

Математическое моделирование – путь в будущее

Академик Олег Фиговский

Моделирование предоставляет исследователю возможность решать многофункциональные задачи быстрее и проще, проводя эксперименты с аналогами реальных объектов, представленных в различных видах. Эффективность проводимого моделирования повышается за счет его применения на стадии проектирования объектов, когда необходимо выбрать подходящий вариант с оптимальными параметрами. Имитационное моделирование – это средство исследования поведения сложных систем путем создания логико-алгоритмического описания поведения элементов системы и правил их взаимодействия, носящие случайный характер. Имитационное моделирование используется тогда, когда эксперимент на реальном объекте невозможен или дорог. Различают три вида имитационного моделирования: дискретно-событийное моделирование, системная динамика, агентное моделирование – замечает профессор Юрий Евдокимов.

При дискретно-событийном моделировании функционирование системы представляется как хронологическая последовательность событий, возникающие в определенный момент времени и меняющие состояния системы. Дискретно-событийное моделирование широко используется для производственных, логистических, медицинских процессов. Второй вид моделирования – системная динамика. Он представляет собой исследование поведения системы и ее структуры во времени в зависимости от связей между элементами и с окружающей средой. Системная динамика направлена на изучение динамических систем с петлями обратной связи, поведение которых переменчиво и нелинейно. Агентное моделирование предназначено для исследования децентрализованных систем, поведение которых описывается не единым законом и математической моделью, а определяется поведением индивидуальных агентов. Агент – это некоторая сущность или объект, обладающая активным собственным поведением, принимающая решения по определенным правилам и взаимодействующая с другими объектами. Для создания агентной модели нужно определить набор агентов, составляющих исследуемую систему, их характеристики и задать правила взаимодействия агентов. Агентное имитационное моделирование исследует поведение агентов и влияние их на поведение системы в целом. Рассмотрим конкретные исследования и разработки в этой области опубликованные в 2023 году.

Ученые из Великобритании выяснили, что во время движения жгутик сперматозоида создает узоры по принципу, который описал Алан Тьюринг больше 70 лет назад. Иными словами, исследователи показали, что между движением сперматозоидов и формированием узоров в природе существует связь. Алан Тьюринг — британский математик и криптограф. Ученого считают основоположником теоретической информатики и теории искусственного интеллекта, прародителем современных вычислительных систем. Прежде всего он

известен тем, что во время Второй мировой войны помог «взломать» немецкие шифровальные аналоговые компьютеры («Энигма»). Это позволило моментально расшифровывать секретные сообщения немцев, что сыграло важнейшую роль во время войны на Западном фронте (но не на Восточном, поскольку СССР эту информацию не передавали). Однако область интересов Тьюринга этим не ограничивалась. В 1950-х годах ученый выдвинул гипотезу, согласно которой замысловатые узоры на теле животных могут возникать из-за появления неоднородностей в исходной гомогенной смеси веществ. Согласно Тьюрингу, такие сложные паттерны — результат распространения химических соединений (диффузии) и взаимодействия друг с другом. В дальнейшем гипотезу британского ученого стали называть «реакционно-диффузионная теория», или «паттерны Тьюринга». Эта математическая модель описывает, как, распространяясь, два взаимодействующих соединения могут самоорганизоваться в виде различных лент, точек, пятен или других форм. Она применима не только к «животным узорам», но и к другим типам макроскопических структур, возникающих в природе. Группа ученых из Бристольского университета (Великобритания) под руководством биотехнолога Гермеса Блумфилда-Гаделья (Hermes Bloomfield-Gadella) попыталась выяснить, существует ли связь между химическими закономерностями, создающими узоры, и тем, как движутся хвосты сперматозоидов.

Природа создает множество узоров – от пятен на леопардах до полос на зебрах. Однако подробное объяснение того, как формируются эти рисунки, до сих пор не найдено. Ученые из Колорадского университета в Боулдере (The University of Colorado Boulder) показали, что тот же физический процесс, который помогает удалять грязь с белья, может играть роль в том, как тропические рыбы получают свои разноцветные полосы и пятна. «Многие биологические вопросы сводятся к одному: как организмы развивают сложные узоры и формы, если все начинается со сферического скопления клеток, – спрашивает Бенджамин Алессо (Benjamin Alessio), автор статьи. – Мы обнаружили простой физико-химический механизм для объяснения сложного природного явления». Биологи ранее установили, что многие животные эволюционировали так, чтобы иметь узор для маскировки или привлечения себе подобных. Хотя гены кодируют информацию об окрасе, например, о цвете пятен леопарда, генетика не объясняет, где именно они будут располагаться. В 1952 году, еще до того, как биологи открыли структуру двойной спирали ДНК, Алан Тьюринг, математик, изобретатель современных вычислительных машин, предложил смелую теорию происхождения узоров у животных.

Ученые теоретически доказали, что частицы, помещенные в электродинамическую ловушку — устройство, которое позволяет им «парить» в пространстве под действием электрического поля, — в определенных условиях начинают хаотично двигаться. При этом, в зависимости от свойств частицы — массы, заряда и размера, — переход к такому типу движения наступает при разном напряжении электрического поля. Наблюдая за поведением отдельных частиц, можно неразрушающим способом оценивать свойства различных соединений для нанотехнологий и лекарственных препаратов. При разработке новых материалов, лекарственных препаратов и других высокотехнологичных продуктов очень важно знать,

какими свойствами они будут обладать. Многие об этом может рассказать анализ отдельных частиц — например, небольших гранул — интересующего объекта. На сегодняшний день существует множество способов определения характеристик — массы, размера и заряда — твердых частиц. Однако каждый из них позволяет получить информацию только об одном из перечисленных параметров, из-за чего исследователям приходится сочетать несколько методов, что делает анализ длительным и трудоемким. Поэтому ученые ищут новые методы, которые позволили бы определять сразу несколько характеристик частицы. Исследователи из Международного научно-образовательного центра физики наноструктур предложили использовать для определения параметров частиц поверхностную электродинамическую ловушку. Это устройство представляет собой набор плоских пластин из электропроводящего материала, на которую подается напряжение. Под его действием над ловушкой создается электрическое поле, в которое помещают твердую частицу — теоретически из любого материала: от неорганических микросфер до макромолекул и одиночных клеток. Частица, помещенная в электрическое поле, «повисает» в нем, но не остается неподвижной, а слегка ритмично колеблется вверх-вниз, подобно маятнику.

Американские физики впервые разработали подход, который позволяет значительно ускорить работу так называемых «жадных» алгоритмов для решения задач комбинаторной оптимизации при помощи квантовых компьютеров с относительно небольшим числом кубитов (квантовых битов). «Задачи комбинаторной оптимизации хорошо подходят для демонстрации превосходства квантовых компьютеров над их классическими аналогами, однако до настоящего времени это не удавалось сделать. Мы создали алгоритм, способный решать задачи комбинаторной оптимизации, и реализовали его на практике при помощи набора из 72 кубитов. Наша разработка оказалась быстрее ее классических аналогов, что указывает на наличие квантового ускорения», — пишут исследователи. Этот алгоритм был разработан группой ученых под руководством вице-президента квантового стартапа Rigetti Computing Мэттью Ригора.

Для большинства из нас время течет в одном направлении, но это не так для физиков-теоретиков. Они могут создать модель, которая имитирует обратное течение времени, невозможное в реальном мире. Эксперимент, проведенный командой ученых из Кембриджа, показал, что текущий вспять поток времени способен дать ответ на задачи, недоступные в обычной физике. Группа физиков под руководством Дэвида Арвидссона-Шукура из Кембриджского университета провела эксперимент, в котором входное состояние меняется в процессе моделирования обратной петли времени. В результате они смогли изменить начальные параметры уже после того, как они были заданы. Несмотря на то, что петля времени — явление сугубо гипотетическое, его можно симулировать при помощи схем квантовой телепортации, созданных запутанными частицами, чтобы решать математические задачи. «Представьте, что собираетесь послать кому-нибудь подарок — вам нужно отослать его в первый день, чтобы он дошел на третий, — пояснил Арвидссон-Шукур. — Однако виш-лист от адресата вы получили только во второй день. В сценарии с привычным течением времени невозможно узнать заранее, что он хочет в подарок, и купить его. А теперь представьте, что можете изменить посылку, которую отослали в первый день, на подарок из виш-листа. Наша модель использует манипулирование квантовой запутанностью, чтобы

показать, как можно ретроспективно менять предшествующие действия, чтобы добиться желаемого исхода».

Квантовая телепортация позволяет, меняя свойства одной из пары запутанных частиц, мгновенно наблюдать эти изменения на другой частице. В данном случае ученые применили телепортацию для переноса информации не в пространстве. Сначала физики запутали две частицы. Манипуляцией одной из частиц они добились того, что прошлое состояние другой изменилось. В итоге изменился и первоначальный результат эксперимента. Ученые не утверждают, будто петля времени существует в реальности. Квантовая теория позволяет всего лишь моделировать эти петли для запутанных квантовых частиц. Расчеты показывают, что временную петлю можно успешно использовать только в 25 процентах случаев. Немного, но, как считают физики, это означает, что модель проверяема в реальном эксперименте. Этот эксперимент еще предстоит провести, запутав большое количество фотонов и используя симуляцию путешествий во времени, чтобы изменить их состояния после того, как они будут отправлены в специальную камеру с фильтром, который пропустит внутрь только фотоны с обновленной информацией. Обнаружение этих фотонов в камере будет означать, что симуляция сработала. «Наша разработка — не машина времени, а, скорее, глубокое погружение в основы квантовой механики. Эти модели не позволят вам вернуться назад во времени и изменить прошлое, но позволят создать лучшее завтра, исправив сегодня вчерашние проблемы», — сказал Арвидссон-Шукур.

Ученые международной лаборатории «Цифровизация, анализ и синтез сложных механических систем, сетей и сред под руководством профессора Тель-Авивского университета Эмилии Фридман создали уникальный математический алгоритм, позволяющий моделировать работу человеческого мозга в разных ситуациях. Его применение позволит исследовать различные психические заболевания, а также разрабатывать интерфейсы «мозг-компьютер» для управления имплантатами, сообщили. «В дальнейшем мы планируем применить наш результат для решения задач классификации режимов активности головного мозга, что может быть использовано как для исследования таких заболеваний, как эпилепсия и синдром дефицита внимания и гиперактивности (СДВГ), так и для разработки интерфейсов мозг-компьютер, позволяющих управлять роботами "силой мысли» и активно применяющихся в области нейропротезирования". Человеческий мозг состоит более чем из 80 млрд нейронных клеток. Создание полноценных и всеохватывающих моделей такого сложного органа в мировой науке все еще остается нерешенной задачей. Однако, группа ученых международной лаборатории в Петербурге нашла способ приблизиться к этой цели и создавать модели для отдельных режимов работы головного мозга в различных ситуациях, в том числе экстремальных.

В основу решения ученых легла математическая модель ФитцХью-Нагумо, которая уже используется для изучения отдельных клеток головного мозга или их популяций. Тем не менее, эта модель имеет структурные ограничения, которые не позволяют моделировать одновременную работу миллиардов нейронов. Специалисты лаборатории сосредоточились на измерении мембранных

потенциалов нейронов – то есть напряжения стенок клеток головного мозга в различных ситуациях. К этим данным применяются математические методы скоростного градиента и фильтров-дифференциаторов, которые вкуче с уже признанной моделью ФитцХью-Нагумо позволяют выйти на новый уровень возможностей моделирования человеческого мозга. «Важным итогом такого подхода становится то, что его сложность не увеличивается при изменении количества моделируемых нейронов. То есть, задача моделирования сети с десятками миллиардов узлов, как в случае с человеческим мозгом, уже не кажется настолько недостижимой. Кроме того, ученым удалось математически доказать, что в зависимости от этих данных параметры модели будут настроены точно, то есть динамика модели с этими параметрами будет повторять динамику реального нейрона или нейронной популяции».

Максены — двумерные наноматериалы с высокой электропроводностью, которые можно эффективно комбинировать с различными металлическими соединениями для изготовления полупроводников, датчиков и электроники. Однако для того, чтобы полностью раскрыть его свойства, важно знать тип и количество молекул на поверхности, а анализ занимает несколько дней даже с самым мощным электронным микроскопом. Южнокорейские ученые разработали модель классификации, которая позволяет получать максены с одинаковыми свойствами. Материал максен (MAXene) был разработан в 2011 году из перемежающихся слоев атомов металла и углерода. Он обладает любопытными и потенциально полезными свойствами, которые зависят от молекул, расположенных на поверхности материала. Если это фтор, электропроводность и эффективность экранирования от электромагнитных волн снижаются. Однако поскольку толщина максенов всего 1 нм, анализ молекул на поверхности занимает несколько дней даже с самым мощным электронным микроскопом. Поэтому массовое производство этого материала до сих пор невозможно. Команда ученых из Института KIST разработала метод прогнозирования распределения молекул на поверхности, используя свойство магнитного сопротивления максенов. С его помощью можно легко измерить распределение молекул. Это значит, что появляется возможность обеспечить контроль качества, необходимый для массового производства. Новый метод основан на том, что электропроводность и изменения магнитных свойств зависят от молекул, закрепившихся на поверхности. Поэтому ученые изучили свойства магнитного транспорта максенов и провели успешный анализ типа и количества этих молекул при атмосферном давлении и комнатной температуре. Написав специальную программу прогнозирования, ученые смогли предсказать, что фактор рассеяния Холла, влияющий на магнитный транспорт, существенным образом меняется в зависимости от типа поверхностных молекул. «Сочетая эти результаты с экспериментальными исследованиями, мы рассчитываем, что сможем контролировать процесс производства максена, который будет применяться для массового производства максенов с постоянным уровнем качества», — заявил Ли Сын Чхоль, директор Индокорейского центра науки и технологий при KIST.

Физики под руководством нобелевского лауреата Франка Вильчека численно нашли параметры метаматериала, чей магнитооптический отклик повторяет отклик

гипотетических аксионов, если бы они существовали в реальности. Работа ученых открывает дорогу к экспериментам с эмерджентной аксионной электродинамикой. Термин «аксион» для новых гипотетических частиц ввел впервые нобелевский лауреат Франк Вильчек (Frank Wilczek), назвав их так в честь стирального порошка — он предполагал, что эти частицы помогут «очистить» квантовую хромодинамику от трудностей, связанных с нарушением CP-симметрии. Сегодня аксионы остаются одними из главных кандидатов на темную материю, и их активно ищут как по астрофизическим данным, так и в наземных экспериментах. В физике, однако, существует и другой подход к исследованию частиц или явлений, которые были предсказаны, но не обнаружены приборами. Он основан на создании особым образом спроектированных сред, элементарные возбуждения в которых (квазичастицы) ведут себя подобно предполагаемым частицам. Ярчайшим примером этого принципа можно назвать исследование майорановских частиц, которые физики активно рассматривают в качестве кандидатов для элементной базы квантовых компьютеров. Аксионоподобные возбуждения (или эмерджентные аксионы) тоже были обнаружены — их нашли в магнитных твердых телах, однако там амплитуда их сигнала довольно небольшая. Однако, в метаматериалах эта ситуация может измениться — это показали Максим Горлач (Maxim A. Gorlach) и его коллеги при участии самого Франка Вильчека.

Метод неортогонального множественного доступа (NOMA) в системах мгновенной беспроводной передачи информации и энергии применяется для коммуникации в промышленном интернете вещей. К сожалению, он подвержен значительным энергопотерям по мере увеличения расстояния. Корейские ученые разработали эффективную схему применения NOMA в распределенной радиосети. Эта технология открывает возможность создания более эффективных и оптимизированных сетей интернета вещей. Промышленный интернет вещей (IIoT) сочетает беспроводные датчики, контроллеры и технологии мобильной связи для наблюдения и управления каждым аспектом производственного процесса. Для создания надежной системы передачи данных и энергии между устройствами IIoT было бы удобно использовать беспроводные технологии. Например, метод мгновенной беспроводной передачи информации и энергии (SWIPT) с помощью радиосигналов, который одновременно переносит энергию и дешифрует информацию. А по мере того, как количество умных устройств растет, SWIPT все чаще сочетают с системой неортогонального множественного доступа (NOMA), которая позволяет увеличить ресурс батареи датчиков и других устройств. Однако энергетическая эффективность этой системы уменьшается вместе с увеличением расстояния от центрального контроллера. Чтобы преодолеть это препятствие, команда ученых из Корейского морского университета разработала новую схему работы NOMA со SWIPT для распределенных радиосетей. Новый метод существенно увеличивает энергетическую и спектральную эффективность IIoT. Исследователи описали трехступенчатый итеративный алгоритм, максимизирующий энергетическую эффективность системы. Сначала они оптимизировали распределение энергии для центрального контроллера IoT. После чего были оптимизированы распределение энергии для NOMA и разветвление энергии для SWIPT. Наконец, ученые проанализировали ситуацию выхода из строя, при которой система не может обеспечить достаточно энергии и скорости передачи

данных, расширив метод оптимизации до многокластерного сценария. Работоспособность алгоритма была подтверждена многочисленными числовыми моделированиями. Результаты показали, что предложенная схема в пять раз более энергоэффективна, чем ее аналоги без распределенной радиосети.

Физики научились сопоставлять электромагнитным волнам системы материальных точек, механические параметры которых численно совпадают с характеристиками исходной волны: степенью поляризации и мерой квантовой запутанности. При этом соотношение, которое связывает эти две величины, на языке механической аналогии сводится к теореме Пифагора. Аналогии между физическими системами упрощают жизнь ученых, даже если системы имеют разную природу и похожи только их математические описания. Например, стандартный прием в квантовой теории поля при конечной температуре — формальная замена обратной температуры на фиктивное время (которое изначально отсутствует как переменная). Это позволяет пользоваться при вычислениях хорошо изученным математическим аппаратом обычной квантовой теории поля (в которой, в свою очередь, нет температуры), а затем интерпретировать результаты уже для исходной модели с температурой. Поиск подобных аналогий и проверка границ их применимости — одно из актуальных направлений в современной науке. Цянь Сяофэн (Xiao-Feng Qian) и Мигаш Изади (Misagh Izadi) из Технологического института Стивенса предъявили количественное описание свойств электромагнитной волны через аналогию с механической системой материальных точек.

Исследователи смоделировали работу внутренних часов организма и определили, как ими «управлять». Исследователи из Северо-Западного университета и Института Санта-Фе (США) разработали теоретическую модель для изучения синхронизации множества внутренних часов в организме под воздействием старения и внешнего влияния, например, смены часовых поясов. Синхронизация часов центральной и периферической системы снижает негативные эффекты. Циркадные часы — внутренние часы, по которым живет организм — присутствуют почти в каждой клетке и ткани организма. Каждый из них полагается на свой собственный набор сигналов для калибровки. Например, часы мозга зависят от солнечного света и освещения в целом, а периферические — калибруются во время еды. Исследователи построили математическую модель, объясняющую это сложное взаимодействие между системами. Теория включает две популяции связанных осцилляторов, которые имитируют естественные ритмы циркадных циклов. Каждый осциллятор влияет на другие и в то же время регулируется на основе уникальных внешних сигналов. Используя эту модель, ученые изучили, как такая связанная система может быть нарушена и что ухудшает эффект. Они обнаружили, что общие симптомы старения, такие как более слабые сигналы циркадных часов и более низкая чувствительность к свету, приводят к тому, что система становится более уязвимой к сбоям и медленнее восстанавливается. Они также нашли новый метод ускорения восстановления

после смены часовых поясов и подобных сбоев. Они считают, что путь к лучшему сну лежит через желудок. «Обильный обед ранним утром в новом часовом поясе поможет преодолеть смену часовых поясов. А постоянно менять график приема пищи или есть ночью не стоит, так как это может привести к рассогласованию внутренних часов», — говорит Итун Хуан, соавтор исследования. Ученые планируют исследовать другую сторону уравнения и выявить факторы, которые повышают устойчивость внутренних часов.

Потребовалось 10 лет, около 500 учёных и более 600 млн €, чтобы проект «Человеческий мозг» наконец подошёл к концу. Он стал одним из крупнейших исследований на средства Европейского союза. Смелой целью было понять человеческий мозг, в подробностях смоделировав его на компьютере. Под эгидой проекта «Человеческий мозг» (HBP) учёные опубликовали тысячи статей и добились значительных успехов в неврологии: создали подробные трёхмерные карты по меньшей мере 200 областей мозга, разработали мозговые имплантаты для лечения слепоты, усовершенствовали методы лечения различных заболеваний. А также с помощью суперкомпьютеров смоделировали такие функции, как память и сознание. Когда проект стартовал, вряд ли кто-то верил в потенциал больших данных и в пользу суперкомпьютеров для моделирования сложной работы мозга, — Томас Скордас, заместитель гендиректора Европейской комиссии в Брюсселе. Однако почти с самого начала HBP вызывал критику. Проект не достиг своей цели моделирования всего человеческого мозга, которую, кстати, многие учёные изначально считали притянутой за уши. Проект несколько раз менял направление, и его научные результаты стали «фрагментированными и мозаичными», сказал участник HBP Ив Френьяк, учёный-когнитивист и директор по исследованиям французского национального агентства CNRS. По его мнению, проект не дал полного или оригинального понимания мозга.

Применение технологий искусственного интеллекта (ИИ) позволит ученым перейти от методов проб и ошибок в прогнозировании свойств «умных» материалов к более быстрому подбору их функций на атомарном уровне, считает Константин Новоселов (МТУ, Англия), получивший Нобелевскую премию по физике в 2010 году вместе с Андреем Геймом за исследования графена. Он отметил, что сегодня ученые подошли к этапу развития исследований материалов, на котором уже могут моделировать их свойства на уровне атомов. «Проблема в том, что до сих пор это делается методом проб и ошибок. <...> К сожалению, мы до сих пор не понимаем, как получить полный контроль над свойствами материалов. Как создавать материалы с заданными свойствами, когда у вас появляется стопроцентная воспроизводимость на атомарном уровне. Это то, где ИИ и машинное обучение могут применяться очень активно», – сказал Новоселов, выступая на международной конференции AI IN в Университете Иннополис, посвященной ИИ-технологиям. Такие перспективные материалы могут стать основой «умных» капсул для точечной доставки лекарств, которые способны открываться и закрываться в нужный момент, привел пример исследователь. «Мы очень надеемся, что именно методы машинного обучения помогут нам решить проблему предсказания свойств, в первую очередь, функциональных, которые меняются во времени у неустойчивых материалов вне состояния равновесия», – заключил он

Ученые создали математическую модель, позволяющую подбирать оптимальные условия для получения углеродных наноструктур с помощью плазменного синтеза. Она подробно описывает процесс «рождения» в газовой плазме частиц углерода, из которых в дальнейшем собираются применяемые в медицине и электронике наноматериалы. Во многих отраслях науки и техники сегодня используются нанотехнологии — направления, позволяющие создавать самые разные объекты (частицы, молекулярные комплексы и даже целые устройства), размер которых в миллионы раз меньше миллиметра. Так, например, в медицине наномасштабные объекты используются для доставки лекарств, в материаловедении — для синтеза легко управляемых или так называемых «умных» материалов, в микроэлектронике — для создания миниатюрных процессоров и запоминающих устройств. Одним из наиболее перспективных методов создания наноструктур считается плазменный синтез с помощью дугового разряда. Этот подход заключается в том, что нужный ученому нанообъект «собирается» из отдельных атомов или молекул с помощью неравновесной плазмы — газа, насыщенного заряженными частицами. Чтобы обогатить газ такими частицами, то есть ионизировать, используют электроды (например, графитовые) — элементы, между которыми протекает электрический ток. Когда ток, поступая от одного электрода к другому, проходит через газ, возникает разряд, по форме напоминающий дугу. Эксперименты показали, что этот газовый разряд сильно нагревает поверхности электродов, из-за чего с них испаряются частицы углерода. На их основе можно синтезировать различные наноструктуры: углеродные нанотрубки, наносферы (фуллерены) и тонкие листы графена, используемые в электронике и биомедицине. Однако до сих пор оставалось не ясным, какие условия синтеза — сила тока, размер электродов, межэлектродное расстояние, давление и сорт газа — оптимальны для сборки углеродных нанообъектов из отдельных частиц.

Ученые из КГНИУ-КАИ разработали самосогласованную физико-математическую модель, наиболее полно описывающую процесс создания дугового разряда в двух инертных газах — аргоне и гелии. Авторы смоделировали ситуацию, когда в газ поместили два графитовых электрода (положительно и отрицательно заряженный), а затем подавали на них постоянный ток, постепенно увеличивая вкладываемую мощность в разряд. Численные расчеты позволили исследователям определить режим газового разряда, при котором становится возможным синтезировать в нем углеродные наноструктуры. Дело в том, что, согласно модели, газовый разряд по мере увеличения силы подаваемого на электроды тока проходит три последовательные стадии, лишь одна из которых подходит для синтеза. Сначала в пространстве между электродами образуются только заряженные частицы буферного газа — ионы аргона или гелия, соответственно. Затем по мере нагревания электродов с них начинают испаряться нейтральные атомы и молекулы (димеры и тримеры) углерода. Они также ионизируются в плазме дугового разряда. По мере дальнейшего увеличения силы тока происходит смена плазмообразующего иона. Другими словами, доминирующим становится ион углерода вместо гелия или аргона. Испаренные в разрядный промежуток частицы углерода, а также их ионы, попадая в области с низкой температурой газа и на подложки, способны объединяться между собой и формировать сложные наноструктуры. Таким образом, модель позволяет точно подобрать силу тока, давление газа, размер электродов и межэлектродное расстояние, чтобы максимально быстро добиться условий горения разряда, при которых синтез углеродных наноструктур будет наиболее эффективным. «Предложенная модель привлекательна не только с фундаментальной, но и прикладной точки зрения. С одной стороны, она позволяет глубже понять природу такого классического объекта как дуговой разряд. С другой стороны, модель поможет повысить скорость и эффективность плазменного синтеза наноструктур, поскольку с ее помощью ученый сможет заблаговременно рассчитать и спрогнозировать оптимальные условия процесса. В дальнейшем мы планируем наработать как теоретическую, так и экспериментальную базу по оптимальным условиям синтеза различных типов наноструктур — углеродных, (включая наноалмазы), кремниевых, германиевых и металлических», — рассказывает руководитель проекта Алмаз Сайфутдинов.

Получен ответ на вопрос, можно ли поймать свет в трехмерный массив микроскопических частиц: при помощи нового метода компьютерного моделирования команда физиков из США и Франции обнаружила условия, при которых волну света может заставить замереть, применяя для этого дефекты правильно подобранных материалов. Электроны могут быть пойманы, или локализованы в неупорядоченных материалах со случайным образом распределенными аномалиями. Это явление получило название андерсоновской локализации в честь американского физика-теоретика Филипа Андерсона и стало важной вехой в развитии физики конденсированного состояния. Если в классической физике мы можем представить себе частицу света как шарик, отскакивающий от стенок хаотичного лабиринта, то волновое представление квантовой механики заставляет электрон останавливаться и превращает материал в изолятор. Нечто похожее происходит, когда электромагнитные волны вынуждают

свет рассеиваться в каком-нибудь веществе, по крайней мере, в одном или двух измерениях. Однако до сих пор никто не мог понять, будет ли происходить то же самое в трех измерениях. Раскрыть этот секрет помог прогресс в вычислительных программах и численном моделировании. При помощи нового инструмента FDTD Software Tidy3D, команда ученых смогла провести каждый цикл вычислений, которые обычно заняли бы несколько дней, за 30 минут. Программа на основе конечно-разностного временного алгоритма, которая делит пространства на ячейки и решает уравнения в каждой точке координат, позволила протестировать различные конфигурации системы, размеры и структурные параметры. Результаты числового моделирования оказались лишены проблемных мест, которые затрудняли предыдущие исследования. Ученые обнаружили, что свет нельзя локализовать в 3D в диэлектрических материалах, таких как стекло или кремний. Однако четкие числовые данные указывают на то, что андерсонова локализация возможна в случайных наборах проводящих металлических сфер. Этот результат указал физикам направление дальнейших исследований андерсоновской локализации в различных типах материалов.

Думают ли умные люди быстрее? Согласно результатам исследования группы ученых из Германии и Испании, не всегда, и в случае решения сложных задач отдельные преимущества оказываются за людьми с менее развитым интеллектом. Мозг взрослого человека состоит из миллиардов нейронов, объединенных многочисленными связями. Эти сложные и подчас запутанные сети — одновременно ключ к удивительным возможностям мозга и главная трудность на пути к его изучению. Поскольку работать с мозгом живого человека довольно сложно, исследователи все чаще обращаются к компьютерному моделированию, используя цифровые данные сканирования мозга, такие как магнитно-резонансная томография (МРТ), а также математические модели, основанные на теоретических знаниях о биологических процессах. Первоначально это позволяет построить «общую» модель человеческого мозга, но затем ученые уточняют ее, используя данные отдельных людей и создавая «персонализированные» модели мозга. Чтобы изучить, как общие показатели уровня интеллекта влияют на скорость решения различных задач, международная группа исследователей создала 650 «персонализированных» моделей мозга участников проекта Human Connectome Project. Это позволило эффективно воспроизводить активность каждого изученного мозга, анализируя интеллектуальные характеристики и время реакции конкретного человека при решении различных задач. В дальнейшем показатели этих моделей сравнивали с показателями самих участников, которым предложили решать серию постепенно усложняющихся задач на подбор элементов в постепенно усложняющихся «пазлах». Ученые обнаружили, что участники с более высокими показателями интеллекта быстро справлялись с простыми задачами, но дольше решали сложные. Части их мозга при этом были лучше синхронизированы между собой, постоянно обмениваясь информацией и затормаживая принятие окончательного решения. С другой стороны, мозг людей с невысоким IQ буквально «спешил с выводами» при принятии сложных решений, а не ждал, пока вышестоящие области мозга завершат этапы обработки, из-за чего такие люди чаще допускали ошибки. Согласно выводам исследователей, в целом показатели «персонализированных»

моделей совпадали с показателями мозга живых людей, что доказывает эффективность компьютерного моделирования человеческого мозга. В будущем такие методы можно применять в медицине: к примеру, с помощью компьютерной симуляции врач сможет оценить, какое лекарство будет наиболее эффективно при лечении конкретного пациента и вызовет наименьшее количество побочных эффектов.

Некоторые кольчатые черви собираются многочисленными группами, свиваясь друг вокруг друга и образуя плотный клубок. Но при опасности клубок распадается так быстро, как и не снилось людям, которые постоянно мучаются с запутанными проводами. Чтобы выяснить, как это возможно, биологам пришлось обратиться к математике. Каждый, кому приходилось распутывать провода наушников или зарядного устройства, знает, как это непросто. Между тем примитивные кольчатые черви способны решать эту задачу в доли секунды. *Lumbriculus variegatus* живут в болотистых водоемах, питаются одноклеточными и распадающейся органикой, и вырастают в длину до 10 сантиметров. Иногда — например, чтобы сохранить тепло или влагу — они собираются в группы, свиваясь в плотный клубок. Но лишь почувствовав угрозу, черви разбегаются, распутываясь почти моментально. Клубок может свиваться и расти несколько минут, набирая до нескольких десятков тысяч особей. Однако для срочного распутывания червям требуется не более пары десятков миллисекунд. Американские биологи (Jörn Dunkel и его коллеги) выяснили, как этим животным удается решать столь сложную задачу. Ученые проводили лабораторные эксперименты с группами примерно по 20 червей *L. variegatus*. Сплетенные ими клубки обрабатывали желатином, чтобы стабилизировать их форму, а затем «просвечивали» ультрафиолетом с целью определить внутреннюю структуру и выяснить, как именно и сколько раз черви обвивались друг вокруг друга. Затем каждый клубок перемещали в емкость с чистой водой и «пугали» слабым электрическим разрядом или ультрафиолетовым излучением.

Стремительное распутывание фиксировали скоростной видеокамерой, которая позволила проследить за движениями каждого червя индивидуально. Для обработки полученных данных биологи привлекли топологов — специалистов в теории узлов. Они построили математическую модель, а затем провели компьютерные симуляции обоих процессов: спутывания и распутывания. Оказалось, все дело в направлении движений, которыми скручиваются черви, собираясь либо разбегаясь. Движения отдельного червя быстро подхватывают соседи, контактирующие с ним. Чтобы спутаться в клубок, каждая особь несколько раз скручивается в одном направлении, после чего резко меняет направление и совершает такое же движение в обратную сторону, образуя плотное сплетение. При распутывании черви быстро чередуют скручивание то в одном, то в другом направлении, часто приобретая форму цифры восемь. «Такая работа кажется чистым курьезом, однако у нее могут быть далеко идущие последствия. Активные филаменты широко распространены в биологических системах, от нитей ДНК до целых организмов. Подобные филаменты способны выполнять множество самых разных функций и могут помочь в создании материалов, меняющих свойства “по

требованию»», — прокомментировала исследование профессор Ева Кансо (Eva Kanso).

Рак простаты — второй по распространению вид онкологических заболеваний среди мужчин и четвертый — среди всех групп населения. Вариантов лечения разработано множество, от иммуно- и радиотерапии до удаления опухолевых тканей. Специалисты из Великобритании оценили эффективность некоторых доступных методов при помощи математики. Один из распространенных подходов лечения рака простаты — андрогенная депривационная терапия (АДТ), которая включает прием медикаментов, снижающих количество андрогенов, мужских половых гормонов, вырабатываемых в семенниках. Эти половые гормоны способствуют росту нормальных и раковых клеток простаты, а АДТ подавляет их развитие. Однако у некоторых пациентов возникает сопротивляемость этому виду терапии. В недавнее время для прогнозирования развития рака и воздействия терапевтических методов в онкологии начали использовать математическое моделирование. Оно состоит в создании упрощенного математического представления реальных сценариев для того, чтобы лучше понять происходящее и выработать более эффективную стратегию. Ученые из Университета Портсмута разработали такую математическую модель для оптимизации терапии рака простаты в краткосрочной и долгосрочной перспективах. Модель включала применение различных препаратов, в чистом виде и в комбинациях. Исследование показало, что в краткосрочный период, за 12 или 18 недель, самым эффективным видом монотерапии является применение кабацитакселя, препарата для химиотерапии. Анализ образцов тканей продемонстрировал, что количество опухолевых клеток сокращается в таком случае больше всего. При этом комбинированная терапия, в целом, более эффективна, чем моно. Кроме того, ученые выяснили, что попеременная терапия энцалутамидом и кабацитакселем действует лучше всего и может значительно улучшить результаты лечения. Выводы были подтверждены сравнительным исследованием. Исследователи уверены в эффективности метода математического моделирования поведения опухоли, однако подчеркивают, что модель была построена на клетках мышей, и ее применение на материале человека требует дальнейшей работы.

Китайские инженеры сообщили о том, что впервые задействовали искусственный интеллект для имитации необычного воздушного боя. Необычность этого боя в том, что он имитировал противостояние истребителя, способного достигать гиперзвуковых скоростей, с самолётом противника. В рамках боя искусственный интеллект, созданный китайскими учёными, свёл в условном воздушном бою самолёты, скорость одного из которых составляла 11 Махов. В такой ситуации ИИ определил параметры поражения цели имеющейся на вооружении ВВС Народно-освободительной армии Китая ракетой воздушного базирования. Параметры этого пуска оказались таковы, что в полёте ракета должна выпускаться в направлении, обратном движению самого истребителя. Система компьютерного моделирования сама определяет момент запуска и осуществляет пуск с возможностью ожидания одобрения этого действия лётчиком. Но так как бои

ведутся на гиперзвуковых скоростях, то, как отмечают китайские инженеры, рано или поздно придётся доверить системе искусственного интеллекта на борту самолёта и выполнение самого пуска. Причина проста – лётчик просто не способен своевременно осуществлять пуск ракеты, чтобы при гиперзвуковой скорости самолёта поразить цель в ту долю секунды, когда это возможно, если не менять саму ракету. На этом основании сделан вывод относительно того, что если истребители достигнут гиперзвуковых скоростей, то они, вероятно, перейдут в разряд беспилотных. Так как мозг среднестатистического человека (даже подготовленного лётчика) не справится с управлением самолёта, с маневрированием на 11 Махах. В использованной в КНР компьютерной модели самолёт противника двигался со скоростью 1,3 Маха. В китайской прессе сообщается, что условным противником был избран стелс-истребитель F-35 ВВС США, точнее – его компьютерная модель.

Химики из Великобритании разработали алгоритм глубокого обучения, способный предсказывать механизмы реакций по кинетическим данным. Ученые обучили свою модель на нескольких тысячах наборах кинетических данных, сгенерированных автоматически, а затем использовали для анализа шести изученных каталитических реакций. Анализ кинетических данных позволяет изучать механизмы каталитических реакций. Обычно для подобного анализа химии проводят каталитическую реакцию с разными загрузками катализатора и измеряют концентрацию продукта или реагента в разные моменты времени. Затем, чтобы сделать выводы из этих зависимостей, необходимо рассчитать теоретические зависимости для нескольких предполагаемых механизмов, а затем сравнить полученные зависимости с экспериментальными. Если зависимости совпадают — значит механизм найден. Еще один способ изучить механизм реакции — измерить начальные скорости реакции при разных начальных концентрациях реагента или катализатора. Далее можно построить логарифмическую зависимость начальной скорости от начальной концентрации, а из нее определить порядок реакции по реагенту или катализатору. Это тоже помогает делать предположения о механизме реакции. Эти и другие более современные методы работают хорошо и ими часто пользуются. Но если механизм реакции сложный, достоверно интерпретировать полученные кинетические данные бывает очень трудно. Это происходит, например, если на нескольких каталитических стадиях катализатор дезактивируется. В этом случае нужно провести много кинетических экспериментов, и все равно гарантированно выбрать один подходящий механизм может не получиться. Чтобы преодолеть эти проблемы, Игорь Ларроса (Igor Larrosa) и Jordi Burgés (Хорди Бурес) решили разработать алгоритм машинного обучения, способный предсказывать механизмы каталитических реакций по кинетическим данным.

Английские ученые первыми создали компьютерную реконструкцию вируса, включая присущий ему геном. Хотя нечто похожее уже выполняли другие команды биологов, впервые исследователям удалось реконструировать точную химическую и трехмерную структуру «живого» вируса. Этот прорыв может привести к появлению альтернатив для антибиотиков, что снизит опасность распространения

устойчивости к противомикробным препаратам. Исследование было проведено с использованием существующих данных о структурах вирусов, полученных криоэлектронной микроскопией и компьютерным моделированием, которое продолжалось почти три года, несмотря на то, что вычисления велись на суперкомпьютерах Великобритании и Японии. Этот прорыв откроет перед биологами возможность изучать те процессы, которые сейчас невозможно исследовать из-за отсутствия генома в модели вируса. В частности, они смогут понять, как бактериофаг — виды вирусов, заражающие бактерии — уничтожают специфические болезнетворные бактерии. На сегодня у ученых нет ясности в этом вопросе, в результате могут появиться препараты более точного действия, которые заменят современные антибиотики и, тем самым, помогут снизить темпы распространения устойчивости к противомикробным препаратам, которая развивается у микробов, делая их невосприимчивыми к антибиотикам. «До сих пор никто не мог построить модель генома целого вируса с таким атомистическим уровнем детализации, — заявил профессор Дмитрий Нерух из Университета Астона. — Способность с большей четкостью изучать геном в вирусе чрезвычайно важна. Без генома невозможно точно понять, как бактериофаг заражает бактерию. Это исследование поможет вирусологам ответить на вопросы, на которые раньше они не могли найти ответы».

Чем может быть полезна математика для социологии, кроме методов обработки экспериментальных данных? Ю.И. БРОДСКИМ для социологического дискурса предлагается язык, родившийся в результате моделирования сложных систем с помощью структурной теории, средствами математики и информатики. Достоинствами этого языка являются математическая однозначность и развитые средства типизации, позволяющие различать сущности, которые часто смешиваются, когда дискурс ведется на естественном языке. Геометрическая теория дает математическую языковую среду для дискурса в предметной области моделирования социального поведения, т.е. возможность выявлять достаточно тонкие различия рассматриваемых сущностей, которые обычно теряются, сливаются при их гуманитарном обсуждении на естественном языке. Отсутствие такой языковой среды часто ведет к кажущимся противоречиям при обсуждении проблем, возникающих при таком моделировании. Язык математического моделирования оказывается в том числе пригодным для моделирования и интерпретирования некоторых философско-религиозных высказываний.

В условиях рыночной экономики никому не нужны просто новации, все хотят именно инновации, т.е. внедренные новации. А коммерциализируют новации именно предприниматели. И очень хорошо, когда креативный специалист - одновременно предприниматель. Тогда процесс реализации инновационного проекта несказанно ускоряется. Проф. Фиговский и Задорский проанализировали и посмотрели на примерах традиционные методы поиска инновационных решений, в частности, инженерные методы решения творческих задач. Специалист решает задачи в своей области на высоком профессиональном уровне, опираясь на накопленные им знания и опыт. Когда же он сталкивается с принципиально новой задачей, для решения которой требуются знания из других областей науки и техники, то появляется барьер, пытаясь обойти который, специалист решает задачу

перебором большого количества вариантов. Часто решение такой задачи, находится на стыке нескольких областей знаний и заранее трудно определить каких. В науке такой процесс перебора вариантов называют "Метод проб и ошибок". Принципиально другую технологию мышления разработал инженер из России Генрих Альтшуллер, которую он назвал «Теория решения изобретательских задач (ТРИЗ)». Альтшуллер первый осознал необходимость создания технологии, позволяющей отказаться от метода проб и ошибок и направленно искать решение; им была разработана система законов развития техники. Проф. Фиговский и Задорский предложен новый метод поиска нестандартных креативных решений в различных областях деятельности человека (метод может использоваться не только для решения технических задач или научных проблем, но и при решении экономических, политических и даже социальных задач). В основу метода положен, системный анализ и его законы. Используются свойства иерархичности систем, их декомпозиции, взаимосвязанности, а также прямой и обратной связи различных уровней иерархии, определяется лимитирующий иерархического уровня системы, используется принцип соответствия (гармонии) методов внешнего воздействия амплитудно – частотным характеристикам системы на лимитирующем уровне.
