

В рассматриваемом подходе, важное значение имеет вопрос о путях рационального применения ТИ. Обычно они используются в корреляционных зависимостях вида  $P=f(\text{ТИ})$ , например,

$$P = a(\text{ТИ}) + b,$$

$$P = a(\text{ТИ})^2 + b(\text{ТИ}) + c,$$

$$P = b(\text{ТИ})^a,$$

$$P = a \ln(\text{ТИ}) + b,$$

$$P = a \exp(\text{ТИ} b)$$

$$P = [a(\text{ТИ}) + b]^{1/2},$$

$$P = \text{ТИ}/[a+b(\text{ТИ})],$$

$$P = a(\text{ТИ})_1 + b(\text{ТИ})_2 + \dots + n(\text{ТИ})_n + c$$

и т.п. Здесь  $a, b, c$  – некоторые параметры (не следует путать их с параметрами аддитивных схем), подлежащих определению.

При исследовании данных зависимостей были выявлены уравнения, отвечающее наиболее тесной корреляционной связи между энтальпией образования (в кДж/моль) алкилсиланов и ТИ:

$$1. \Delta_f H^0_{(\text{г}, 298 \text{ К})} = -8,849H + 4,307R - 1,729R' + 3,09p_3 - 66,263p'_3 + 39,122p_4 + 15,666p'_4 + 46,935$$

Средняя абсолютная ошибка расчета ( $|\bar{\mathcal{E}}|$ ) и максимальное отклонение ( $\varepsilon_{\max}$ ) соответственно равны 4,1 кДж/моль и 15,2 кДж/моль.

$$2. \Delta_f H^0_{(\text{г}, 298 \text{ К})} = -7,366H - 0,529R + 9,9359R' + 17,318p_4 + 19,296p'_4 + 17,871,$$

$|\bar{\mathcal{E}}| = 10,2$  кДж/моль и  $\varepsilon_{\max} = 53,2$  кДж/моль.

$$3. \Delta_f H^0_{(\text{г}, 298 \text{ К})} = 3,848 \ln H + 186,055 \ln W' - 322,633 \ln W - 1,474H - 1,411W' + 6,026W + 107,639$$

$|\bar{\mathcal{E}}| = 10,7$  кДж/моль и  $\varepsilon_{\max} = -35,0$  кДж/моль.

По первой формуле был выполнен расчёт энтальпий образования алкилсиланов от  $C_1$  до  $C_6$ .

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Виноградова М.Г., Папулов Ю.Г., Смоляков В.М. Количественные корреляции «структура свойство» алканов. Аддитивные схемы расчета. Тверь, 1999. 96 с.
2. Химические приложения топологии и теории графов / Под ред. Р.Кинга. М.: Мир, 1987. 560 с.
3. Применение теории графов в химии / Под ред. Н.С. Зефирова и С.И. Кучанова. Новосибирск: Наука, 1988. 306 с.
4. Станкевич М.И., Станкевич И.В., Зефиров Н.С. Топологические индексы в органической химии // Успехи химии. 1988. Т.57, №3, С.337-366.
5. Виноградова М.Г., Салтыкова М.Н. Теоретико-графовой подход в построении расчетных схем алкилсиланов // Вестник ТвГУ. 2007, №2(30), С.70-75.
6. Виноградова М.Г., Салтыкова М.Н. Диаграммы в корреляциях «Структура-

свойство» алкилсиланов // Вестник ТвГУ. 2007, №15(43), С.31-38.

7. Виноградова М.Г., Салтыкова М.Н. Теоретико-графовой подход в изучении взаимосвязи между строением и свойствами алкилсиланов. // Фундаментальные исследования, 2009. №1. С.17-19.

#### СТУПЕНЧАТЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ НА ГРАФАХ

Кругленко В.И.

Камский институт  
Набережные Челны, Россия

В граф, в котором степень каждой вершины  $L = a_1 * a_2 * a_3 * \dots * a_N$ , вводим  $N$ -мерную координатную систему графа. При каждой вершине каждому ребру присваиваем числа от 0 до  $a_1 - 1$  так, чтобы количества разных чисел были равными  $L / a_1$ . Затем при каждой вершине всем группам ребер с одинаковыми числами присваиваем еще значения от 0 до  $a_2 - 1$  так, чтобы количества этих разных чисел были равными  $L / a_1 a_2$  и т. д. Таким образом для каждого ребра формируем координатную единицу. Перестановка разных множителей приводит к изменению координатной системы. Например, для  $L = 24$  можно ввести 1 одномерную, 6 двухмерных, 9 трехмерных и 4 четырехмерных системы.

Далее вводим понятие ступенчатых представлений как совокупность последовательных переходов между вершинами с помощью  $N$   $a_i$ -ричных координатных последовательностей, компоненты которых соответствуют координатным единицам. Для двухмерного представления  $\Phi(\alpha, \beta)$  на полном 9-ти вершинном графе с петлями, где  $L = 3 * 3$ , подходят, например, 3-ричное разложение дроби  $1/37$  и 3-ричное разложение дроби  $3/37$ . В этом случае моделировались ступенчатые представления, когда координатные последовательности представлялись случайными, рациональными дробями, числами  $\pi, e$  (до 5000 знаков). Спектры распределений по вершинам приводили к равномерным и неравномерным, но устойчивым

распределением. Для прямоугольной двумерной граф-решетки с введенной двухмерной асимметричной координатной системой установлено условие замкнутости и реальности представлений  $\Phi(\alpha, \beta)$ . Показаны влияния разных  $\alpha$  на представление при одних и тех же  $\beta$ .

Далее вводим понятие ступенчатого соответствия в случае, когда некоторые координатные последовательности в  $\Phi(\alpha, \beta, \dots, z)$  заранее определены, а другие определяется по различным множествам влияния  $V$  и правилам формирования. Рассматривался частный случай, когда выбрана прямоугольная граф-решетка и множество влияния  $f(x)$  – парабола. Правило формирования состояло из трех условий. 1. Из всех возможных переходов в следующую вершину  $x_i$ , ребра графа которых имеют общую точку с множеством  $V$ , выбирается тот, у которого достигается  $\min \rho(x_i, (s, f(s)))$ . 2. Если общих точек нет, то просто по  $\min \rho(x_i, (s, f(s)))$ . 3. Запрещен уже состоявшийся переход. В этом случае, получены аналитические выражения и проведено моделирование поведения объемов ступенчатых соответствий при изменении единицы решетки.

#### БИОФИЗИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ИССЛЕДОВАНИЮ БИОНООСФЕРЫ

Кутимская М.А., Бузунова М.Ю.

*Иркутская государственная  
сельскохозяйственная академия  
Иркутск, Россия*

Биофизику следует рассматривать как физику явлений жизни, изучаемых на микро,

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} = N_i - \sum_{i,j=1}^N N_i N_j - \alpha N_i^2 + \Delta N_i, \quad (1)$$

где  $N_i$  – число носителей информации  $i$ -того типа, например, зайцев в модели Лотки-Вольтерра «хищник-жертва».

Модель описывает численность носителей  $N_i$  за счет источника (зайцы поедают траву и размножаются); внутривидовые взаимодействия  $\alpha N_i^2$  (заяц-зайчиха); межвидовые взаимодействия  $\sum_{i,j} N_i N_j$  - (заяц-рысь) и  $\Delta N_i$  –

дивергенция (расхождение), где  $\Delta$  – оператор Лапласа, например побег одного из носителей информации (зайца) в другой лес по  $x$ ,  $y$  или  $z$  координатам. Анализ показывает, что система (1) эволюционирует, и в процессе эволюции самопроизвольно повышается ценность информации. Данная модель является примером

макро и мегауровнях: от молекул (в частности ДНК), человека и биосферы в целом. Термин «биосфера» был введен нами в работе [1]. Под ним подразумевается существование биосферно-ноосферного комплекса. Применим к изучению этой сложной метасистемы теорию, описывающую диссипативные системы. В этих открытых, неравновесных системах возникают процессы самоорганизации.

Как мы знаем, современное научное мировоззрение формируется на основе процесса интеграции знаний [2]. Большую роль здесь сыграло математическое моделирование процессов с использованием нелинейных систем, позволяющих одинаково хорошо описывать явления самоорганизации и хаоса в любых природных и социальных системах. Согласно сказанному, будем считать информационную реальность, связанную с мыслительным и вычислительным экспериментами, одной из составляющих ноосферы.

В системе «биосфера» идет процесс непрерывного развития. Общим языком, описывающим процесс развития материи как единого целого, на наш взгляд, является синергетика, тесно связанная с информацией, мышлением. Сфера Разума – ноосфера является естественным этапом развития жизни на Земле [3-6]. Мышление, особенно математическая манера мышления, дает возможность связать в единое целое результаты отдельных исследований, реализовать принцип системности, утвердить в междисциплинарных исследованиях единый язык, используемый, например, в информационно-синергетических моделях.

Подобная модель имеет вид [7]:

продуктивности синтеза термодинамического (синергетического) и информационного подходов, поскольку динамическая теория информации является одной из ветвей термодинамики неравновесных открытых систем, а член  $\sum_{i,j} N_i N_j$  уравнения (1) описывает поведение синергетической системы.

Модель (1) представляет собой поризм [8]. Она применяется для решения самых разных задач, таких как возникновение ценной биологической информации, формировании языка, эволюции Вселенной и т.д.

Модели типа (1) решались нами намного раньше [9].