Shekhovtsov O. V., Goulatis I. L., Chroneos A.* / Accepted to Supercond. Sci. Technol (2013).
9. *Vovk R. V., Nazyrov Z. F., Obolenskii M. A., Goulatis I. L., Chroneos A. and Pinto Simoes V.M.* Philos. Mag. 91, 2291 (2011).
10. *Kebede A.et al.* Phys. Rev. B 40, p.4453-4462 (1991).
11. *Radousky H.B., Mater J.* Res. V.7, N7, p.1917-1955 (1992).
12. *Vovk R.V., Obolenskiy M.A., Zavgorodniy A.A., Lotnyk D.A., Kotvitskaya K.A.* // Physica B 404 (2009) p. 3516-3518.
13. *Vovk M.A. Obolenskii A.A. Zavgorodniy A.V. Bondarenko I.L. Goulatis A.I. Chroneos A.* // J Mater Sci: Mater in Electron. -2007. -V.18. -P. 811-815.
14. *Vovk R. V., Obolenskii M. A., Nazyrov Z. F., Goulatis I. L., Chroneos A.* / Journal of Materials Science: Materials in Electronics (2012) 23:1255–1259 DOI 10.1007/s10854-011-0582-8.
15. *Mott N.F.* Metal-insulator transition. - Word Scientific: London, 1974.
16. *Vovk R.V., Obolenskii M.A., Zavgorodniy A.A., Goulatis I.L., Beletskii V.I., Chroneos A.* // Physica C. – 2009. –V.469. – P. 203-206.
17. *Chroneos A., Goulatis I.L., Vovk R.V.* / Acta Chimica Slovenica 54 (1) , pp. 179-184 (2007).
18. *Волошин В.А., Абалышева И.С., Бочкова Г.Ю., Бойко Ф.А., Дорошенко Н.А., Южелевский Я.И.* // ФТТ. -1996. -т.38, №5. -с.1553-1558.
19. *Vovk R. V., Nazyrov Z. F., Goulatis L. I., Chroneos A.* / Journal of Low Temperature Physics (2013) V. 170, Issue 3-4, pp 216-222 170:216-222 DOI 10.1007/s10909-012-0755-8.

http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1358 http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper_e.php?p=1358

РЕЛАКСАЦИЯ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ НЕДОДОПИРОВАННЫХ КИСЛОРОДОМ МОНОКРИСТАЛЛОВ $YBA_2CU_3O_{7-\delta}$ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ВЫСОКОГО ГИДРОСТАТИЧЕСКОГО ДАВЛЕНИЯ

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

В работе исследовано влияние высокого гидростатического давления на электросопротивление в ab-плоскости монокристаллов $YBA_2CU_3O_{7-\delta}$ с недостатком кислорода. Установлено, что температурная зависимость электрического сопротивления определяется флуктуационной проводимостью вблизи Тс и рассеянием электронов на фононах в нормальном состоянии. Высокое давление вызывает перераспределение лабильного кислорода, приводящее к усилению фазового расслоения. Снятие давления сопровождается процессами релаксации как в фононной, так и в электронной подсистемах, характерные времена которых значительно отличаются друг от друга

RELAXATION OF THE ELECTRICAL RESISTANCE NEDOBOROVSKYY OXYGEN MONOCRYSTALS $YBA_2CU_3O_{7-\delta}$ WHEN EXPOSED TO HIGH HYDROSTATIC PRESSURE

Khadjay G., Vovk R., Vovk N., Nazyrov Z.
V.N.Karazin Kharkov National University

We have investigated the influence of the high hydrostatic pressure on the electrical resistance in the ab-plane of YBA2CU3O7-d single crystals c by the lack of oxygen. It is established that the temperature dependence of the electric resistance is determined by the fluctuation conductivity near TC and scattering of electrons on phonons in a normal condition. High pressure causes a redistribution of labile oxygen, leading to the strengthening of the phase stratification. Removing the pressure is accompanied by relaxation processes in phonon and electron subsystems, characteristic times are significantly different from each other

В отсутствие микроскопической теории высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) [1] особое значение приобретают экспериментальные методики позволяющие проверить адекватность многочисленных теоретических моделей, а также определить эмпирические пути повышения критических параметров ВТСП-соединений. Одним из таких важнейших методов является применение высоких давлений [2-10]. При этом следует отметить, что присутствие в структуре ряда ВТСП (в частности, в соединении $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$) лабильной

компоненты приводит к возможной реализации в таких соединениях, так называемых, «истинного» [2, 4, 6, 9] и «релаксационного» [3, 5, 7, 8] эффектов давления. Первый эффект условно связывают с изменением параметров решетки, электрон-фононного взаимодействия, связей между слоями и т.д. [11], в то время как «релаксационный» эффект обусловлен изменением количества носителей тока под давлением, в свою очередь, связанным с перераспределением лабильного кислорода [3, 5, 7, 8]. В нашей недавней работе [9] было исследовано влияние «истинного» эффекта давления на нормальный электротранспорт кислороддефицитных монокристаллов $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$. В то же время, как отмечалось выше, важной особенностью ВТСП-соединений системы $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ является возможность реализации в них неравновесного состояния при определенной степени дефицита кислорода [12-14], которое может быть индуцировано посредством внешних воздействий, например температуры [13, 14] или высокого давления [3, 5, 7, 8, 11]. Это состояние сопровождается перераспределением лабильного кислорода и структурной релаксацией, что, в свою очередь, оказывает значительное влияние на электротранспортные параметры системы [7, 8, 13, 14]. Важную роль при этом играет степень отклонения от кислородной стехиометрии [6-8, 12-14]. Все эти явления чрезвычайно важны для создания новых сверхпроводящих материалов с высокой токонесущей способностью. Характерной особенностью образцов с дефицитом кислорода $\delta \geq 0.3$ является уширение их резистивных переходов в сверхпроводящее состояние под давлением [3, 4, 7, 8, 10]. Причина такого поведения к настоящему времени окончательно не установлена. Следует также отметить, что, несмотря на значительное число работ, посвященных исследованиям релаксационных процессов в системе 1-2-3 при высоком давлении, многие аспекты этого явления, например, такие как перенос заряда и характер перераспределения в вакансионной подсистемы, остаются все еще окончательно невыясненными. Очевидно, определенную роль здесь играет тот факт, что существенная часть экспериментального материала была получена на керамических, текстурированных и поликристаллических образцах с высоким содержанием межгранулярных связей [2-5].

Учитывая вышесказанное, в настоящей работе были проведены исследования влияния гидростатического давления до 8 кбар на электротранспортные характеристики и структурную релаксацию в *ab*-плоскости монокристаллических образцов $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ с пониженным содержанием кислорода $\delta \approx 0.5$ и критической температурой $T_c \approx 50$ К.

Монокристаллы $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ выращивали по раствор-расплавной технологии в золотом тигле по методике [6-10]. Для получения образцов с оптимальным содержанием кислорода отобранные кристаллы отжигали в потоке кислорода при температуре 400°С в течение пяти суток. Для уменьшения содержания кислорода проводили их отжиг в течение суток в атмосфере воздуха при температуре 600°С. Электрические контакты создавали по стандартной 4-х зондовой схеме при помощи серебряной пасты. Гидростатическое давление создавали в автономной камере типа поршень-цилиндр [9]. Величину давления измеряли с помощью манганинового манометра, температуру – медь-константановой термопарой, вмонтированной в наружную поверхность камеры на уровне образца. Для определения влияния перераспределения кислорода проводили измерения по истечении нескольких суток после приложения-снятия давления по мере завершения релаксационных процессов.

Как показал анализ температурных зависимостей электросопротивления образца, измеренных в *ab*-плоскости, $\rho_{ab}(T)$, при различных давлениях, уменьшение содержания кислорода помимо понижения критической температуры от 92 до 50 К и увеличения абсолютного значения удельного электросопротивления от 200 μОм·см до 750 μОм·см, привело к переходу от квазиметаллического поведения кривых $\rho_{ab}(T)$ [6] к зависимостям с характерной *s*-образной формой.

При понижении содержания кислорода ширина перехода в сверхпроводящее состояние существенно возрастает по сравнению с исходным образцом. Это, видимо, свидетельствует о появлении в образце признаков фазового расслоения [7, 8, 10]. Приложение давления приводит к понижению электросопротивления и росту T_c (см. таблицу) со скоростью $dT_c/dP \approx 0.82$ К·кбар$^{-1}$, что согласуется с литературными данными [2-10].

Как отмечалось в работах [8, 10], отклонение от стехиометрии по кислороду может приводить к тому, что зависимости $dR_{ab}(T)/dT$ в области сверхпроводящего перехода становятся асимметричными, приобретают ступенчатую форму или на этих зависимостях появляются дополнительные пики. Согласно [4, 8, 10] максимумы на этих зависимостях соответствуют T_c. В нашем случае отчетливо выраженных пиков на резистивных переходах не наблюдалось, что может быть связано с наличием перколляционных путей протекания тока по фазе с более высокой T_c [6]. В то же время, значительное уширение СП-перехода, по сравнению с исходным, оптимально допированным кислородом, образцом и наличие слабо выраженного остаточного максимума на отдельных кривых может свидетельствовать о появлении в образце как минимум двух фаз, имеющих, соответственно, различные критические температуры перехода в сверхпроводящее состояние [8, 10]. Согласно [3] в качестве таких температур могут быть приняты температуры начала и конца резистивного перехода (T_{co} и T_{cf}) в сверхпроводящее состояние.

Как показал анализ, выдержка образца при комнатной температуре в процессе приложения–снятия давления помимо абсолютного изменения величины T_c приводит к существенным качественным изменениям ширины и формы сверхпроводящего перехода. Выдержка (отжиг) образца под давлением приводит к уменьшению величины производной $d\rho_{ab}/dT$ в области сверхпроводящего перехода более чем в 2 раза и к значительному уширению перехода. Сброс давления вызывает только незначительное увеличение $d\rho_{ab}/dT$, и лишь выдержка образца при комнатной температуре в течение 3 суток при атмосферном давлении приводит к возврату $d\rho_{ab}/dT$. Что касается барической производной, dT_c/dP, то она возрастает на этом этапе и далее практически не изменяется. Все это дает нам основание предположить, что увеличение давления вызывает перераспределение лабильного кислорода, что приводит к изменению фазового состава образца. Это, в свою очередь, влияет на форму кривой сверхпроводящего перехода. При уменьшении давления происходит обратное перераспределение. Подобное явление возможно, например, в случае реализации процесса восходящей диффузии [8, 10].

На каждом этапе процесса приложения–снятия давления электрическая проводимость образца в интервале

T_C–300 К может быть аппроксимирована как сумма проводимости, которая ограничена рассеянием электронов на фононах (*s*–*s* и *s*–*d* процессы [15]) и флуктуационной проводимости (2D модель Асламазова–Ларкина [16]):

$$\sigma=\rho_{scat.}^{-1}+\Delta\sigma_{AL} \quad (1)$$

$$\rho_{scat.}=(\rho_0+\rho_i)\cdot(1-b_0\cdot T^2),\ \rho_i=\rho_3+\rho_5,\ \rho = C_n\cdot\left(\frac{T}{\theta}\right)^n\int_0^{\theta/T}\frac{x^n e^x}{(e^x-1)^2}dx \text{ [15]}, \quad (2)$$

Здесь ρ_0 – остаточное сопротивление; ρ_3, ρ_5 – вклады в сопротивление за счет внутризонного (*s*–*s* процессы, ρ_5) и межзонного (*s*–*d* процессы, ρ_3) рассеяния на фононах; θ – температура Дебая; b_0 зависит от формы кривой плотности электронных состояний, эффективных масс носителей тока и энергии Ферми [17, 18]; $\Delta\sigma_{AL}=e^2/(16\hbar d\varepsilon)$, $\varepsilon=\ln(T/T_C)$ – приведеная температура, T_C – критическая температура в приближении среднего поля, $T\geq T_C$, d – расстояние между проводящими слоями в ВТСП [16]. Величину T_C определяли по положению максимума производной $d\rho/dT$.

Параметры такой аппроксимации, которые обеспечивают наименьшее среднее отклонение ≈1% от экспериментальных значений на интервале T_C–300 К, приведены в таблице вместе с данными о состоянии образца. Из таблицы видно, в частности, что через 3 суток выдержки без давления при комнатной температуре только величины T_C (и связанный с нею кислородный дефицит, δ), ΔT_c, а также низкотемпературное значение $(d\rho/dT)_{max}$ вернулись к своим начальным значениям.

Параметры, которые характеризуют рассеяние электронов на фононах (ρ_0, C_3, C_5, θ) медленнее возвращаются к начальным значениям, то есть время их релаксации по крайней мере превышает 3 суток. Более всего изменились параметры b_0 (24%) и $e^2/(16\hbar d)$ (16%). Чувствительность параметра b_0 к состоянию образца свидетельствует о том, что уровень Ферми находится на склоне минимума кривой плотности электронных состояний (псевдощель). Значения температуры Дебая, θ, соответствуют литературным данным [19]; величины межслоевого расстояния, d, согласуются с литературными данными [16] для этапов 1–3 и 5. Значение d для этапа 4 достаточно мало, что свидетельствует о существенном искажении структуры образца после резкого снятия давления, которое затем исчезает при отжиге (выдержке) образца при комнатной температуре. О резком искажении структуры образца после этапа 4 свидетельствуют также резкие изменения параметров θ и b_0 (см. табл.).

Согласно [8,21], низкотемпературная (обедненная кислородом) фаза может формироваться на двойниковых границах. Последние всегда возникают в монокристаллах при насыщении кислородом как следствие сегнетоэлластического тетра-орто перехода, минимизирующего упругую энергию кристалла [22,23]. При этом высокотемпературная (обогащенная кислородом) фаза образуется непосредственно в объеме сверхпроводника. Видно, что приложение давления приводит к увеличению объемной концентрации кислорода, вероятно за счет заполнения кислородных вакансий. С этим, вероятно, связано и соответствующее уменьшение остаточного сопротивления, ρ_0.

Следует также отметить, что зависимость, полученная для низкотемпературной фазы, ведет себя антисимметрично относительно высокотемпературной кривой. Это может служить косвенным подтверждением высказанного ранее предположения о возможности реализации процесса восходящей диффузии в экспериментальном образце в процессе его отжига под высоким давлением. Как было показано в теоретической работе [24] такие эффекты могут быть обусловлены собственными дефектами, которыми в нашем случае являются вакансии лабильного кислорода. При этом зависимость, полученная для T_c, определяемой по максимуму $d\rho(T)/dT$ в области СП-перехода, достаточно слабо меняется в процессе отжига под давлением, что, по-видимому, отражает проявление, так называемого, «истинного» эффекта давления [2, 4, 6, 9] о котором говорилось во вступительной части работы.

На этапе 4, по-видимому, происходит резкое уменьшение объемной концентрации кислорода, что и приводит к уменьшению θ вследствие уменьшения плотности вещества между слоями (см., напр. [25]). Тогда уменьшение межслоевого расстояния, d, на 4-ом этапе также может быть связано с уменьшением плотности объемного кислорода.

Из таблицы видно, что под давлением существенно возрастает критическая температура (T_c), уменьшается остаточное сопротивление (ρ_0) и *s*–*d* рассеяние электронов на фононах (C_3). Определенную роль при этом могут играть специфические механизмы квазичастичного взаимодействия, обусловленные присутствием в системе структурной и кинематической анизотропии [26-29]. Параметр C_5 почти не уменьшается.

Таким образом высокое давление вызывает, в первую очередь, перераспределение лабильного кислорода, как это и было ранее установлено, например, в [5,8,10]. В свою очередь, перераспределение лабильного кислорода при изменениях давления приводит к процессам, которые проявляются в изменениях параметров аппроксимации.

Перераспределение лабильного кислорода при изменениях давления влияет как на сверхпроводящий переход, так и на рассеяние электронов на фононах таким образом, что для разных процессов времена релаксации оказываются различными. Можно предположить, что при изменении концентрации объемного кислорода из-за изменений давления изменяется пространственное распределение и размеры кластеров низко- и высокотемпературных фаз [7, 8, 13, 14]. Последнее предполагает диффузионное перемещение кислорода на расстояние порядка размеров кластеров. Причем изменение фазового состава и дефектности образца по-разному влияет на сверхпроводящие характеристики и рассеяние электронов, что и приводит к разной скорости релаксации для различных процессов.

В заключение кратко просуммируем результаты, полученные в настоящей работе. Температурная зависимость электрического сопротивления $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ з $\delta\approx0.5$ в плоскости слоев имеет «металлический» характер и в интервале T_C–300 К может быть аппроксимирована с учетом рассеяния электронов на фононах и флуктуационной проводимости Асламазова–Ларкина. Индуцированное высоким давлением перераспределение лабильного кислорода приводит к увеличению концентрации объемного кислорода за счет заполнения кислородних вакансий. Перераспределение лабильного кислорода можно считать обратимым, но времена релаксации отдельных процессов значительно отличаются друг от друга.

Литература

1. *Кашурников В.А., Красавин А.В.* Современные проблемы физики твердого тела, ч. 2, Высокотемпературная сверхпроводимость. М.: изд. МИФИ, 2002.
2. *Griessen R.* Phys. Rev. B36, 5284 (1987).
3. *Driessen A., Griessen R., Koeman N., Salomons E., Brouwer R., D.G. de Groot, Heeck K., Hemmes H., Rector J.* Phys. Rev., B36, 5602 (1987).
4. *Borges H.A.and Continentino M.A.* Solid State Commun. 80, 197 (1991).
5. *Fietz W.H., Quenzel R., Grube K., Metzger J., Weber T., Ludwig H.A.* Physica C235, 1786 (1994).
6. *Vovk R.V., Obolenskii M.A., Zavgorodniy A.A., Bondarenko A.V., Goulatis I.L., Samoilov A.V. and Chroneos A., Alloys J.* Compds, 453, 69 (2008).
7. *Vovk R.V. et al Vovk R. V., Zavgorodniy A. A., Obolenskii M. A., Goulatis I. L., Chroneos A., Pinto Simoes V.M., Mater J.* Sci.: Mater. Electron., 22, 20 (2011).
8. *Vovk R. V., Nazyrov Z. F., Obolenskii M. A., Goulatis I. L., Chroneos A., Pinto Simoes V.M.* Philosophical Magazine 91, 2291 (2011).
9. *Вовк Р.В., Хаджай Г.Я., Оболенский М.А.* ФНТ, 38, 323 (2012).
10. *Vovk R. V., Khadzhai G.Ya., Nazyrov Z. F., Goulatis I. L., Chroneos A.* Physica B407, 4470 (2012).
11. *Gupta R.P., Gupta M.* Phys. Rev. B51, 11760 (1995).
12. *Jorgencen J.D., Shiyou Pei, Lightfoot P., Shi H., Paulikas A.P., Veal B.M.W.* Physica C167, 571 (1990).
13. *Obolenskii M.A., Bondarenko A.V., Vovk R.V., Prodan A.A.* Low Temp. Phys. 23, 882 (1997).
14. *Vovk R.V., Obolenskii M.A., Zavgorodniy A.A., Goulatis I.L., Beletskii V.I., Chroneos A.* Physica C469, 203 (2009).
15. *Colquitt L.* J. of Applied Physics, 36, 2454 (1965).
16. *Aslamazov L.G. and Larkin A.I.* Phys. Lett., 26A, 238 (1968).
17. *Aisaka T. and Shimizu M.J.* Phys. Soc. Japan., 28, 646 (1970).
18. *Жураковский Е.А., Немченко В.Ф.* Кинетические свойства и электронная структура фаз внедрения.-Киев: Наук. думка, 1989.
19. *Varshney D., Singh R.K. and Khaskalam A.K.* Phys. stat. sol. (b)., 206, 749 (1998).
20. *Krekels T., Zou H., G. van Tendeloo, Wagener D., Buchgeister M., Hosseini S.M. and Herzog P.* Physica C196, 363 (1992).
21. *Vovk R.V., Obolenskii M.A., Bondarenko A.V., Goulatis I.L., Samoilov A.V., Chroneos A.I., Pinto Simoes V.M., Alloys J. and Compaunds*, 464, 58 (2008).
22. *Vovk R.V., Obolenskii M.A., Nazyrov Z.F., Goulatis I.L., Chroneos A. and Pinto Simoes V.M., Mater J.* Sci.: Mater. Electron., 23, 1255 (2012).
23. *Bondarenko A.V., Shklovskij V.A., Obolenskii M.A., Vovk R.V., Prodan A.A., Pissas M., Niarchos D. and Kallias G.* Phys. Rev. B58, 2445 (1998).
24. *Займан Дж.* Электроны и фононы. – М.: Изд. Иностранной литературы, 1962.
25. *Косевич А.М.* УФН, 114, 507 (1974).
26. *Vovk R.V., Williams C.D.H. and Wyatt A.F.G.* Phys. Rev., B69, 144524 (2004).
27. *Smith D.H.S., Vovk R.V., Williams C.D.H. and Wyatt A.F.G.* New J. Phys., 8, 128 (2006).
28. *Smith D.H.S., Vovk R.V., Williams C.D.H. and Wyatt A.F.G.* Phys. Rev. B72, 054506 (2005).
29. *Vovk R.V.', Obolenskii M.A., Zavgorodniy A.A., Lotnyk D.A., Kotvitskaya K.A.* Physica B: Condensed Matter, 404, 3516 (2009).

Таблица. Параметры аппроксимации электрического сопротивления по (1)–(3) и характеристики сверхпроводящего перехода для различных состояний образца.

Состояние образца → Параметры аппроксимации ↓	1 – исходное состояние, P=0	2 – непосредственно после приложения давления P=7.8 кбар	3 – после выдержки в течение недели при P=7.8 кбар	4 – непосредственно после снятия давления, P=0	5 – после выдержки в течение трех дней при P=0	Δ_{fin}, %
T_c, K	49.80	54.92	56.18	48.94	49.82	0.04
ΔT_c, K	1.1	3.6	3.3	3.4	0.9	18
$10^6 \cdot (d\rho/dT)_{max}$, Ohm·cm/K	0.56	0.23	0.21	0.27	0.62	11
dT_c/dP, K/кбар	—	0.65	0.82	0.93	0.82	—
$\rho_0 \cdot 10^6$, Ohm·cm	1.14	0.98	0.94	1.18	1.09	–4
$C_3 \cdot 10^5$, Ohm·cm	1.77	0.93	0.67	1.26	1.94	10
$C_5 \cdot 10^5$, Ohm·cm	7.0	7.3	7.3	7.1	7.5	7
θ, K	690	698	696	667	702	2
$b_0 \cdot 10^6$	2.4	2.4	2.2	1.7	3.0	25
d, Å	9.9	11.1	9.9	5.2	11.5	15

http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper.php?p=1359 http://www.ivtn.ru/2013/confs/enter/paper_e.php?p=1359

СОДЕРЖАНИЕ

CONTENTS

ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В НАУКЕ

COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENCE

ЗАЯВКА НА УЧАСТИЕ В РАБОТЕ ИВТН-2014

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-2014 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-2013

COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENTIFIC RESEARCHES
IVTN-2013 Session

Сборник материалов
The Proceedings

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

Editorial board
Make-up: *Kuprina Yu.*
Translators: *Belikova D.*
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