

МИЭМ

Московский институт электроники
и математики им. А.Н.Тихонова



**НАЦИОНАЛЬНЫЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
"ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ"**

Московский институт электроники и
математики им. А.Н. Тихонова
Национального исследовательского университета
"ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ"



МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ

2019

**МЕЖВУЗОВСКАЯ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
СТУДЕНТОВ, АСПИРАНТОВ И МОЛОДЫХ СПЕЦИАЛИСТОВ
имени Е.В. АРМЕНСКОГО**

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
«ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ»

МОСКОВСКИЙ ИНСТИТУТ ЭЛЕКТРОНИКИ И МАТЕМАТИКИ им. А.Н.Тихонова
НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
«ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ»



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

МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ

Москва 2019 г.

ББК 2+3

Н 34

Межвузовская научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых специалистов им. Е.В. Арменского. Материалы конференции. - М. ~: МИЭМ НИУ ВШЭ, 2019. – 278 стр.

ISBN 978-5-94768-074-4

В материалах конференции студентов, аспирантов и молодых специалистов представлены тезисы докладов по следующим направлениям: математика и компьютерное моделирование; информационно-коммуникационные технологии; автоматизация проектирования, банки данных и знаний, интеллектуальные системы; компьютерные образовательные продукты; информационная безопасность; электроника и приборостроение; производственные технологии, нанотехнологии и новые материалы; инновационные технологии цифровой экономики; инновационные технологии в дизайне.

Материалы конференции могут быть полезны для преподавателей, студентов, научных сотрудников и специалистов, специализирующихся в области прикладной математики, информационно-коммуникационных технологий, электроники, информационной безопасности и дизайна.

Редакционная коллегия: Е.А. Крук, С.А. Аксенов, С.М. Авдошин, У.В. Аристова,
Г.Г. Бондаренко, Л.С. Восков, А.А. Елизаров,
Э.С. Клышинский, А.Б. Лось, Н.С. Титкова

Издание осуществлено с авторских оригиналов.

ISBN 978-5-94768-074-4

© Московский институт электроники и математики Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики», 2019 г.
© Авторы, 2019г.

Вычислительный эксперимент

В ходе вычислительного эксперимента тестировались задачи размерностей (n) равным: 6 (2 задачи), 10 (2 задачи), 15 (2 задачи), 33 (задача с известным оптимумом и решением [6]).

Цели вычислительного эксперимента:

Путем вычисления задач с известными оптимальными решениями убедиться, что реализованный алгоритм работает верно;

Выбрать 3 лучших, с точки зрения затраченного времени, стратегии ветвления;

Найти наилучшую, с точки зрения затраченного времени, комбинацию параметров алгоритма (стратегии ветвления, выбор алгоритма подсчёта нижних оценок) для решения этого класса задач.

Стратегия подсчёта нижней оценки для каждого листа выбиралась таким образом:

если у вершины «родителя» соотношение $\frac{\text{Верхняя оценка} - \text{Нижняя оценка}}{\text{Верхняя оценка}} * 100\% \leq 0\%$ (8)

(5%; 10%; 20%; 30%; 50%; 100%), то у всех «наследников вершины» нижняя оценка считается потоковым алгоритмом, иначе – симплекс методом.

Нижняя оценка начальной вершины всегда считается симплекс методом. Ниже представлен фрагмент таблицы с результатами вычислительного эксперимента.

Таблица 1.
Время работы алгоритма в зависимости от выбора параметров

n	0%	5%	10%
1	00:00,52737	00:00,38436	00:00,71461
10	00:19,41699	00:14,59107	00:01,82696
15	10:11,46150	00:26,29119	04:59,88340
33	03:09,64559	02:49,38984	02:52,20578
6	00:00,64228	00:00,42618	00:00,58451
10	00:04,94293	00:00,93811	00:03,26072
15	16:55,03324	05:42,91886	00:04,47344

В первом столбце приведены размерности тестируемых задач. В первом – третьем столбцах приведено время (в секундах) работы алгоритма в зависимости от выбранных параметров, где первая строка – процент, меньше которого должно быть соотношение (8), чтобы нижняя оценка вершины «потомка» считалась потоковым алгоритмом.

Заключение

В ходе исследования и вычислительного эксперимента было установлено:

При решении задач с известными оптимальными решениями [6] вышеизложенным алгоритмом, решения совпали с известными решениями;

Выбраны 3 лучших, с точки зрения затраченного времени, стратегии ветвления в порядке убывания это: ветвление по минимальной нижней оценке, ветвление по минимальной верхней оценке, ветвление по гибридной оценке;

Выявлено, что при выполнении соотношения (8) в диапазоне 5% - 15%, протестированные задачи считаются наименьшее время.

Список литературы:

1. He Jiang, Shuwei Zhang, Zhilei Ren, Xiaochen Lai, and Yong Piao «Approximate Muscle Guided Beam Search for Three-Index Assignment Problem» Software School, Dalian University of Technology, Dalian, 116621, China jiangle@dlut.edu.cn
2. A. M. C. Ficker, L. G. Afraimovich, F. C. R. Spieksma The axial 3-Dimensional Problem with perimeter costs revisited. Proceedings of the 12th Workshop on Models and Algorithms for Planning and Scheduling Problems. MAPSP 2015. La Roche-en-Ardenne, Belgium. 8-12 June 2015. P. 83-85.
3. Афраймович Л. Г. «Эвристические методы решения целочисленных декомпозиционных многоиндексных задач», Автоматика и телемеханика, 2014. № 8. С. 3–18.
4. Афраймович Л. Г. «Многоиндексные транспортные задачи с 2-вложенной структурой», Автоматика и телемеханика, 2013. № 1. С. 116-134.
5. Burkard R.E., Rudolf R., Woeginger G.J. Three-dimensional axial assignment problems with decomposable cost coefficients // Discrete Applied Mathematics. 1996. V. 65. P. 123–139
6. <http://www.win.tue.nl/~fspieksma/instancesEJOR.htm>

РЕШЕТОЧНАЯ МОДЕЛЬ БЕЛКА

К.Н. Файзуллина

*Национальный исследовательский университет
«Высшая школа экономики»,
департамент прикладной математики
МИЭМ НИУ ВШЭ*

Аннотация

В работе изучается решёточная гидрофобно-полярная модель белка [1], рассматривается пространство конформаций (блужданий) заданной длины. Рассматривается зависимость среднего квадрата расстояния между концами блужданий и среднего квадрата радиуса инерции от длины, а также средние величины, характеризующие процесс фолдинга для фиксированной последовательности аминокислот.

Введение

Гидрофобно-полярная модель белка на квадратной решётке [1] является простейшей моделью биополимера. Протеин представляет собой цепочку длины n — число аминокислот. Каждая аминокислота относится к одному из двух типов: Н (гидрофобная) или Р (полярная). Конформация цепочки — это блуждание без самопересечений. Топологическими соседями называется пара мономеров, если они являются смежными в пространстве, но не являются последовательными в цепочке. Каждый контакт НН между топологическими соседями имеет энергию взаимодействия $\epsilon (<0)$. Каждый топологический контакт РР или НР имеет энергию взаимодействия 0. Нативным состоянием называется состояние, при котором цепочка имеет минимум свободной энергии.

Множество всех блужданий и всех конформаций

Пространство конформаций представляет собой набор всех конформаций с точностью до поворота или отражения. Для генерации уникальных конформаций использовалась метрика, описанная в [1].

Пусть N — число всех уникальных конформаций заданной длины n, а A — число всех блужданий этой же длины. Тогда между ними следующая зависимость:

$$A = 8(N - 1) + 4$$

Это связано с тем, что всем уникальным конформациям, кроме полностью прямой конформации, соответствуют

8 блужданий — 4 поворота и два отражения. У полностью прямой конформации нет отражений. Это также подтверждается численно полным перебором всех блужданий с длинами вплоть до 11.

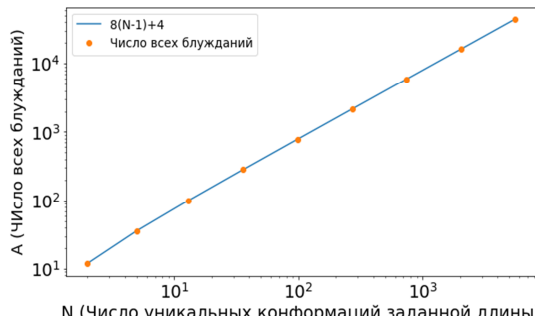


Рис.1. Линией показана зависимость $A=8(N-1)+4$, точками отмечено полученное программой число всех блужданий заданной длины.

Для цепочки длины n квадрат радиуса инерции определяется следующим образом [2]:

$$R_g^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|r_i - r_c\|^2, \text{ где } r_c \text{ — центр масс цепочки.}$$

Предполагается, что масса всех мономеров одинакова.

Для пространства уникальных конформаций и для пространства блужданий можно вычислить средний квадрат расстояний между концами блуждания и средний квадрат радиуса инерции [2], [3]. Численно разница между средним квадратом радиуса инерции для всех блужданий и для всех уникальных конформаций уменьшается с увеличением n — длины цепочки. Аналогично для среднего квадрата расстояния.

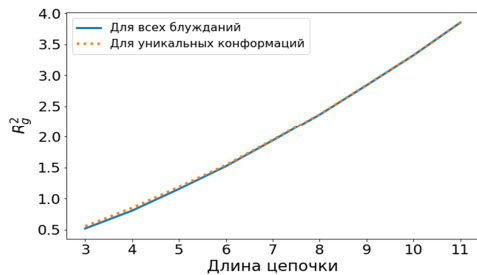
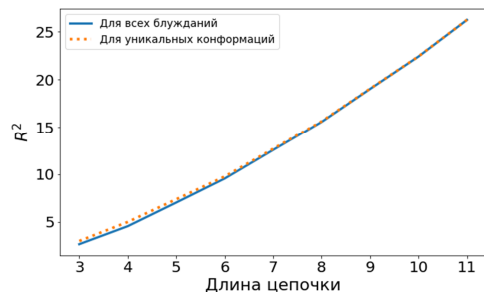


Рис.2. Средний квадрат радиуса инерции. Сплошной линией показаны результаты, полученные при учёте всех блужданий, пунктирной — при учёте всех



уникальных конформаций.

Рис.3. Средний квадрат расстояния между концами блуждания. Сплошной линией показаны результаты, полученные при учёте всех блужданий, пунктирной — при учёте всех уникальных конформаций.

Температурные зависимости

Усреднения по всем блужданиям, приведенные в предыдущем разделе, соответствуют пределу бесконечно высокой температуры

При конечной температуре T статистическая сумма модели имеет вид [1]:

$$Z = \sum_{m=0}^s g(m) \exp\left(\frac{(s-m)\epsilon}{kT}\right),$$

где $m=0..s$ — число топологических контактов НН, $g(m)$ — количество конформаций, у которых число топологических контактов равно m , k — постоянная Больцмана, $\epsilon (<0)$ — энергия взаимодействия между топологическими соседями НН.

Средняя компактность

Величина $\rho=(m+u)/x$, определённая для данного полимера (для фиксированной конформации и последовательности), называется компактностью, где m — число топологических контактов НН, u — количество остальных топологических контактов, x — максимально возможное число топологических соседей для длины данной цепочки.

Тогда средняя компактность по всему набору уникальных конформаций для данной фиксированной последовательности определяется следующим образом:

$$\langle \rho \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{m=0}^s \sum_{u=0}^{x-m} G(m, u) \exp\left(\frac{(s-m)\epsilon}{kT}\right)$$

где $G(m, u)$ — число конформаций, у которой ровно m топологических контактов НН и ровно u остальных топологических контактов. Средняя компактность характеризует потенциал цепочки к фолдингу. Последовательности, для которых средняя компактность достигает значение 1 при увеличении модуля ϵ , будут иметь нативные состояния, которые будут максимально компактными.

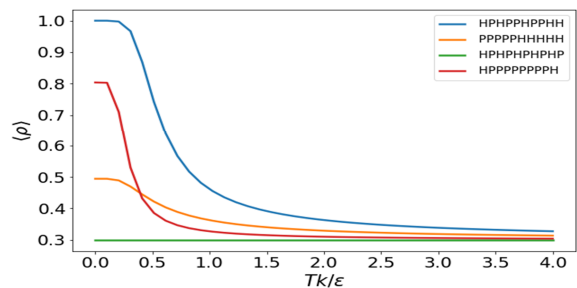


Рис.4. Средняя компактность для нескольких последовательностей при изменении температуры

На рисунке 4 показаны изменения средней компактности от температуры. Из графика видно, что с увеличением температуры средняя компактность уменьшается. Получается, что цепочка сворачивается при более низких температурах.

Средняя энергия находится по следующей формуле:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{m=0}^s g(m) (s-m)\epsilon \exp\left(\frac{(s-m)\epsilon}{kT}\right)$$

На рисунке 5 показана зависимость средней энергии от температуры для рассмотренных ранее последовательностей. Видно, что средняя энергия последовательности, которая имеет максимально компактные нативные структуры, принимает большие значения.

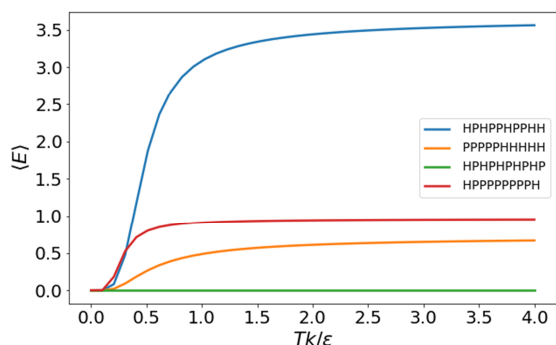


Рис.5. Средняя энергия для двух последовательностей при изменении температуры

Теплоемкость находится как второй момент энергии: $C = \frac{\epsilon}{kT^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$

На рисунке 6 показана зависимость теплоёмкости от температуры для некоторых последовательностей.

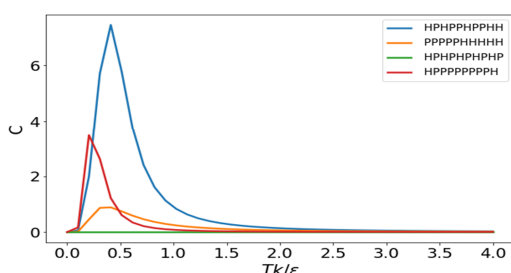


Рис.6. Теплоёмкость при изменении температуры для некоторых последовательностей последовательностей

Заклучение
В ходе работы было рассмотрено пространство конформаций, средние физические величины для последовательности и их связь с фолдингом. В работе приведены примеры для коротких цепочек, рассматривались последовательности до длины 11.

Данная работа — всего лишь начало исследования, посвящённого моделированию фолдинга белка.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ 19-07-01117.

Список литературы:

1. Ken A. Dill, A Lattice Statistical Mechanics Model of the Conformational and Sequence Spaces of Proteins / Kit Fun Lau, Ken A. Dill // Macromolecules J. – 1989 – Vol 22 – P. 3986-3997 .
2. Iwao Teraoka, Polymer solutions /Iwao Teraoka // John Wiley & Sons – 2002 – Vol 1 – P. 1-66.
3. Carlo Vanderzande, Lattice Models of Polymers / Carlo Vanderzande// Cambridge University Press – 2008– Vol 3 – P. 38-61, Vol 8 — P 119-148.

ВЛИЯНИЕ ФЕРРОНОВ СО СПИНОМ S=3/2 НА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ОДНОМЕРНЫХ ЦЕПОЧЕК СО СПИНОМ S=1

Р.Г. Астраханцев, Т.В. Бень

Национальный исследовательский университет
«Высшая школа экономики»,
департамент прикладной математики
МИЭМ НИУ ВШЭ.

Аннотация

В работе была изучена зависимость теплоемкости и магнитной восприимчивости от параметра взаимодействия между двумя ферронами со спинами 3/2.

Введение

В кристаллах, содержащих в своей структуре халдейновские цепочки с $S=1$, образуется неупорядоченное основное состояние со щелью в спектре магнитных возбуждений [1]. Основное состояние таких систем представляет собой устойчивую простую валентную связь. Согласно модели VBS, каждый из спинов $S=1$ в цепочке представляется в виде двух квазичастиц с спином $S=1/2$, связанных антиферромагнитным взаимодействием с квазичастицей соседнего иона. Если на ионе кислорода образуется дырка с эффективным спином $S=1/2$, то виртуальный обмен дырками приводит к ферромагнитному взаимодействию между двумя ближайшими магнитными ионами, в результате чего возникает кластер со спином $S = 3/2$ — феррон [2].

Внесение данной примеси в исследуемую халдейновскую систему приводит к появлению аномалии Шоттки на температурной зависимости теплоёмкости [3] (широкого максимума), которая смещается в сторону высоких температур с увеличением магнитного поля. Это смещение изотропно, т.е. практически не зависит от направления приложенного магнитного поля. Данная аномалия появляется вследствие перераспределения электронов с изменением температуры по уровням энергетического спектра. Была так же замечена некоторая зависимость величины магнитной восприимчивости от концентрации примесей Ca^{2+} в соединении Y_2BaNiO_5 : при увеличении концентрации в области низких температур восприимчивость возрастает, и при достаточно большой концентрации уходит в насыщение [4].

Анализ энергетического спектра двух ферронов

Гамильтониан для двух взаимодействующих ферронов со спинами $S_1=S_2=3/2$ имеет следующий вид [4]:

$$\hat{H} = 2J(\hat{S}_1\hat{S}_2) - g\mu_B H_i \hat{S}_i$$

где J – константа обменного взаимодействия спинов $S=3/2$, второе слагаемое – энергия Зеемана во внешнем магнитном поле H , i – одна из осей x, y, z , \hat{S}_i – компонента полного спина системы вдоль соответствующей осей.

Уравнение Шредингера для определения уровней энергии имеет вид:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

Для получения энергетических уровней была использована среда Wolfram Mathematica. Найдены следующие значения:

$$\begin{aligned} E_1 &= 0, E_2 = \Delta - g\mu_B H, E_3 = \Delta, E_4 = \Delta + g\mu_B H, \\ E_5 &= 3\Delta - 2g\mu_B H, E_6 = 3\Delta - g\mu_B H, E_7 = 3\Delta, \\ E_8 &= 3\Delta + g\mu_B H, E_9 = 3\Delta + 2g\mu_B H, E_{10} = 6\Delta - 3g\mu_B H, \\ E_{11} &= 6\Delta - 2g\mu_B H, E_{12} = 6\Delta - g\mu_B H, E_{13} = 6\Delta, \\ E_{14} &= 6\Delta + g\mu_B H, E_{15} = 6\Delta + 2g\mu_B H, E_{16} = 6\Delta + 3g\mu_B H, \end{aligned}$$

где $g = 2, \mu_B$ – магнетон Бора, $\Delta=2J$ – состояние между синглетом и триплетом в отсутствии поля.

Анализ зависимостей магнитной восприимчивости и теплоемкости

Температурная зависимость теплоемкости, которая представляет собой аномалию Шоттки, определяется перераспределением электронов по расщепленным подуровням системы двух взаимодействующих ферронов. Для заданной системы теплоемкость в присутствии магнитного поля будет иметь следующий вид: теплоемкость системы определяется выражением

$$C = R \frac{\partial}{\partial T} \left(T^2 \frac{\partial \ln z}{\partial T} \right)$$

где $z = \sum_i e^{-\frac{E_i}{kT}}$ – статистический вес системы, k – постоянная Больцмана.

На рис. 1 изображена температурная зависимость теплоемкости. Было показано, что при появлении магнит-