

$$\varphi_j = \begin{cases} p_0 e^{-\frac{b_j(K_j - K_j^0)}{K_j^0}}, & K_j \leq K_j^0 \\ 1 - (1 - p_0) e^{-\frac{b_j(K_j - K_j^0)}{K_j^0}}, & K_j > K_j^0 \end{cases}$$

$a_0, a_1, \dots, a_4, b_0, b_1, \dots, b_4$  – коэффициенты модели, причем  $\sum_{j=0}^4 a_j = 1, b_j > 0, \forall j = \overline{0,4}$ .

Неизвестные параметры модели предполагается определять, исходя из условия минимума суммы квадратов отклонения известных вероятностей для группы предприятий и вероятностей, рассчитанных по модели, т.е. из условия минимума функции:

$$Q = \sum_{i=0}^n (P_i - \varphi(K_0^i, K_1^i, \dots, K_4^i))^2$$

где  $K_i^0$ -нормы для соответствующих показателей.

Для того чтобы показать адекватность построенной модели данная ситуация была смоделирована. При этом для группы из 21 предприятия были эвристически определены надежности, таким образом, чтобы они коррелировали с соответствующими результирующими показателями модели СК и образовывали монотонную последовательность относительно этих значений. На основе полученных данных выведены следующие оценки коэффициентов:

$$b_0 = 0.126, b_1 = 2.33, b_2 = 1.86, b_3 = 3.05, b_4 = 0.54 ;$$

$$a_0 = 0.312, a_1 = 0.452, a_2 = 0.074, a_3 = 0.051, a_4 = 0.011 .$$

Исследование выявило, что модель показала хорошее согласование с имеющимися моделями.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Анализ финансовой отчетности: Учебник. – 2-е изд. / Под общ.ред. М.А.Вахрушиной. – М.:Вузовский учебник: ИНФРА—М, 2011. 431с.
2. Пожидаева Т.А. Анализ финансовой отчетности: учебное пособие / Т.А.Пожидаева. – 3-е изд., стер. – М.: КНОРУС, 2010. 320с.
3. Никифорова Н.А. Анализ в антикризисном управлении // Финансовый менеджмент. — 2004. — №6.
4. Шеремет А.Д., Негашев Е.В. Методика финансового анализа деятельности коммерческих организаций. — М.: ИНФРА-М, 2004. — 237 с.

#### РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА МОДЕЛИРОВАНИЯ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ

А.С. Попов А.В. Обходский

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: asptomsktpu@gmail.com

Рост производительности вычислительной техники дает больше возможностей для выполнения расчетов. Одновременно с этим развивается теоретическая база, задачи которой направлены на оптимизацию существующих и создание новых методов расчетной оценки свойств атомных структур. Практически всегда существует спрос на новые материалы с уникальными свойствами, применяемые в самых разных областях.

Одним из самых востребованных методов расчета является метод Хартри-Фока-Рутана [1]. Данный метод имеет множество модификаций, позволяющий рассчитывать как молекулы, так и кристаллы с различными особенностями [2], применяя при этом практический любые базисные наборы [3].

В ходе работы была разработана структура программного обеспечения, в которую входит интерфейс пользователя, программа визуализации, локальная и удаленная система хранения данных, локальная и

удаленная система обработки данных. Такая структура позволит производить расчет в десятки раз быстрее, при помощи удаленной системы обработки данных, а также вести структуризацию результатов вычислений с помощью системы хранения данных.

В настоящий момент разработан формирователь расчетной модели (входящий в состав интерфейса пользователя), способный производить расчет полной энергии, энергии ионизации, матрицы плотности, заселенностей по Малликену и дипольного момента любой молекулы, имеющей замкнутые электронные оболочки, с помощью ограниченного метода Хартри-Фока-Рутана. В докладе приводятся результаты верификации программного обеспечения по значениям полной энергии, показывающие, что погрешность составляет не более 0,6 % (средняя погрешность метода Хартри-Фока-Рутана составляет 1 % [4]). Расчеты производились в базисном наборе 6-31G\*.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации. Соглашение о предоставлении субсидии RFMEFI57814X0095 от 28.11.2014 г.*

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кларк Т. Компьютерная химия. – Москва: Мир, 1990 – 371 с.
2. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия. – Москва: Академия, 2008. – 382 с.
3. Слэтер Д. Электронная структура молекул. – Москва: Мир, 1965 – 588 с.
4. Малыханов Ю.Б., Горшунов М.В. О точности метода Хартри-Фока в расчетах атомов и ионов // Известия высших учебных заведений. – 2014. – № 1. – С. 128–140.

#### УРАВНЕНИЕ ФИШЕРА–КОЛМОГорова–ПЕТРОВСКОГО–ПИСКУНОВА С АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИЕЙ

А.А. Прозоров, А.Ю. Трифионов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: [aap51@tpu.ru](mailto:aap51@tpu.ru)

Нелокальные модели классического популяционного уравнения Фишера–Колмогорова–Петровского–Пискунова (ФКПП) используются в моделях реакционно-диффузионных систем с дальнедействием. Благодаря нелокальному взаимодействию такие модели способны качественно описывать нелинейные явления характерные для реакционно-диффузионных систем даже в случае популяций, состоящих из особей одного вида. К таким явлениям можно отнести процесс образования структур, возникающих за счет диффузии, конвекции, роста и нелокальных конкурентных потерь при соответствующем выборе параметров уравнения.

В некоторых случаях свойства среды, в которой происходит эволюция системы, а также коллективные эффекты могут изменить фиковскую диффузию, приводя к супер- или субдиффузии, т.е., к увеличению или уменьшению подвижности частиц в системе (особей в популяции), возникновению асимметрии. Эти явления называют аномальной диффузией и моделируют уравнениями с дробными производными. В этом случае шлейф объектов распространяется быстрее, чем предсказывают классические модели, и в процессе может проявляться значительная асимметрия. Среди математических моделей описываемых процессов с аномальной диффузией является дробно-диффузионное уравнение, где обычная вторая производная по пространственным переменным заменяется дробной производной порядка  $0 < \alpha < 2$ .