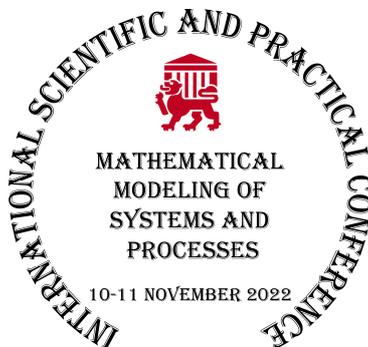


Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Псковский государственный университет



МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ И ПРОЦЕССОВ

Сборник тезисов докладов
Международной научно-практической конференции
10–11 ноября 2022 г.

Электронное сетевое издание

Псков
Псковский государственный университет
2022

УДК 62+001
ББК 30+72
С568

*Рекомендовано к изданию редакционно-издательским советом
Псковского государственного университета*

Рецензенты:

— Д. А. Андреев, кандидат технических наук, заведующий отделением информационно-коммуникационных технологий образовательного департамента Передовой инженерной школы Союзного государства в Псковском государственном университете;

— В. Ю. Цветков, доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой инфокоммуникационных технологий Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники.

Редакционная коллегия:

*Ю. В. Бруттан (общая редакция), Т. К. Антал, В. В. Фролов,
В. Н. Мельник*

М34

Математическое моделирование систем и процессов. Сборник тезисов докладов Международной научно-практической конференции. — Псков: Псковский государственный университет, 2022. — 24 с. Режим доступа: <https://lib.pskgu.ru/page/d1f45f6d-f629-4fa1-94fd-6449031c1269>
ISBN 978-5-00200-103-3

Издание содержит тезисы докладов участников Международной научно-практической конференции «Математическое моделирование систем и процессов», которая состоялась в г. Пскове 10–11 ноября 2022 г.

Опубликованные работы представляют интерес для научных и педагогических работников, преподавателей, аспирантов, магистрантов и студентов, молодых ученых, занимающихся научно-исследовательской деятельностью, а также для иных специалистов с целью использования в научной работе, педагогической и учебной деятельности.

Все статьи проходят рецензирование (экспертную оценку), стилистическую и редакционную правку.

УДК 62+001
ББК 30+72

ISBN 978-5-00200-103-3

© Коллектив авторов, 2022
© Псковский государственный университет, 2022

СОДЕРЖАНИЕ

Абатурова А. М., Ризниченко Г. Ю.

Анализ траекторий броуновской динамики движения молекул цитохрома С в поле димера ВС1-комплекса дыхательной цепи митохондрий 4

Гундина М. А., Юхновская О. В.

Метод кластеризации медицинского изображения в зависимости от выбора меры близости данных 6

Ильин Л. С., Хитров А. И.

Моделирование рабочих режимов асинхронного электропривода с частотным управлением 8

Комаров А. В.

Динамическое исследование твердотельных моделей механизмов в среде solidworks 10

Сафронов П. И.

Возможности моделирования грунтовых оснований зданий и сооружений в программных комплексах SCAD OFFICE, ЛИРА-САПР, PLAXIS 12

Сотников В. Г., Сафин Р. Г., Ланкин К. А., Мифтахов Р. А.,

Каримов И. Р., Ильясов И. Р.

Моделирование процесса пирогенетического разложения сыпучего слоя органического сырья 14

Холина Е. Г., Федоров В. А., Хрущев С. С., Коваленко И. Б.

Страховская М. Г., Рубин А. Б.

Идентификация сайтов связывания катионных фотосенсибилизаторов на вирусной оболочке методами молекулярного моделирования 18

Хрущев С. С., Червицов Р. Н., Тодоренко Д. А., Дрозденко Т. В.,

Антал Т. К., Ризниченко Г. Ю., Плюснина Т. Ю.

Использование методов кластеризации и классификации для изучения воздействия тяжелых металлов на фитопланктон 20

Юров А. В., Юрова А. А.

К вопросу об унификации интегрируемых иерархий 22

АНАЛИЗ ТРАЕКТОРИЙ БРОУНОВСКОЙ ДИНАМИКИ ДВИЖЕНИЯ МОЛЕКУЛ ЦИТОХРОМА С В ПОЛЕ ДИМЕРА ВС1-КОМПЛЕКСА ДЫХАТЕЛЬНОЙ ЦЕПИ МИТОХОНДРИЙ

Абатурова А. М., Ризниченко Г. Ю.,

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова

Ключевые слова: цитохром С, III дыхательный комплекс, митохондрии, броуновская динамика, электростатические взаимодействия.

Цитохром С (цитС) это небольшой (около 12 кДа) водорастворимый белок, локализованный в люмене кристы и межмембранном пространстве митохондрий. Он содержит гем типа С. В дыхательной электрон-транспортной цепи цитС выполняет незаменимую роль — переносит электроны между трансмембранными III и IV дыхательными комплексами.

Положительно заряженная молекула цитС связывается в предварительный комплекс с отрицательно заряженной частью димера III дыхательного комплекса (III_2), субъединицей цитС₁. В ходе конформационных преобразований образуется продуктивный комплекс цитС- III_2 , в котором происходит передача электрона между гемами цитС и цитС₁. Подвижность цитС может определять эффективность электронного транспорта [1]. Исследование этих процессов представляет практический и научный интерес.

С помощью программы броуновской динамики ProKSim [2] мы построили модель диффузии молекулы цитС в участке кристы 12x30x30нм, содержащем неподвижный димер III дыхательного комплекса (III_2). Использовали PDB координаты атомов димера III комплекса из быка 1BGY и цитС из лошади 3O1Y. ЦитС рассматривали в окисленном состоянии, цитохром С₁ (цитС₁) субъединицы Р комплекса III_2 — в восстановленном. Мембраны учитывались как геометрические ограничения.

Записывали траектории движения цитС из начального положения между III и IV дыхательными комплексами, шаг по времени в модели был 100 пс. Моделирование проводили в течение 50 мкс, повторили 3000 раз.

Показано, что в процессе диффузии цитС предпочтительно занимает участки пространства около двух мономеров цитС₁ и область, соединяющую эти участки около гемов. Эти области расположены на расстоянии 1,5–3 нм от поверхности комплекса III_2 .

Анализ только суммарной частоты нахождения молекул цитС около III_2 не дает представления о характере диффузии цитС во времени. Анализ зависимости среднеквадратичного смещения от шага по времени позволяет сделать вывод о характере движения частицы — происходит ли движение под действием случайной броуновской силы, действуют ли на движение направленная сила или движение частицы ограничено [3].

Моделируемый объем был разбит на ячейки с шагом 0,1 нм, для каждой ячейки было посчитано среднеквадратичное смещение атома Fe молекул цитС в зависимости от шага по времени (0,1–5 нс). Была получена линейная зависимость среднеквадратичного смещения от шага по времени для исходного начального положения, это говорит о свободной диффузии цитС только под действием случайной броуновской силы. При приближении цитС к гемму цитС₁ зависимость становится вогнутой. Это говорит о направленном движении цитС к сайту связывания. При попадании цитС в области, где он часто находится, зависимость приобретает выпуклый характер. Это говорит об ограничении диффузии цитС.

Данные результаты позволяют сделать вывод о том, что молекула цитС случайно попав в область притяжения III₂ направленно движется к цитС₁ и там её диффузия ограничена силами электростатического притяжения. Это удержание молекул цитС около III₂ может способствовать образованию финального комплекса цитС-III₂ для передачи электрона.

Исследование выполнено в рамках научного проекта государственного задания МГУ № 121032500060-0.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. A. Stuchebrukhov, J. Schäfer, J. Berg, P. Brzezinski, «Kinetic advantage of forming respiratory supercomplexes», *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) — Bioenergetics*, vol. 1861, issue 7, 1 July, 2020. DOI: 10.1016/j.bbabi.2020.148193
2. Хрущев С. С. Моделирование белок-белковых взаимодействий с применением программного комплекса многочастичной броуновской динамики ProKSim / С. С. Хрущёв, А. М. Абатурова, А. Н. Дьяконова, Д. М. Устинин, Д. В. Зленко, В. А. Федоров, И. Б. Коваленко, Г. Ю. Ризниченко, А. Б. Рубин // Компьютерные исследования и моделирование. М. 2013. Вып. 5. № 1. С. 47–64. DOI: 10.20537/2076-7633-2013-5-1-47-64.
3. Qian H., Sheetz M. P., and Elson E. L., «Single particle tracking. Analysis of diffusion and flow in two-dimensional systems» *Biophysical Journal*, vol. 60, issue 4, pp. 910-921, october 01, 1991. DOI: 10.1016/S0006-3495(91)82125-7.

МЕТОД КЛАСТЕРИЗАЦИИ МЕДИЦИНСКОГО ИЗОБРАЖЕНИЯ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ВЫБОРА МЕРЫ БЛИЗОСТИ ДАННЫХ

Гундина М. А., Юхновская О. В.
Белорусский национальный технический университет

Ключевые слова: кластеризация, данные, расстояния, мера близости

Медицинские изображения стали незаменимыми в медицине для осуществления диагностики и лечения. Эти изображения играют существенную роль в программах, используемых для обработки изображений, в процессе изучению внутренней анатомии. Для этого в медицинской технике широко применяются системы формирования изображения, его преобразования в цифровую форму, визуализация и документирование.

В процессе исследования понятие изображения будет рассматривается как информация, пригодная для визуального восприятия, а также функция двух вещественных переменных $I(x, y)$, где I — это интенсивность (яркость) в точке с координатами (x, y) [1, 2].

Известно, что изображения, сформированные различными оптико-электронными системами и зарегистрированные с помощью разнообразных приёмников, искажаются действием помех различного характера. Искажения изображения вносятся всеми компонентами изображающего прибора, начиная с осветительной системы (например, неравномерность освещенности предмета). Помехи затрудняют визуальный анализ изображения и его автоматическую обработку.

В этой связи высокая скорость развития информационных технологий, объём и разнородность анализируемых изображений постоянно возрастают, в результате чего основной задачей, решаемой в ходе данного исследования, является повышение однородности данных, обрабатываемых кластерным методом.

Язык Wolfram Language имеет широкую поддержку иерархических и не-иерархических методов кластерного анализа. Под кластеризацией будем понимать методику группировки подобных точек данных в группы, которые называются кластерами.

В иерархических методах каждый экземпляр данных образует отдельный кластер. Затем процесс объединения кластеров происходит последовательно на основании матрицы расстояний.

Методы иерархического кластерного анализа отличаются используемыми мерами близости и алгоритмами классификации.

Для функции ClusteringComponent можно определить опцию, которая определяет формулу нахождения расстояний.

ManhattanDistance [u, v] определяется следующим образом:

$$\|u - v\|_1 = \sum_{i=1}^n |u_i - v_i|.$$

ChessboardDistance [u, v] определяется следующим образом

$$\|u - v\|_2 = \max_{1 \leq i \leq n} |u_i - v_i|.$$

EuclideanDistance [u, v] определяется как

$$\|u - v\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n |u_i - v_i|^2}.$$

На рис. 1. представлено исходное изображение перелом плечевой кости и изображение, полученное обработкой бинаризацией.

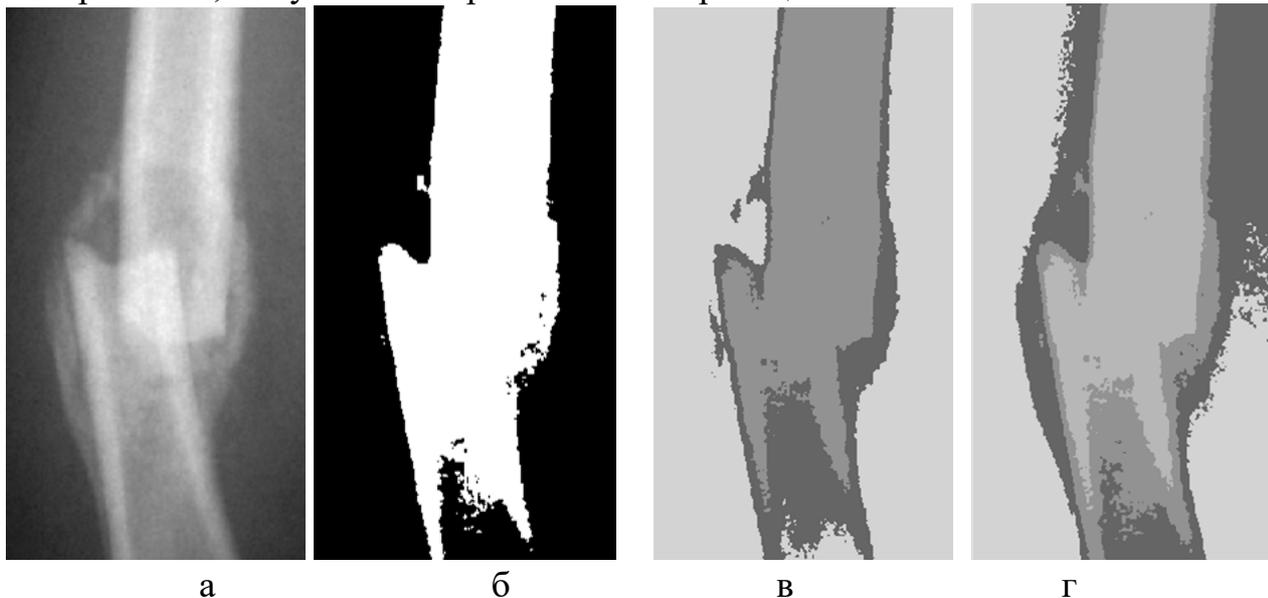


Рис. 1. Исходное изображение. Обработанное изображение

На рис. 1а представлен исходный снимок, на рис.1б представлен бинаризованный снимок, на рис. 1в представлен обработанный снимок с применением опции ManhattanDistance, на рис. 1г — с применением EuclideanDistance.

Данная кластеризация позволила локализовать область образования костной мозоли на рентгеновском снимке.

Заметим, что получаемые изображения не являются единственными. Результат есть порождение одного из возможных вариантов. И вопрос предпочтительности результата и метода анализа требует дальнейшей оценки.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гундина М. А., Шлык В. А. Прикладные задачи обработки медицинских изображений // Materiały VIII Międzynarodowej naukowo-praktycznej konferencji «Dynamika naukowych badań-2012». Volume 21. Matematyka: Przemysł. Polska, 2012. P. 75–77.
2. Гундина М. А. Обработка медицинских данных с помощью вейвлетов / М. А. Гундина, А. Д. Абдыев, А. В. Хомиченко, М. И. Шукелович // Материалы Белорусско-Китайского молодежного инновационного форума «Новые горизонты — 2018», Минск, 2018. С. 134–135.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОЧИХ РЕЖИМОВ АСИНХРОННОГО ЭЛЕКТРОПРИВОДА С ЧАСТОТНЫМ УПРАВЛЕНИЕМ

**Ильин Л. С., Хитров А. И.,
Псковский государственный университет**

Ключевые слова: асинхронный электродвигатель, скалярное частотное управление, цифровой двойник для электропривода, механические и динамические характеристики.

Объектом моделирования является модернизированная система асинхронного электропривода с частотным управлением токарного деревообрабатывающего станка ТСД-120. Система электропривода данного станка состоит из асинхронного двигателя (АД) и преобразователя частоты (ПЧ) со скалярным управлением. Модернизированный токарный станок обладает новыми функциями. Обычный бытовой токарный станок, имеющий постоянную скорость вращения шпинделя, получил возможность регулирования скорости [1].

Для проведения расчетов и моделирования рабочих режимов необходимо знать абсолютные параметры АД различных серий отечественных и зарубежных производителей. Но такие параметры, как правило, не предоставляются заводами-изготовителями. В результате для создания компьютерной модели (цифрового двойника) объекта исследования, расчета базовых электромеханических и механических характеристик требуется использовать методики определения абсолютных параметров по его паспортным данным.

Сотрудниками кафедры электроэнергетики, электропривода и систем автоматизации была создана база данных абсолютных параметров АД [2], рассчитанные на основе справочника [3], зарегистрированная как база данных и изданная в виде учебно-методического пособия в 2021 году. При проведении моделирования использовались параметры АД 4АМ80А4 электропривода токарного деревообрабатывающего станка, представленные в таблице 1.

Таблица 1

Параметры асинхронного двигателя 4АМ80А4

n, об/мин	P, кВт	I, А	U_n, В	f_n, Гц	η, %	cos φ	J, кг·м²
1500	1,1	3	380	50	76	0,73	0,012
M_{ном}, Н·м	S_n, %	K_{max}	R_s, Ом	R_r, Ом	X_m'	X_s'	X_r'
5,6	5,33	2,2	8,418	4,569	1,7	0,078	0,12

Создание цифрового двойника в среде Matlab-Simulink позволяет провести анализ возможности использования разомкнутых систем управления на базе системы ПЧ-АД со скалярными системами управления, обладающих наилучшими экономическими показателями с точки зрения стоимости для конкретного промышленного механизма с изменяющимся моментом нагрузки.

Модель АД с короткозамкнутым ротором для системы ПЧ-АД берётся из раздела библиотеки SimPowerSystems. Производится настройка модели АД, вводятся параметры двигателя. Модель системы представлена на рисунке 1.

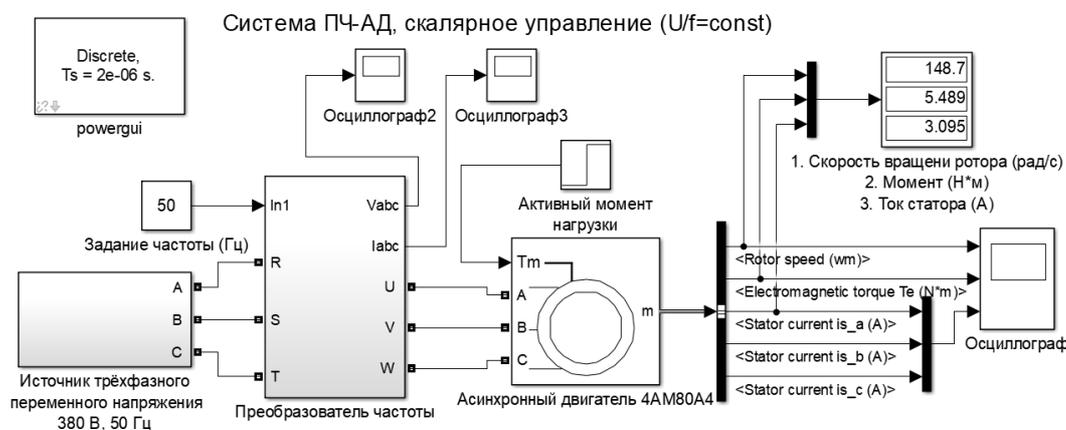


Рис. 1. Компьютерная модель объекта

Управление системой осуществляется с помощью задания частоты и активного момента нагрузки. При задании частоты соблюдается закон М. П. Костенко ($U/f = \text{const}$).

После создания виртуальной модели был получен ряд динамических характеристик для скорости, момента и тока статора АД в различных режимах, как показано на рисунке 2.

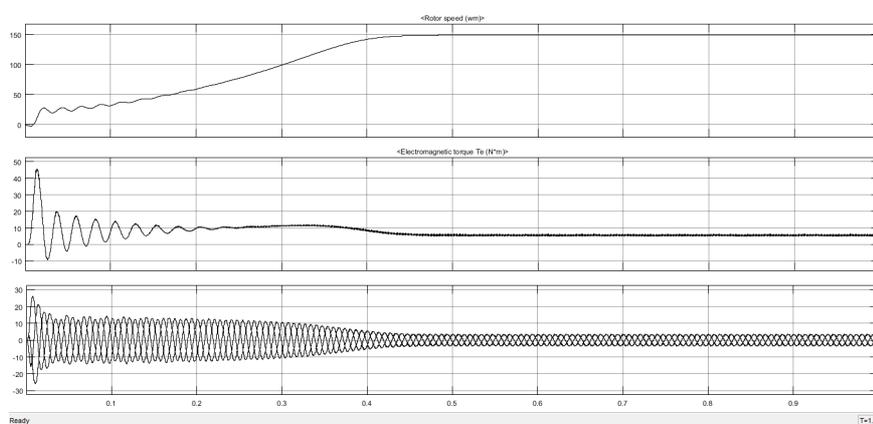


Рис. 2.

Динамические характеристики при пуске с частотой 50 Гц без нагрузки

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Молодёжь – науке. 2020. Материалы молодёжных научно-практических конференций Псковского государственного университета по итогам научно-исследовательской работы в 2019/2020 учебном году. Т. II. Псков: Псковский государственный университет, 2020. 136 с.
2. Хитров А. И., Хитров А. А. Справочник по параметрам трехфазных асинхронных двигателей с короткозамкнутым ротором. Псков: псковский государственный университет, 2021. 92 с.
3. Асинхронные двигатели серии 4А. Справочник / Под ред. Кравчика А. Э. М.: Энергоиздат, 1982. 504 с.

ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ МОДЕЛЕЙ МЕХАНИЗМОВ В СРЕДЕ SOLIDWORKS

Комаров А. В.,
Псковский государственный университет

Ключевые слова: динамическое исследование, твердотельное моделирование.

В настоящее время при проектировании машин и механизмов вместе с классическими методами, а, зачастую, и вместо них, для решения задач кинематического, силового и динамического исследования используется программное обеспечение, основанные на методах вычислительной математики.

Для ускорения процесса создания новых механизмов удобнее использовать программы, которые позволяют создавать твердотельные модели с одновременным анализом выбранной конструкции. В этом случае появляется возможность их быстрой корректировки с целью оптимизации размеров и достижения заданных свойств.

Одним из таких программных продуктов является система твердотельного параметрического моделирования – SolidWorks, которая, в настоящее время, по утверждению руководства фирмы, относится к системам CAD, CAE и CAM.

Как показывает многолетний опыт, эта программа имеет дружественный к пользователю интерфейс. С помощью дополнений этой программы можно выполнять различные виды инженерных исследований. Однако, для полной уверенности в правильности полученных результатов необходимо выполнить их верификацию.

Верификация выполнялась с использованием классических методов механики, которые предполагают создание математических моделей и выполнение необходимых вычислений в среде Turbo Pascal, Microsoft Excel и MathCad.

В качестве примера приведем результаты верификации динамического исследования рычажного, кулачково-рычажного и зубчатого механизмов.

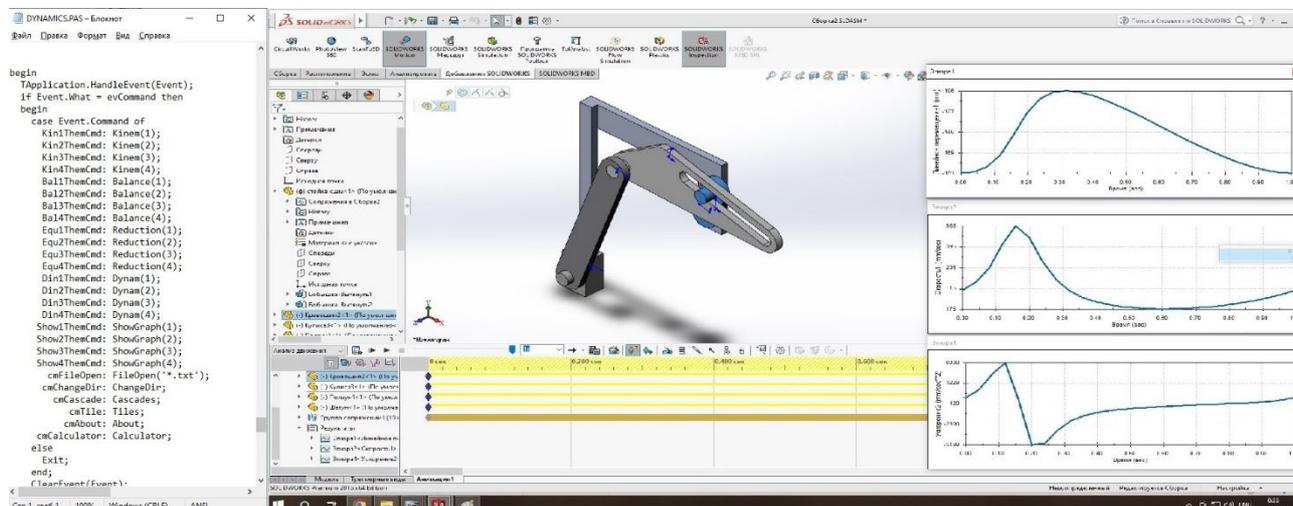


Рис. 1. Исследование рычажного механизма

Математические модели плоских рычажных механизмов создавались с помощью методов замкнутых векторных контуров и гармонических методов динамического анализа с разложением функции нагрузки в ряд Фурье. Реализация расчетов выполнялась с использованием языка программирования Паскаль. Динамическое исследование с помощью программы SolidWorks показало полное совпадение альтернативных результатов расчета.

Однако, в последних версиях этой программы, из-за отсутствия возможности корректировать виды кинематических пар в модуле Motion, возникают проблемы с идентификацией звеньев механизма, состоящих из нескольких деталей.

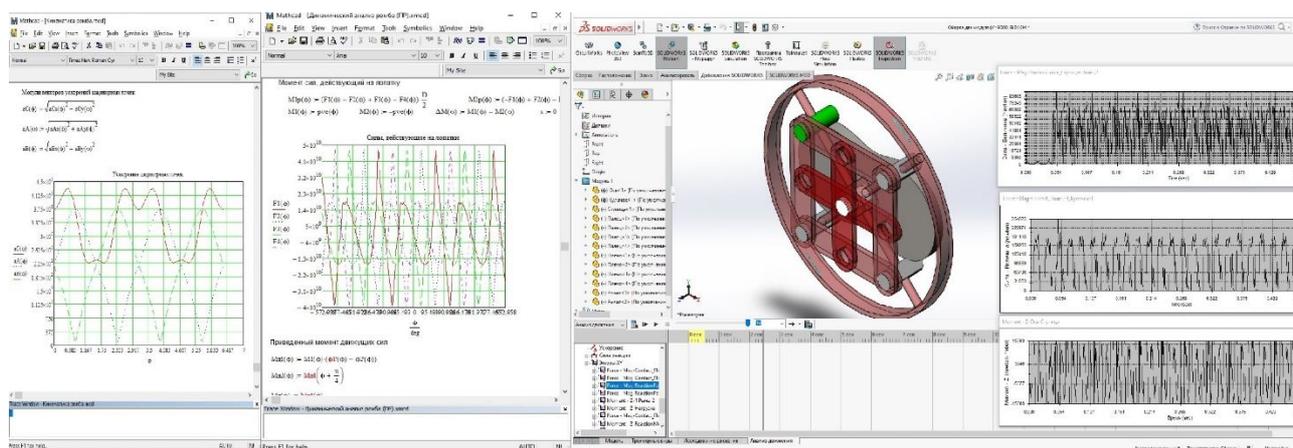


Рис. 2. Исследование кулачково-рычажного механизма

Математическая модель кулачково-рычажного механизма создавалась по аналогии с моделями рычажных механизмов. Расчеты реализовывались с помощью программы MathCad. Динамическое исследование с помощью программы SolidWorks показало допустимое совпадение альтернативных результатов расчета.

К сожалению, исследование зубчатых механизмов не совсем корректно реализовано в программе SolidWorks. Вместо анализа кинематики и динамики зубчатого зацепления эмулируется кинематика фрикционных механизмов. Однако, несмотря на это, визуализация зубчатых передач выглядит наглядно и реалистично.

СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кинематика рычажно-кулачкового механизма роторно-поршневого двигателя. Механика и процессы управления: Труды XXXVII Уральского семинара. Екатеринбург: УрО РАН, 2007. С. 172–179.
2. Теория механизмов и машин. Динамическое исследование машинного агрегата (учебное пособие). Псков: Псковский политехнический институт, 2009. 48 с.
3. Кинематический и силовой анализ в среде CosmosMotion (учебно-методическое пособие) Псков: Псковский политехнический институт, 2009. 35 с.
4. Силовой анализ бесступенчатой зубчатой передачи. Вестник Псковского государственного университета. Серия «Экономические и технические науки». Вып. 4. Псков: Псковский государственный университет, 2014. С. 143.

ВОЗМОЖНОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ ГРУНТОВЫХ ОСНОВАНИЙ ЗДАНИЙ И СООРУЖЕНИЙ В ПРОГРАММНЫХ КОМПЛЕКСАХ SCAD OFFICE, ЛИРА-САПР, PLAXIS

**Сафронов П. И.,
Псковский государственный университет**

Ключевые слова: метод конечных элементов, программный комплекс, SCAD OFFICE, ЛИРА-САПР, PLAXIS, расчетные модели грунтов

Научно-технический прогресс приводит к необходимости строительства все более сложных зданий и сооружений. В крупных городах Российской Федерации существует проблема со свободными площадками под строительство новых зданий и сооружений. В результате растет этажность новых зданий и активно осваивается подземное пространство этих городов. В современных экономических реалиях растут требования к экономичности вновь возводимых объектов. Все эти обстоятельства приводят к необходимости более точного определения напряженно-деформированного состояния зданий и сооружений.

В современной проектной практике наблюдается тенденция к учету взаимодействия зданий и сооружений с грунтовыми основаниями, на которых они расположены. Напряженно-деформированное состояние как здания, так и грунтового основания существенно зависит от взаимодействия этих объектов. Необходимость учета этого взаимодействия отражена в действующих нормативных документах, в частности в [1].

Грунтовое основание представляет собой сложный природный объект. При проектировании зданий и сооружений необходимо представить этот объект в виде модели, отражающей существенные свойства исходного объекта. В настоящее время в проектной практике используются следующие модели грунтовых оснований: модель Винклера, модель линейно-деформируемого основания, модель двухпараметрического упругого основания (модель Пастернака), билинейная модель основания Федоровского, упругопластическая модель Кулона — Мора, идеально упругопластическая модель Друккера — Прагера, модель Боткина и целый ряд других моделей.

Грунтовое основание, как правило, состоит из нескольких слоев грунта. Эти слои грунта образуют сложную трехмерную структуру. Физико-механические характеристики грунтов могут существенно отличаться друг от друга. Здание или сооружение также представляет собой сложный трехмерный объект. В этом объекте выделяют несущие элементы, которые могут быть стержневого, пластинчатого, оболочечного или массивного типа. Модель здания должна учитывать особенности конструкционного материала несущих конструкций, в качестве которого обычно используется железобетон или сталь. Для моделирования таких сложных объектов в строительстве наиболее часто используется метод конечных элементов. Этот метод реализован в различных

программных комплексах. В практике проектирования зданий и сооружений в Российской Федерации достаточно часто используются программные комплексы SCAD OFFICE, ЛИРА-САПР, PLAXIS.

В программном комплексе SCAD Office реализованы следующие модели грунтовых оснований:

- модель упругого основания Винклера с одним коэффициентом постели;
- модель линейно-деформируемого основания;
- модель двухпараметрического упругого основания (модель Пастернака);
- билинейная модель основания Федоровского с переменными по площади коэффициентами постели.

В программном комплексе ЛИРА-САПР реализованы следующие модели грунтовых оснований:

- модель упругого основания Винклера с одним коэффициентом постели;
- модель линейно-деформируемого основания;
- модифицированная модель двухпараметрического упругого основания (модель Пастернака);
- идеально упругопластическая модель Кулона — Мора;
- идеально упругопластическая модель Друккера — Прагера;
- модель Боткина.

В программном комплексе PLAXIS реализованы следующие модели грунтовых оснований:

- Linear elastic: линейно-упругая, линейно-деформируемая, без критерия прочности;
- Mohr-Coulomb: линейно-упругая, линейно-деформируемая, идеально пластичная, с критерием прочности Кулона — Мора;
- Hardening soil: шатровая упругопластическая модель, нелинейно-деформируемая, с упрочнением при объёмном сжатии и при сдвиге;
- Hardening soil small: является развитием модели Hardening soil с учётом области малых напряжений;
- Soft soil: шатровая модель, с объёмным упрочнением, нелинейно-деформируемая, с критерием прочности Кулона — Мора. Является усовершенствованной моделью типа Cam-Clay;
- Soft soil creep: является развитием модели Soft Soil и учитывает ползучесть (вторичная консолидация);
- целый ряд других моделей.

Обсуждение достоинств и недостатков часто используемых в проектной практике моделей грунтовых оснований.

Обсуждение проблем использования моделей грунтовых оснований при проектировании реальных зданий и сооружений.

СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. СП 22.13330.2016. Основания зданий и сооружений. Актуализированная редакция СНиП 2.02.01-83. М.: 2016.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПИРОГЕНЕТИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ СЫПУЧЕГО СЛОЯ ОРГАНИЧЕСКОГО СЫРЬЯ

Сотников В. Г., Сафин Р. Г., Ланкин К. А.,
Мифтахов Р. А., Каримов И. Р., Ильясов И. Р.,
ФГБОУ ВО «КНИТУ»

Ключевые слова: органическое сырье, термическое разложение, тепломассоперенос.

Пирогенетическое разложение перспективный метод утилизации вредных бытовых отходов. В России метод пиролиза мало применяется. В основном это обусловлено сложностью протекания процесса в связи с чем подбор технологических режимов и разработка аппаратного оформления представляется непростой задачей.

Математическое описание пирогенетического разложения представляет собой совокупность тепло и массобменных процессов, происходящих в результате термического воздействия.

В данной работе предлагается моделирование термического разложения сыпучего слоя растительного сырья в герметичной камере (рис. 1). Сечение пиролизной камеры выполнено в виде прямоугольника. Подвод тепла к камере кондуктивный, с четырех сторон.

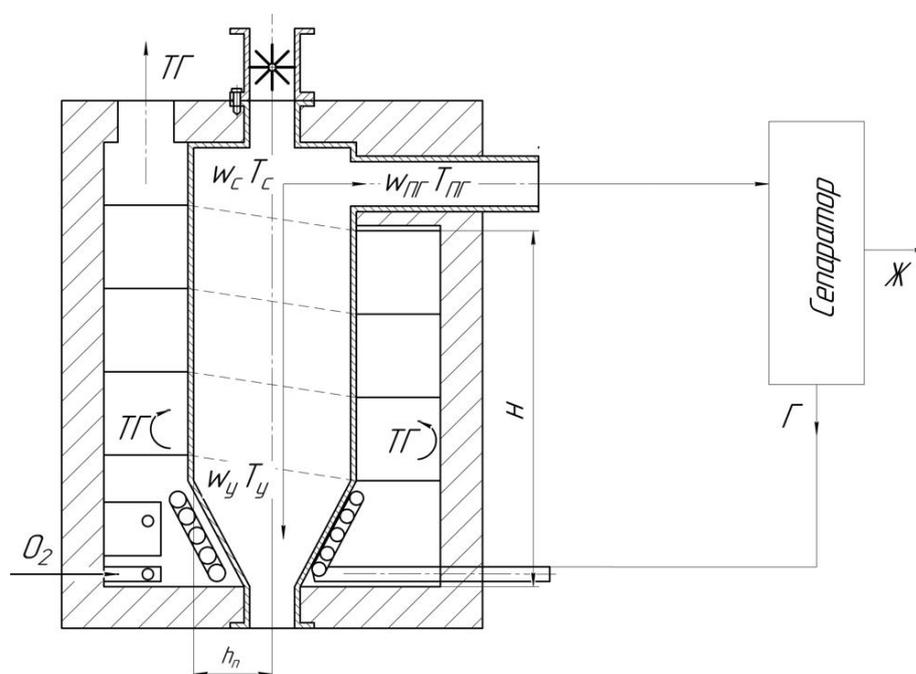


Рис. 1. Схема пиролизной зоны

Прогрев стенок пиролизной камеры осуществляется топочными газами. Температура топочных газов около 1100 °С. Переработка отходов ведется в непрерывном режиме. За счет использования продуктов сепарации пиролизных

газов удается добиться существенного энергосбережения при проведении пиро-генетической переработки.

Моделирование пирогенетического разложения органического сырья осуществлялось для слоя измельченных частиц, находящихся, условно, в бес-конечной пластине.

Перенос тепла в насыпном слое частиц, движущихся с постоянной скоро-стью W_M , описывается дифференциальным уравнением Фурье второго порядка.

$$W_M \cdot \rho_{cl} \cdot c_M \frac{\partial T_{cl}}{\partial h} = \frac{\partial T_{cl}}{\partial l} \cdot \left(\lambda_{cl} \cdot \frac{\partial T_{cl}}{\partial l} \right) + q_{xp} \quad (1)$$

где, h — текущая координата высоты насыпного слоя отходов в камере пироли-за, м; $\rho_{пл}$ — насыпная плотность частиц, кг/м³; c_M — теплоемкость материала, Дж/(кг·К); T_{cl} — температура слоя, С°; l — текущая координата расстояния от прилегающей стенки камеры пиролиза, м; λ_{cl} — эффективный коэффициент теплопроводности слоя материала, Вт/(м·К), зависит от порозности слоя, тем-пературы, скорости движения биомассы в зоне пиролиза, его значение опреде-ляется экспериментальным путем; $q_{x.p}$ — сток (приток) тепла за счет химиче-ских реакций, Дж/(м²·с), рассчитывается по выражению

$$q_{x.p} = \sum_{i=1}^n q_i (-k_i \rho_i)$$

где, q_i — удельная теплота превращения i компонента, Дж/кг; k_i — константа скорости i химической реакции, Дж/кг; ρ_i — плотность i компонента, кг/м³

Схема крайевых условий для решения уравнения (1) представлена на рис. 2.

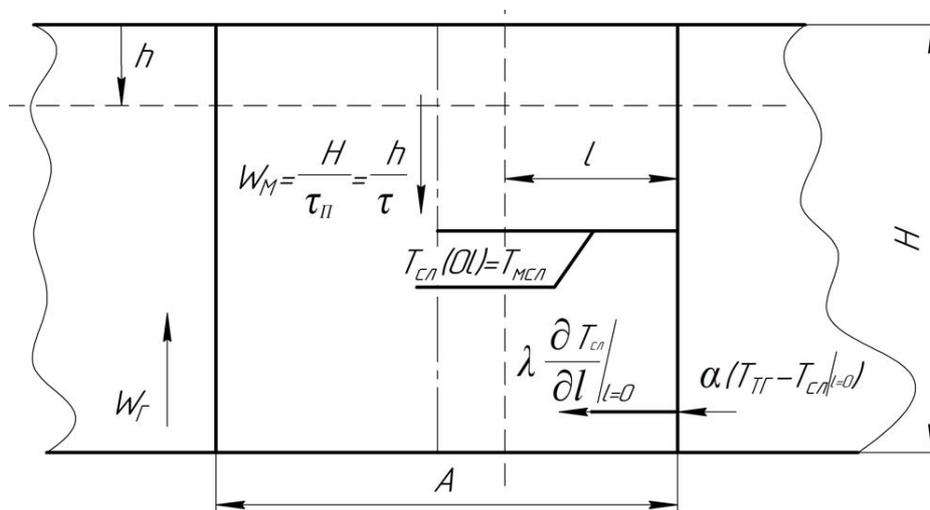


Рис. 2. Схема крайевых условий уравнения Фурье

Начальная температура слоя измельченных органических отходов на вхо-де в камеру пиролиза $T_{cl}(0,l)$ определяется конечной температурой материала после сушки $T_{м.с}$ соотношением [1–4]

$$T_{cl}(0,l) = T_{м.с}$$

Температура слоя материала, соприкасающаяся с теплоподводящей поверхностью, определяется граничным условием третьего рода:

$$-\lambda_{\text{сл}} \left. \frac{\partial T_{\text{сл}}}{\partial l} \right|_{l=0} = \alpha (T_{\text{г}} - T_{\text{сл}}|_{l=0}),$$

где, $T_{\text{г}}$ — температура топочного газа, $^{\circ}\text{C}$.

Условие симметрии запишется соотношением:

$$\left. \frac{\partial T_{\text{сл}}}{\partial l} \right|_{l=\frac{A}{2}} = 0.$$

При разложении древесины образуется уголь и парогазовая смесь. Массоперенос по сечению частицы можно записать отдельно для древесины, угля и парогазовой смеси:

— для древесины

$$\frac{\partial \rho_{\text{др}}}{\partial \tau} = -k_{\text{др}} \rho_{\text{др}} \quad (2)$$

— для угля

$$\frac{\partial \rho_{\text{у}}}{\partial \tau} = \phi \cdot k_{\text{др}} \rho_{\text{др}} \quad (3)$$

— для пиролизных газов

$$\frac{\partial \rho_{\text{ПГ}}}{\partial \tau} = (1 - \phi) k_{\text{др}} \rho_{\text{др}} \quad (4)$$

где, ρ — удельная масса компонента, $\text{кг}/\text{м}^3$ (др — древесины, у — угля, ПГ — пиролизных газов); ϕ — доля угля в древесной частице, $\phi = m_{\text{у}}/m_{\text{др}}$; $k_{\text{др}}$ — константа скорости химических реакций разложения древесины [5–9].

Начальные условия для уравнений (2)–(4) имеют вид:

$$\rho_{\text{др}} = \rho_{\text{др}0}; \rho_{\text{ПГ}} = 0; \rho_{\text{у}} = 0$$

Расчет математической модели позволяет определить время прогрева сыпучего слоя растительных отходов и кинетику разложения на фракционные составляющие пиролизного газа и углеродистого остатка. Показано, что значение ширины слоя отходов при кондуктивном пиролизе оказывает существенное воздействие на длительность процесса термического разложения, а плотность сырья может быть критерием для определения степени пиролиза твердого остатка и скорости образования пиролизных газов при пирогенетическом разложении органического сырья.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Trubetskaya A., Souihi N., Umeki K. Categorization of tars from fast pyrolysis of pure lignocellulosic compounds at high temperature. *Renewable Energy*, 2019, vol. 141, P. 751–759.
2. Сафин Р. Г., Степанова Т. О., Зиатдинов Р. Р., Рябушкин Д. Г., Петров В. И., Сотников В. Г. / Конструктивный расчет пиролизной зоны установки производ-

- ства активированного угля // *Деревообрабатывающая промышленность*. 2020. № 3. С. 45–55.
3. Сафин Р. Г., Зиятдинов Р. Р., Сотников В. Г., Рябушкин Д. Г., Гумеров Д. Р., Чжан С. В. / Моделирование процесса измельчения и транспортирования органических отходов в установке производства активированного угля / *Системы. Методы. Технологии*. 2021. № 2. С. 15–157.
4. Сафин Р. Г., Степанова Т. О., Зиятдинов Р. Р., Рябушкин Д. Г., Сотников В. Г. / Моделирование процесса охлаждения в установке производства активированного угля // *Деревообрабатывающая промышленность*. 2021. № 3. С. 78–86.
5. Сотников В. Г. Моделирование процесса измельчения и транспортировки органических отходов для установки по производству активированного угля / *Системы. Методы. Технологии*. 2021. № 3. С. 92–97.
6. Сафин Р. Г., Зиятдинов Р. Р., Сотников В. Г., Рябушкин Д. Г., Тимербаева А. Л. / Методика расчета пиролизной зоны в установке производства активированного угля / *Вестник ИжГТУ имени М. Т. Калашникова*. 2021. № 3. С. 26–35.
7. Сафин Р. Г., Зиятдинов Р. Р., Сотников В. Г., Рябушкин Д. Г., Ахметова Д. А. / Моделирование процесса сушки древесных отходов в установке производства активированного угля / *Системы. Методы. Технологии*. 2021. № 4. С. 79–86.
8. Сафин Р. Г., Зиятдинов Р. Р., Сотников В. Г., Рябушкин Д. Г. Методика расчета зоны активации в установке производства активированного угля // *Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки*. 2021. № 4. С. 43–50.
9. Сафин Р. Г., Сотников В. Г., Зиятдинова Д. Ф. Пирогенетическая переработка органических отходов текстильной промышленности в адсорбенты. *Известия высших учебных заведений. Технология текстильной промышленности*. 2021. № 5. С. 229–235.

ИДЕНТИФИКАЦИЯ САЙТОВ СВЯЗЫВАНИЯ КАТИОННЫХ ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРОВ НА ВИРУСНОЙ ОБОЛОЧКЕ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Холина Е. Г.¹, Федоров В. А.¹, Хрущев С. С.¹, Коваленко И. Б.^{1,2},
Страховская М. Г.^{1,2}, Рубин А. Б.¹

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова

²Федеральный научно-клинический центр специализированных видов
медицинской помощи и медицинских технологий ФМБА России

Ключевые слова: SARS-CoV-2; SARS-CoV; MERS-CoV; фотосенсибилизатор; броуновская динамика; электростатические взаимодействия

Фотосенсибилизаторы, участвующие в фотодинамических реакциях, могут вызывать повреждение оболочечных вирусов, в связи с чем считаются перспективными кандидатами для инактивации коронавирусов. В частности, в ряде экспериментальных исследований с участием нашей лаборатории была показана активность октакис(холинил) фталоцианина цинка ($ZnPcChol_{8+}$) по отношению к бычьему коронавирусу, вирусу птичьего гриппа H5N8 и коронавирусу человека SARS-CoV-2. Одним из важнейших белков оболочки коронавирусов является S белок, необходимый для связывания вируса с клеткой-хозяином и последующего слияния вирусной и животной мембран, в результате чего вирус проникает в клетки.

Для того чтобы оценить возможные области связывания фотосенсибилизаторов с S-белками коронавирусов SARS-CoV-2, SARS-CoV и MERS-CoV был применен метод броуновской динамики. Для трех белков было построено поверхностное распределение электростатического потенциала. Показано, что электростатический потенциал очень неоднородно распределен на поверхности S-белков, однако самая выраженная из областей с отрицательным электростатическим потенциалом на соединении «головы» и «ноги» спайковых белков является общей для всех трех исследованных коронавирусов и представляет доминирующий центр связывания фотосенсибилизаторов. Связывание с этой областью молекул фотосенсибилизаторов на расстоянии всего 10 нм от вирусной мембраны может способствовать эффективному окислительному повреждению не только самих S-белков, но и липидного бислоя [1; 2].

После апробации метода броуновской динамики для изучения связывания молекулы $ZnPcChol_{8+}$ с S-белками коронавирусов, аналогичное исследование было проведено с использованием модели оболочки SARS-CoV-2, разработанной в работе [3]. Нами была создана электростатическая карта внешней поверхности SARS-CoV-2, демонстрирующая неоднородное распределение поля электростатического потенциала вирусной оболочки [4]. Многочисленные отрицательно заряженные участки электростатического потенциала возникают, в основном, из-за присутствия в вирусной мембране отрицательно заряженных ли-

пидных доменов и отрицательно заряженных областей на «ногах» S-белков. Мембранные (М) и оболочечные (Е) белки с суммарным положительным зарядом имеют тенденцию к колокализации с отрицательно заряженными липидами. В пентамере Е белка, экспонированном на внешней поверхности, отрицательно заряженные остатки глутамата и окружающие липиды образуют кольцевой участок отрицательного электростатического потенциала. В результате применения метода броуновской динамики нами были получены несколько тысяч диффузионно-столкновительных электростатически выгодных комплексов молекулы ZnPcChol₈₊ с оболочкой SARS-CoV-2. Показано, что все отрицательно заряженные компоненты оболочки притягивают молекулы фотосенсибилизатора и, таким образом, являются потенциальными мишенями для синглетного кислорода, образующегося в фотосенсибилизированных реакциях. Результаты, полученные с применением методов компьютерного моделирования, согласуются с наблюдаемой в экспериментальных исследованиях потерей S-белков и разрушением мембраны в результате фотодинамической инактивации коронавируса.

Полученные результаты вычислительных экспериментов объясняют, как положительно заряженные противовирусные препараты могут связываться с оболочкой коронавируса, несмотря на ее суммарный положительный заряд.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sharshov K. The photosensitizer octakis (Cholanyl) zinc phthalocyanine with ability to bind to a model spike protein leads to a loss of SARS-CoV-2 infectivity in vitro when exposed to far-red LED / K. Sharshov, M. Solomatina, O. Kurskaya, I. Kovalenko, E. Kholina, V. Fedorov, G. Meerovich, A. Rubin, M. Strakhovskaya // *Viruses*. 2021. V. 13. № 4. P. 643.
2. Fedorov V. What Binds Cationic Photosensitizers Better: Brownian Dynamics Reveals Key Interaction Sites on Spike Proteins of SARS-CoV, MERS-CoV, and SARS-CoV-2 / V. Fedorov, E. Kholina, S. Khrushev, I. Kovalenko, A. Rubin, M. Strakhovskaya // *Viruses*. 2021. V. 13. № 8. P. 1615.
3. Pezeshkian W. Molecular architecture and dynamics of SARS-CoV-2 envelope by integrative modeling / W. Pezeshkian, F. Grünwald, O. Narykov, S. Lu, T. A. Wassenaar, S. J. Marrink, D. Korkin // *bioRxiv*. 2022. P. 2021.09.
4. Fedorov V. Electrostatic Map of the SARS-CoV-2 Virion Specifies Binding Sites of the Antiviral Cationic Photosensitizer / V. Fedorov, E. Kholina, S. Khrushev, I. Kovalenko, A. Rubin, M. Strakhovskaya // *Int. J. Mol. Sci.* 2022. V. 23. № 13., P. 7304.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ КЛАСТЕРИЗАЦИИ И КЛАССИФИКАЦИИ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ВОЗДЕЙСТВИЯ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ НА ФИТОПЛАНКТОН

Хрущев С. С.¹, Червицов Р. Н.¹, Годоренко Д. А.¹,
Дрозденко Т. В.², Антал Т. К.², Ризниченко Г. Ю.¹, Плюснина Т. Ю.¹
¹Биологический факультет Московского государственного университета
имени М. В. Ломоносова
²Лаборатория комплексных экологических исследований
Псковского государственного университета

Индукционные кривые отражают динамику интенсивности флуоресценции хлорофилла *a* под действием света. Форма таких кривых характеризуется так называемыми параметрами ЛР-теста, которые представляют собой значения флуоресценции в различные моменты времени и комбинации этих значений [2]. Эти параметры могут быть использованы как входные данные для алгоритмов кластеризации [3] и классификации [1][4], что позволило бы существенно ускорить и автоматизировать обработку данных. В перспективе, применение данных методов может быть использовано при создании системы экологического мониторинга для обнаружения токсиканта в среде обитания фитопланктона.

Для анализа действия тяжелых металлов на фотосинтетический аппарат фитопланктона были отобраны пробы фитопланктона из восьми водных объектов Псковской области. Образцы фитопланктона были обработаны солями кадмия и хрома. Далее пробы инкубировались в течении трех суток, и через каждые 3–5 часов измерялись кривые индукции флуоресценции. Всего было получено 465 индукционных кривых, каждая из которых имела 14 параметров ЛР-теста. Набор всех параметров ЛР-теста и составил массив данных для дальнейшего анализа.

Обнаружено, что с течением времени фотосинтетическая активность в присутствии токсикантов снижается, причем в случае кадмия это происходит практически сразу же после его добавления, тогда как в случае хрома токсическое действие развивается примерно за 8 часов.

Далее для сравнения образцов фитопланктона из различных водоемов были проанализированы контрольные выборки из всех водных объектов. С помощью статистических методов (тест Тьюки, метод Колмогорова — Смирнова) и кластерного анализа все водные объекты были разделены на две группы — группа 1, характеризующаяся более низкой фотосинтетической активностью, и группа 2, характеризующаяся более высокой фотосинтетической активностью. Характеристики образцов внутри каждой группы сходны между собой и статистически значимо отличаются от характеристик образцов другой группы.

На следующем этапе был проведен анализ изменения ключевых параметров ЛР-теста, характеризующих образцы группы 1 и группы 2, в ответ на действие токсикантов. Значения F_v/F_M (квантовый выход первичной фотохимии,

являющийся показателем эффективности фотосинтеза) и PI_{ABS} (индекс производительности) снижались сильнее в образцах группы 1. Такие изменения указывают на то, что группа 1, характеризующаяся исходно в контроле более низкой эффективностью фотосинтеза, оказалась более чувствительной к действию токсикантов.

Далее, для того чтобы определить наличие или отсутствие токсиканта в среде обитания, был создан классификатор «Случайный лес» [1][4], где в качестве признаков использовались 14 параметров ЛР-теста, характеризующих каждую индукционную кривую. Точность классификатора определялась методом кросс-валидации и составила примерно 83 %. Классификаторы с использованием только двух параметров ЛР-теста, либо главных компонент, позволяют получить точность, близкую к исходной. Точность классификации зависит от времени инкубации: для контрольных наблюдений точность со временем снижается, а для наблюдений с токсикантами – увеличивается.

Таким образом, с помощью кластерного и статистического анализа все водные объекты по активности фотосинтеза фитопланктона были разделены на две группы. Объекты внутри одной группы имели сходную реакцию на действие токсиканта, которая отличалась от реакции объектов другой группы. Созданный в работе классификатор «Случайный лес» позволяет определить присутствие токсикантов в пробах с точностью 83 %. Согласно полученным результатам, существуют перспективы применения данных методов при определении наличия токсикантов в естественных местообитаниях фитопланктона.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Чистяков С. П. Случайные леса: обзор // Труды Карельского научного центра РАН. 2013. № 1. С. 117–136.
2. Strasser R. J., Tsimilli-Michael, M., Srivastava, A. Analysis of the Chlorophyll a Fluorescence Transient. // George C. Papageorgiou and Govindjee (eds): Chlorophyll a Fluorescence: A Signature of Photosynthesis. 2004. P. 321–362.
3. Scikit-learn. Machine Learning in Python. Clustering. [Online]. Available: <https://scikit-learn.org/stable/modules/clustering.html>
4. Scikit-learn. Machine Learning in Python. Ensemble methods [Online]. Available: <https://scikit-learn.org/stable/modules/ensemble.html#forest>

К ВОПРОСУ ОБ УНИФИКАЦИИ ИНТЕГРИРУЕМЫХ ИЕРАРХИЙ

Юров А. В.¹, Юрова А. А.²,
¹БФУ имени И. Канта
²КГТУ, БФУ имени И. Канта

Ключевые слова: интегрируемость, солитоны. одевающие цепочки, суперсимметрия, преобразование Дарбу.

Связи между интегрируемыми иерархиями обсуждаются давно. Простейшим примером является преобразование Миуры между уравнением КдФ и мКдФ. Позднее стало ясно, что эта связь носит суперсимметричный характер: преобразование Дарбу для одномерного уравнения Шредингера (L-уравнение иерархии КдФ) генерирует алгебру суперсимметрии [1], [2] а суперзаряд оказывается L-уравнением для иерархии мКдФ [3]. Другой вариант установить эту связь, использовать одевающие цепочки дискретных симметрий [4], что позволило исследователям включить в единую схему гиперболическое и эллиптическое уравнения Каладжеро [5], [6]. Другое направление унификации было намечено в работах Матвеева, Дубарда и Смирнова [7, 8, 9] основанное на иерархии AKNS и обнаруженное при изучении волн-убийц (обобщенных солитонов Перегринна) [10]. Мы доводим эти исследования до логического завершения и объясняем связь иерархии НУШ и КП, которые оказываются разными формами записи одних и тех же уравнений.

СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Андрианов А. А., Борисов Н. В., Иоффе М. В. Метод факторизации и преобразование Дарбу для многомерных гамильтонианов. ТМФ, 61:2 (1984), 183–198; Theoret. and Math. Phys., 61:2 (1984), 1078–1088.
2. Андрианов А. А., Борисов Н. В., Иоффе М. В., Эйдес М. И. Суперсимметричная механика: новый взгляд на эквивалентность квантовых систем. ТМФ, 61:1 (1984), 17–28; Theoret. and Math. Phys., 61:1 (1984), 965–972.
3. Андреев В. А., Бутова М. В. Низшие уравнения Кортевега де Фриза и суперсимметричная структура уравнений синус-Гордон и Лиувилля. ТМФ, 85:3 (1990), 376–387; Theoret. and Math. Phys., 85:3 (1990), 1275–1283.
4. Веселов А. П., Шабат А. Б. Одевающая цепочка и спектральная теория оператора Шредингера. Функц. анализ и его прил., 27:2 (1993), 1–21; Funct. Anal. Appl., 27:2 (1993), 81–96.
5. Борисов А. Б., Зыков С. А. Одевающая цепочка дискретных симметрий и размножение нелинейных уравнений. ТМФ, 115:2 (1998), 199–214; Theoret. and Math. Phys., 115:2 (1998), 530–541.
6. Юров А. В. Сопряженные цепочки дискретных симметрий (1+2) нелинейных уравнений. ТМФ, 119:3 (1999), 419–428; Theoret. and Math. Phys., 119:3 (1999), 731–738.

7. Dubard P., Matveev V. B. Multi-Rogue Waves Solutions: From the NLS to the KP-I Equation. *Nonlinearity*, 26:12 (2013), R93–R125.
8. Матвеев В. Б., Смирнов А. О. Решения типа «волн-убийц» уравнений иерархии Абловица — Каупа — Ньюэлла — Сигура: единый подход. *ТМФ*, 186:2 (2016), 191–220; *Theoret. and Math. Phys.*, 186:2 (2016), 156–182.
9. Матвеев В. Б., Дюбард Ф., Смирнов А. О. Квазирациональные решения нелинейного уравнения Шрёдингера. *Нелинейная динам.*, 11:2 (2015), 219–240.
10. Итс А. Р., Рыбин А. В., Салль М. А. К вопросу о точном интегрировании нелинейного уравнения Шрёдингера. *ТМФ*, 74:1 (1988), 29–45; *Theoret. and Math. Phys.*, 74:1 (1988), 20–32

Научное издание

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ И ПРОЦЕССОВ

Сборник тезисов
Международной научно-практической конференции
10–11 ноября 2022 г.

Электронное сетевое издание

Технический редактор: Ю. В. Бруттан
Компьютерная верстка: Ю. В. Бруттан, Н. А. Васильева

Подписано в печать 04.12.2022. Формат 60×90/8.
Гарнитура Times New Roman. Усл. п. л. 3,0. Заказ № 6100.

Адрес издательства:
Россия, 180000, г. Псков, ул. Л. Толстого, д. 4^а, корп. 3^а.
Псковский государственный университет