

$$y = -7,53 + 0,79v_1 + 5,56v_2 + 8,33v_3,$$

$$\begin{cases} v_1 = 0,4x_{11} + 0,4x_{12} + 0,2x_{13} \\ v_2 = 0,0083x_{21} + 0,01x_{22} + 0,0167x_{23} + 0,015x_{24}, \\ v_3 = 0,0057x_{31} + 0,0029x_{32} + 0,0114x_{33}, \end{cases}$$

Данные этой модели были исследованы с помощью МГК и рассмотрены автором [4]. Результаты полностью подтвердили адекватность нашей модели.

Библиографический список

1. Оскорбин Н.М. Математические модели систем с латентными переменными // Известия АГУ. – 2012. №1/2(73). – С. 97–100.
2. Оскорбин Н.М., Суханов В.А. Исследование операций и теория игр в элементарном изложении. – Барнаул: Изд-во Алт. ун-та, 1987. – 62 с.
3. Смолякова Л.Л. Построение модельного примера успешности обучения бакалавров ФМиИТ АлтГУ с использованием МГК // Ломоносовские чтения на Алтае: фундаментальные проблемы науки и образования : сборник научных статей международной конференции, Барнаул, 20–24 октября, 2015. – Барнаул : Изд-во Алт. ун-та, 2015. – 878-884 с.
4. Смолякова Л.Л. Применение МГК для анализа данных успешности обучения бакалавров математического факультета АлтГУ // Анализ, геометрия и топология : труды всероссийской молодежной школы-семинара, Барнаул, 2-4 октября, 2013 : в 2 ч. – Барнаул: ИП Колмогоров И.А., 2013. – Ч.2. – С. 142–147.

УДК 532.135

Математическое моделирование динамики разветвленной макромолекулы

Ю.Б. Трегубова
АлтГТУ, г. Барнаул

Работа посвящена формулировке и решению уравнений динамики разветвленной макромолекулы в рамках микроструктурного (статистического) подхода. Такой подход позволяет учитывать как молекулярное строение вещества, так и процессы межмолекулярного взаимодействия. Он был успешно применен при моделировании динамики линейных макромолекул [1, 2].

Всякая макромолекула может быть эффективно представлена как цепочка связанных броуновских частиц (так называемая модель гауссовых субцепей или шариков и пружин [3]). При этом макромолекула разбивается на N субцепей длиной M/N каждая, а поведение макромолекулы описывается движением линейной цепочки из $N+1$ броуновских частиц, связанных между собой последовательно упругими силами.

Динамика рассматриваемой макромолекулы может быть упрощена допущением, что соседние макромолекулы описываются как единообразная бесструктурная среда и все важные взаимодействия могут быть превращены во внутримолекулярные взаимодействия, так что крупномасштабная стохастическая динамика единичной макромолекулы в такой системе может быть рассмотрена как динамика эффективной броуновской частицы.

Пренебрегая взаимным гидродинамическим взаимодействием частиц в линейном по скоростям приближении, динамика единичной цепочки может быть описана набором стохастических уравнений, которые подробно рассматриваются в [1].

Решение указанной системы дифференциальных уравнений проводилось методом Эйлера с применением параллельных вычислений. В результате решения получали траектории частиц. Для того, чтобы уменьшить влияние случайных сил и проанализировать релаксационные свойства полученной физической системы проводилось достаточно большое количество вычислений, а затем усреднение полученных траекторий.

Моделирование проводилось для макромолекул h -полимеров, гребней, кистей, простых звезд и звезд с лучами из двух мономеров.

Для обозначенных ранее разветвленных макромолекул было выявлено присутствие диффузного механизма движения, которое проявляется в наличии характерного плато на рассчитанных зависимостях.

Для макромолекул h -полимеров и простых звезд количество субцепей N в моделируемой макромолекуле практически не оказывает влияния на получаемые кривые (рисунок 1). В случае кистей и звезд с лучами из двух мономеров влияние этого параметра модели на зависимости (рисунок 2) слабое. Очень важное значение количество субцепей N в моделируемой макромолекуле имеет для греб-

ней (рисунок 3). Значения параметров модели, при которых велись расчеты, результаты которых представлены на рисунках 1–5, следующие $B = 2265$, $\chi = 0,02$, $\psi = 23$.

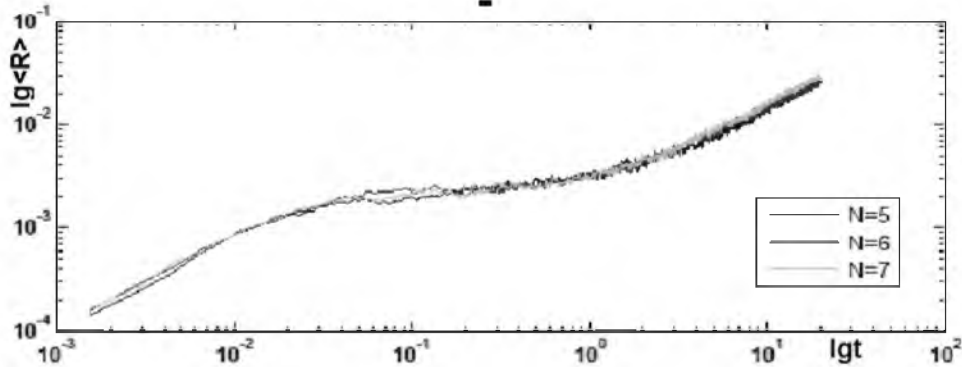


Рисунок 1 – Среднее смещение центра масс макромолекулы h-полимера от времени при различных значениях N

Отметим, что для макромолекулы гребнеобразного полимера, с увеличением N происходит уменьшение размеров плато.

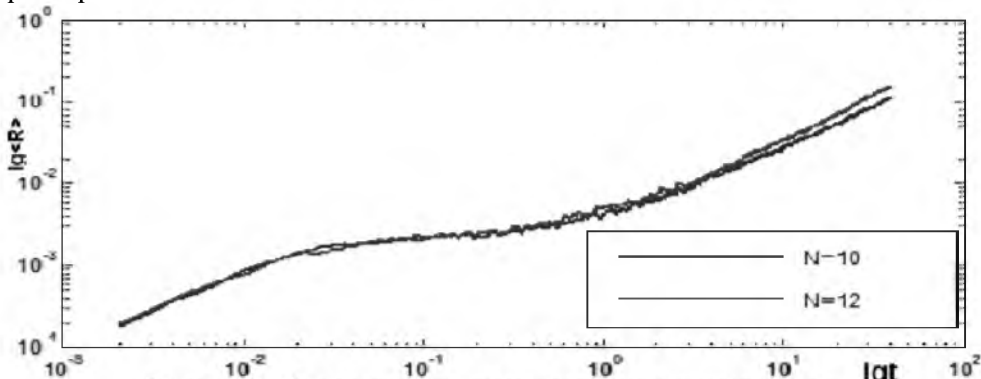


Рисунок 2 – Среднее смещение центра масс макромолекулы – кисти от времени при различных значениях N

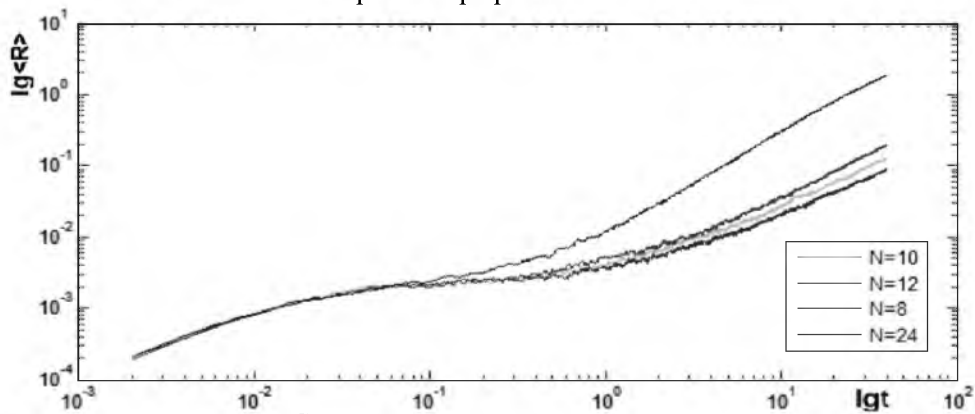


Рисунок 3 – Среднее смещение центра масс макромолекулы – гребня от времени при различных значениях N

Также было проведено сравнение траекторий центра масс макромолекулы для разных видов полимеров. При сравнении расчетов для макромолекулы h-полимера и линейного полимера, у которых одинаковое количество субцепей, результаты получаются очень близкими, практически аналогичные (рисунок 4). Если же мы сравниваем молекулу линейного полимера и макромолекулу – звезду с лучами из двух мономеров, то появляется значительная разница: размер плато у линейной макромолекулы меньше, и оно появляется раньше (рисунок 5).

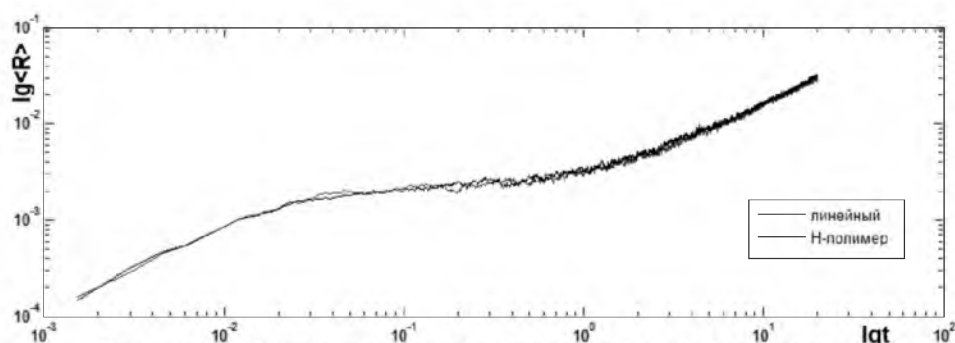


Рисунок 4 – Кривые среднего смещение центра масс макромолекул линейного полимера и h-полимера от времени при $N = 7$, $V=2265$, $\chi = 0,02$, $\psi = 23$

В работе также было исследовано влияние параметра χ на получаемые зависимости. Все исследованные в работе полимерные молекулы аналогично реагируют на изменение величины параметра χ . С ростом увеличения χ расстояние, которое проходит макромолекула до выхода на плато, больше.

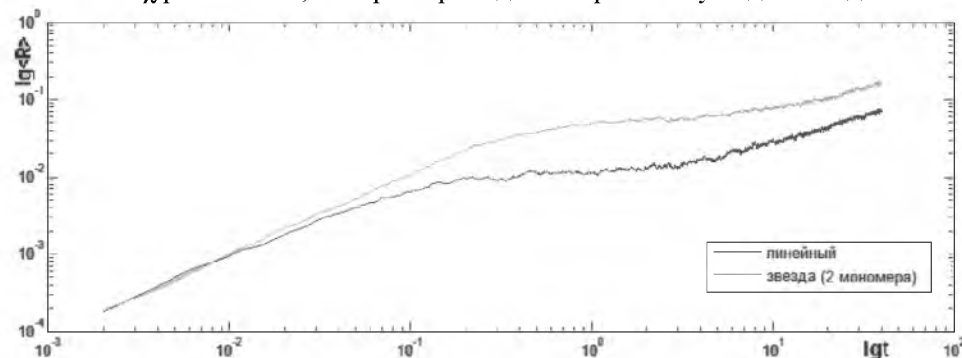


Рисунок 5 – Кривые среднего смещение центра масс макромолекул линейного полимера и звезды с лучами из двух мономеров от времени при $N = 13$, $V=2265$, $\chi = 0,02$, $\psi = 23$

Таким образом, в работе сформулирована и решена система уравнений динамики разветвленной макромолекулы. Показано наличие диффузного механизма движения разветвленной макромолекулы в окружении себе подобных.

Библиографический список

1. Алтухов Ю.А., Трегубова Ю.Б., Третьяков И.В. К обоснованию рептационного механизма диффузии линейной макромолекулы в теории микровязкоупругости // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2011. – №4. – С. 27–31.
2. Алтухов Ю.А., Трегубова Ю.Б. Броуновская динамика как модель поведения макромолекулярной системы // *Ломоносовские чтения на Алтае : сборник научных статей международной школы-семинара*. – Барнаул, 2011. – С. 243–246.
3. Покровский В.Н. Динамика слабо связанных линейных макромолекул // *Успехи физических наук*. – 1992. – № 5, т. 162. – С. 87–121.

УДК 519.673

Использование среды Wolfram Mathematica при разработке социально-ориентированных геоинформационных систем

А.С. Тякунов, В.В. Славский, А.О. Ташкин
ЮГУ, г. Ханты-Мансийск

Одним из наиболее важных аспектов при построении социально-ориентированных систем (в том числе, и геоинформационных) является способность создаваемого программного средства получать и обрабатывать информацию динамически, предоставляя таким образом результат деятельности в максимально соответствующем действительности виде. Поскольку любая информационная система, в общем смысле, является «справочником», позволяющим человеку оперативно получать некоторые данные, необходимые ему для принятия решений, важно не только произвести автоматизацию некой математической модели, но и продумать удобный и быстрый механизм передачи данных в систему.