

стью. Кроме того, обработка кадров изображений может вестись в произвольном порядке, например, в порядке развертки изображений, что позволяет разрешить противоречие между скоростью поступления информации и быстродействием вычислительных средств.

Под псевдоградиентным оцениванием вектора \mathbf{a} неизвестных параметров изображений будем понимать использование для получения оценки $\hat{\mathbf{a}}$ рекуррентной процедуры вида [1]

$$\hat{\mathbf{a}}_{t+1} = \hat{\mathbf{a}}_t - \Lambda_{t+1} \beta_{t+1} (Q(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{a}}_t)),$$

где $\beta_{t+1}(Q(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{a}}_t))$ - псевдоградиент целевой функции $Q(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{a}}_t)$ оценивания -случайное направление в пространстве параметров, зависящее от $\hat{\mathbf{a}}_t$, номера итерации t и составляющее в среднем острый угол с градиентом $Q(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{a}}_t)$; \mathbf{x} -совокупность наблюдаемых изображений, по которым требуется оценить \mathbf{a} ; Λ_t - положительно определенная матрица, определяющая закон приращения параметров.

Асимптотические вероятностные свойства оценок, сформированных псевдоградиентными процедурами, хорошо изучены. Проблема же анализа вероятностных свойств оценок $\hat{\mathbf{a}}_t$ при конечном числе итераций исследована недостаточно. Объясняется это тем, что такой анализ осложнен влиянием большого числа факторов: характер плотностей распределения вероятностей и ковариационных функций изображений и мешающих шумов, вид целевой функции $Q(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{a}}_t)$, псевдоградиента β_t и матрицы Λ_t , начальное приближение $\hat{\mathbf{a}}_0$ вектора \mathbf{a} .

При решении поставленной задачи в качестве величин, комплексно характеризующих влияние указанных выше факторов, использованы вероятности улучшения оценок параметров при переходе вектора $\hat{\mathbf{a}}_t$ из t -го состояния в $(t+1)$ -е состояние (вероятности сноса ρ) [2]. Использование вероятностей ρ позволило получить выражения для плотностей распределения вероятностей $\hat{\mathbf{a}}_t$. Показано, в частности, что для этого удастся использовать свойство нормализуемости компонент псевдоградиента.

При псевдоградиентном оценивании элементы матрицы вероятностей марковских переходов оценок из состояния $\hat{\mathbf{a}}_t$ в состояние $\hat{\mathbf{a}}_k$ легко выражаются через вероятности сноса ρ . Однако при большой размерности вектора \mathbf{a} размер матриц обуславливает очень высокие требования к вычислительным ресурсам. При этом, основными факторами, определяющими вычислительные затраты, является число возможных состояний оценки каждого параметра и размерность вектора \mathbf{a} .

Для уменьшения объема вычислений сделан переход от непрерывной области определения параметров к дискретной. Это позволяет априорно выбрать размеры матрицы одношаговых переходов, обеспечи-

вающие реализуемость вычислений при заданном классе вычислительных средств. Для исключения влияния размерности вектора \mathbf{a} предложена модифицированная матрица одношаговых переходов, размер которой не зависит от размерности \mathbf{a} . Это свойство достигнуто ценой потери информации о вероятности нахождения оценки $\hat{\mathbf{a}}$ в каждой из подобластей дискретизированной области определения параметров.

На основе предложенной методики вероятностного моделирования псевдоградиентного оценивания параметров изображений разработана библиотека прикладных программ, предназначенная для анализа вероятностных характеристик оценок параметров межкадровых пространственных деформаций изображений и оптимизации процедур измерения.

Таким образом, использование вероятностного математического моделирования позволяет решить задачу оценивания вероятностных свойств погрешностей псевдоградиентного измерения параметров изображений при конечном числе итераций.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Tashlinskii A.G. Pseudogradient estimation of image sequence spatial deformations / Automation, Control and Information Technology //A Publication of The International Association of Science and Technology for Development – IASTED. – Anaheim-Calgary-Zurich: ACTA Press, 2002. – Pp. 382-385.
2. Tashlinskii Alexandr. Computational Expenditure Reduction in Pseudo-Gradient Image Parameter Estimation / Computational Science – ICCS 2003. Vol. 2658. Proceeding, Part II. - Berlin: Springer, 2003. – Pp. 456-462.

ИЗУЧЕНИЕ ПОВЕРХНОСТИ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ 2-МЕТИЛ-1,3-ДИОКСАНА МЕТОДОМ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Курамшина А.Е., Бочкор С.А., Кузнецов В.В.

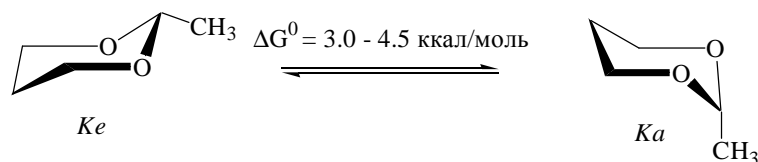
Уфимский государственный
нефтяной технический университет,
Уфа

Интерес к 1,3-диоксанам, связанный с особенностями строения [1], делает актуальным изучение поверхности потенциальной энергии (ППЭ) молекул этих веществ методами компьютерного моделирования [2-7]. Настоящая работа посвящена исследованию характера конформационных превращений 2-метил-1,3-диоксана методом Хартри-Фока с помощью полуэмпирических (AM1 и PM3), а также неэмпирических (STO-3G и 6-31G**) квантово-химических приближений в рамках программного обеспечения HyperChem [8] в условиях, моделирующих поведение молекул этого вещества в газовой фазе.

Известно, что главному минимуму на ППЭ 1,3-диоксанов отвечает конформер *кресла* с преимущественно экваториальной ориентацией алкильного заместителя (*Ke*). Данные спектроскопии ЯМР ^1H однозначно указывают на пребывание молекул 2-метил-

1,3-диоксана при комнатной температуре в преимущественной конформации *Ke* с достаточно большой

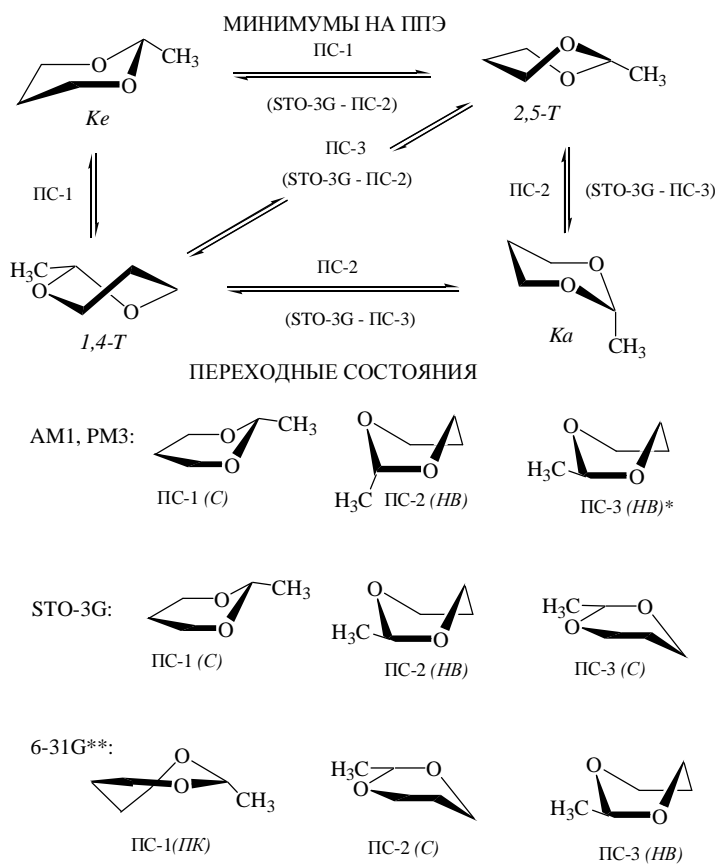
свободной энергией конформационного перехода $Ke \leftrightarrow Ka$ [9].



Нами выявлена общая картина конформационных превращений, а также характер промежуточных минимумов и переходных состояний исследуемого соединения (табл.1).

Таблица 1. Энергетические параметры инверсии $Ke \leftrightarrow Ka$ 2-метил-1,3-диоксана (ккал/моль)

Методы	Минимумы, ΔE				Максимумы, ΔE^\ddagger		
	<i>Ke</i>	<i>Ka</i>	<i>1,4-T</i>	<i>2,5-T</i>	ПС-1	ПС-2	ПС-3
AM1	0.3	0	2.6	2.5	3.8	2.7	2.8
PM3	1.6	0	-	3.4	3.4	5.0	-
STO-3G	0	3.7	4.7	4.7	8.6	5.0	12.5
6-31G**	0	4.8	5.5	5.2	9.3	10.6	5.8



* Для PM3 не реализуется.

Полученные данные свидетельствуют о двух маршрутах конформационной изомеризации $Ke \leftrightarrow Ka$, аналогичных наблюдаемым для незамещенного 1,3-диоксана [4] (в PM3 реализуется только направление, включающее форму *2,5-T*). Формы *1,4-T* и *2,5-T* превращаются друг в друга через максимум ПС-3 (в STO-3G – ПС-2). Основному максимуму на ППЭ отвечают формы *софы* (ПС-1 в приближении AM1 и PM3, а также ПС-2 в приближении 6-31G** и ПС-3 в приближении STO-3G). Однако согласно данным расчета оба маршрута практически равновероятны. Результаты 6-31G** относительно неплохо воспроизводят

экспериментальное различие в энергии между конформерами *Ke* и *Ka* (ΔG^0 составляет 4.07 ± 0.46 ккал/моль в пользу *Ke* [9]).

В то же время экспериментальная величина ΔG^\ddagger процесса конформационной изомеризации этого соединения неизвестна; значение ΔE^\ddagger (10.6 ккал/моль, ПС-2 в 6-31G**) близко к экспериментальному барьеру инверсии в незамещенном 1,3-диоксана (9.0-10.1 ккал/моль [9]). Следует также отметить несоответствие глобального минимума, рассчитанного в приближениях AM1 и PM3 (форма *Ka*), данным эксперимен-

та, по всей видимости, из-за несовершенства параметризации этих методов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Рахманкулов Д.Л., Караханов Р.А., Злотский С.С., Кантор Е.А., Имашев У.Б., Сыркин А.М. Итоги науки и техники. Технология органических веществ. Т.5. Химия и технология 1,3-диоксациклоалканов / Д.Л. //М.: ВИНТИ, 1979. - 288 с.
2. Курамшина А.Е., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. //Третья Всероссийская научная internet-конференция. Тамбов, 2001. Вып.14. – С.9.
3. Курамшина А.Е., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. //Четвертая Всероссийская научная internet-конференция. Тамбов, 2002. Вып.18. – С.54.
4. Курамшина А.Е., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. //Баш. хим. журн. – 2004. – Т.11, № 1. – С.81.
5. Мазитова Е.Г., Курамшина А.Е., Кузнецов В.В. //Журн. орг. химии. – Т.40, вып. 4. – С.615.
6. Шаимова А.Х., Курамшина А.Е., Кузнецов В.В. //Материалы 54-й научно-технической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. Уфа. УГНТУ, 2003. Ч.1. – С.169.
7. Сарварова Г.С., Курамшина А.Е., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. //Интеграция науки и высшего образования в области органической и биоорганической химии и механики многофазных систем. Материалы II Всероссийской научной internet-конференции. Уфа. Реактив, 2003. – С.135.
8. HyperChem 5.02. Trial version. www.hyper.com.
9. Внутреннее вращение молекул / под ред. В.Дж. Орвилл-Томаса. М.: Мир, 1975. – С.355.

АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ПАРАМЕТРОВ ФУНКЦИИ ВЕЙЕРШТРАССА-МАНДЕЛЬБРОТА НА ЕЕ ЗАКОН РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Седельников А.В., Корунтяева С.С., Чернышева С.В.
Институт энергетики и транспорта Самарского государственного аэрокосмического университета
им. академика С.П. Королева

Введение. Проблема микроускорений вот уже на протяжении нескольких десятилетий является одной из важнейших проблем космического материаловедения [1]. Ее успешное решение позволит шагнуть современным технологиям на революционно новый уровень. На современном этапе развития проблемы ключевую роль играет математическое моделирование микроускорений [2]. В представляемой работе микроускорения на борту орбитального космического аппарата (КА) моделируются с помощью действительной части фрактальной функции Вейерштрасса-Мандельброта (далее – ФВМ). При таком подходе возникает потребность корректной замены одной случайной величины на другую [3, 4]. В отсутствие или при наличии слабого демпфирования микроускорения можно считать случайной величиной [5].

Исследования показывают, что ФВМ также подходит под понятие случайной величины в пределах изменения своих параметров:

$$0 < b < 1; \quad 1,95 < D < 2 \quad (1)$$

Причем, в этой ситуации решающую роль играет фрактальная размерность D : при ее значениях меньших, чем 1,95, ФВМ существенно возрастает и уже не может считаться случайной величиной. Поэтому, не останавливаясь на всех тонкостях данного вопроса, далее будет считаться, что неравенства (1) есть наиболее благоприятный коридор для моделирования микроускорений с помощью ФВМ.

Для корректного моделирования требуется удовлетворить условию тождественности законов распределения микроускорений и ФВМ. Вообще говоря, сама функция Вейерштрасса-Мандельброта [6]:

$$W(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{(1 - e^{ib^n t}) e^{ij^n}}{b^{(2-D)n}} \quad (2)$$

может иметь любой закон распределения благодаря фазе j^n . Строго говоря, эта фаза сама по себе является случайной величиной, что придает функции в форме (2) совершенно непредсказуемый характер и лишает возможности проводить какое-либо осмысленное моделирование микроускорений. Видимо, она представляет собой больше мультифрактал, чем классический фрактал, который описывается только одной фрактальной размерностью. В работе [7] показано, что размерность Хаусдорфа-Безыковича функции (2) не совпадает с фрактальной размерностью D . Именно в этом смысле она ближе к мультифракталу, чем к фракталу. Однако эти серьезные вопросы требуют особого внимания и в данной работе рассмотрены не будут. При моделировании микроускорений с помощью ФВМ полагалось, что фаза всегда равна нулю:

$$j_n = 0 \quad (3)$$

Условие (3) исключает лишнюю случайность из модели микроускорений, но ставит вопрос об исследовании закона распределения ФВМ, который уже не может быть произвольным, как у функции (2).

Постановка задачи. В данной работе рассматривается закон распределения ФВМ при выполнении условия (3) при различных значениях параметров b и D . Необходимо выяснить, изменяется ли закон распределения ФВМ в принятых допущениях при варьировании этими параметрами в коридоре (1) или нет. В зависимости от ответа на поставленный вопрос следует либо строить схему выбора параметров ФВМ для удовлетворения условия тождественности законов распределения (если закон изменяется), либо изменить условие (3) таким образом, чтобы тождественность была выполнена (если закон неизменный).

Следовательно, поставленная задача является актуальной для моделирования микроускорений с помощью ФВМ.

Основные результаты работы. Для решения поставленной задачи целесообразно выдвинуть статистическую гипотезу о нормальном законе распределения ФВМ и проверить ее для разных параметров функции с помощью критерия согласия χ^2 - Пирсона, воспользовавшись хорошо известным интервальным методом анализа непрерывной случайной величины. Если окажется, что нормальный закон распределения,