

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
«ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ»

МОСКОВСКИЙ ИНСТИТУТ ЭЛЕКТРОНИКИ И МАТЕМАТИКИ
НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
«ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ»

МИЭМ



ФОНД СОДЕЙСТВИЯ РАЗВИТИЮ
малых форм предприятий в научно-технической сфере

SuperJob

МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ

**Межвузовская
научно-техническая
конференция студентов,
аспирантов и молодых
специалистов им. Е.В. Арменского**

2016 г.

СОДЕРЖАНИЕ

<u>Секция 1 "Математика и компьютерное моделирование"</u>	7-47
Игонин Д.М. Система распознавания образов на фоне подстилающей поверхности с использованием искусственных нейронных сетей	7
Журков А.П. Построение диагностических графов для распределенной радиотехнической системы наблюдения минимальной конфигурации	8-9
Чусовлянкин А.А. "Антижадный" алгоритм для решения задачи коммивояжера	10-11
Беклемищев Ф.С. Динамическая модель катапультного устройства с параметрической моделью пиропривода в программном комплексе EULER	12-13
Морозов А.Ю. Уменьшение эффекта обертывания в методах рядов Тейлора решения задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений с интервальными начальными условиями	14-15
Лис А.И. Применение нечетких чисел для оценки американских опционов	16
Лебедева Н.А. Методика уточнения коэффициентов математической модели дозирующего клапана и клапана постоянного перепада	17
Дроботов Ю.Е. Вакулов Б.Г. К исследованию условий ограниченности потенциала Рисса переменного порядка в пространствах обобщенной и переменной гёльдеровости со специальными весами	17-18
Эрво В.А. Особенности реализации Android-приложения для построения IDEF-диаграмм	18-19
Колотев С.В. Моделирование пространственных эволюционных игр	19-20
Клименкова О.Д. Оптимальное управление распространением вирусов: аналитические и численные результаты	20-21
Балакирева Е.Ю. Исследование коэффициента гравитационного потенциала J_2 для Земли и планет Солнечной системы по спутниковым данным	21-22
Зимин С.М. Эффективная рекурсивная реализация алгоритма быстрого вычисления семейства дискретных сверток	22-23
Пузино Ю.А. Обработка результатов испытаний на сжатие с плоской деформацией	24-25
Журин Ю.В. Исследование возможностей вычисления высоты облачности земли путём анализа видеоданных с МКС	26
Бугрова А.Д. Моделирование термонапряженного состояния комплекса ACS для миссии ExoMars	27
Захарьев И.Ю. Определение реологических свойств сверхпластичных материалов на примере алюминиевых сплавов	28-29
Артюшкин В.И. Моделирование структур матричных процессоров с использованием сетей Петри	30-31
Хоменко И.И. Мониторинг тепловых характеристик приборов космического аппарата	32-33
Мойленко А.А. Шидловский И.Г. Имитационное моделирование адаптивной цепи поставок	34-35
Рутковская В.С. Исследование характеристик управляемой системы массового обслуживания с ограниченным временем ожидания	35-36
Маричева А.В. Отсутствие зависти в задачах распределения большого числа неделимых благ	36-37

Ильина Н.А. Оптимизация структуры системы массового обслуживания с разными типами заявок и зависимыми временами обслуживания	37-38
Гуськова М.С. Исследование динамики космического полета в окрестности точки либрации L2 системы земля-луна	38-40
Шемендюк А.А. Граничные условия, имитирующие задачу Коши для разностных уравнений в частных производных	40-41
Николаев К.Е. Полетаев Д.А. Вихревое поле СВЧ диапазона	41-42
Никифоров А.В. Исследование колебательных спектров и поляризуемости молекул методом теории функционала плотности	43-44
Цымбалов Е.А. Компактные разностные схемы для задачи Штурма-Лиувилля	44-45
Скибина Е.С. Исследование особенностей движения космического аппарата в окрестности точки либрации L1 системы солнце-земля	45-47
Сахарова Е.А. Долговременное влияние летней жары 2010Г. в Москве на здоровье населения	47
<u>Секция 2 "Информационно-коммуникационные технологии"</u>	48-180
Абрамешин Д.А. Разработка подпрограммы расчета поглощенной дозы электронного излучения с учетом фактора ее накопления	48
Звездов Д.С. Расчет полевой зависимости радиационной электропроводности полимеров	49
Грановский В.С. Разработка программы расчета величины частотного фактора радиационной электропроводности полимеров по результатам экспериментальных исследований	50
Сметанин С.А. Новопашин М.А. Разработка системы потового распознавания лиц	51
Помолотова А.В. Моделирование электризации полиэтилена высокого давления электронами низкой энергии	52
Дрозд О.В. Разработка структуры системы управления данными об изделии микроэлектронного производства	53-54
Гребенщикова Т.Д. Моделирование объемного заряжения пленок полистирола электронами низких энергий	54-55
Тютнев В.А. Моделирование электризации диэлектриков космического применения с помощью ПО Mathcad	55-56
Бухаров О.Е. Расширение спектра задач решаемых интеллектуальной СППР за счет разработки модуля работы с нечеткой информацией	56-58
Николаева Д.В. Марусов Н.Л. Макет системы автоматизированного управления стендом для тестирования порт-плаггов установки ИТЭР	58-60
Алейников А.В. Маякова О.Ю. Обзор и анализ библиотек данных на различных носителях	60-61
Королев Д.В. Власова А.А. Визуализация развития отношений между пользователями Twitter по мере роста социальной сети	62
Иванов О.А. Ограничения потребляемой мощности приемно-передающего устройства мотов сенсорной сети	63
Савин И.И. Каркас автоматизированной системы массового онлайн-обучения с использованием персонализированной модели пользователя и парным рецензированием	64

ИССЛЕДОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ И ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ МОЛЕКУЛ МЕТОДОМ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

А.В. Никифоров
НИУ ВШЭ,
Департамент электронной инженерии
МИЭМ НИУ ВШЭ

Аннотация

В работе изучается зависимость физических характеристик ряда молекул в зависимости от метода вычисления. Для расчетов используется ряд обменно-корреляционных функционалов плотности. Исследована производительность и точность вычислений с использованием двойных гибридных функционалов B2PLYP [1], PW2PLYP [2], B2PLYP-D3 [3]. Также проанализирован ряд базисов с целью нахождения наилучшего размера базиса для расчетов колебательных спектров и поляризуемости молекул.

Введение

В настоящее время в квантовой химии большое распространение среди методов расчета физических свойств молекул получила теория функционала плотности. В отличие от методов решения уравнения Шредингера на основе многоэлектронной волновой функции, здесь вычисления характеристик многоэлектронной системы могут быть произведены с помощью электронной плотности $\rho(\vec{r})$.

$$\rho(\vec{r}) = \int |\psi_e(\vec{r})|^2 d\vec{r}$$

В отличие от волновой функции электронная плотность измеряема. С ее помощью стало возможным численно находить характеристики сложных молекул.

Теоретическое описание метода

Современная теория функционала плотности основана на двух теоремах Кона-Хоэнберга, согласно которым существует однозначное соответствие между электронной плотностью и полной энергией многоэлектронной системы.

Согласно этим теоремам, минимизация функционала полной энергии системы

$$E(\mathbf{r}) = V_e[\mathbf{r}] + F_H[\mathbf{r}],$$

где $V_e[\mathbf{r}]$ - внешний кулоновский потенциал атомных ядер, $F_H[\mathbf{r}]$ - функционал Хоэнберга-Кона, не зависящий от внешнего кулоновского потенциала, дает электронную плотность основного состояния. В итоге удалось избежать решения многоэлектронного уравнения Шредингера, и основной целью для решения задачи становится минимизация функционала плотности.

Функционал Хоэнберга-Кона $F_H[\mathbf{r}]$ включает в себя функционал кинетической энергии движения электронов $T[\mathbf{r}]$ и функционал $V_{ee}[\mathbf{r}]$, описывающий электрон-электронное взаимодействие и складывающийся из обменно-корреляционного функционала и функционала кулоновского отталкивания электронов. Зная эти функционалы, можно получить точное решение уравнения Шредингера. Но явный вид функционала кинетической энергии, а также обменно-корреляционного функционала неизвестен. Поэтому нахождение явного вида этих функционалов является важной задачей.

На практике вычислительная реализация метода основана на методе Кона-Шема. Предлагается вычислить полную кинетическую энергию вспомогательной системы без электрон-электронного взаимодействия. Применяя вариационный принцип к функционалу полной энергии, получа-

ем уравнения Кона-Шема

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + n_K(\vec{r})\right)y_i(\vec{r}) = \epsilon y_i(\vec{r})$$

Численно решая эти уравнения методом итераций, получаем орбитали y_i , с помощью которых можно получить плотность исходной многоэлектронной системы.

Численная стабильность метода

Посчитаем для ряда базисных наборов из одного семейства какую-либо физическую характеристику (например, поляризуемость). Возьмем несколько корреляционно-согласованных наборов, отличающихся числом функций.

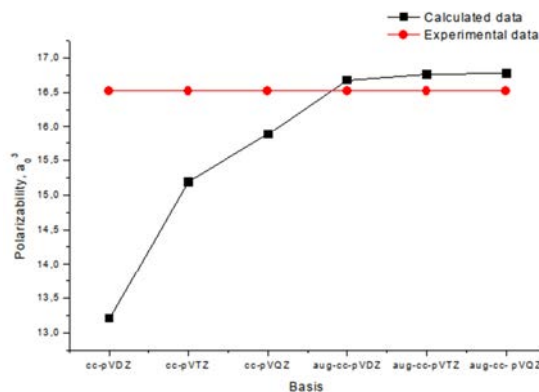


Рис. 1. Зависимость рассчитанной поляризуемости от величины корреляционно-согласованного базиса

Из полученных результатов видно, что при увеличении числа базисных функций, метод сходится к значению, близкому к эксперименту. Из этого можно сделать вывод о стабильности метода.

Результаты моделирования с использованием двойных гибридных функционалов

Рассмотренный выше метод реализован во многих квантовохимических программах. В данной работе используется квантовохимическая программа Orca[4], предназначенная для параллельных вычислений на многопроцессорных системах под управлением операционных систем Unix.

Получены результаты для тестового набора из 27 небольших молекул со связью С-Н. В первой таблице приведены результаты, полученные с помощью разных методов и базисов для среднего абсолютного отклонения от экспериментально полученных значений поляризуемости.

Во второй таблице представлены масштабные факторы для колебательных спектров, рассчитываемые по формуле

$$C = \frac{\sum (n_i w_i)}{w_i^2}$$

где n_i - вычисляемые частоты колебаний, w_i - экспериментальные частоты колебаний.

Таблица 1.

Среднее абсолютное отклонение для поляризуемости		
Функционалы/базис	B2PLYP	B2PLYP-D3
cc-pVDZ	0.272521	0.272521
cc-pVTZ	0.176743	0.176743
cc-pVQZ	0.244955	0.133466
aug-cc-pVDZ	0.107524	0.107524
aug-cc-pVTZ	0.140946	0.103121
aug-cc-pVQZ	0.140691	0.140574

Таблица 2. Масштабные факторы для колебательных спектров ряда молекул

Функционалы/базис	B2PLYP	B2PLYP-D3	PW2PLYP
cc-pVDZ	0.946	0.945	0.934
cc-pVTZ	0.963	0.955	0.938
cc-pVQZ	0.952	0.952	0.929
aug-cc-pVDZ	0.961	0.964	0.955
aug-cc-pVTZ	0.968	0.968	0.963
aug-cc-pVQZ	0.974	0.974	0.977

Вычисления масштабных факторов для ряда из 27 молекул показывают, что вычисленные с помощью двойных гибридных функционалов ИК спектры находятся в хорошем соответствии с экспериментом. Это объяснимо, поскольку двойные гибридные функционалы включают в себя нелокальную информацию о корреляции, полученную с помощью теории возмущений. Также необходимо отметить, что время расчета с функционалом B2PLYP превышает время расчета с остальными функционалами. Кроме того, прослеживается зависимость точности результатов и времени вычисления от размера базиса. Статистический анализ показал, что результаты вычислений зависят от базисного набора в большей степени, чем от выбора метода расчета. Очевидно, что чем больше базисных функций, тем точнее получается результат. Самый приближенный к эксперименту результат показал корреляционно-согласованный базис aug-cc-pVQZ, но его недостатком является то, что он отнюдь не обеспечивает наилучшую ресурсоемкость, и время расчета с этим базисом довольно велико. Экспериментальные данные представлены по ссылке [7].

Оценка производительности всех методов показала, что двойной гибридный функционал B2PLYP-D3 обеспечивает наилучшую точность при наименьших затратах времени.

Заключение

В работе проанализирована электронная структура ряда молекул с помощью различных алгоритмов. С помощью различных функционалов плотности получены результаты, согласующиеся с экспериментальными данными.

Проведенный анализ может служить основой для выбора вычислительной схемы для расчетов в более сложных молекулах.

Список литературы:

1. Ganyushin, D.; Neese, F. (2013) A fully variational spin-orbit coupled complete active space self-consistent field approach: Application to electron paramagnetic resonance g-tensors, *J. Chem. Phys.*, 138, 104113.
2. Kossmann, S.; Kirchner, B.; Neese, F. *Mol. Phys.* 2007, 105, 2049.
3. Atanasov, M.; Zdrozny, J. M.; Long, J. R.; Neese, F. (2013) A theoretical analysis of chemical bonding, vibronic coupling, and magnetic anisotropy in linear iron(II) complexes with single-molecule magnet behavior, *Chem. Sci.*, 4, 139–156.
4. Neese F. ORCA - an ab initio, Density Functional and Semiempirical program package. University of Bonn. [<http://www.thch.uni-bonn.de/tc/orca/>].
5. P. Hohenberg and W. Kohn, "Inhomogeneous Electron Gas," *Phys. Rev.* 136, B864–B871 (1964).
6. Kohn W., Sham L.J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // *Phys. Rev. A.* American Physical Society, 1965. Vol. 140, No 4. P. 1133–1138.
7. <http://cccbdb.nist.gov/>

КОМПАКТНЫЕ РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ ЗАДАЧИ ШТУРМА - ЛИУВИЛЛЯ

Е.А. Цымбалов

НИУ ВШЭ,

Факультет компьютерных наук

Аннотация

Для задачи Штурма - Лиувилля с гладким или разрывным коэффициентом построены компактные разностные схемы, в ряде случаев весьма превосходящие классические по точности и порядку аппроксимации.

Введение

Рассматривается задача Штурма - Лиувилля с граничными условиями первого рода:

$$-d_x \theta d_x u = f, \quad (1)$$

где $u \in [0, L]$, $u(0) = u(L) = 0$, $\theta > 0$.

Случай гладкого коэффициента

Рассмотрим случай переменного коэффициента $\theta = \theta(x)$. Введем на отрезке $[0, L]$ равномерную сетку с шагом h и $(N+1)$ узлами в точках x_0, \dots, x_N . Будем аппроксимировать (1) компактной разностной схемой на трехточечном шаблоне ($j=1, \dots, N$):

$$R_{j,+} u(x_{j+1}) + R_{j,0} u(x_j) + R_{j,-} u(x_{j-1}) = p_j f(x_{j+1}) + q_j f(x_j) + r_j f(x_{j-1}), \quad (2)$$

Коэффициент в (1) – положительную гладкую функцию $\theta(x)$ – локально аппроксимируем в окрестности центральной точки шаблона (примем ее за нуль) экспонентой: $\theta(x) \approx A \exp(ax + bx^2) > 0$.

Наложим следующие условия на коэффициенты $R_{j,+}$, $R_{j,0}$, $R_{j,-}$, p_j , q_j , r_j :

1. выполнение (2) на парах тестовых функций (см. [1]) $\langle \tilde{u}_k, \tilde{f}_k \rangle = \langle x^k, kA \exp(ax + bx^2) [(k-1)x^{k-2} + (a + 2bx)x^{k-1}] \rangle$, $k = 0, \dots, 4$;
2. самосопряженность оператора (2) (вследствие самосопряженности (1));
3. коэффициенты для левой части ищем в виде $R_{j,+} = \alpha \theta^{\gamma_1}(x_{j+1}) \theta^{1-\gamma_1}(x_j) + \beta \theta^{\gamma_2}(x_{j+1}) \theta^{1-\gamma_2}(x_j)$. Тогда коэффициенты $R_{j,0}$, $R_{j,-}$ получаются из первых двух условий.

Условия 1-3 задают СЛАУ для коэффициентов $R_{j,+}$, $R_{j,0}$, $R_{j,-}$, p_j , q_j , r_j . Получено семейство схем, зависящих от параметров γ_1, γ_2 , $\gamma_1 \neq \gamma_2$. Численные эксперименты показали независимость точности и порядка аппроксимации от γ_1, γ_2 и превосходство схемы (2) над классической:

$$\theta(x_{j-1/2}) u(x_{j-1}) - [\theta(x_{j-1/2}) + \theta(x_{j+1/2})] u(x_j) + \theta(x_{j+1/2}) u(x_{j+1}) = f h^{-2} \quad (3)$$

в случаях малых амплитуд колебания $\theta(x)$ – погрешность меньше в десятки раз, а ее порядок стремится к четвертому при уменьшении амплитуды колебаний против второго порядка схемы (3). Численные эксперименты при больших амплитудах колебания $\theta(x)$ показали, что погрешность схемы (2) не более чем в два раза больше погрешности схемы (3); тут их порядок погрешности совпадает и равен двум. Вышеописанное справедливо, если модифицировать уравнение в задаче (1), добавив младший член с положительным потенциалом:

$$-d_x \theta d_x u + \varphi(x) u = f, \quad (4)$$

Случай разрывного коэффициента

Рассмотрим случай кусочно-постоянного коэффициента

$$\theta = \begin{cases} \theta_-, & x < L/2; \\ \theta_+, & x > L/2; \\ (\theta_+ + \theta_-)/2, & x = L/2. \end{cases}$$