

Задавая  $\lambda$  и  $n$ , неизвестные параметры  $a$  и  $\sigma^2$  могут быть получены путем максимизации функции правдоподобия  $l_\lambda(a, \sigma^2)$ .

Однако остается проблема – критерий, на основании которого необходимо выбирать сглаживающий параметр  $\lambda$  и число базисных функций  $n$ . Поскольку в функцию правдоподобия добавлено штрафное слагаемое, применение информационного критерия Акаике (Akaike Information Criteria – AIC) является теоретически необоснованным [2]. Вместо него применяется обобщенный информационный критерий (Generalized Information Criteria – GIC) [3].

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Chiu N.-C., Fang S.-C., Lavery J.E., Lin J.-Y., Wang Y. Approximating Term Structure of Interest

Rates Using Cubic  $L_1$  Splines // European Journal of Operational Research. 2008. Vol. 184. P. 990-1004.

2. Kawasaki Y., Ando T. Estimating Term Structure Using Nonlinear Splines: a Penalized Likelihood Approach // International Congress on Modeling and Simulation, section: Econometric modelling and financial econometrics. December 2005. Melbourne University, Vic P. 864-870.

3. Konishi S., Kitagawa G. Information Criteria and Statistical Modeling. Springer, 2008.

4. McCulloch J.H. Measuring the Term Structure of Interest Rates // The Journal of Business. 1971. Vol. 44. No. 1. P. 19-31.

5. Ramponi A. Adaptive and Monotone Spline Estimation of Cross-Sectional Term Structure // International Journal of Theoretical and Applied Finance. 2003. Vol. 6. No 2. P.195-212.

### Новые информационные технологии и системы

#### ОБ ОДНОЙ ИЗ ВОЗМОЖНЫХ ПРИЧИН ЭФФЕКТА ГРАНИ ПРИ НАПРАВЛЕННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ РАСПЛАВОВ В КОСМОСЕ

Бабичева Д.С., Арестова М.А., Казарина М.И., Серпухова А.А., Кожевникова Е.В.

*Самарский государственный аэрокосмический университет им. С.П. Королёва, Самара, Россия*

**Введение.** В работе рассматривается выявленный авторами работы [1] эффект грани в экспериментах с направленной кристаллизацией. Процесс кристаллизации является длительным и по захвату примеси в различных сечениях образовавшегося кристалла можно судить об уровне микроускорений, используя приближённые методики оценки, например [2-5]. Считается, что чем выше уровень микроускорений, тем интенсивнее должны быть движения конвективного типа в расплаве, а, следовательно, и захват примеси при кристаллизации [6-8]. Однако в ряде случаев было выявлено отклонение от этой логики [1]. Этот феномен и был назван эффектом грани.

**Постановка задачи.** Требуется найти возможное объяснение поведения примесного канала при направленной кристаллизации в рамках физической модели микроускорений [9-12].

**Основные результаты работы.** На основе проведенного анализа, учитывая, что квазистатическая компонента микроускорений соответствует понятию случайной величины [13], можно утверждать, что на захват примеси влиял не только сам модуль микроускорений, но и динамика его изменения во времени. Именно быстрые динамические изменения поля микроускорений во времени в зоне проведения направленной кристаллизации и

привели к появлению эффекта грани. Поэтому условия для благоприятного протекания технологических экспериментов не должны сводиться лишь к ограничениям модуля микроускорений. Данная серия экспериментов наглядно демонстрирует всю сложность влияния поля микроускорений на гравитационно-чувствительные технологические процессы.

Работа выполнена силами студенческой творческой лаборатории «Позитрон» при студенческом научном обществе института энергетики и транспорта СГАУ.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Земсков В.С., Раухман М.Р., Шалимов В.П. Гравитационная чувствительность расплавов при выращивании кристаллов InSb:Te методами Бриджмена и бестигельной зонной плавки в условиях микрогравитации // Космические исследования. – том. 39. - №4. – 2001. – с. 375 – 383.

2. Авраменко А.А., Седельников А.В. Моделирование поля остаточной микрогравитации на борту орбитального КА // Изв. вузов. Авиационная техника. – 1996. – № 4. – С. 22-25.

3. Седельников А.В. Фрактальная оценка микроускорений для слабого демпфирования собственных колебаний упругих элементов космического аппарата. I // Изв. вузов. Авиационная техника. – 2006. – № 3. – С.73-75.

4. Седельников А.В. Фрактальная оценка микроускорений для слабого демпфирования собственных колебаний упругих элементов космического аппарата. II // Изв. вузов. Авиационная техника. – 2007. – № 3. – С. 62-64.

5. Sedelnikov A.V. Modelling of microaccelerations with using of Weierstass-Mandelbrot function // Actual problems of aviation and aerospace systems. – 2008. - № 1(26). – P. 107-110.

6. Седельников А.В. Проблема микроускорений: 30 лет поиска решения // Современные наукоемкие технологии. – 2005. – № 4. – С. 15-22.

7. Седельников А.В., Корунтеева С.С., Подлеснова Д.П. Фрактальная модель микроускорений: оценка и эксперименты на космической станции «Скайлаб» // Труды 8-й Международной конференции "Актуальные проблемы современной науки". Естественные науки. Часть 3. Механика Машиностроение. – 2007. – С. 105-108.

8. Седельников А.В., Подлеснова Д.П. Космический аппарат «Спот-4» как пример успешной борьбы с квазистатической компонентой микроускорений // Известия высших учебных заведений. Северокавказский регион. – 2007. – № 4 (140). – С. 44-46.

9. Казарина М.И., Седельников А.В., Серпухова А.А. Исследование адекватности физической модели микроускорений // Тезисы докладов второй Всероссийской конференции учёных, молодых специалистов и студентов «Информационные технологии в авиационной и космической технике – 2009». – М.:Изд-во МАИ-ПРИНТ. – 2009. – С. 92.

10. Седельников А.В., Бязина А.В., Иванова С.А. Статистические исследования микроускорений при наличии слабого демпфирования колебаний упругих элементов КА // Научные чтения в Самарском филиале РАО. – Часть 1. Естественные науки. – М.: Изд. УРАО. – 2003. – С. 137-158.

11. Седельников А.В. К вопросу выбора обобщённого параметра упругих конструкций космического аппарата для построения фрактальной модели микроускорений // Изв. вузов. Авиационная техника. – 2008. – № 1. – С. 63-65.

12. Sedelnikov A.V., Koruntjeva S.S. Fractal model of microaccelerations: research of qualitative connection // European journal of natural history. – 2007. – №5. – P. 73-75.

13. Седельников А.В. Статистические исследования микроускорений как случайной величины // Фундаментальные исследования. – 2004. – № 6. – С. 123-124.

## КОНФОРМАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА 2,5-ДИМЕТИЛ-1,3,2-ДИОКСАБОРИНАНА В ВОДНОМ КЛАСТЕРЕ

Валиахметова О.Ю.<sup>1</sup>, Кузнецов В.В.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Уфимский государственный нефтяной  
технический университет,

<sup>2</sup>Институт физики молекул и кристаллов  
Уфимского научного центра РАН,  
Уфа, Россия

Известно, что циклические эфиры борных кислот способны к формированию молекулярных комплексов как с донорами, так и с акцепторами электронной пары и, таким образом, являются удобными объектами в компьютерном моделировании механизмов взаимодействия субстрата с растворителями различной природы [1-5]. Ранее [6] было показано, что главным минимумом на поверхности потенциальной энергии (ППЭ) 2,5-диметил-1,3,2-диоксаборинана (**I**) является конформер экваториальной *софы* (*Se*), локальный минимум соответствует форме аксиальной *софы* (*Sa*), а переходное состояние – конформации 2,5-*твист* (2,5-*T*).

Настоящая работа посвящена исследованию конформационной изомеризации молекул эфира **I** в кластере из 39 молекул воды с помощью полумпирического приближения РМЗ в рамках программного обеспечения HyperChem [7].

Исследуемый кластер был сформирован последовательным добавлением молекул воды к эфиру-**I** таким образом, чтобы возникла водородная связь вода-боринан либо вода-вода; при этом одна из молекул воды образует координационную связь O→B. После прибавления очередной молекулы воды проводилась минимизация энергии полученной системы. Общий вид кластера для основного минимума (конформер *Se*) показан на схеме. Пунктирными линиями обозначены водородные связи.

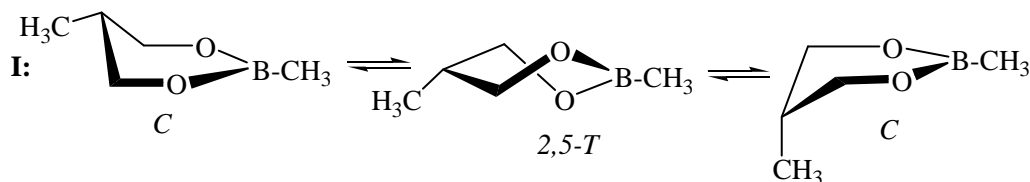


Рис. 1.

**I** • 39 H<sub>2</sub>O

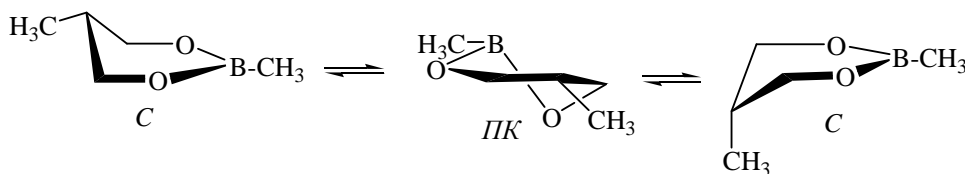


Рис. 2.