

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  $0 < \alpha < 2$ .

В данной работе предложен аналитический подход, позволяющий строить квазиклассические асимптотические решения задачи Коши для нелокального уравнения ФКПП с дробной производной в диффузионном слагаемом. В качестве определения дробной производной были использованы подходы Грюнвальда-Летникова и Лиувилля.

Полученные решения являются пространственно однородным и монотонно зависят от времени. Квазиклассический метод позволяет строить приближенные решения в различных функциональных классах. Асимптотики на больших временах построены в предположении, что модель может быть описана как возмущения точного решения с точностью до  $O(1/T^2)$ , в классе функций, которые стремятся к точному решению при  $T \rightarrow \infty$

Показано, что порядок производной влияет на смещение центра возмущений пространственно-временных структур. В частности, при убывании порядка дробной производной растет смещение центра пиков и их амплитуда.

*Работа частично поддержана программой повышения конкурентоспособности Томского государственного университета и программой «Наука», контракт № 1.676.2014/К.*

## СЛУЧАЙ РЕЗЕРВИРОВАНИЯ ДИСКРЕТНЫХ КАНАЛОВ НАБЛЮДЕНИЯ С ПАМЯТЬЮ ПРИ НАЛИЧИИ АНОМАЛЬНЫХ ПОМЕХ

О.В. Рожкова, Н.С. Демин

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

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

Результаты работ [1, 2] обобщаются на случай резервирования дискретных каналов наблюдения с памятью. Исследуется зависимость точности оценивания от кратности резервирования каналов наблюдения.

В современной технике для повышения надёжности оборудования широко используется метод резервирования (от латинского *reserve* - сберегаю, сохраняю), то есть введение излишних элементов, узлов и целых агрегатов. Назначение этих дополнительных устройств состоит в том, чтобы по мере выхода основных устройств из рабочего состояния они принимали на себя необходимую нагрузку. Однократное резервирование называется дублированием.

Резервирование каналов наблюдения является важным способом повышения как надёжности измерительных устройств, так и точности систем обработки информации, поступающей с выхода этих каналов [3], [4].

В системах с резервированием каналов наблюдения возникает задача о влиянии резервного канала без аномальных помех на качество оценивания. Смысл результатов в том, что добавление идеальных каналов наблюдения без аномальных помех может только улучшить качество оценивания.

Применительно к системам управления, навигации, передачи данных, имеющих непрерывно дискретные во времени инерционные каналы наблюдения, полученные результаты позволяют обоснованно выбирать кратности резервирования каналов наблюдения.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Демин Н.С., Рожкова С.В. Непрерывно - дискретное оценивание стохастических процессов в случае наблюдений с памятью при наличии аномальных помех. Синтез // Изв. РАН. Теория и системы управления. – 2000. – № 3. – С. 5–16.