

Мы продолжаем серию редакционных статей, направленных на то, чтобы дать читателям более объемное представление о материалах, представленных в журнале. Этот номер содержит три тематических раздела: «Математические основы и численные методы моделирования», «Модели в физике и технологии» и «Анализ и моделирование сложных живых систем».

В статье Свириденко А. Б. о проектировании нуля на линейное многообразие, многогранник и вершину многогранника и ньютоновских методах минимизации рассматривается подход к построению методов решения задачи квадратичного программирования для расчета направления спуска в ньютоновских методах минимизации гладкой функции на множестве, заданном набором линейных равенств. Автором показано, что предложенный подход к расчету направления спуска требует меньшего объема вычислений на одной итерации, чем упоминаемый в работе двойственный метод Гилла и Мюррея. Важно также, что предлагаемый в статье метод допускает организацию вычислительного процесса с любой начальной точки в качестве исходного приближения решения. Достоинством работы является то обстоятельство, что помимо теоретических результатов в статье приводятся алгоритмы решения конкретных задач и примеры их решения.

В статье Лукашенко В. Т. и Максимова Ф. А. о моделировании полета осколков метеорного тела с учетом вращения рассматривается математическая модель оценки влияния вращения на скорость разлета осколков метеорного тела после разрушения для построения возможных траекторий выпавших на Землю метеоритов. При этом в качестве осколков рассматриваются простые геометрии тел (прямоугольники). Стоит отметить, что рассматривается двумерная плоская задача обтекания систем тел в условиях значительной интерференции. Показано, что вращение тел может существенно влиять на скорость разлета фрагментов метеорного тела после разрушения и, как следствие, приводить к значительно большей площади выпадения метеоритов.

В статье Мадеры А. Г. об иерархических методах математического моделирования стохастических тепловых процессов в сложных электронных системах рассматриваются математические модели функционирования таких комплексов. Такие модели необходимы в связи с появлением сложных электронных устройств, таких как многопроцессорные вычислительные комплексы, и автоматизации проектирования такого рода сложных комплексов. Отметим, что такое моделирование может производиться на разных уровнях детализации. Например, моделирование функционирования СБИС приводит к необходимости решения больших (до миллионов уравнений) систем ОДУ. В предлагаемой статье автор сосредоточился на моделировании теплового выделения при работе сложной электронной системы. Тема весьма актуальная, так как проектирование систем охлаждения, например кластерных систем, является сложной инженерной задачей. Автор предлагает «иерархический» метод моделирования процесса тепловыделения с учетом многих стохастических факторов. Обычно такой подход приводит к необходимости решения систем стохастических дифференциальных уравнений с вычислением стохастических интегралов (Ито или Стратановича). Автор же предлагает свой метод, позволяющий избежать сложных ресурсоемких вычислений. Демонстрируются примеры, иллюстрирующие эффективность применения авторской методики.

Статья Попова Д. И. и Климчика А. С. о моделировании жесткости для шагающих роботов посвящена моделированию жесткости (податливости) звеньев и шарниров в нижних конечностях антропоморфных роботов и определению ее влияния на точность позиционирования звеньев робота при совершении шага. В работе предлагается использовать метод виртуальных пружин для компенсации отклонений звеньев устройства от заданных значений в процессе реализации движения. Этот подход позволит более точно определять положение и ориентацию рабочего органа робота за счет описания деформаций звеньев путем введения в модель устройства виртуальных пружин. Авторами проведен анализ жесткости шагающего робота в двух фа-

зах шага: одноопорной и двухопорной, причем в первом случае робот моделируется как манипулятор, звенья которого образуют цепочку, а во втором случае — как параллельный манипулятор с двумя последовательными цепочками. В результате численного моделирования в работе построены карты отклонений рабочего органа (стопы) вдоль координатных осей, а также амплитуды отклонений положения и ориентации стопы для одноопорной фазы движения. Установлено, что карты отклонений зависят от высоты подъема ноги. Также авторами выявлено, что в двухопорной фазе шага численные значения отклонений существенно меньше, чем в одноопорной, и их влияние на устойчивость робота не критично. Полученные в рамках работы результаты могут быть в дальнейшем использованы для детальной разработки системы стабилизации движения двуногих шагающих роботов и компенсации отклонений их звеньев для предупреждения потери устойчивости.

Статья Фаворской А. В. об исследовании свойств материала пластины лазерным ультразвуком при помощи анализа кратных волн посвящена численному моделированию распространения ультразвуковых волн, генерирующихся при воздействии лазерного излучения на твердое тело (так называемый лазерный ультразвук). При этом считается, что параметры излучения таковы, что поглощенное лазерное излучение не ведет к прогреву материала. Хотя амплитуда таких ультразвуковых (упругих) волн, как правило, невелика и можно ограничиться линейным приближением, динамическая задача остается достаточно сложной — в уравнениях для распространения волн в твердом теле присутствуют компоненты симметрического тензора напряжений (всего их 6). Как следствие, в системе уравнений гиперболического типа появляется несколько типов волн. При их отражении от свободных границ энергия волн одного типа может переходить в энергию волн другого типа. Предлагаемая работа посвящена исследованию многомерной динамической задачи по распространению нескольких типов волн в алюминиевом образце. Приводится подробная постановка задачи. Имеются ссылки на статьи, где подробно описана используемая модификация сеточно-характеристического метода. Приведено подробное описание полученных автором численных результатов.

Статья Алешина И. М. и Малыгина И. В. об интерпретации результатов радиоволнового просвечивания методами машинного обучения посвящена построению трехмерной модели распределения электрических свойств межскважинного пространства с использованием результатов натуральных измерений при помощи методов машинного обучения. В экспериментах используется метод радиоволнового просвечивания, преимущества которого хорошо видны, если исследуемые объекты обладают большой разницей электрических свойств. Идея заключается в использовании зависимости амплитуды электромагнитных волн от проводящих свойств исследуемой геологической среды. При этом источником и приемником волн является, как обычно, диполь, причем располагаются они в соседних скважинах. Измерение уменьшения амплитуды электромагнитной волны позволяет приближенно вычислить коэффициент поглощения среды, причем геосреде с более низким сопротивлением соответствует более высокое поглощение (распределение коэффициента поглощения по пространству пропорционально распределению электропроводности среды). Авторы предлагают использовать идею машинного обучения (нейтронную сеть) для анализа экспериментальных данных (обучение сети). Приводится процедура построения 3D-распределения коэффициента затухания при помощи метрического классификатора.

Статья Ключева П. Н. и Рамазанова Р. Р. о механизмах диссоциации пары цитозинов, опосредованных ионами серебра, посвящена актуальным вопросам формирования межнуклеотидного спаривания, опосредованного координационными взаимодействиями с ионами переходных металлов. В работе используются комбинированные методы молекулярной механики и квантовой химии (КМ/ММ). Авторам удалось показать процесс мягкой диссоциации неканонической Су<sub>т</sub>–Су<sub>т</sub>-пары через ион серебра. Выделены промежуточные конфигурации. Два типа спаривания сравнены между собой и получены некоторые количественные характеристики.

В статье Аминуддина М. и Ананда М. «Анализ гемодинамики в идеализированном соединении брюшной аорты и почечной артерии средствами вычислительной гидродинамики: предварительное исследование для определения местонахождения атеросклеротической бляшки» делается попытка определить локализацию атеросклеротической бляшки в брюшной аорте че-

ловека в окрестности соединения с почечной артерией, используя средства вычислительной гидродинамики. Вычисленные гемодинамические показатели представляют собой среднее значение напряжения сдвига на стенке сосуда (AWSS), колебательный сдвиговый индекс (OSI) и относительное время задержки (RRT). Моделирование пульсирующего течения показывает, что малое значение AWSS и высокий индекс OSI возникают в областях почечной артерии вниз по течению от соединения и в инфраренальном отделе брюшной аорты вблизи соединения. Высокий RRT, который является относительным индексом и зависит как от AWSS, так и OSI, как показано в данной работе, сочетается с низким AWSS и высоким OSI в краниальной части поверхности почечной артерии, проксимальной около соединения и на латеральной поверхности вблизи бифуркации брюшной аорты: это указывает на то, что данные области наиболее всего подвержены атеросклерозу. Результаты качественно соответствуют литературным данным. Они могут служить начальным этапом исследований и иллюстрировать пользу средств вычислительной гидродинамики для определения местоположения атеросклеротической бляшки.

Статья Ильина О. В. о моделировании одномерных нелинейных пульсовых волн в эластичных сосудах на основе решеточных уравнений Больцмана посвящена приложению методов кинетической теории к задачам гемодинамики. Вопросы моделирования пульсирующих течений в эластичных трубках, в том числе применительно к течениям в сети кровеносных сосудов, весьма активно обсуждаются в современной научной литературе как в России, так и за рубежом. Предложенное автором использование решеточных уравнений Больцмана для описания таких процессов является новым и, по всей видимости, перспективным направлением. В работе показано, что метод может описывать как изменение формы пульсовой волны при распространении по сосуду, так и сложную картину множественных отражений пульсовых волн в бифуркации и на закрытых концах сосудов.

В статье Минкевича И. Г. об оценке максимальных значений выхода биомассы, основанной на материально-энергетическом балансе метаболизма клеток, рассматривается обобщенный вариант переднего метаболизма, когда учтены возможное наличие внеклеточных продуктов метаболизма и возможность как аэробного, так и анаэробного роста. В работе выведено уравнение, выражающее максимальный выход биомассы через удельные количества макроэргических связей, образованных и потребленных парциальными обменами. Оно содержит удельное потребление макроэргических связей стандартным конструктивным обменом, которое является универсальным биохимическим параметром, применимым к широкому диапазону организмов и субстратов роста. В результате численного исследования влияния вариаций соотношений между потоками через различные узловые метаболиты было показано, что потребности стандартного конструктивного обмена в макроэргических связях практически являются константами.

В статье Неверовой Г. П., Ждановой О. Л., Колбиной Е. А. и Абакумова А. И. о влиянии зоопланктона на динамику фитопланктона предложена и подробно исследована модель планктонного сообщества, являющаяся системой рекуррентных уравнений, т. е. моделью с дискретным временем. Предлагаемая суточная дискретизация модели представляется уместной и оправданной. Применение такого подхода именно к планктонному сообществу оригинально и представляется весьма перспективным. Оригинальными являются также разделение зоопланктона на зрелые и незрелые группы и учет трофических взаимоотношений между этими группами. В работе проанализированы сценарии перехода от стационарной динамики к колебаниям численности фито- и зоопланктона при различных значениях внутривидовых параметров, определяющих характер динамики каждого из составляющих сообщество видов, и параметров их взаимодействия.

Мы надеемся, что данный материал позволит нашим читателям лучше ориентироваться в этом номере журнала и привлечет более пристальное внимание к какой-либо из опубликованных статей.

*С уважением от имени редакции,  
Н. Митин*