

Результаты и их обсуждение

Теорема 1.5. Пусть для $g^{(1)}, g^{(2)}$ из класса $G(l, \beta, \gamma)$ существуют

$$\sigma^{(1)}, \sigma^{(2)} \in \Sigma(l, M_\sigma, c_0, \rho_0, \sigma_*)$$

как решения обратной задачи (1)–(4) соответственно. Тогда

$$\|\sigma^{(1)} - \sigma^{(2)}\|_{H^1(0,l)}^2 \leq C \|g^{(1)} - g^{(2)}\|_{H^1(0,2l)}^2,$$

$$C = C(l, M_\sigma, c_0, \rho_0, \sigma_*),$$

где

$$f^{(j)} = (f_1^{(j)}, f_2^{(j)}, f_3^{(j)}),$$

$$f_1^{(j)}(x, t) = \frac{1}{2} \left[(g^{(j)})'(t+x) - (g^{(j)})'(t-x) \right],$$

$$f_2^{(j)} = -\frac{1}{\gamma}, \quad f_3^{(j)}(x) = -\frac{2(g^{(j)})'(2x)}{\gamma}, \quad j = 1, 2,$$

$$C = 3(l+1) \left(l + \frac{2}{\gamma^2} \right) \left[c_0^2 \rho_0^2 + l M_\sigma^2 \right] \exp \left\{ \frac{2l M_\sigma^2}{\sigma_*^2} \right\} \times \\ \times \left(15 + \frac{50 M_\sigma^2}{\gamma^2 \sigma_*^2} + \frac{5l M_\sigma^2}{\sigma_*^2} \left(1 + \frac{5 M_\sigma^2}{\gamma^2 \sigma_*^2} \right) \exp \left\{ \frac{l M_\sigma^2}{2 \sigma_*^2} \right\} \right) \times \\ \times \exp \left\{ \left(3l + 5\beta + \frac{25l}{\gamma^2} \right) \frac{M_\sigma^2}{\sigma_*^2} + \left(\frac{l^2}{\gamma^2} + \frac{25l^2 M_\sigma^4}{2\gamma^2 \sigma_*^4} + \frac{10l\beta}{\gamma^2} \right) \exp \left\{ \frac{l M_\sigma^2}{2 \sigma_*^2} \right\} + \left(10\beta l \frac{M_\sigma^4}{\sigma_*^4} + 5l\beta + \frac{70l\beta}{\gamma^2} \right) \exp \left\{ \frac{2l M_\sigma^2}{\sigma_*^2} \right\} + \right. \\ \left. + \frac{55l^2 \beta M_\sigma^2}{\gamma^2 \sigma_*^2} \exp \left\{ \frac{5l M_\sigma^2}{2 \sigma_*^2} \right\} \right\}.$$

Заключение, выводы. Для доказательства условной корректности рассматриваемой задачи, доказано теорема, где в отличие от аналогичной теоремы в [3] в вышеприведенной теореме при выводе требуемой константы в основном неравенстве использовалась не оценка вектора q , а оценки каждой из его компонент q_1, q_2, q_3 . В работе [3] в выкладках норма каждой компоненты оценивалась через норму вектора q , так как оценка нормы вектора q есть сумма оценок его компонент. А в данной работе, как сказано, выше, уже использовались непосредственно оценки каждой компоненты.

Список литературы

1. Кabanikhin S.I., Isakov K.T. Обратные и некорректные задачи для гиперболических уравнений. – Алматы: КазНПУ им. Абая, 2007. – 330 с.

2. Tyulepberdinova G.A., Nurseitova A.T. The finite difference method of solving 1d inverse acoustic problem // Abstract of the 3d congress of the world mathematical society of the Turkic countries / al Farabi KazNU. – Almaty, 2009. Vol. 2, № 6. – P. 66-67.

3. Кabanikhin S.I., Бектемесов М.А., Нурсейтова А.Т. Итерационные методы решения обратных и некорректных задач с данными на части границы. – Алматы: Международный фонд обратных задач, 2006. – 432 с.

4. Нурсейтова А.Т., Тюлепбердинова Г.А. Сходимость метода итераций Ландвебера для решения задачи определения акустической жесткости // Вестник КазНПУ: Серия «Физико-математические науки»- 2008.- Т. 21, № 1. – С. 215-217.

5. Kabanikhin S.I., Ayapbergenova A.T. Estimation of the rate of convergence of the Landweber iteration method in an inverse problem of acoustics // Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics. – 2002. – Vol. 2. – P. 75-97.

6. Кabanikhin S.I., Isakov K. Оптимизационные методы решения коэффициентных обратных задач. – Новосибирск: НГУ, 2001. – 316 с.

«Компьютерное моделирование в науке и технике»,

Андорра, 8-15 марта 2014 г.

Химические науки**АДДИТИВНЫЕ СХЕМЫ РАСЧЁТА АМИНОВ. ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД**

Виноградова М.Г., Демидова М.С.,
Серёгин Э.А.

Тверской государственный университет, Тверь,
e-mail: mgvinog@mail.ru

Феноменологические методы эффективны для исследования закономерностей, связыва-

ющих свойства веществ со строением молекул и пригодны для массового расчёта и прогнозирования физико-химических свойств химических соединений.

Данные методы реализуются в виде аддитивных схем расчета и прогнозирования, которые успешно применяются в гомологических рядах [1, 2]. Рассмотрим аддитивные схемы расчета для аминов [3].

$$P_{C_nH_{2n+2}X_m} = h_{cc}p_{c-c} + h_{cn}p_{c-n} + h_{cx}p_{c-x} + x_{cc_1}\Gamma_{cc} + x_{cx_1}\Gamma_{cx} + x_{xx_1}\Gamma_{xx} + x_{ccc_1}\Delta_{ccc} + x_{ccx_1}\Delta_{ccx} + x_{cxx_1}\Delta_{cxx} + x_{xxx_1}\Delta_{xxx} + x_{cc_2}\tau_{cc} + x_{cx_2}\tau_{cx} + x_{xx_2}\tau_{xx} + x_{cc_3}\omega_{cc} + x_{cx_3}\omega_{cx} + x_{xx_3}\omega_{xx} \quad (1)$$

где p_{c-c} , p_{c-n} и p_{c-x} – эффективные энергии соответствующих связей, $X = NH_2$, $h_{cc} = (n-1)$, $h_{cn} = (2n+2-m)$, $h_{cx} = m$. Здесь Γ_{cc} , Γ_{cx} , Γ_{xx} , D_{ccc} , D_{ccx} , D_{cxx} , D_{xxx} – эффективные взаимодействия пар и троек соответствующих атомов через один атом углерода, а t_{cc} , t_{cx} , t_{xx} , w_{cc} , w_{cx} , w_{xx} – эффективные взаимодействия соответствующих

пар атомов через два и три атома углерода по цепи молекулы.

Аддитивные схемы расчета могут иметь теоретико-графовую интерпретацию. В таких схемах топологические индексы участвуют как числа параметров. Так схему (1) можно записать как

$$P_{C_nH_{2n+2}X_m} = a + p_2\Gamma_{cc} + p'_2\Gamma_{cx} + p''_2\Gamma_{xx} + R\Delta_{ccc} + R'\Delta_{ccx} + R''\Delta_{cxx} + R^*\Delta_{xxx} + p_3\tau_{cc} + p'_3\tau_{cx} + p''_3\tau_{xx} + p_4\omega_{cc} + p'_4\omega_{cx} + p''_4\omega_{xx} \quad (2)$$

где

$$a = (n-1)p_{c-c} + (2n+2-m)p_{c-n} + mp_{c-x}$$

или

$$P_{C_nH_{2n+2}X_m} = p_1b_{c-c} + p'_1b_{c-n} + p''_1b_{c-x} + p_2\Gamma_{cc} + p'_2\Gamma_{cx} + p''_2\Gamma_{xx} + R\Delta_{ccc} + R'\Delta_{ccx} + R''\Delta_{cxx} + R^*\Delta_{xxx} + p_3\tau_{cc} + p'_3\tau_{cx} + p''_3\tau_{xx} + p_4\omega_{cc} + p'_4\omega_{cx} + p''_4\omega_{xx} \quad (3)$$

Здесь $p_1 = x_{cc_0} = m = n-1$, $p_2 = x_{cc_1}$, $p_3 = x_{cc_2}$, $p_4 = x_{cc_3}$ – число путей соответственно длины 1, 2, 3 и 4, а $R = x_{ccc_1}$ – число троек смежных ребер.

В таблице показаны используемые нами параметры схем расчета рассматриваемых соединений.

Параметры расчётных схем оценки свойств аминов

№	Молекула	Число параметров									
		p_1	p'_1	p_2	p'_2	R	R'	p_3	p'_3	p_4	p'_4
1.	CH ₅ N	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
2.	CH ₃ CH ₂ NH ₂	1	1	0	1	0	0	0	0	0	0
3.	H ₂ NCH ₂ CH ₂ NH ₂	1	2	0	2	0	0	0	1	0	0
4.	(CH ₃) ₂ NH	0	2	1	0	0	0	0	0	0	0
5.	CH ₃ CH ₂ CH ₂ NH ₂	2	1	1	1	0	0	0	1	0	0
6.	(CH ₃) ₂ CHNH ₂	2	1	1	2	0	1	0	0	0	0
7.	(CH ₃) ₃ N	0	3	3	0	1	0	0	0	0	0
8.	H ₂ NCH ₂ CH(NH ₂)CH ₃	2	2	1	3	0	1	0	2	0	0
9.	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ NH ₂	3	1	2	1	0	0	1	1	0	1
10.	CH ₃ CH ₂ CH(NH ₂)CH ₃	3	1	2	2	0	1	1	1	0	0
11.	(CH ₃) ₂ CHCH ₂ NH ₂	3	1	3	1	1	0	0	2	0	0
12.	(CH ₃ CH ₂) ₂ NH	2	2	1	2	0	0	2	0	1	0
13.	CH ₃ CH ₂ CH(NH ₂)CH ₂ NH ₂	3	2	2	3	0	1	1	3	0	1
14.	(CH ₃) ₂ C(NH ₂)CH ₂ NH ₂	3	2	3	4	1	3	0	3	0	0
15.	(CH ₃ CH ₂) ₃ N	3	3	3	3	1	0	6	0	3	0

Ряд параметров Γ_{xx} , Δ_{cxx} , Δ_{xxx} , τ_{xx} , ω_{xx} , как видно из данной таблицы, выпадает из-за нехватки экспериментальных данных.

По схеме (2) нами был выполнен расчет энthalпии образования ряда аминов.

Рассчитанные величины, в общем, согласуются с экспериментальными и позволяют предсказать (в пределах ошибок опыта) недостающие значения свойств членов исследуемого ряда.

Список литературы

1. Папулов Ю.Г., Виноградова М.Г. Расчетные методы в атом-атомном представлении. – Тверь: ТвГУ, 2002. – 232 с.
2. Виноградова М.Г., Папулов Ю.Г., Смоляков В.М. Количественные корреляции «структура – свойство» алканов. Аддитивные схемы расчета. – Тверь: ТвГУ, 1999. – 96 с.
3. М.Г. Виноградова, Ю.Г. Папулов, Г.С. Куликов. Энthalпия образования аминов. Численные расчёты и основные закономерности // Вестник Тверского государственного университета. Серия «Химия», 2013. – Вып. 16.– № 30. – С.132–136.