

МАТЕМАТИКА. ФИЗИКА. ТЕХНИКА

Бейшекеев Ж.Ж.

**ПРИЛОЖЕНИЯ ХИМИЧЕСКИЙ ГРАФ
В ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ**

УДК 513.83.

В данной статье рассматривается приложения химический граф в энергетических системах. Сетевые модели нейрона изучается правилами Кирхгофа, и в конце топологические и метрические характеристики сети приводят к уравнениям Лагранжа, геодезическим уравнениям.

Введение.

Модель сети, в которой используются элементы, связанные правилами Кирхгофа, использована для представления римановой метрики химических многообразий энергии. Входные токи сети соответствуют контравариантным компонентам тангенциальных векторов в направлениях координат многообразия в данной точке скоростям реакции, тогда как сопряженные напряжения соответствуют ковариантным компонентам, связанным средством. Введение линейных сопротивлений, являющихся постоянными во всем дифференциальном интервале, ведут к типичному риманову элементу расстояния. Неравенство Шварца превращается в параметр, определяющий оптимальный динамический коэффициент трансформации энергии, а колебания в переходах между двумя состояниями в химическом многообразии могут быть введены с помощью дополнительных элементов- конденсаторов, индуктивностей и сопротивлений. Топологические и метрические характеристики сети приводят к уравнениям Лагранжа, геодезическим уравнениям. Итак, современная интерпретация основных понятий химии неизбежно ведет к исследованию геометрических и топологических свойств химических графов.

Правила Кирхгофа в энергетических системах.

Анализ сложных сетей основан на записи в матричной форме уравнений, которые связывают токи и напряжения в узлах, ветвях или ячейках сети.

Для данной точки p на пути реакции s дифференциальный элемент - расстояния, например изменение энергии между любыми двумя точечными состояниями в многообразии, определяется с помощью римановой метрики:

$$dE = ds^2 = d\vec{s} * d\vec{s} = \sum_{i,k} g_{ik} dx^i * dx^k =$$

$$= \sum_{i,k} g^{ik} * dx_i * dx_k \geq 0 \tag{1}$$

в которой, элементы фундаментального ковариантного метрического тензора являются функциями положения, а x^i и x^k — контравариантными координатами, непрерывно определенными на этом многообразии. Мы предполагаем, что это многообразие является дважды непрерывно дифференцируемым, и что векторы касательных s_i могут быть изображены в каждой точке p на пути s в направлении каждой из этих координат:

$$\vec{s}_i = \partial \vec{s} / \partial x_i \tag{2}$$

где $g_{ik} = \vec{s}_i * \vec{s}_k$, $d\vec{s} = \vec{s}_i dx_i$, $\|\vec{s}_i\| = \sqrt{g_{ii}}$;

Кроме того, угол θ_{ik} , образуемый любыми двумя координатами в многообразии, определяется соотношением:

$$\cos\theta_{ik} = \vec{s}_i * \vec{s}_k / \|\vec{s}_i\| * \|\vec{s}_k\| = g_{ik} / \sqrt{g_{ii}} * \sqrt{g_{kk}} = g_{ik} \tag{3}$$

Для любого дифференциального элемента на гиперповерхности метрическое многообразие можно рассматривать как семейство

n -мерных гиперпризм, имеющих ребра

$$\sqrt{g_{11}} * dx^{(1)}, \sqrt{g_{22}} * dx^{(2)} \dots \sqrt{g_{nn}} * dx^{(n)},$$

которые образуют произвольные углы друг с другом. Площадь, объем или объем более высокой размерности определяется как:

$$v = (\sin\theta) * \sqrt{g_{11}g_{22} * \dots * g_{nn}} * dx^{(1)} * dx^{(2)} \dots dx^{(n)}. \quad (4).$$

Здесь θ - угол, образуемый координатами и определяемый соотношением, где q — матрица, элементы которой равны q_{ij} при $i \neq j$ и при $i = j$

Для удобства скобки не применено при указании индексов векторов.

Многообразие, метрические, ковариантные и контравариантные компоненты могут быть представлены с помощью планарной электрической сети [1], в которой линейные омические сопротивления, соединяются между узлами (i, j) , где потенциалы определяются вторым правилом Кирхгофа (ВПК), а инцидентные токи подчиняются первому правилу Кирхгофа (ППК). Такая сеть имеет два ортогональных векторных пространства, которых соответствующие ей [8], размерность может быть определена путем удаления по одной ветви сети каждый раз до тех пор, пока в сети не будет отсутствовать ток. Множество удаленных звеньев образует базис векторного пространства, порождаемого токами в сети, тогда как оставшийся подграф образует дерево сети. В кирхгофовых сетях понятие линейной независимости возникает естественным путем из определения деревьев и звеньев: при восстановлении по одному звену каждый раз потоки в произвольной ветви дерева будут линейной комбинацией потоков звеньев по принцип суперпозиции. До того как будут введены основные соотношения для ветвей, мы докажем равенство, известное инженерам-электрикам как теорема Телегина [2].

$$\sum v_k i_k = \sum v_i i_i + \sum v_c i_c = 0 \quad (5).$$

т.е. по всем ветвям равно, по звеньям плюс, по ветвям деревьев. Это важный топологический результат, полученный на основе ППК и ВПК. Хотя он следует из основных понятий цепей, топологических циклов и граничных и пограничных операторов комбинаторной топологии [3], уравнение (5) может быть легко выведено

графически с учетом того, что ППК позволяет определить циркулирующие токи j_m для каждой ячейки.

При разложении произведений $v_k * i_k$ на произведения циркулирующих по ячейке токов, умноженных на суммы напряжений в контуре, уравнение (5) получается после применения ВПК к каждому контуру. Пусть выполняется ППК, то ток в произвольной ветви i_b может быть выражен как разность между токами, циркулирующими в петле j_t . В таком случае из этого следует, что если выполняется ВПК, то $\sum i_b V_b = 0$ для полной сети. Это может быть выражено как:

$$- \sum i_t V_t = \sum i_t V_t. \quad (6).$$

т. е. по звеньям, и по дереву может быть противоположно.

Кроме того, мы можем разложить члены, соответствующие звеньям и переменным дерева. Это можно осуществить путем отрыва одной или больше ветвей от границы сети, не отрывая их от сети, чтобы получить:

$$\sum V_k i_k = \sum V_i i_i \quad (7).$$

Если в ветви дерева - включены линейные сопротивления R_t , легко показать при использовании обычных аналитических методов что суммирование членов, находящихся в левой части уравнения, приводит к билинейной метрике с $R_{kj} = R_{jk}$.

$$\Phi = \sum V_k i_k = \sum_{k,j} R_{kj} i_k i_j \geq 0 \quad (8).$$

Уравнения, связывающие напряжения и токи, следуют просто из:

$$V_k = \frac{1}{2} \frac{\partial \Phi}{\partial i_k} \quad (9).$$

и соответствующее обратное выражение для токов может быть получено введением проводимостей обратных величин сопротивлений, в двойственную сеть.

Если напряжения v_k и токи i_k отождествляются с инкрементами dx_k и dx^k соответственно, то уравнение (6) ведет к уравнению (1) при условии, что сеть составлена из положительных сопротивлений. В таком случае сеть, обладающая активным сопротивлением, с положительными сопротивлениями и n независимыми звеньями гомологична n -мерному метрическому многообразию. Может быть показано, что преобразование между ковариантными и контравариантными компонентами эквивалентно преобразованиям сети, осуществляемым путем сопоставления измерений разомкнутой и короткозамкнутой цепи [4]. В обычных терминах тензорного исчисления для метрического векторного пространства силы представляют ковариантные векторы v_μ , тогда как токи - контравариантные векторы j^μ , и их скалярное произведение соответствует инварианту (тензору нулевого порядка)

$$\Phi = \sum_{\mu} V_{\mu} i^{\mu} = \sum_{\mu,\eta} g^{\mu\eta} V_{\mu} V_{\eta} = \sum_{\mu,\eta} g_{\mu\eta} i^{\mu} i^{\eta}, \quad (10).$$

где $g^{\mu\eta}$ и $g_{\mu\eta}$ - фундаментальные ковариантные и контравариантные метрические тензоры, подчиняющиеся условию $g_{\mu\eta} g^{\mu\eta} = \delta^{\eta}_{\mu}$. Член, находящийся в правой части уравнения (6), получен в результате замены линейных сопротивлений составными соотношениями для каждой ветви полученного дерева:

$$\sum V_t i_t = \sum R_t i_t^2 = \sum (\sqrt{R_t} i_t)^2 = \sum \xi^2 \quad (11).$$

Исходная метрика (9), имеющая перекрестные члены R_{jk} , теперь преобразована в пифагорову форму в правой части уравнения, являющейся суммой квадратов. Если длина определена как норма вектора, то ясно, что на многообразии звеньях, где координаты неортогональны, в общем случае изменение энергии в сети задается уравнением сем. Тогда, как сети сопротивления определяют ортогональные направления в «пифагорово смысле», где изменение энергии может быть вычислено с помощью сумм квадратов локальных величин (10). Это эквивалентно вложению n -мерного многообразия в ортогональное пространство большей размерности. Поскольку минимальное число необходимых сопротивлений равно $d_{\min} = n(n+1)/2$, минимальная размерность ортогонального пространства равна этому числу. Если мы отождествили каждое из направлений, определенных с помощью сопротивлений, с ортогональной координатой, то каждое из них роль выполняет декартовой координаты, даже если все они не являются независимыми, поскольку связаны правилами Кирхгофа. В таком случае окончательным результатом является геометрической сеть, входы которой представляют собой параметры n -мерного многообразия, тогда как внутренние сопротивления определяют, декартовы направления. Например, Рис. 1., при активации различных отделов коры усиливается их кровоснабжение.

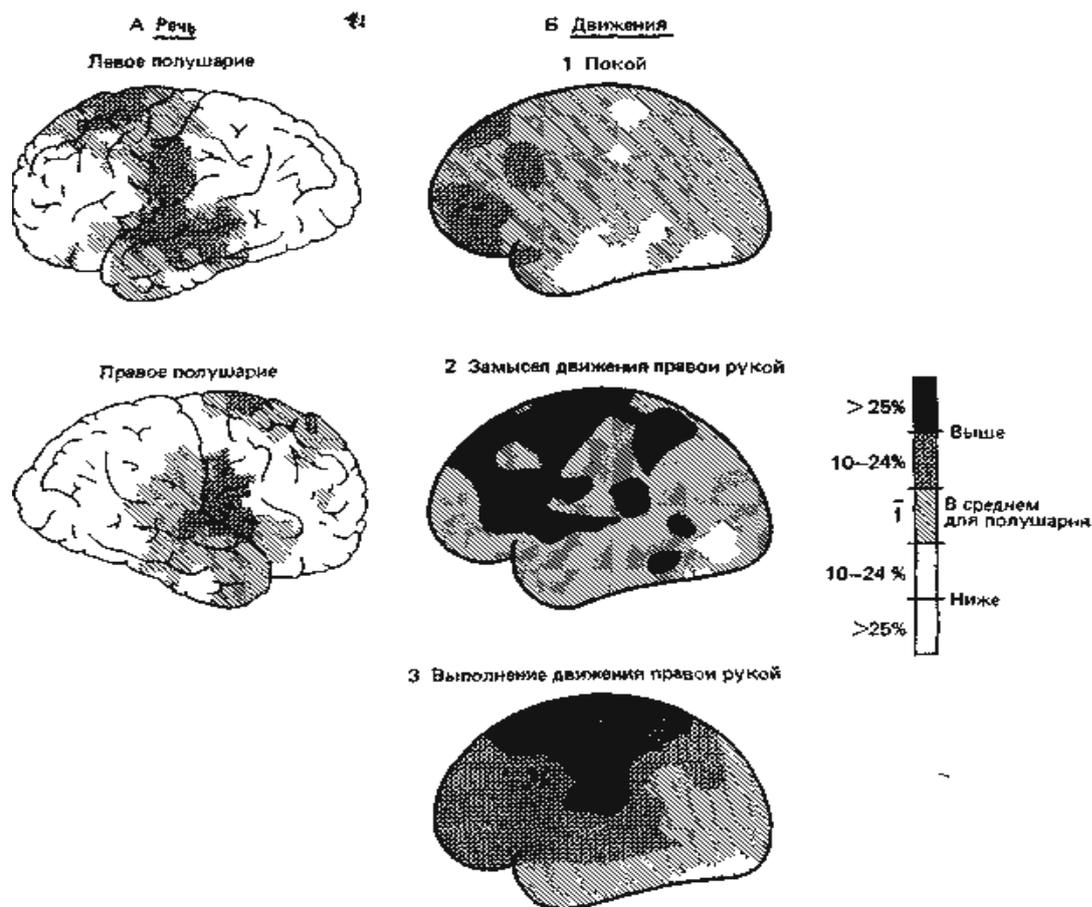


Рис.1.

Введение в кровотоки радиоактивного вещества (ксенон-133) и измерение его концентрации с помощью датчиков, помещенных на поверхность черепа, позволяет оценивать активность различных отделов коры у бодрствующих испытуемых, выполняющих определенные умственные задачи. Компьютерные изображения различий в региональном кровотоке во время различных видов деятельности.

А - области, активные во время устной речи. Размеры квадратиков отражают разрешающую способность батареи датчиков, укрепленных на поверхности головы.

Темные участки-области с высоким кровотоком (т.е. активная зона), серые участки-области с обычным кровотоком, а белые участки-с активностью ниже обычной.

Б - сравнение областей, активных при мысли о двигательном акте и при его выполнении: 1-состояние покоя, 2-испытуемого попросили вообразить, что он ритмично сжимает и разжимает правую руку. При этом появились очаги активности в лобной теменной и височные доли, однако в двигательной зоне, расположенной вдоль центральной борозды активность пока незначительна. Третий при выполнении

движения очаг активности сконцентрировался в области двигательной коры. Все три рисунка построены по данным таких же компьютерных изображений, как и А использовались результаты обследования шести человек [8].

Известно, что в коре мозга нейроны пространственно организованы образуя участки, несущие ответственность за зрение, осязание, слух, чувства боли на любой участок тела, памяти и ответственности движения. Все эти виды активности могут быть обусловлены, распространением электрических сигналов, генерируемых в результате химической и электрической активности клеток мозга. Нейроны генерируют электрический ток и одновременно сообщаются с многими другими клетками. В этом сильно помогает пластичность нейронных сетей, и молекулярные перегруппировки в клетке, так как нейроны находятся в тесном взаимодействии с большим количеством глиальных клеток мозга, которые обеспечивают их структурную поддержку и питание. Нейрон состоит из трех отдельных частей: тела клетки, аксона, и дендритов. В теле клетки происходят все процессы синтеза белка и репарации.

К числу важнейших явлений, которые происходят в белках, относится не только перенос энергии, но и перенос протонов по водородным связям. В работе [6] для изучения этих явлений в биосистемах в

качестве модельных систем рассматривались комплексы $(\text{H}_2\text{O}\dots\text{H}\dots\text{OH}_2)^+$ и $(\text{H}_3\text{N}\dots\text{H}\dots\text{NH}_3)^+$. Барьер переноса протона чувствителен к валентным и деформационным колебаниям водородных связей в указанных системах. Барьер переноса протона возрастает в ряду $\text{OH}\dots\text{N} < \text{NH}\dots\text{N} < \text{OH}\dots\text{O} < \text{NH}\dots\text{O}$. Движения, происходящие в белках, осуществляются с характерными временами,

варьирующими в чрезвычайно широком диапазоне: с одной стороны, к ним принадлежат гармонические тепловые колебания с постоянной времени порядка 1 пс и менее, а с другой, в белках происходят многообразные конформационные перегруппировки, длящиеся секунды. Такой структурной различной группировки молекул остается долго в некоторых местах мозг.

Литература:

1. А. Дж. Мак-Конел. Введение в тензорный анализ., Москва , 1963, С. 411.
2. Tellegen B. D. , Phillips Res. Reports, 1952, v. 7, p. 259.
3. Narary F., I. R. E. Trans. Circuit Theori, 1959, p. 95.
4. Peusner L., J. Theor. Biol., 1983, v. 102, p. 7.
5. Ж. Ж. Бейшекеев. Структурообразования молекул в графах. Известия вузов.- Бишкек 2009. (в печати.).
7. Бейшекеев. Ж. Ж. Теория графов в энергетических задачах. Труды ИВМ и МГ СО РАН, Новосибирск 2008, сер. Инф-ка, Вып. 8, С.175-182.
8. A-Lassen et al, 1978, in Kolb, Whishaw, 1980, Б - Ingvar, Phillipson, in. Yarovsky, Ingvar, 1981