

Издательский дом «Юр-БАК»

ISSN 2313-223X

COMPUTATIONAL NANOTECHNOLOGY

научный рецензируемый журнал

№ 4, 2015 г.

г. Москва

Журнал «Computational nanotechnology»

(Вычислительные нанотехнологии)

ISSN 2313-223X

Научный рецензируемый журнал «Computational nanotechnology» публикует авторские материалы по следующим базовым специальностям:

01.00.00-Физико-математические науки,
05.00.00 - Технические науки,
08.00.00 - Экономические науки.

Научное цитирование журнала:

Журнал входит в Russian Science Index, все выпуски журнала представлены в открытом доступе в базе научной периодики Российского Индекса Научного Цитирования elibrary.ru, Math-Net.ru, на сайте Издательского дома ЮР-ВАК www.urvak.ru, UlrichsWeb, ИВИС- дистрибьютор американской компании «East View Information Services, Inc» в России и СНГ, Электронных библиотеках: Mybrary, Лань, Ibooks.ru, Cyberleninka.

Концепция журнала:

Журнал посвящен вопросам нанотехнологий, возникающим в различных теоретических и практических научных разработках. Использование математических моделей и вычислительных машин становится частью технологического процесса создания систем на молекулярном уровне. В журнале также рассматриваются многомасштабные вычислительные модели, определяющие успех моделирования наносистем.

Главный редактор, дир. по маркетингу, канд. наук –

Ястребова Елена Владимировна

Верстка Юрасова О.

Дизайн обложки Иванов О.

Адрес редакции:

115419, г. Москва, ул. Донская, д.15

Адрес для корреспонденции:

119607, г. Москва, ул. Раменки, 21-282.

Телефон редакции: 8-495-932-47-09, 8-916-393-18-27

E-Mail: leg_journal@list.ru

http://www.urvak.ru

Издание зарегистрировано в Федеральной службе по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор). Свидетельство о регистрации СМИ:

ПИ №ФС77-58561 от 14.07.2014

Учредитель журнала: «Издательский дом «ЮР-ВАК»

Журнал распространяется **только по подписке**.

Индекс по каталогу агентства «Роспечать»: **70854**
«Computational nanotechnology».

Цена договорная.

Журнал выпускается при участии: факультета Вычислительной математики и кибернетики МГУ им. М.В. Ломоносова, Института материаловедения ХНЦ ДВО РАН.

Подписано к печати 24.12.2015. Формат 60х84 1/8. Печать офсетная. Бумага офсетная №1. Печ. л. 16 Тираж 500 экз. (1 завод 140 экз.)

Периодичность – 4 раза в год.

Отпечатано в типографии ТИРАЖИ.RU г. Москва, тел. (495) 585-08-95

Journal "Computational Nanotechnology"

ISSN 2313-223X

The journal reviews the most important problems dealing with theory, modeling, design and simulations of nanostructured materials and of the fascinating new developments and interdisciplinary nanodevices, quantum computing, computational chemistry, physics and biology, nanomechanics, nanomachines, nanoelectronics, nanoprocesses, nanomagnetism, nano-optics, nanomedicines, nanobiotechnology, etc. This journal provides the survey activities in the whole field presented by scientists working in different subject areas of science, engineering and medicine.

The articles are written by scientists working on master's and doctor's theses.

All articles are reviewed by the members of the editorial board and other top-level academic lawyers.

Председатель редакционной коллегии журнала:

Попов Александр Михайлович – доктор физ.-мат. наук, профессор МГУ им. М.В. Ломоносова, действительный член РАЕН по отделению «Прикладная математика и управление», член Американского Физического общества

Редакционная коллегия журнала:

Андреев Валерий Филиппович – доктор физ.-мат. наук, старший научный сотрудник Института проблем безопасного развития атомной энергетики Российской Академии Наук

Бестугин Александр Роальдович – доктор технических наук, декан Санкт-Петербургского государственного университета аэрокосмического приборостроения, заведующий кафедрой Микро- и нанотехнологий аэрокосмического приборостроения

Днестровский Юрий Николаевич – доктор физ.-мат. наук, профессор, академик РАЕН, ведущий научный сотрудник Национального Исследовательского центра «Курчатовский институт» (Институт ядерного синтеза), лауреат Государственной премии СССР (1981), лауреат Ломоносовской премии МГУ I-ой степени (1976), лауреат Курчатовской премии РНЦ «Курчатовский институт» (2001)

Елизаров Георгий Сергеевич – доктор технических наук, директор ФГУП НИИ «Квант», лауреат Ленинской премии

Заводинский Виктор Григорьевич – доктор физ.-мат. наук, профессор, директор Института материаловедения Хабаровского научного центра Дальневосточного отделения Российской Академии Наук

Крук Евгений Аврамович – доктор технических наук, профессор, лауреат премии правительства Санкт-Петербурга, Заслуженный деятель науки РФ, директор Института информационных систем и защиты информации (СПбГУАП)

Левин Владимир Константинович – действительный член РАН, член Бюро Отделения нанотехнологий и информационных технологий РАН, доктор технических наук, профессор, научный руководитель ФГУП НИИ «Квант», лауреат Ленинской премии и Государственной премии

Никонов Владимир Глебович – доктор технических наук, член президиума РАЕН, народный художник России

Суетин Николай Владиславович – доктор физ.-мат. наук, профессор, директор по науке и исследованиям ИТ кластер Фонд «Сколково»

Чубраева Лидия Игоревна – член-корреспондент РАН, доктор технических наук, декан факультета «Интеллектуальные системы управления и нанотехнологии», зав. кафедрой «Информационные технологии в электромеханике и робототехнике» Санкт-Петербургского государственного университета аэрокосмического приборостроения (ГУАП), директор НИИ инновационных технологий в электромеханике и электроэнергетике ГУАП

Фетисов Владимир Андреевич – доктор технических наук, профессор, директор института аэрокосмических приборов и систем ГУАП, зав. кафедрой системного анализа и логистики ГУАП, научный консультант комитета по транспорту ассоциации Северо-Западных субъектов РФ и Законодательного собрания Санкт-Петербурга, Действительный член Международной академии информатизации, доктор Будапештского технического университета, доктор технических наук АН Венгрии

Шмелев Алексей Борисович – кандидат физ.-мат. наук, с.н.с. МГУ ВМК Исполнительный директор группы компаний РСК (Российские суперкомпьютеры)

Chairman of an editorial board:

Popov Alexander M. – the Doctor of Science in Physics and Mathematics, professor of the Lomonosov Moscow State University, the full member of the Russian Academy of Natural Sciences on department "Applied mathematics and management", the member of the American Physical society

Editorial board:

Andreyev Valery F. – the Doctor of Science in Physics and Mathematics, senior research associate of Institute of problems of safe development of nuclear power of the Russian Academy of Sciences

Bestugin Alexander R. – the Doctor of Science in Engineering, the dean of St. Petersburg State University of Aerospace Instrumentation, to the Head of the department Mikro-and nanotechnologies of space instrument making

Dnestrovsky Yuri N. – the Doctor of Science in Physics and Mathematics, professor, academician of the Russian Academy of Natural Sciences, leading researcher of the National Research center "Kurchatov Institute" (Institute of nuclear synthesis)

Yelizarov Georgy S. – the Doctor of Science in Engineering, the director of Federal State Unitary Enterprise Scientific Research Institute «Kvant»

Zavodinsky Victor G. – the Doctor of Science in Physics and Mathematics, Professor, Director of Materials Science Institute Khabarovsk scientific center of Far East office of the Russian Academy of Sciences

Kruk Evgeny A. – the Doctor of Science in Engineering, professor, the Honored worker of science of the Russian Federation, the director of Institute of information systems and information security (St. Petersburg State University of Aerospace Instrumentation)

Levin Vladimir K. – to the corresponding member of the Russian Academy of Sciences, the Doctor of Science in Engineering, professor, the deputy director of Federal State Unitary Enterprise Scientific Research Institute «Kvant»

Nikonov Vladimir G. – the Doctor of Technical Sciences, member of the Natural Sciences Academy, People's Artist of Russia

Suetin Nikolai V. – the Doctor of Science in Physics and Mathematics, Professor, Director of Science and Research IT cluster Fund "Skolkovo"

Chubrayeva Lidiya I. – the corresponding member of the Russian Academy of Sciences, the Doctor of Science in Engineering, the chief of department "Intellectual control systems and nanotechnologies", the department chair "Information technologies in electromechanics and a robotics" St. Petersburg State University of Aerospace Instrumentation, the director of scientific research institute of innovative technologies in electromechanics and GUAP power industry

Fetisov Vladimir A. – the Doctor of Science in Engineering, professor, the director of St. Petersburg State University of Aerospace Instrumentation GUAP, the department chair of the system analysis and GUAP logistics, the scientific consultant of committee for transport of association of Northwest territorial subjects of the Russian Federation and Legislative assembly of St. Petersburg, the Full member of the International academy of informatization, the doctor of the Budapest technical university, the Doctor of Engineering of Hungarian Academy of Sciences

Shmelyov Alexey B. – the Ph.D in Physics and Mathematics, senior research associate, Moscow State University Executive director RSK group of companies (The Russian supercomputers)

Республика Беларусь

Солодовников Сергей Юрьевич – д-р экономических наук, академик Международной Академии Социальных Технологий (Российская Федерация), профессор Белорусского Государственного Университета, зав. кафедрой Белорусского национального технического университета

Республика Узбекистан

Рахимов Рустам Хакимович – доктор технических наук, Институт Материаловедения Научно-производственное объединение «Физика-Солнце» Академии наук Республики Узбекистан

Республика Казахстан

Нурсултанов Ерлан Даутбекович – доктор физ.-мат. наук, профессор, зав. кафедрой «Математики и информатики» Казахстанского филиала МГУ имени М.В. Ломоносова

Редакционный совет журнала:

Емельянов Владимир Ильич – д-р физ.-мат. наук, профессор, МГУ Физический факультет МГУ им.М.В. Ломоносова

Хакамова Наталия Павловна – научный сотрудник, Центр лазерной технологии и материаловедения (Москва)

Хапаев Михаил Михайлович – д-р физ.-мат. наук, профессор, профессор факультета ВМК МГУ им. М.В. Ломоносова

Republic of Belarus

Solodovnikov Sergey Yuryevich – Doctor of Science in Economy, the academician of the International Academy of Social Technologies (Russian Federation), professor of the Belarusian State University, Head of the department the Belarusian National Technical University

Republic of Uzbekistan

Rakhimov Rustam Kh. – doctor of technical Sciences, head of laboratory №1. Institute of materials science, “Physics-sun”. Uzbekistan Academy of sciences

Republic of Kazakhstan

Nursultanov Erlan Dautbekovich – Doctor of Science in Physics and Mathematics, professor, head of the department "Mathematics and informatics" Kazakhstan branch of Lomonosov Moscow State University

Editorial Council

Emel'yanov Vladimir I. – the Doctor of Science in Physics and Mathematics, professor. Physics Faculty of Moscow State University

Khakamova Natalia P. – research fellow, Center of laser technology and material science (Moscow)

Khapaev Mikhail M. – the Doctor of Science in Physics and Mathematics professor, VMK Dep. Lomonosov Moscow State University, Russia

СОДЕРЖАНИЕ

Computational nanotechnology

декабрь 2015

80 страниц

№4

ISSN 2313-223X

1. Технологии вычислительной обработки

1.1. ОБЗОР ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫХ СРЕДСТВ РАЗРАБОТКИ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ГРАФОВЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ ДЛЯ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫХ КОМПЛЕКСОВ

Фролов А. С., Семенов А. С., канд. техн. наук,
Марков А. С., д-р физ.-мат. наук, профессор 6

1.2. СРАВНЕНИЕ ТЕХНОЛОГИЙ ПАРАЛЛЕЛЬНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ MPI И CHARM++ НА ПРИМЕРЕ ЗАДАЧИ ПОСТРОЕНИЯ МИНИМАЛЬНОГО ОСТОВНОГО ДЕРЕВА В ГРАФЕ

Мазеев А. В., Семенов А. С., канд. техн. наук, Фролов А. С. 18

2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

2.1. ГЕОМЕТРИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ДОКАЗАТЕЛЬСТВУ БИЕКТИВНОСТИ ОДНОГО КООРДИНАТНО-ПороГОВОГО ОТОБРАЖЕНИЯ

Никонов В. Г., д-р техн. наук, Литвиненко В. С. 26

2.2. КОНСТРУКТИВНЫЙ МЕТОД СИНТЕЗА СБАЛАНСИРОВАННЫХ К-ЗНАЧНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ ПОРОГОВЫХ ФУНКЦИЙ

Сошин Д. А. 31

3. Модельно-ориентированное проектирование

3.1. ДВУХСТАДИЙНЫЙ МЕХАНИЗМ ОБРАЗОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ НАНОСТРУКТУР ПРИ ОСАЖДЕНИИ АТОМОВ

Емельянов В. И., д-р физ.-мат. наук, профессор, Тархов А. Е. 37

4. Наноструктурированные материалы

4.1. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ НОВОЙ КОНТАКТНОЙ СТРУКТУРЫ «НАНООБЪЕКТ-ПОЛУПРОВОДНИК»

Имамов Э. З., д-р физ.-мат. наук, профессор, Джалалов Т. А.,
Муминов Р. А., академик АНРУз., Рахимов Р. Х., д-р техн. наук 51

4.2. РАЗРАБОТКА И ИЗГОТОВЛЕНИЕ ДЕЙСТВУЮЩЕГО МАКЕТА ЛАБОРАТОРНОЙ УСТАНОВКИ ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА ИЗНОСОСТОЙКИХ МЕЛЮЩИХ ТЕЛ МАЛЫХ РАЗМЕРОВ ИЗ ВЫСОКОПРОЧНОЙ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОЙ КЕРАМИКИ

Пирожкова Т. С., Макеева М. А. 64

5. Информационные технологии и автоматизированные системы

5.1. ПРИМЕНЕНИЕ БЕСПИЛОТНЫХ ЛЕТАТЕЛЬНЫХ АППАРАТОВ ПРИ ПРОВЕДЕНИИ КУЛЬТУРНО МАССОВЫХ МЕРОПРИЯТИЙ

Вытовтов А. В., Шумилин В. В.,
Калач А. В., д-р хим. наук, профессор 69

5.2. ИМИТАЦИОННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЕЛИЧИНЫ СЪЕМА МЕТАЛЛА ОТ РЕЖИМОВ ГИДРОАБРАЗИВНОЙ ОБРАБОТКИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Иванов В. В., Иванов С. В., Иванов В. В. 74

Требования к материалам, представляемым в журнал «Computational nanotechnology»,
порядок и условия публикации статей 79