

М.Д. Аптекарь, В.А. Колесников, В.В. Кузнецов

**КРАТКИЙ ОБЗОР НОВЫХ ДОСТИЖЕНИЙ В ОБЛАСТИ  
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ХИМИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ, КАК  
ИНСТРУМЕНТА ЭКОЛОГИЧЕСКОЙ БЕЗОПАСНОСТИ**

Проведен краткий обзор новейших достижений в области вычислительной химии и вычислительного материаловедения. Показано, что в настоящее время имеется возможность моделирования структур с заранее заданными свойствами, благодаря современным достижениям в компьютерной и экспериментальной технике.

**Ключевые слова:** вычислительная химия, вычислительное материаловедение.

**Постановка проблемы.** Для создания различных сплавов, необходимо проводить промышленную разработку полезных ископаемых, что создает значительные экологические проблемы. Так, например, для производства 1 тонны чугуна требуется 1,2-1,5 тонны угля, не менее 1,5 тонны железной руды, свыше 0,5 тонны флюсовых известняков и 30 м<sup>3</sup> воды. Для получения той же тонны алюминия требуется 4-8 т руды, цинка - 20-50 т, меди - 20- 150 т, а редких металлов - до десятков тысяч тонн сырья [1]. Одним из выходов для данной ситуации является разработка новых технологий для создания новых материалов и сплавов с заранее заданным комплексом свойств. Для успешного решения приведенной выше проблемы, необходимо использовать новейшие достижения в области компьютерных наук. Поэтому одним из приоритетных научных направлений, в этой области, являются *вычислительная химия (computational chemistry)* и *вычислительное материаловедение (computational materials science)* [2-4]. Которые объединяют в себе целый комплекс взаимосвязанных направлений: физическое материаловедение, информатику, физику, химию. Вычислительная химия фактически представляет собой новый способ проведения научных исследований в химии — компьютерный эксперимент и компьютерное моделирование. Традиционно экспериментаторы проводят химические эксперименты с реальными химическими системами, а затем теоретики объясняют результаты этих экспериментов в рамках развитых моделей и теорий. Такой подход до последнего времени был успешным, и сегодня мы знаем основные законы, описывающие химические явления и процессы. Однако часто их точное аналитическое описание возможно только в случае очень простых моделей. Приближенные аналитические методы позволяют расширить набор решаемых задач. Развитие компьютеров в течение последних 60 лет дало возможность решать многие проблемы не только в случае упрощенных моделей, но и для реальных химических процессов и структур [2].

**Цель работы** — сделать краткий обзор публикуемого материала, посвященного вычислительной химии и материаловедению, а также численным вычислениями электронных структур молекулярных систем *ab initio*.

**Анализ последних достижений и публикаций.** *Ab initio* (лат. *от начала*) в физике — решение задачи из первых основополагающих принципов без привлечения дополнительных эмпирических предположений. Обычно подразумевается прямое решение уравнений квантовой механики. *Ab initio* — устойчивое сочетание (фразеологизм). Термин фактически именуется одно из направлений современной теоретической физики твёрдого тела. Означает

совокупность физических приближений, процедур вычисления и оптимизации, используемых для расчёта электронных и фононных спектров с целью нахождения термодинамических и кинетических характеристик материала, таких как коэффициент теплового расширения, электрическая проводимость и другие.

Несмотря на название при этом зачастую делаются какие-либо предположения и упрощения. Данные упрощения позволяют рассчитывать системы с большим числом атомов или атомы, имеющее большее число электронов. Примером такого упрощения является использование PAW-потенциалов.

Так, например, для расчёта энергии сублимации атома используется разница энергий атома в кристаллическом состоянии и изолированного атома, помещённого в ячейку большого размера (что аналогично свободному атому). Первыми из серьёзных достижений в этом направлении можно считать концепцию самосогласованного поля и уравнения Хартри и их прямые уточнения, уравнения Хартри-Фока. Эти уравнения с различными вариациями являются основой вычислительных методов в квантовой химии.

Существует два подхода к проблемам химии: вычислительная квантовая химия и невычислительная *квантовая химия*. Вычислительная квантовая химия имеет дело численными вычислениями электронных структур молекулярных систем *ab initio* и полуэмпирическими методами, а невычислительная квантовая химия имеет дело с получением аналитических выражений для свойств молекулярных структур и химических реакций. Журналы по вычислительной химии: Journal of Theoretical and Computational Chemistry <http://www.worldscinet.com/jtcc/jtcc.shtml> и Reviews in Computational Chemistry <http://www.chem.iupui.edu/rcc/rcc.html>. Научные и технические достижения в этой области вычислительного материаловедения освещаются в периодическом журнале «Computational Materials Science» издательства ELSIVIER ([www.elsevier.com](http://www.elsevier.com)).

В последнее время все большее распространение в физике твёрдого тела приобретают методы *ab initio* расчётов, основанные на использовании метода функционала плотности.

Достоинством расчётов из первых принципов является точное описание атомного взаимодействия с учётом квантовых эффектов. Недостатком — невозможность расчёта за разумное время систем с достаточно большим числом атомов (на практике редко более 100).

Если расположить современные методы моделирования, используемые в физике, по возрастанию размеров моделируемых систем и времени моделирования, то картина получится следующей:

1. *Ab initio* методы, не использующие приближений;
2. *Ab initio* методы, использующие приближения;
3. Методы молекулярной динамики, использующие полуэмпирические потенциалы;
4. Метод Монте-Карло;
5. Методы конечных элементов;

Аналогично от 1-5 увеличивается количество упрощений и приближений которые могут влиять на корректность получаемого результата [6].

Краткий перечень компьютерных программ и приложений используемых при моделировании («из первых принципов»): Gaussian, CPMD, NWChem, ABINIT, VASP, WIEN2K, GAMESS (US), PC GAMESS, ORCA, CRYSTAL.

Существуют также коммерческие приложения, требующие членства в виртуальных организациях Gaussian или Turbomole. Перечислим программы и приложения которые касаются рассмотренных выше научных направлений:

HONDO, MOLCAS, MOLPRO, MPQC, NAMD, Priroda, PQS, PSI, Q-Chem, TURBOMOLE, GROMACS, FANTOM, Ascalaph Designer.

Сделаем краткий обзор программ и приложений [4]:

*ABCtraj* – вычисляет свойства атом-диатомных реакций в газовой фазе. События генерируются с использованием алгоритмов Монте-Карло. Результаты расчетов могут быть показаны с помощью среды виртуальной молекулярной реальности на виртуальных мониторах.

*COLUMBUS* – комплекс программ для расчетов *ab initio* молекулярных электронных структур высокого уровня. Программы предназначены в основном для расширенных мульти-реперных расчетов основных электронных состояний и возбужденных состояний атомов и молекул.

*Dalton* – мощная программа квантовой химии для расчетов свойств молекул с помощью волновых функций SCF, MP2 и MCSCF. Предназначена, в основном, для расчетов магнитных и (зависящих от частоты) электрических свойств и поверхностей потенциальной энергии молекулярных систем как в статических, так и в динамических исследованиях.

*Gaussian* – набор программ для расчетов электронных структур, широко используемый исследователями как в устоявшихся, так и в развивающихся областях химии. Основываясь на базовых законах квантовой механики, Gaussian предсказывает свойства молекулярных систем в разнообразных условиях. Это коммерческий продукт, и в силу лицензионных ограничений доступен только через виртуальную организацию Gaussian. Подробная информация относительно членства в ней размещена на сайте <http://egee.grid.cyfronet.pl/Gaussian>.

*MCTDH* – алгоритм общего характера для решения уравнений Шредингера с временной зависимостью в расчетах многомерных динамических систем, состоящих из отдельных частиц. MCTDH может определить квантовое движение ядер молекулярной системы на одной или нескольких связанных поверхностях потенциальной энергии. По своей природе, MCTDH является приближенным методом, однако он может дать такую же точность, как любой другой конкурирующий метод, но его вычислительная эффективность ухудшается с увеличением точности.

*NEWTON-X* – программный пакет общего назначения для молекулярной динамики возбужденных состояний, включающий неадиабатические методы (Tully's surface hopping). Модульная структура пакета позволяет легко использовать его вместе с другими пакетами квантовой химии, которые используют энергетические градиенты и неадиабатические связанные векторы. В текущей версии NEWTON-X рассчитывает динамику, используя пакеты COLUMBUS и TURBOMOLE.

*TURBOMOLE* – программный пакет для *ab initio* расчетов электронных структур. Отличительными особенностями пакета являются: полупрямые алгоритмы с настраиваемыми требованиями по использованию памяти и дискового пространства, полное использование точечных групп, эффективные интегральные вычисления, стабильные и точные решетки для численного интегрирования. Turbomole является коммерческим пакетом, и доступен только через самостоятельную виртуальную организацию.

*Venus* – расчет сечений и коэффициентов скорости элементарных химических реакций с помощью моделирования столкновений атомов и молекул, начальные состояния которых генерируются методом Монте-Карло. От реагентов до продукта реакции для каждого столкновения решаются уравнения Гамильтона, определяющие движение атомов.

*WIEN2k* – программный пакет для расчетов электронных структур в твердом веществе, использующий теорию функционала плотности (DFT). Основан на методе (линеаризованных) присоединенных плоских волн полного потенциала ((L)APW) + локальных орбиталей (lo), что является одной из наиболее точных схем для расчетов зонных структур. В DFT может быть использована локальная аппроксимация (спиновой) плотности (LDA) или улучшенная версия генерализованной аппроксимации градиента (GGA). Пакет *WIEN2k* использует полностью электронную схему, включая релятивистские эффекты и имеет много достоинств. Грид-порт пакета включает прототип последовательности операций для работы в гриде. Пакет разрешено использовать только обладателям действительной лицензии *WIEN2k*.

При решении данных задач широко применяются грид-вычисления. Например, известен грид-интерфейс *CHARON*. *Грид-вычисления* (англ. *grid* — решётка, сеть) — это форма распределённых вычислений, в которой «виртуальный суперкомпьютер» представлен в виде кластеров соединённых с помощью сети, слабосвязанных, гетерогенных компьютеров, работающих вместе для выполнения огромного количества заданий (операций, работ). Грид (Information Power Grid) с точки зрения сетевой организации представляет собой согласованную, открытую и стандартизованную среду, которая обеспечивает гибкое, безопасное, скоординированное разделение вычислительных ресурсов и ресурсов хранения информации, которые являются частью этой среды, в рамках одной виртуальной организации [5].

Например, сегодня NASA не только проектирует и испытывает на компьютерных стендах в ходе вычислительных экспериментов новую технику, но и создает для своих нужд с помощью вычислительной химии новые молекулярные соединения и материалы, программируя их свойства в требуемых диапазонах (рис. 1а) [6].

Как сообщается в статье [7] система, построенная на базе алгоритмов искусственного интеллекта, может стать абсолютным химическим инструментом. Программное обеспечение способно быстро предсказать свойства молекул, исходя из их теоретических структур. Очевидно, что это могло бы содействовать химикам в компьютерном «конструировании» молекул (рис. 1б).

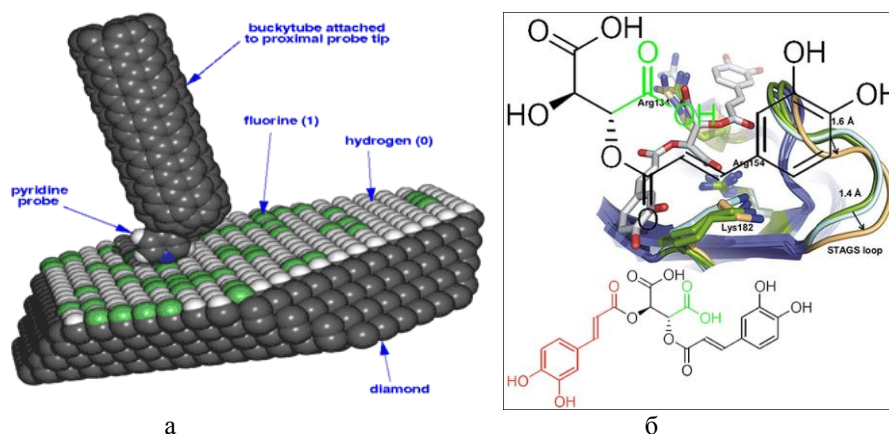


Рис. 1. Высокоточная визуализация молекулярного соединения, полученная на суперкомпьютере [6] – а. Природные ингибиторы протеин-протеинового взаимодействия; моделирование, изучение механизма ингибирования (иллюстрация Thorsten Berg / Bioorganic & Medical Chemistry Letters) [7] - б

Основной преградой для широкого использования компьютерного дизайна в химии является уравнение Шрёдингера. В теории его решение могло бы дать численное распределение значений вероятностей нахождения электронов и атомов, что в свою очередь привело бы к установлению основных химических и физических свойств. К сожалению, сложность решения уравнения возрастает так быстро, что точное решение существует только для самых простых систем — классического атома водорода (один протон, один электрон) и молекулы водорода (два протона, два электрона). Это исключает возможность точного предсказания свойств больших молекул. Учёные из Аргоннской национальной лаборатории (США) обошли уравнение Шрёдингера, обратившись к теории вычислительных машин и систем. Учёные постарались сфокусироваться на самом основном свойстве молекул — энергии атомизации, составив базу данных по 7165 молекулам с известными структурами и энергиями атомизации. Компьютеру позволили использовать только 1000 из них для идентификации структурных особенностей, на основании которых можно было бы предсказать энергии атомизации. Когда затем исследователи протестировали получившийся алгоритм на оставшихся 6165 молекулах, оказалось, что компьютер смог предсказать энергии атомизации с точностью до 1% от уже известного значения [7].

Дальнейшее развитие компьютерных технологий позволяет проводить моделирование микроструктуры на разных уровнях иерархии, учитывать влияние легирующих элементов на прочностные и физико-механические свойства как материала, так и детали и самой конструкции, учитывать влияние различных сред (например, водородсодержащих) [8 - 11].

**Выводы.** Вычислительная химия и материаловедение будут развиваться, параллельно с таким направлением как информационные технологии и т.д. Повысить эффективность расчета свойств новых материалов можно благодаря грид-вычислениям. Использование перечисленных выше возможностей должно существенным образом способствовать повышению экологической безопасности окружающей среды, так как целенаправленное создание материалов с заранее заданными свойствами позволит экономить природные ресурсы.

### Література

1. Энциклопедия [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://russia.clow.ru/text/396.html>.
2. Вычислительная химия [Электронный ресурс]. Википедия электронная энциклопедия. Режим доступа: <http://ru.wikipedia.org/wiki>.
3. Кундас С. П. Вычислительное материаловедение – современное состояние и перспективы развития XLIII Международная конференция «Актуальные проблемы прочности» 27 сентября – 1 октября 2004 г., Витебск, Беларусь. С. 3 – 10.
4. Приложения вычислительной химии [Электронный ресурс]. Enabling Grids for E-science. Режим доступа: [http://press.eu-eggee.org/fileadmin/documents/infosheets\\_eggee3/infosheet\\_compuchem-rus.pdf](http://press.eu-eggee.org/fileadmin/documents/infosheets_eggee3/infosheet_compuchem-rus.pdf).
5. Грид [Электронный ресурс]. Википедия электронная энциклопедия. Режим доступа: <http://ru.wikipedia.org/wiki>.
6. Леваков А. Суперкомпьютерные технологии и проекты в США. Часть 3. [Электронный ресурс]. Публикации Daily.Sec.Ru. Режим доступа: <http://daily.sec.ru/publication.cfm?rid=17&pid=10632&pos=9&stp=25>.

7. Свойства молекул можно будет предсказывать не обращаясь к уравнению Шредингера [Электронный ресурс]. NNN Сайт о нанотехнологиях № 1 в России. Режим доступа: <http://www.nanonewsnet.ru>.
8. Верительник Е.А., Колесников В.А., Колесникова Е.Б. Новые компьютерные программы для расчета прочностных свойств материалов и конструкций. ЧАСТЬ 1. // Вісник Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля // Вид-во СХУ ім. В.Даля, 2010. – № 9(151). – Частина 2. – с.11 - 15.
9. Колесников В.А. Развитие новых компьютерных технологий в Германии // Вісник Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля // Вид-во СХУ ім. В.Даля, 2008. – № 6(124). Частина 2. – С.170-175.
10. Тупельняк О. Л., Колесников В.А., Савченко Е. А., Курылёв В. О. Краткий обзор возможностей компьютерного атомно-кристаллического моделирования материалов // тези доповідей Міжнародна науково-практична конференція "Комп'ютерні науки для інформаційного суспільства", 22-23 грудня 2010 року, м. Луганськ. – С. 78. – 80.
11. Колесніков В.О., Дев'яткін Ю. С., Дев'яткін Д. С. Комп'ютерне моделювання сплавів з урахуванням впливу водню / XXI відкрита науково-технічна конференція молодих науковців і спеціалістів КМН – 2009 // Фізико-механічний інститут ім. Г.В. Карпенка НАН України. – Львів. – 2009. – С. 258 – 261.

**Аптекар М.Д., Колесніков В.О., Кузнецов В.В. Короткий огляд нових досягнень у галузі обчислювальної хімії та матеріалознавства, як інструменту екологічної безпеки.**

Проведено короткий огляд одних з останніх досягнень у галузі обчислювальної хімії та матеріалознавства. Показано, що нині є можливість моделювання структур з наперед заданими властивостями, завдяки сучасним досягненням у комп'ютерній і експериментальній техніці.

**Ключові слова:** обчислювальна хімія, обчислювальне матеріалознавство.

**Aptekar M.D., Kolesnikov V.O., Kuznecov V.V. The brief review of new achievements in computational chemistry and computational materials science as a tool of ecological safety.**

The brief overview of some of the latest advances in computational chemistry and computational materials science. It is shown that at present there is ability to model structures with preset properties, thanks to modern advances in computer and experimental techniques.

**Keywords:** computational chemistry, computational materials science.

Аптекар Михайло Давидович – проф., к.х.н., декан факультету Інженерії та Менеджменту, академік Міжнародної академії наук екологічної безпеки, зав. каф. природничих та фундаментальних дисциплін, м. Краснодон.

Колесніков Валерій Олександрович – зав. кафедри інженерних дисциплін, заступник декана з наукової роботи Краснодонського факультету інженерії та менеджменту Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля, к. т. н, доцент, м. Луганськ.

Кузнецов В'ячеслав Валентинович – ас. кафедри автоматизації та комп'ютерно-інтегрованих технологій, Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля, м. Луганськ.

Поступила в редакцію 12.02.2012

Рецензент: Рамазанов С. К., докт. техн. наук, докт. екон. наук, професор

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ, МОЛОДІ ТА СПОРТУ УКРАЇНИ  
СХІДНОУКРАЇНСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
імені ВОЛОДИМИРА ДАЛЯ**

# **ВІСНИК**

**Східноукраїнського  
національного університету  
імені ВОЛОДИМИРА ДАЛЯ**

**№ 2 (173)  
2012**

**НАУКОВИЙ ЖУРНАЛ**

**Луганськ 2012**

# ВІСНИК

СХІДНОУКРАЇНСЬКОГО  
НАЦІОНАЛЬНОГО УНІВЕРСИТЕТУ  
ІМЕНІ ВОЛОДИМИРА ДАЛЯ

**№ 2 (173) 2012**

НАУКОВИЙ ЖУРНАЛ  
ЗАСНОВАНО У 1996 РОЦІ  
ВИХІД З ДРУКУ - ДВАНАДЦЯТЬ  
РАЗІВ НА РІК

Засновник

Східноукраїнський національний  
університет імені Володимира Даля

# VISNIK

OF THE VOLODYMYR DAHL EAST  
UKRAINIAN NATIONAL UNIVERSITY

**№ 2 (173) 2012**

THE SCIENTIFIC JOURNAL  
WAS FOUNDED IN 1996  
IT IS ISSUED TWELVE TIMES  
A YEAR

Founder

of the Volodymyr Dahl East Ukrainian  
National University

Журнал зареєстровано  
в Міністерстві юстиції України

Свідоцтво про державну реєстрацію  
серія КВ № 15607- 4079ПР  
від 18.08.2009 р.

Registered by the Ministry  
of Yustice of Ukraine

Registration Certificate  
KB № 15607- 4079ПР  
dated 18.08.2009

Журнал включено до Переліків наукових видань ВАК України (Бюл. ВАК №3 2010 р.), (Бюл. ВАК №5 2010 р.), (Бюл. ВАК №3 2010 р.), (Бюл. ВАК №11 2010 р.), (Бюл. ВАК №7 2011 р.) в яких можуть публікуватися результати дисертаційних робіт на здобуття наукових ступенів доктора і кандидата наук з *технічних, економічних, історичних, хімічних та фізико-математичних наук* відповідно.

ISSN 1998-7927

**Головна редакційна колегія:** Голубенко О.Л., член-кор. Національної академії педагогічних наук, докт. техн. наук (головний редактор), Осенін Ю.І., докт. техн. наук (заступник головного редактора), Смирний М.Ф., докт. техн. наук (заступник головного редактора), Арлінський Ю.М., докт. фіз.-мат. наук, Бер Р., докт. техн. наук., професор університету ім. Отто фон Гюріке, Магдебург, Німеччина, Будіков Л.Я., докт. техн. наук., Бузько І.Р., докт. екон. наук, Гадушова З., професор, декан факультету мистецтв університету Філософа Костянтина в Нитрі, Словачія, Галстян Г.А. докт. хім. наук, Голубничий П.І., докт. фіз.-мат. наук, Гончаров В.М., докт. екон. наук, Довжук І.В., докт. іст. наук, Житна І.П., докт. екон. наук, Іджер М., докт. техн. наук., професор Познанського технічного університету, Польща, Красовські Е., професор університету природничих наук в Любліні, редактор наукового видання Текі і MOTROLU, Козаченко Г.В., докт. екон. наук, Кондратов С.О., докт. хім. наук, Кудюков Ю.П., докт. хім. наук, Куліков Ю.А., докт. техн. наук, Лазор Л.І., докт. юр. наук, Литвиненко В.Ф., докт. істор. наук, Максимов В.В., докт. екон. наук, Михайлюк В.П., докт. іст. наук, Нагорний Б.Г., докт. соціол. наук, Носко П.Л., докт. техн. наук, Петров О.С., докт. техн. наук, Рач В.А., докт. техн. наук, Рей Р.І., докт. техн. наук, Суханцева В.К., докт. філос. наук, Тюпало М.Ф., докт. хім. наук, Ульшин В.О., докт. техн. наук, Чапка М., докт. екон. наук, професор, іноземний член-кор. Національної академії педагогічних наук України, Польща, Шевченко Г.П., член-кор. Національної академії педагогічних наук України, докт. пед. наук., Хорошко В.О., докт. техн. наук.

**Відповідальний за випуск:** Рамазанов С.К.

Рекомендовано до друку Вченою радою Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля (Протокол № 8 від 3 квітня 2012 р.)

Матеріали номера друкуються мовою оригіналу.

© Східноукраїнський національний університет імені Володимира Даля, 2012  
© of the Volodymyr Dahl East Ukrainian National University, 2012

## ЗМІСТ

<b>С.К. РАМАЗАНОВ</b> ИНТЕГРАЛЬНАЯ ИННОВАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ УСТОЙЧИВОГО РАЗВИТИЯ МИРОВОГО СООБЩЕСТВА .....	7
<b>А.А. РОСКЛАДКА</b> ОПТИМІЗАЦІЯ ЦІЛЬОВИХ ЗНАЧЕНЬ ПОКАЗНИКІВ ЕФЕКТИВНОСТІ НЕВИРОБНИЧИХ ПРОЦЕСІВ .....	13
<b>О.В. ОСТАПЧУК</b> ОБҐРУНТУВАННЯ НЕОБХІДНОСТІ ВДОСКОНАЛЕННЯ ОРГАНІЗАЦІЙНИХ СТРУКТУР ПІДПРИЄМСТВА .....	19
<b>Н.К. МАКСИШКО, С.С. ЧЕВЕРДА</b> КОМБІНОВАНИЙ МЕТОД ПРОГНОЗУВАННЯ СВІТОВОЇ ЦІНИ НА НАФТУ .....	25
<b>П.Є. ЖИТНИЙ, Г.М. КАРАМИШЕВА</b> МЕХАНІЗМ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ БЕЗПЕКИ МІЖБАНКІВСЬКОГО КРЕДИТУВАННЯ В ПРОЦЕСІ ОЦІНКИ КРЕДИТОСПРОМОЖНОСТІ БАНКІВ-КОНТРАГЕНТІВ .....	32
<b>Є.Є. БІЗЯНОВ</b> РОЗВИТОК ІНФОРМАЦІЙНИХ СИСТЕМ УПРАВЛІННЯ У СУЧАСНИХ ЕКОНОМІЧНИХ УМОВАХ УКРАЇНИ .....	43
<b>А.М. АХМЕТШИН, А.С. СЕФЕРОВА</b> КАЧЕСТВЕННАЯ КЛАССИФИКАЦИЯ НЕЛИНЕЙНОЙ ДИНАМИКИ ФИНАНСОВО– ЭКОНОМИЧЕСКИХ ВРЕМЕННЫХ РЯДОВ МЕТОДОМ РЕКУРРЕНТНОГО АНАЛИЗА.....	48
<b>А.М. ТУРИЛО, О.В. КОРНУХ</b> СТРАТЕГІЯ ФОРМУВАННЯ СИСТЕМИ УПРАВЛІННЯ ІНТЕЛЕКТУАЛЬНИМ КАПІТАЛОМ ПІДПРИЄМСТВА .....	53
<b>В.Л. ИВАНОВ</b> УПРАВЛЕНИЕ РИСКОМ В ОБЕСПЕЧЕНИИ ЭКОНОМИЧЕСКОЙ БЕЗОПАСНОСТИ ПРЕДПРИЯТИЙ .....	62
<b>О.А. ПОГОРЕЛОВ</b> ИССЛЕДОВАНИЕ БЫСТРОДЕЙСТВИЯ ГЕНЕТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА.....	69
<b>О.В. СТРЕЛЮК</b> МОДЕЛЮВАННЯ КРИВОЇ СУКУПНОЇ ПРОПОЗИЦІЇ AS.....	75
<b>О.А. ДМИТРИЄВА, О.М. ГРИГОР'ЄВА</b> ОРГАНІЗАЦІЯ ВИСОКОПРОДУКТИВНИХ ОБЧИСЛЕНЬ В ДИНАМІЧНИХ ЗАДАЧАХ З РОЗРІДЖЕНИМИ МАТРИЦЯМИ.....	85
<b>І.І. ЧАЙКОВСЬКА</b> ЗАСТОСУВАННЯ АПАРАТУ НЕЧІТКОЇ ЛОГІКИ У ФОРМУВАННІ КОМПЛЕКСНОЇ ОЦІНКИ ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОГО КАПІТАЛУ ПІДПРИЄМСТВА .....	90
<b>В.П. ШИШОВ, П.Л. НОСКО, А.А. МУХОВАТЫЙ</b> СИНТЕЗ ИСХОДНОГО КОНТУРА ВЫСОКОНАГРУЖЕННЫХ ЗУБЧАТЫХ КОЛЕС ПО ЗНАЧЕНИЮ УГЛА ЕГО ПРОФИЛЯ.....	106
<b>Н.С. ПЕДЧЕНКО</b> МОТИВАЦІЙНИЙ ПРОФІЛЬ ПРИ СТРАТЕГІЧНОМУ УПРАВЛІННІ ПОТЕНЦІАЛОМ РОЗВИТКУ ПІДПРИЄМСТВ ТА ОРГАНІЗАЦІЙ СПОЖИВЧОЇ КООПЕРАЦІЇ.....	111

<b>С.К. РАМАЗАНОВ, Т.О. ВІТКОВА</b>	
ДЕЯКІ МОДЕЛІ ТА ІННОВАЦІЙНІ ІНСТРУМЕНТИ ЕФЕКТИВНОЇ ДІЯЛЬНОСТІ ЕКОНОМІЧНОГО ОБ'ЄКТУ .....	118
<b>Г.Г. ВОРОНОВА</b>	
ЕКОНОМІЧНА БЕЗПЕКА ЯК СКЛАДОВА СИСТЕМИ РЕГІОНАЛЬНОЇ БЕЗПЕКИ ....	127
<b>А.Е. ВОРОНКОВА, Д.К. ВОРОНКОВ</b>	
СТРАТЕГІЧНІ ЗМІНИ ЯК БАЗИС ІННОВАЦІЙНОГО РОЗВИТКУ ПІДПРИЄМСТВА .	134
<b>В.М. ДАНІЧ, Л.П. ЯКИМОВА</b>	
МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ДИНАМІКИ ФУНКЦІОНУВАННЯ НАКОПИЧУВАЛЬНОЇ СИСТЕМИ ПЕНСІЙНОГО СТРАХУВАННЯ .....	139
<b>Т.В. РЕШЕТНЯК, К.М. КРИКУНЕНКО</b>	
КЛАСИФІКАЦІЯ ФІНАНСОВИХ СИТУАЦІЙ ІЗ ЗАСТОСУВАННЯМ ТЕОРІЇ НЕЧІТКИХ МНОЖИН.....	145
<b>С.С. ФЕДУШКО, М.О. КОТИЛО, Ю.О. СЕРОВ</b>	
МОДЕЛЮВАННЯ СТРУКТУРИ ТА ФУНКЦІОНУВАННЯ СПЕЦІАЛІЗОВАНОЇ ВІРТУАЛЬНОЇ СПІЛЬНОТИ НА ОСНОВІ БЛОГУ (НА ПРИКЛАДІ WEBSTYLETALK.NET).....	150
<b>І.Г. ФИЛИППОВА, В.Г. СУМЦОВ</b>	
КОНЦЕПЦІЯ ОЦІНКИ СОЦІАЛЬНОЇ ВІДПОВІДАЛЬНОСТІ БІЗНЕСУ .....	155
<b>Г.В. УРСУЛЕНКО</b>	
ТЕОРІЯ ЕКСТРЕМАЛЬНИХ ЗНАЧЕНЬ ЯК ІНСТРУМЕНТ МОДЕЛЮВАННЯ РИНКОВИХ РИЗИКІВ .....	163
<b>О.В. УРСУЛЕНКО</b>	
ВИБІР ОПТИМАЛЬНОЇ СТРАТЕГІЇ ТА ЧАСУ КУПІВЛІ-ПРОДАЖУ НА РИНКУ НЕРУХОМОСТІ .....	168
<b>М.В. ВИСОЦЬКИЙ, В.М. ГУЖВА</b>	
ДЕЯКІ АСПЕКТИ МУЛЬТИАГЕНТНОГО МОДЕЛЮВАННЯ СИСТЕМ ЕЛЕКТРОННОГО БІЗНЕСУ (НА ПРИКЛАДІ ІНТЕРНЕТ-АУКЦІОНУ) .....	173
<b>Е.А. МЕЛИХ</b>	
АНАЛІЗ АДАПТИВНОСТІ СТРАТЕГІЙ ЕКОНОМІЧЕСКОГО РОЗВИТКУ ПІДПРИЄМСТВА ПИЩЕВОЇ ПРОМИШЛЕННОСТІ УКРАЇНИ .....	179
<b>Г.В. ГАВРИЛЮК</b>	
КОМПЛЕКСНИЙ ПІДХІД ДО ПРОГНОЗУВАННЯ ТРУДОМІСТКОСТІ РОБІТ ЗА КРЕПЛЕННЯМИ ВИРОБІВ ДЛЯ СТАДІЇ ЕКСПЛУАТАЦІЇ .....	184
<b>А.Ю.ТИЩЕНКО</b>	
КОНЦЕПЦІЯ УПРАВЛІННЯ ІНВЕСТИЦІЙНИМ КАПІТАЛОМ ПІДПРИЄМСТВА.....	189
<b>В.Н. ПИЛИПЕНКО</b>	
ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОДИФИЦИРОВАННОГО БЕТОНА ВИБРО-УДАРНОИМПУЛЬСНОГО УПЛОТНЕНИЯ.....	198
<b>И.М. СЕМЕНЕНКО, Я.И. ХОРУЖИЙ</b>	
УПРАВЛЕНИЕ РИСКАМИ НА ОСНОВЕ ПЛАНИРОВАНИЯ НЕПРЕРЫВНОСТИ БИЗНЕСА .....	206
<b>В.Б. ІГНАТЬЄВА</b>	
УПРАВЛІННЯ СТВОРЕННЯМ МАЛОГО ІННОВАЦІЙНОГО ПІДПРИЄМСТВА .....	212
<b>О.П.СТЕПАНЕНКО</b>	
СИСТЕМИ ПІДТРИМКИ ПРИЙНЯТТЯ РІШЕНЬ В БАНКІВСЬКІЙ СФЕРІ .....	219

<b>К.Л. КРУПСЬКИЙ</b>	
ПРОЦЕДУРА ВИБОРУ ГОЛОВНИХ КОМПОНЕНТ ДЛЯ МОДЕЛІ «НЕЧІТКА ГУСЕНИЦЯ» В ЗАДАЧІ ПРОГНОЗУВАННЯ .....	226
<b>О.А. ПОГОРЕЛОВ</b>	
ЭНТРОПИЯ КАК МЕРА НЕОДНОРОДНОСТИ ОБОГАЩАЕМЫХ МАТЕРИАЛОВ .....	231
<b>Н.М. ЗАЙЦЕВА</b>	
МЕТОДИКА ОЦЕНКИ ЭКОНОМИЧЕСКОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРОЕКТА ВНЕДРЕНИЯ ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ.....	236
<b>О.О. МЕЛЬНИК</b>	
ДОСЛІДЖЕННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ АЛГОРИТМІВ СКЛАДАННЯ РОЗКЛАДІВ ГРУП ДЛЯ ОДНОГО ПРИЛАДУ ІЗ НАЛАГОДЖЕННЯМИ ЗА КРИТЕРІЄМ СУМАРНОГО ВИПЕРЕДЖЕННЯ І ЗАПІЗНЕННЯ.....	241
<b>А.Г. БИСТРОВ</b>	
РОЛЬ ТА ЗНАЧЕННЯ ЕТАПУ ВПРОВАДЖЕННЯ ІННОВАЦІЙ В ПРОЦЕСІ ІННОВАЦІЙНОЇ ДІЯЛЬНОСТІ ПІДПРИЄМСТВА.....	247
<b>В. Р. ХОМ'ЯК</b>	
МОДЕЛЮВАННЯ ІНДЕКСУ ВАЛЮТНОГО ТИСКУ .....	251
<b>Р.В. ВЕРБА, Н.В. ГРИШКО</b>	
СИСТЕМА ПОДДЕРЖКИ ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЙ В УПРАВЛЕНИИ ЛОГИСТИЧЕСКИМИ ПОТОКАМИ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКОГО КОМБИНАТА.....	256
<b>Я.В. ПЕТРЕНКО</b>	
ОПТИМИЗАЦИЯ СРЕДСТВАМИ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ СТРУКТУРЫ БАЛАНСА ПРЕДПРИЯТИЯ ДЛЯ СНИЖЕНИЯ РИСКОВ ЛИКВИДНОСТИ .....	262
<b>Т.М. БЕРІДЗЕ, С.В. ТКАЛІЧЕНКО</b>	
МОНІТОРИНГ ІНВЕСТИЦІЙНОЇ ПРИВАБЛИВОСТІ ПІДПРИЄМСТВА З ВИКОРИСТАННЯМ ТЕОРІЇ НЕЧІТКИХ МНОЖИН.....	267
<b>А.В. ВЕЛІГУРА, М.В. ІВАНОВСЬКА</b>	
ОБГРУНТУВАННЯ НЕОБХІДНОСТІ СТВОРЕННЯ ЕКОЛОГО-ЕКОНОМІЧНОЇ СИСТЕМИ УПРАВЛІННЯ ЛУГАНСЬКОЇ ОБЛАСТІ.....	273
<b>М.Д. АПТЕКАРЬ, В.А. КОЛЕСНИКОВ, В.В. КУЗНЕЦОВ</b>	
КРАТКИЙ ОБЗОР НОВЫХ ДОСТИЖЕНИЙ В ОБЛАСТИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ХИМИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ, КАК ИНСТРУМЕНТА ЭКОЛОГИЧЕСКОЙ БЕЗОПАСНОСТИ.....	279
<b>В.В. ПРОСЯНОК, А.В. НЕЧЕПУРЕНКО</b>	
РАСЧЁТ НА ПРОЧНОСТЬ ГИБКОГО КОЛЕСА ВОЛНОВОЙ ШАРОВОЙ ПЕРЕДАЧИ .....	285
<b>І.В. МАЛКОВ, Г.В. СИРОВИЙ, С.О. КАШКАРОВ</b>	
АНАЛІЗ ВІТРОЕНЕРГЕТИКИ В УКРАЇНІ І ПОДАЛЬШИЙ ЇЇ РОЗВИТОК.....	290
<b>Н.О. РЯЗАНЦЕВА</b>	
ДОСЛІДЖЕННЯ РЕГІОНУ З ТОЧКИ ЗОРУ ПОЛІКОМПОНЕНТНОСТІ.....	295
<b>Л.А. ГАМБАРОВ, Д.В. РАЙКО</b>	
МОДЕЛЮВАННЯ БЮДЖЕТУ ІНФОРМАЦІЙНОЇ ВЗАЄМОДІЇ В СИСТЕМІ «СПОЖИВАЧ – ПІДПРИЄМСТВО – ПАРТНЕР».....	300
<b>А.Г. ХМЕЛЁВ</b>	
ФОРМИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВА ПРИЗНАКОВ ПРОГНОЗИРУЮЩИХ НЕЙРОСЕТЕВЫХ МОДЕЛЕЙ СЛОЖНЫХ ЭКОНОМИЧЕСКИХ СИСТЕМ .....	313

Аптекарь М.Д., Колесников В.А., Кузнецов В.В. Краткий обзор новых достижений в области вычислительной химии и материаловедения, как инструмента экологической безопасности // Вісник Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля № 2 (173) 2012 – с. 279 – 284.

Короткий огляд нових досягнень в області обчислювальної хімії та матеріалознавства, як інструменту екологічної безпеки

A brief review of new developments in the field of computational chemistry and materials science as an environmental safety tool

[https://www.researchgate.net/publication/336587992\\_V\\_I\\_S\\_N\\_I\\_K\\_Shidnoukrainskogo\\_nacionalnogo\\_universitetu\\_imeni\\_VOLODIMIRA\\_DALA\\_No\\_2\\_173\\_2012](https://www.researchgate.net/publication/336587992_V_I_S_N_I_K_Shidnoukrainskogo_nacionalnogo_universitetu_imeni_VOLODIMIRA_DALA_No_2_173_2012)

[https://researchworker.ucoz.ru/load/publikacii/v\\_i\\_s\\_n\\_i\\_k\\_skhidnoukrajinskogo\\_nacionalnogo\\_universitetu\\_imeni\\_volodimira\\_dalja\\_2\\_173\\_2012/3-1-0-267](https://researchworker.ucoz.ru/load/publikacii/v_i_s_n_i_k_skhidnoukrajinskogo_nacionalnogo_universitetu_imeni_volodimira_dalja_2_173_2012/3-1-0-267)

[https://www.researchgate.net/publication/336588104\\_KRATKIJ\\_OBZOR\\_NOVYH\\_DOSTIZENIJ\\_V\\_OBLASTI\\_VYCHISLITELNOJ\\_HIMII\\_I\\_MATERIALovedENIA\\_KAK\\_INSTRUMENTA\\_EKOLOGICESKOJ\\_BEZOPASNOSTI](https://www.researchgate.net/publication/336588104_KRATKIJ_OBZOR_NOVYH_DOSTIZENIJ_V_OBLASTI_VYCHISLITELNOJ_HIMII_I_MATERIALovedENIA_KAK_INSTRUMENTA_EKOLOGICESKOJ_BEZOPASNOSTI)

[https://kolesnikov.ucoz.com/load/aptekar\\_m\\_d\\_kolesnikov\\_v\\_a\\_kuznecov\\_v\\_v\\_kratkij\\_obzor\\_novykh\\_dostizhenij\\_v\\_oblasti\\_vychislitelnoj\\_khimii\\_i\\_materialovedenija\\_kak\\_instrume/1-1-0-150](https://kolesnikov.ucoz.com/load/aptekar_m_d_kolesnikov_v_a_kuznecov_v_v_kratkij_obzor_novykh_dostizhenij_v_oblasti_vychislitelnoj_khimii_i_materialovedenija_kak_instrume/1-1-0-150)

[https://researchworker.ucoz.ru/load/publikacii/aptekar\\_m\\_d\\_kolesnikov\\_v\\_a\\_kuznecov\\_v\\_v\\_kratkij\\_obzor\\_novykh\\_dostizhenij\\_v\\_oblasti\\_vychislitelnoj\\_khimii\\_i\\_materialovedenija\\_kak\\_instrume/3-1-0-268](https://researchworker.ucoz.ru/load/publikacii/aptekar_m_d_kolesnikov_v_a_kuznecov_v_v_kratkij_obzor_novykh_dostizhenij_v_oblasti_vychislitelnoj_khimii_i_materialovedenija_kak_instrume/3-1-0-268)