

Таблица 2

Время расчета коррелированной системы N-частиц, технология CUDA

Кол-во частиц	10240	50176	250880	401408
Время расчета (в секундах)	0,02	0,14	3,53	9,1

Таким образом, внедрение разработанных методов высокопроизводительных вычислений в программный комплекс ИИС «MD-SLAG-MELT» предоставит широкому кругу исследователей возможность удаленного доступа к проведению компьютерного эксперимента и физико-химическим результатам, обладающим прогнозными возможностями. Полученные результаты могут быть использованы в таких областях как физическая химия, теория металлургических процессов, черная и цветная металлургия, компьютерное материаловедение.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, проект № 14.132.21.1792.

Список литературы

1. Воронова Л.И., Трунов А.С. Оптимизация параллельного алгоритма подсистемы распределенного молекулярно-динамического моделирования // Межотраслевая информационная служба, № 3, 2011, с.1-12.
2. Воронова Л.И., Григорьева М.А., Воронов В.И. Разработка методов компьютерного моделирования наноструктуры многокомпонентных расплавов // Фундаментальные исследования, № 8-3, 2011, с. 617-622.
3. Воронова Л.И., Григорьева М.А. Разработка информационной модели физико-химических свойств расплава для исследовательского программного комплекса MD-SLAGMELT // Межотраслевая информационная служба, № 2, 2011, с.30-36.
4. Воронова Л.И., Григорьева М.А., Воронов В.И., Трунов А.С. Программный комплекс «MD-SLAG-MELT» для моделирования наноструктуры и свойств многокомпонентных расплавов // Расплавы, № 2, 2013, с.1-16.
5. Баканов В.М., Осипов Д.В. Введение в практику разработки параллельных программ в стандарте MPI. – М.: Московская государственная академия приборостроения и информатики, 2005. – 65 с.

**«Высшее профессиональное образование.
Современные аспекты международного сотрудничества»,
Испания (Майорка), 16-23 августа 2013 г.**

Физико-математические науки

О ХАРАКТЕРЕ КОЛЕБАНИЙ МОЛЕКУЛ В ЖИДКОСТЯХ

Павлов А.М.

*РГП на ПХВ «Восточно-Казахстанский
государственный университет им. С. Аманжолова»,
Усть-Каменогорск, e-mail: amravlov@mail.ru*

В жидкостях наблюдается ближний порядок. Следовательно, молекулы или атомы совершают в основном колебательное движение около положения равновесия, которое время от времени меняется. Чтобы определить период и частоту колебаний необходимо найти потенциальную энергию молекулы, обусловленную её взаимодействием с ближайшими соседями. Для определения этой энергии воспользуемся моделью, аналогичной модели самосогласованного поля в атомной физике. Эта идея принадлежит Леннард-Джонсу и Девоншайру, и развита Я.И. Френкелем [2].

Суть этой идеи заключается в том, что задача о движении N взаимодействующих частиц заменяется задачей о движении каждой из них в поле, создаваемом остальными N-1 частицами. Поле, создаваемое этими N-1 частицами можно считать сферически симметричным, а сами частицы закрепленными в своих положениях равновесия, т.е. в узлах кристаллической решетки.

Получается, что каждый атом жидкости (или молекула) находится в сферической ячейке радиуса a, близкого к среднему расстоянию между соседними частицами в решетке с координационным числом v и определяемого из условия, чтобы объём, приходящийся на одну частицу V/N , совпадал с тем, который соответствует кристаллическому состоянию.

Если считать атомы твёрдыми шариками с диаметром a, то при их плотной упаковке в гранцентрированной кубической решётке с числом $n=12$ ребро ячейки равно $a\sqrt{2}$ и содержит 4 атома. Тогда объём, приходящийся на один атом

$$v = \frac{V}{N} = \frac{(a\sqrt{2})^3}{4} = \frac{a^3}{\sqrt{2}}.$$

В то время как объём сферической ячейки радиуса a равен $\frac{4\pi a^3}{3}$, что несколько больше v. Тем не менее, будем считать объём ячейки равным $v = \frac{a^3}{\sqrt{2}}$.

Пусть молекула A зафиксирована в своём положении равновесия, а молекула B может занимать любое положение на сфере радиуса $r < a$, центром которой является точка O – положение равновесия молекулы B. Расстояние от A до O равно равновесному расстоянию между

молекулами – a . Будем считать все молекулы неподвижными, кроме B , которая перемещается по указанной сфере. Точнее может занимать любое положение на этой сфере при колебаниях относительно точки O в усредненном поле сил остальных молекул. Таким образом, задача свелась к нахождению энергии молекулы B в этом усредненном поле, когда она отклонится от положения равновесия на расстоянии r .

Для определения указанной энергии воспользуемся потенциалом Леннарда-Джонса в виде:

$$W(r) = \frac{\epsilon v}{2r} \left\{ \frac{r_m^{12}}{10a^{11}} \left[\left(1 - \frac{r}{a}\right)^{-10} - \left(1 + \frac{r}{a}\right)^{-10} \right] - \frac{r_m^6}{2a^5} \left[\left(1 - \frac{r}{a}\right)^{-4} - \left(1 + \frac{r}{a}\right)^{-4} \right] \right\}, \quad (2)$$

где n – число соседей у молекулы B . Разлагая выражения в круглых скобках в ряд по степеням r/a и ограничиваясь слагаемыми, содержащими r^5/a^5 , будем иметь:

$$W(r) = \epsilon v \left(\frac{r_m^{12}}{a^{12}} - 2 \frac{r_m^6}{a^6} \right) + 2\epsilon v \left[\frac{r_m^{12}}{a^{12}} (11y + 100y^2) - \frac{r_m^6}{a^6} (5y + 14y^2) \right], \quad (3)$$

где $y = \frac{r^2}{a^2}$. При $r=0$ получается энергия в состоянии равновесия, т.е. формула (1) при $r=a$:

$$U = \epsilon \left[\frac{r_m^{12}}{r^{12}} - 2 \frac{r_m^6}{r^6} \right], \quad (1)$$

где r_m – равновесное расстояние в этом потенциале, которое связано с диаметром молекулы соотношением: $r_m = \sqrt[6]{2}\sigma$ или $r_m^3 = \sqrt{2}\sigma^3$.

Расстояние r_B можно выразить через a и r :

$$r_A = \sqrt{r^2 + a^2 - 2ra \cos \theta}.$$

После подстановки r_B в (1) и интегрирования по θ от 0 до π , получаем:

$$W(0) = \epsilon v \left(\frac{r_m^{12}}{a^{12}} - 2 \frac{r_m^6}{a^6} \right). \quad (4)$$

Тогда оставшаяся часть из (3) будет являться потенциальной энергией колебательного движения частицы B :

$$W(r) - W(0) = 2\epsilon v \left[\left(11 \frac{r_m^{12}}{a^{12}} - 5 \frac{r_m^6}{a^6} \right) y + \left(\frac{100r_m^{12}}{a^{12}} - \frac{14r_m^6}{a^6} \right) y^2 \right]. \quad (5)$$

Отношение r_m/a стоящее в круглых скобках можно заменить отношением собственного объёма атома или молекулы к объёму, приходящемуся на одну частицу. Из сказанного ранее следует, что собственный объём частицы равен

а объём, приходящийся на одну частицу $V_1 = \frac{V}{N} \approx \frac{a^3}{\sqrt{2}}$.

Отсюда

$$V^* = \frac{4\pi\sigma^3}{3} \approx \frac{r_m^3}{\sqrt{2}}, \quad \frac{r_m^3}{a^3} = \frac{V^*}{V_1}. \quad (6)$$

Поставляя это в (5), получим:

$$W(r) - W(0) = 2\epsilon v \left\{ \left[11 \left(\frac{V^*}{V_1} \right)^4 - 5 \left(\frac{V^*}{V_1} \right)^2 \right] \frac{r^2}{a^2} + \left[100 \left(\frac{V^*}{V_1} \right)^4 - 14 \left(\frac{V^*}{V_1} \right)^2 \right] \frac{r^4}{a^4} \right\}. \quad (7)$$

Как известно, вторая производная от потенциальной энергии по координате определяет коэффициент жёсткости молекулярных квазиупругих C . В нашем случае

$$C = \frac{4\epsilon v}{a^2} \left[11 \left(\frac{V^*}{V_1} \right)^4 - 5 \left(\frac{V^*}{V_1} \right)^2 \right]. \quad (8)$$

Чтобы C было положительным и не равнялось нулю, необходимо выполнение неравенства: $r_m > 0,8768a$ или $\frac{V^*}{V_1} > 0,674$. Обратное отношение $\frac{V^*}{V_1} < 1,484$. Это отношение меньше,

чем отношение этих величин в критическом состоянии, равное $\frac{V_{кр}}{V^*} = 2,1$.

Следовательно, при температурах гораздо ниже критических молекулы перестают колебаться, а совершают поступательное движение, как в газах. Эта температура, конечно, зависит от давления. Так у молекул аргона температура указанного перехода при давлении 5 бар равна 98К, а при 25 барах – 100К [1]. Получается, что при этих температурах в жидкостях происходит что-то вроде фазового перехода второго рода. Вроде ничего не меняется, кроме характера теплового движения. Однако характер теплового движения определяют окружающие молекулы.

Следовательно, должно меняться число соседей и равновесное расстояние между молекулами, т.е. микроструктура жидкости. Теряется квазикристаллическое строение и жидкость становится аморфной. Если пренебречь нелинейным слагаемым в силе взаимодействия, т.е. второй квадратной скобкой в (7), то частота колебаний будет определяться выражением:

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{C}{m}} = \sqrt{\frac{4\varepsilon v}{a^2 m} \left(\frac{11r_m^{12}}{a^{12}} - \frac{5r_m^6}{a^6} \right)}. \quad (9)$$

Как видно из (9) эта частота не зависит явно от T , а зависит от числа соседей v и отношения $\frac{V^*}{V_1}$. Однако и число соседей v и указанное отношение являются функциями температуры. Следовательно, и ω_0 будет функцией температуры.

Однако если учесть второе слагаемое в (7), то получается и явная зависимость частоты колебаний от температуры. Перепишем (7) в виде

$$W(r) - W(0) = \frac{Cr^2}{2} + \frac{\beta r^4}{a^4}, \quad (10)$$

где C определяется выражением (8), а

$$\beta = 2\varepsilon v \left[100 \left(\frac{V^*}{V_1} \right)^4 - 14 \left(\frac{V^*}{V_1} \right)^2 \right] \frac{r^4}{a^4}. \quad (11)$$

Определим сначала амплитуду колебаний, используя закон сохранения энергии:

$$\frac{mv^2}{2} + \frac{Cr^2}{2} + \frac{\beta r^4}{a^4} = E = \text{const}.$$

При $v=0$ смещение частицы равно амплитуде колебаний. Следовательно

$$\beta x^2 + \frac{Ca^2}{2} x - E = 0,$$

где $x=A^2/a^2$. Решение этого уравнения будет:

$$A^2 = \frac{Ca^4}{4\beta} \left[-1 + \sqrt{1 + \frac{16\beta E}{(Ca^2)^2}} \right]. \quad (12)$$

Как известно, среднее значение энергии молекулярного осциллятора равно kT . Кроме того, отношение $\frac{16\beta E}{(Ca^2)^2} < 1$. Так для аргона $\varepsilon=120$ при $T=85\text{K}$ и числе соседних молекул 6 это отношение равно 0,564. Следовательно, корень можно разложить в ряд и сохранить только первые два слагаемых. При этих условиях получаем

$$A = \sqrt{\frac{2kT}{C} \left[1 - \frac{4\beta E}{(Ca^2)^2} \right]}$$

или при $\beta=0$

$$A = a \sqrt{\frac{kT}{2\varepsilon v \left(\frac{11V^{*4}}{V_1^4} - \frac{5V^{*2}}{V_1^2} \right)}}. \quad (13)$$

Если не считать зависимости v и V_1 от температуры, то $A \sim \sqrt{T}$. На самом деле и v и V_1 являются функциями T , следовательно зависимость $A(T)$ носит более сложный характер. Если считать, что v не зависит от T , а $V_1 \sim T$ (объемное расширение при нагревании), то тогда амплитуда колебаний будет пропорциональна $T^{3/2}$.

Перейдем к определению периода и частоты колебаний. Поскольку не удалось свести интеграл $T = 4 \int_0^A \frac{dr}{v}$ к эллиптическому, будем определять частоту колебаний из дифференциального уравнения движения атома или молекулы:

$$m \ddot{r} + Cr = -\frac{4\beta r^3}{a^4}.$$

Перепишем его в виде

$$\ddot{z} + \omega_0^2 z = -\frac{4\beta A^2}{ma^4} z^3, \quad (14)$$

где $z=r/A$.

Поскольку однородное уравнение имеет решение

$$Z = C \cos \omega_0 t,$$

то решение неоднородного уравнения будем искать в виде

$$Z = x \cos y. \quad (15)$$

К этому условию добавим еще одно

$$\dot{Z} = -\omega_0 x \sin y. \quad (16)$$

С помощью уравнений (14)–(16) получается следующая система уравнений для x и y :

$$\dot{x} \cos y - x \dot{y} \sin y = -\omega_0 x \sin y;$$

$$\omega_0 \dot{x} \sin y + \omega_0 x \dot{y} \cos y = \omega_0^2 x \cos y + \frac{4\beta A^2}{ma^4} x^3 \cos^3 y.$$

Разрешая эту систему уравнений относительно \dot{x} и \dot{y}

$$\dot{y} = \omega_0 + \frac{4\beta A^2}{m\omega_0 a^4} x^2 \cos^4 y. \quad (17)$$

Поскольку отношение амплитуды колебаний к расстоянию между частицами мало, т.е. $A/a \ll 1$, то система уравнений (17) имеет малый параметр. Это позволяет амплитуду x и фазу y искать в виде разложения по степеням этого параметра:

$$x = x_0 + \varepsilon x_1 + \varepsilon^2 x_2 + \dots$$

$$y = y_0 + \varepsilon y_1 + \varepsilon^2 y_2 + \dots$$

где $y = \frac{4\beta A^2}{m\omega_0 a^4}$.

Тогда для x и y получается следующая система уравнений:

$$\dot{x}_0 = 0; \dot{x}_1 = x_0^3 \cos^3 y_0 \sin y_0; \dots$$

$$\dot{y}_0 = \omega_0; \dot{y}_1 = x_0^2 \cos^4 y_0; \dots$$

Учитывая малость ε , можно ограничиться этим приближением. Примем, что в начальный момент частица отклонена на максимальное расстояние, т.е. $x_0 = 1$. Тогда получаем:

$$x = 1 + \frac{\beta A^2}{m a^4 \omega_0^2} (1 - \cos^4 \omega_0 t);$$

$$\dot{y} = \omega_0 + \frac{4\beta A^2}{m a^4 \omega_0} \cos^4 \omega_0 t.$$

Последнее равенство определяет частоту колебаний:

$$\omega = \omega_0 \left(1 + \frac{4\beta A^2}{m a^4 \omega_0^2} \cos^4 \omega_0 t \right). \quad (18)$$

Если сюда подставить значение амплитуды из (12) и усреднить $\cos^4 \omega_0 t$, то получим:

$$\omega = \omega_0 \left[1 + \frac{6\beta E}{(Ca^2)^2} \right]. \quad (19)$$

Среднее значение энергии колебательного движения молекул, как известно, равно kT , следовательно (19) можно переписать в виде

$$\omega = \omega_0 \left[1 + \frac{6\beta kT}{(Ca^2)^2} \right]. \quad (20)$$

Отсюда видно, что средняя частота колебаний увеличивается при увеличении температуры. Итак, из наших расчётов следует:

1. Жидкости, имея вдалеке от точки кипения квазикристаллическую структуру, при определенной температуре, зависящей от давления, теряют её и переходят в аморфное состояние.

2. Внешнее давление способствует сохранению квазикристаллической микроструктуры жидкости, так как при увеличении давления температура перехода увеличивается.

3. Амплитуда и частота колебаний молекул в жидкости зависят от температуры. Амплитуда колебаний пропорциональна $T^{1/2}$, а частота – пропорциональна T .

Список литературы

1. Вассерман А.А., Рабинович В.А. Теплофизические свойства жидкого воздуха и его компонентов. – М.: Изд. комитета стандартов, мер и измерительных приборов при Сов. мин. СССР, 1968. – С. 240.
2. Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей. – Л.: Наука, 1975. – С. 592.

«Диагностика, терапия, профилактика социально значимых заболеваний человека», Турция (Анталья), 16-23 августа 2013 г.

Медицинские науки

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТИПА ВЕГЕТАТИВНОЙ НЕРВНОЙ СИСТЕМЫ У БОЛЬНЫХ С ОСТРЫМ НАРУШЕНИЕМ МОЗГОВОГО КРОВООБРАЩЕНИЯ

Дубинина В.В., Гуринова Л.И., Дорофеев А.Л.,
Галушко Н.А., Федорова Е.А.

ДВГМУ, Хабаровск, e-mail: vickdoctor@yandex.ru

ОНМК одна из наиболее важных проблем в ряду социальнозначимых заболеваний. Так как ежегодно в России, согласно статистическим данным, более 450 тысяч человек переносят инсульт, 20% из них становятся инвалидами. И, как правило, первый инсульт – гром среди ясного неба. Несмотря на широкую пропаганду здорового образа жизни и развития первичной медико – санитарной помощи, среднестатистический житель России не обращает внимание на состояние своего здоровья до тех пор, пока не окажется в стационаре с острым нарушением здоровья. Как известно, в человеческом организме все внутренние органы иннервируются вегетативной нервной системой (ВНС),

в том числе и тонус сосудов. Логично предположить, что все больные с ОНМК должны быть симпатотониками, т.е. теми, у кого преобладает симпатическая ветвь ВНС, для них характерны тахикардия и повышенное АД. Поэтому целью нашей работы явилось изучение тонуса ВНС у больных, находящихся на лечении в неврологическом отделении с диагнозом «ОНМК».

Было обследовано 35 человек, 16 женщин и 19 мужчин, типирование вегетативной нервной системы проведено при помощи таблицы Вейна, расчета индекса Кердо и анализа данных ЭКГ.

В результате исследовательской работы выявлено 25 симпатотоников, что составило 71,4%, остальные 10 человек по данным нашего обследования были отнесены к ваготоникам, 28,6% соответственно. При этом, с явным преобладанием симпатической ветви – 19 человек, а с явным преобладанием парасимпатической – 5. Анализируя полученные результаты по половому признаку, в женской группе выявлено 12 (75%) симпатотоников и 4 (25%) ваготони-