

# Управление, вычислительная техника и информатика

Sample of text

Dehmer M., Emmert-Shtreib F., Tsoy Y.R., Varmuza K.:  
Bulletin of the Tomsk Polytechnic University, vol. 316 [5] p. 5-11 (2010)  
New information functional for analyzing chemical graph structures.

УДК 54.022;519.722;519.17

## НОВЫЙ ФУНКЦИОНАЛ ИНФОРМАТИВНОСТИ ДЛЯ АНАЛИЗА СТРУКТУРЫ ХИМИЧЕСКИХ ГРАФОВ<sup>1</sup>

М. Дэмер, Ф. Эммерт-Штрайб\*, Ю.Р. Цой\*\*, К. Вармуза\*\*\*

Институт биоинформатики и исследования процессов трансляции при Университете изучения здоровья,  
медицинской информатики и технологии, г. Халль, Тироль, Австрия  
E-mail: Matthias.Dehmer@umit.at

\*Центр исследования раковых заболеваний и клеточной биологии, Школа медицины,  
стоматологии и биомедицинских наук Королевского университета, г. Белфаст, Сев. Ирландия, Великобритания  
E-mail: v@bio-complexity.com

\*\*Томский политехнический университет, г. Томск, Россия  
E-mail: yurytsoy@gmail.com

\*\*\*Лаборатория хеометрии Институт химии Венского технологического университета, г. Вена, Австрия  
E-mail: kvarmuza@email.tuwien.ac.at

*Предлагается функционал информативности, основанный на степенных ассоциациях графов. Такой подход позволяет получить параметрическую меру энтропии графа, необходимую для оценки информативности структуры графа. Приведен пример, демонстрирующий вычисление предлагаемой меры.*

### Ключевые слова:

*Меры информативности, энтропия, молекулярные графы, топологические дескрипторы, статистическое моделирование сетей, сложные сети, хеометрия.*

### Key words:

*Information Measures; Entropy; Molecular Graphs; Topological Descriptors; Statistical Modeling of Networks; Complex Networks, Chemometrics.*

Статистические и теоретико-информационные методы оценки параметров сетей представляют в настоящее время значительный интерес [1, 2] и находят применение в развитии статистических оценок корреляции, мер информативности, таких как энтропия, условная энтропия и совместная информация для структурного анализа сетей [3–7]. Классические подходы для определения структурной сложности графов химических соединений в большинстве своем основаны на использовании формулы энтропии Шеннона [3] для вывода конечного распределения вероятности, зависящего от выбранного критерия эквивалентности [8–14].

Отметим, что предлагаемые меры энтропии графов могут быть применены не только для графов химических соединений [5, 6], но и для сложных сетей произвольной природы, благодаря полиномиальной сложности вычисления этих мер, что может быть доказано аналогично подходу, описанному в [4].

### 1. Топологические дескрипторы и хеометрия

Развитие и эффективное использование формального представления структур химических соединений представляет собой одну из важнейших

<sup>1</sup> Статья основана на частичном переводе главы монографии: Dehmer M., Emmert-Streib F., Tsoy Y., Varmuza K. Quantifying Structural Complexity of Graphs: Information Measures in Mathematical Chemistry / In: M. Putz (Ed.): Quantum Frontiers of Atoms and Molecules in Physics, Chemistry, and Biology. – Hauppauge, NY: Nova Science Publishers, 2010. – P. 467–485.

Перевод, а также публикация рисунков и иллюстраций выполнены с разрешения издательского дома Nova Science Publishers, Inc. Перевел: Ю.Р. Цой

Министерство образования и науки Российской Федерации  
Томский политехнический университет



ISSN 1684-8519

# ИЗВЕСТИЯ

## ТОМСКОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Том 316, № 5, 2010

Управление,  
вычислительная техника  
и информатика

ИЗДАТЕЛЬСТВО  ТПУ

г. Томск

**ИЗВЕСТИЯ  
ТОМСКОГО  
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО  
УНИВЕРСИТЕТА**

**Редакционный совет:**

Чубик П.С. (председатель)  
Власов В.А. (зам. председателя)  
Гвоздев Н.И.  
Дедюх Р.И.  
Дамам Ж.  
Евтушенко Г.С.  
Ефременков А.Б.  
Клименов В.А.  
Кривобоков В.П.  
Кузнецов Г.В.  
Лопатин В.В.  
Мазуров А.К.  
Онищук Л.Н.  
Погребенков В.М.  
Рубанов В.Г.  
Суржиков А.П.  
Тюрин Ю.И.  
Юшицин К.В.  
Язиков Е.Г.

**Редакционная коллегия:**

Власов В.А. (главный редактор)  
Коробейников А.Ф. (зам. главного редактора)  
Могильницкий С.Б. (ученый секретарь)  
Барышева Г.А.  
Григорьев В.П.  
Заворин А.С.  
Корниенко А.А.  
Кривобоков В.П.  
Лисицын В.М.  
Погребной В.К.  
Потылицын А.П.  
Усов Ю.П.  
Филимонов В.Д.

Журнал зарегистрирован Министерством  
Российской Федерации по делам печати,  
телерадиовещания и средств массовых коммуникаций.  
Свидетельство ПИ № 77-16615 от 24 октября 2003 г.  
Учредитель: Томский политехнический университет

Издается с 1903 г.

© Томский политехнический университет, 2009  
Все права защищены.

**BULLETIN  
OF THE TOMSK  
POLYTECHNIC  
UNIVERSITY**

**Editorial Board:**

P.S. Chubik, Chairman  
V.A. Vlasov, Deputy Chairman  
N.I. Gvozdev  
R.I. Dedukh  
G. Damamme (Франция)  
G.S. Yevtushenko  
A.B. Efremenko  
V.A. Klimenov  
V.P. Krivobokov  
G.V. Kuznetsov  
V.V. Lopatin  
A.K. Mazurov  
L.N. Onishuk  
V.M. Pogrebenkov  
V.G. Rubanov  
A.P. Surzhikov  
Yu.I. Tyurin  
K.V. Yushitsin  
E.G. Yazikov

**Editorial:**

V.A. Vlasov, Editor-in-Chief  
A.F. Korobeinikov, Deputy Editor-in-Chief  
S.B. Mogilnitsky, Science Secretary  
G.A. Barysheva  
V.P. Grigoriev  
A.S. Zavorin  
A.A. Kornienko  
V.P. Krivobokov  
V.M. Lisitzyn  
V.K. Pogrebnoy  
A.P. Potylitzin  
Yu.P. Usov  
V.D. Filimonov

Подписной индекс по каталогу  
Агентства «Роспечать» – 18054

Журнал рассылается в адреса 50-и библиотек РФ,  
США, ФРГ, Великобритании, Франции и 9-и стран  
ближнего зарубежья

Полнотекстовый доступ к электронной версии  
журнала возможен на сайтах ТПУ: [portal.tpu.ru/izvestiya/](http://portal.tpu.ru/izvestiya/);  
ООО «Научная электронная библиотека»:  
[www.elibrary.ru](http://www.elibrary.ru), [www.e-library.ru](http://www.e-library.ru),  
а также поисковой системы [scholar.google.com](http://scholar.google.com)

Импакт-фактор РИНЦ с 14.05.2010 г. 0,121

© Tomsk Polytechnic University, 2009  
All rights reserved.

## СОДЕРЖАНИЕ

<b>УПРАВЛЕНИЕ, ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ТЕХНИКА И ИНФОРМАТИКА</b>	
Новый функционал информативности для анализа структуры химических графов Дэмер М., Эммерт-Штрайб Ф., Цой Ю.Р., Вармуза К.	5
Определение настроек линейных робастных регуляторов, обеспечивающих аperiodические переходные процессы в интервальных системах Гайворонский С.А., Суходоев М.С.	12
Задачи корневого анализа и синтеза систем автоматического управления Ефимов С.В., Замятин С.В., Гайворонский С.А.	16
Параметрическая автонастройка регуляторов многоконтурных систем автоматического регулирования Алексеев А.С., Замятин С.В.	21
Компенсация скрытых стохастических свойств объекта автоматического регулирования Затонский А.В.	26
Подход к сглаживанию и реконструкции формы состояний стохастического объекта на основе модели эталонов Колесникова С.И., Волченко Е.В.	34
Эффективный метод построения псевдослучайных векторов, равномерно распределенных в гиперконусе Рейзлин В.И.	41
Разработка обобщенного масштабно-временного представления сигналов Быков С.Ф., Блынский А.А.	44
Определение и анализ области состояний модели системы реального времени Погребной В.К.	48
Методы распознавания состояний динамических систем Колесникова С.И.	55
Ячеечная модель устройства для решения дифференциальных уравнений в частных производных Хамухин А.А.	63
Реконфигурирование однородной вычислительной структуры с непрограммируемыми ячейками для решения дифференциальных уравнений в частных производных Хамухин А.А.	68
Математическое моделирование OLAP-куба в контексте агрегирования простых и иерархических измерений Кулагин В.П., Матчин В.Т.	72
Семантико-энтропийное регулирование информационного морфизма реализаций xOLAP Миронов А.А., Сигов А.С.	75
Вопросы математического обеспечения компьютерных сетей на основе семантического подхода Войтович А.Ю., Мордвинов В.А.	80
Алгоритмы позиционирования мобильного устройства на основе данных от встроенной фотокамеры Козырева А.В.	83
Алгоритм распараллеливания обработки цифрового видеопотока Кох А.М.	90
Оптимизация системы массового обслуживания с резервным прибором с управлением, зависящим от времени ожидания Самочернова Л.И.	94
Тестирование неисправностей задержек путей в условиях ограничений на выбор пар тестовых наборов Матросова А.Ю., Мельников А.В.	98
Синтез тестов с гарантированной полнотой для временных автоматов Жигулин М.В., Евтушенко Н.В., Дмитриев И.М.	104
Организация и принцип работы многофункциональных схем моделирования Цапко Г.П., Цапко С.Г., Тараканов Д.В.	110
Критерии и средства развития программного обеспечения для моделирования нефтегазовых месторождений Ямпольский В.З., Захарова А.А.	117

## CONTENTS

<b>CONTROL, COMPUTER AND INFORMATION SCIENCE</b>	
New information functional for analyzing chemical graph structures Dehmer M., Emmert-Shtreib F., Tsoy Yu.R., Varmuza K.	5
Determining the adjustments of linear robust controllers providing aperiodic transients in interval systems Gaivoronskiy S.A., Sukhodoev M.S.	12
The problems of root analysis and synthesis of automatic control system Efimov S.V., Zamyatin S.V., Gaivoronskiy S.A.	16
Parametric autotuning of controllers of automatic control multi-loop systems Alekseev A.S., Zamyatin S.V.	21
Balancing latent stochastic properties of automatic control object Zatonskiy A.V.	26
The approach to smoothing and reconstructing the form of stochastic object states on the basis of master pattern Kolesnikova S.I., Volchenko E.V.	34
The efficient method of constructing pseudorandom vectors evenly distributed in hypercone Reizlin V.I.	41
The development of generalized scale-time signal presentation Bykov S.F., Blynskiy A.A.	44
Determining and analyzing the region of real-time system model states Pogrebnoy V.K.	48
The methods of recognizing the dynamic system states Kolesnikova S.I.	55
Mesh model of the device for solving the partial differential equations Khamukhin A.A.	63
Reconfiguration of homogeneous computational structure with nonprogrammable cells for solving partial differential equations Khamukhin A.A.	68
Mathematical simulation of OLAP-cube in the frame of aggregation of simple and hierarchical measurements Kulagin V.P., Matchin V.T.	72
Semantic-entropy control of information morphism of xOLAP implementations Mironov A.A., Sigov A.S.	75
Questions of computer network software on the basis of semantic approach Voitovich A.Yu., Mordvinov V.A.	80
Algorithms for positioning the mobile device on the basis of data received from built-up camera Kozyreva A.V.	83
The paralleling algorithm of processing digital video stream Kokh A.M.	90
Serving system optimization with a backup device with control depending on latent period Samochnernova L.I.	94
Testing path delay fault in conditions of limitations to test pattern pairs selection Matrosova A.Yu., Melnikov A.V.	98
Test generation with guaranteed confidence for time state machines Zhigulin M.V., Evtushenko N.V., Dmitriev I.M.	104
Organization and mode e operation of multifunctional simulation circuits Tsapko G.P., Tsapko S.G., Tarakanov D.V.	110
Criteria and means of developing program software for modeling oil-gas fields Yampolskiy V.Z., Zakharova A.A.	117

<p><b>Алгоритмическое и программное обеспечение для пре- и постпроцессинга при 3D-моделировании месторождений нефти и газа</b> Захарова А.А., Ямпольский В.З.</p> <p><b>Подход к разработке системы поддержки принятия решений на примере нефтегазодобывающего предприятия</b> Загорулко Ю.А., Ануреев И.А., Загорулко Г.Б.</p> <p><b>Формирование функций принадлежности для алгоритма нечеткого управления технологическим процессом каталитического крекинга</b> Шумихин А.Г., Вялых И.А.</p> <p><b>Система автоматического регулирования давления азота в емкости для хранения каталитаторного комплекса с двумя управляющими воздействиями</b> Бурмантов Д.Г., Ефимов С.В., Коновалов В.И., Кочегурова Е.А., Курганов В.В.</p> <p><b>Автоматизация исследования кристаллографического скольжения в ГЦК металлах</b> Петелин А.Е., Колупаева С.Н.</p> <p><b>Система управления многозонной термической установкой для выращивания кристаллов по методу Бриджмена</b> Филиппов М.М., Бабушкин Ю.В., Грибенюков А.И., Гинсар В.Е.</p> <p><b>Адаптивная система регулирования температуры кожухотрубного теплообменника</b> Скороспешкин М.В., Цапко Г.П., Скороспешкин В.Н.</p> <p><b>Технология и средства разработки информационно-моделирующих систем для решения технологических задач в металлургии</b> Спирин Н.А., Лавров В.В., Бурькин А.А., Краснобаев А.В., Быков А.Г.</p> <p><b>Разработка конструктора и интерпретатора алгоритмов внутрилабораторного контроля качества результатов анализа</b> Щелканов С.В., Терещенко А.Г., Григорьев В.П., Вылегжанин О.Н.</p> <p><b>Автоматический выбор метода расчета фигурного раскроя с использованием сравнительного анализа алгоритмов</b> Петунин А.А.</p> <p><b>Визуализация результатов экспериментальных исследований</b> Шаропин К.А., Берестнева О.Г., Шкатова Г.И.</p> <p><b>Организация медицинской информационной системы с использованием электронных клинических документов в стандарте HL7 CDA при поддержке форматов Office Open XML</b> Фам Ван Тап, Пономарев А.А.</p>	<p><b>122</b></p> <p><b>127</b></p> <p><b>132</b></p> <p><b>137</b></p> <p><b>141</b></p> <p><b>146</b></p> <p><b>151</b></p> <p><b>156</b></p> <p><b>162</b></p> <p><b>169</b></p> <p><b>172</b></p> <p><b>177</b></p>	<p><b>Algorithmic and program software for pre- and post processing at 3D-modeling of oil and gas fields</b> Zakharova A.A., Yampolskiy V.Z.</p> <p><b>The approach to the development of decision support system by the example of oil and gas production enterprise</b> Zagorulko Yu.A., Anureev I.A., Zagorulko G.B.</p> <p><b>Forming the membership functions for algorithm of fuzzy controlling the catalytic cracking technological process</b> Shumikhin A.G., Vyalykh I.A.</p> <p><b>The automatic control system of nitrogen pressure in the capacitance for storing catalyst complex with two control actions</b> Burmantov D.G., Efimov S.V., Konovalov V.I., Kochegurova E.A., Kurganov V.V.</p> <p><b>Automation of studying crystallographic slip in FCC metals</b> Petelin A.E., Kolupaeva S.N.</p> <p><b>The control system of multizone thermal installation for growing crystals by Bridgman method</b> Philippov M.M., Babushkin Yu.V., Gribenyukov A.I., Ginsar V.E.</p> <p><b>The adaptive system of controlling temperature of shell-and-tube heat exchanger</b> Skorospeshkin M.V., Tsapko G.P., Skorospeshkin V.N.</p> <p><b>Engineering and means of developing information-modeling systems for solving technological problems in metallurgy</b> Spirin N.A., Lavrov V.V., Burykin A.A., Krasnobaev A.V., Bykov A.G.</p> <p><b>The development of algorithm constructor and interpreter of internal laboratory verification of the analysis results quality</b> Schelkanov S.V., Tereschenko A.G., Grigoriev V.P., Vylegzhanin O.N.</p> <p><b>Automatic selection of computing technique of nesting problem using the comparative analysis of algorithms</b> Petunin A.A.</p> <p><b>Visualization of the experimental investigation results</b> Sharopin K.A., Berestneva O.G., Shkatova G.I.</p> <p><b>Organization of medical information system using electronic clinical documents in standard HL7 CDA at support of Office Open XML formats</b> Fam Van Tap, Ponomarev A.A.</p>
<b>РЕФЕРАТЫ СТАТЕЙ</b>	<b>183</b>	<b>SUMMARIES</b>
<b>СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ</b>	<b>187</b>	<b>INFORMATION ABOUT AUTHOR</b>