

A decorative border composed of a series of colored diamonds (brown, orange, yellow, and green) arranged in a rectangular frame around the central text.

V Студенческая Конференция Академического Университета

Сборник тезисов

*Санкт-Петербург
14 мая 2025*

Торцевой полупроводниковый лазер на основе оптических таммовских состояний

Е.В. Шляга^{1),*}, В. А. Шукин²⁾, В. П. Калоша²⁾, Н. Н. Леденцов²⁾

¹⁾ *Академический университет им. Ж. И. Алфёрова, Санкт-Петербург, Россия*

²⁾ *VI Systems GmbH, Берлин, Германия*

РБО (распределённый брэгговский отражатель) – периодическая структура, отражающая свет определённого диапазона длин волн.

ОТС (оптическое таммовское состояние) – поверхностная оптическая мода, экспоненциально затухающая в однородной среде и затухающая с осцилляциями в периодической среде.

ТМ-поляризация (поперечная магнитная поляризация) – поляризация света, в которой магнитное поле перпендикулярно плоскости падения.

FDFD метод – численный метод конечных разностей в частотной области, применяемый в работе для решения уравнений Максвелла.

Приближение Френеля – приближение, в котором коэффициент отражения электромагнитной волны рассчитывается так же, как на границе двух однородных сред.

Ближнее поле – электромагнитное поле в непосредственной близости от излучателя, на расстояниях, сопоставимых с длиной волны излучения.

Кремниевая фотоника – технология создания оптических интегральных схем на кремниевом микрочипе.

Поверхностные состояния на границе периодической структуры и однородной среды, предсказанные Таммом [1] как поверхностные электронные состояния на границе кристалла, имеют аналоги в оптике. Большинство исследований оптических таммовских состояний (ОТС) относились к периодическим структурам, граничащим с металлом [2, 3] или со сложной композитной средой. Недавнее экспериментальное обнаружение ОТС в неметаллических системах, граничащих с воздухом [4], позволило предсказать [5] возможность реализации торцевого полупроводникового лазера для простой модельной структуры, в которой активная среда расположена поверх распределённого брэгговского отражателя (РБО) вблизи границы с воздухом, а ОТС является оптической модой лазерного излучения. В то же время в [5] не был подробно рассмотрен коэффициент отражения ОТС от лазерной фасетки. Поскольку эффективный показатель преломления ОТС близок к 1, приближение Френеля даёт крайне низкие значения коэффициента отражения, что требовало подробного точного исследования.

В настоящей работе для исследования торцевых полупроводниковых лазеров на основе ОТС коэффициент отражения ОТС от фасетки рассчитан точно методом конечных разностей в частотной области (finite difference frequency domain, FDFD). Установлено, что точный коэффициент отражения сильно отличается от рассчитанного в приближении Френеля. Точные значения коэффициента отражения ТМ-поляризованного ОТС лежат в диапазоне 0.01–0.04, что указывает на то, что сколотая лазерная фасетка обладает антиотражающими свойствами для поверхностной моды. Такие свойства не являются автоматически просветляющими, поскольку, в отличие от обычных торцевых лазеров, малый коэффициент отражения назад в ту же самую оптическую моду не обязательно означает более сильное излучение света вперёд через фасетку, а может означать также потери за счёт отражения назад в другие моды.

Предложена конструкция лазера, в которой ТМ-поляризованное ОТС имеет наилучшие условия для генерации по сравнению с другими возможными модами. Для увеличения коэффициента отражения от задней фасетки предложено использовать дополнительное зеркало в форме металлической полоски на поверхности вблизи задней фасетки. В работе рассмотрены два типа лазерных диодов: (1) с передней сколотой фасеткой, обладающей антиотражающим эффектом, и металлическим зеркалом вблизи задней фасетки и (2) с металлическими зеркалами вблизи обеих фасеток. Рассчитанная пороговая плотность тока лежит в диапазоне 250–500 А/см².

Показано, что для лазера, генерирующего излучение с длиной волны около 1 мкм, глубина проникновения ОТС в воздух находится в диапазоне 0.8–1.3 мкм. Это даёт возможность вывода излучения через ближнее поле во внешний волновод или в оптическое волокно, расположенные вблизи поверхности РБО. Полученные результаты указывают на перспективность использования лазеров на основе ОТС в оптических интегральных схемах, в том числе в кремниевой фотонике.

Список литературы

- [1] И. Е. Тамм, “О возможной связи электронов на поверхности кристалла”, ЖЭТФ **3**, 34–43 (1932).
- [2] A. V. Kavokin, I. A. Shelykh, G. Malpuech, “Lossless interface modes at the boundary between two periodic dielectric structures”, Phys. Rev. B **72** (23), 233102 (2005). DOI: 10.1103/PhysRevB.72.233102.
- [3] M. Kaliteevski, I. Iorsh, S. Brand, R. A. Abram, J. M. Chamberlain, A. V. Kavokin, I. A. Shelykh, “Tamm plasmon-polaritons: Possible electromagnetic states at the interface of a metal and a dielectric Bragg mirror”, Phys. Rev. B, **76** (16), 165415 (2007). DOI: 10.1103/PhysRevB.76.165415.
- [4] V. A. Shchukin, N. N. Ledentsov, V. P. Kalosha, N. Ledentsov Jr., M. Agustin, J. R. Kropp, M. V. Maximov, F. I. Zubov, Yu. M. Shernyakov, A. S. Payusov, N. Yu. Gordeev, M. M. Kulagina, A. E. Zhukov, A. Yu. Egorov, “Virtual cavity in distributed Bragg reflectors”, Opt. Express **26** (19), 25280–25292 (2018). DOI: 10.1364/OE.26.025280.
- [5] V. A. Shchukin, N. N. Ledentsov, A. Yu. Egorov, “Wavelength-stabilized near-field laser”, Opt. Express **27** (22), 32019–32036 (2019). DOI: 10.1364/OE.27.032019.

Использование микрофлюидики для формирования альгинатных микрогелей с клетками для использования в качестве моделей тканей и органов

П.С. Плешаков^{1),*}, Н. А. Филатов²⁾, А. С. Букатин^{1,2)}

¹⁾ *Академический университет им. Ж. И. Алфёрова, Санкт-Петербург, Россия*

²⁾ *Институт Аналитического Приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия*

**email: avekipr@gmail.com*

Ткань — совокупность клеток и межклеточного вещества, объединённых общим происхождением, строением и выполняемыми функциями.

3D клеточная культура — искусственно созданная среда, в которой клетки способны расти или взаимодействовать с окружающей средой во всех трех измерениях.

Нативный — появившийся естественным путем.

Сфероид — плотное скопление клеток сферической формы с активным межклеточным взаимодействием.

Органоид — миниатюрная и упрощенная версия органа, созданная *in vitro* в трех измерениях.

In vitro — технология выполнения экспериментов, когда опыты проводятся «в пробирке» — вне живого организма.

2D клеточная культура — клетки, выращиваемые на плоских твёрдых поверхностях.

Гидрогель — это трехмерная, как правило, желеобразная полимерная сетка, способная впитывать и удерживать воду в объеме, значительно превышающем его собственную массу.

Микрофлюидика — область науки и техники, занимающаяся управлением и манипуляцией жидкостями в микроскопических масштабах с помощью устройств, называемых чипами.

Капельная микрофлюидика — направление микрофлюидики, которое позволяет формировать изолированные капли вещества в непрерывном потоке жидкости и манипулировать с ними.

Эмульгирование — процесс смешивания двух или более несмешивающихся жидкостей, например, масла и воды, где в результате образуется эмульсия — смесь, в которой одна жидкость находится в виде капель в другой.

Янус-подобный — имеющий структуры из двух половин, каждая из которых отличается по какому-либо признаку.

Альгинат натрия — высокомолекулярный углеводный биополимер, получаемый из бурых водорослей.

ST26 EGFP — линия клеток опухоли толстой кишки мышей, генетически модифицирована выделять зелёный флуоресцентный белок, флуоресцирует зелёным.

HepG2 — линия клеток злокачественной опухоли печени человека.

HUVEC — Human umbilical vein endothelial cell, линия клеток полученные из ткани внутренней стенки вен пуповины.

Технологии создания моделей органов и тканей — перспективная область исследований, благодаря которой в будущем станет возможно заменять поврежденные части организма, сделать эффективнее процесс разработки лекарственных средств, а также приблизиться к пониманию работы организма. 3D-клеточные культуры, включая клеточные сфероиды и органоиды, являются прекрасным инструментом в современных биомедицинских исследованиях благодаря их способности более точно имитиро-

вать условия *in vitro* [1]. Эти модели позволяют изучать межклеточные взаимодействия, механизмы заболеваний и ответы на терапевтические агенты с большей степенью сходства с нативными тканями по сравнению с традиционными 2D-культурами [2, 3].

Существует множество подходов к созданию 3D-клеточных культур. Во многих из них частым недостатком является ограничение диффузии питательных веществ и кислорода к клеткам и отсутствие удаления токсичных продуктов обмена веществ. Относительно новой ветвью является создание гидрогелевых микрочастиц (микрогелям), размер которых обычно не превышает 300 мкм [4]. Такие микрогели воспроизводят внеклеточную среду, а скорость диффузии питательных веществ и продуктов обмена веществ достаточна для длительного культивирования клеток.

Среди них одним из наиболее перспективных методов получения микрогелей является использование микрофлюидики для эмульгирования водных растворов предшественников гидрогелей в несмешивающемся масле в генераторе микрофлюидных капель [5]. После генерации раствор гидрогеля сшивается внутри капель вода-в-масле, превращая их в сферические микрочастицы гидрогеля. Главным преимуществом такого подхода является идеальный контроль размера и структуры микрогелей в диапазоне от 30 до 300 мкм с относительно низким распределением по размерам и высокой производительностью. Более того, с помощью микрофлюидики можно комбинировать несколько материалов и производить частицы типа ядро-оболочка и Янус-подобные, помещая в каждой субъединице различные типы клеток для воспроизведения высокоупорядоченной клеточной структуры тканей человека.

В этой работе использованы технологии капельной микрофлюидики для формирования альгинатных микрогелей с живыми клетками, такими как CT26 EGFP, HepG2, HUVEC с последующим их культивированием и анализом жизнеспособности.

Список литературы

[1] *“The Third Dimension Bridges the Gap between Cell Culture and Live Tissue”* by Pampaloni, F.; Reynaud, E. G.; Stelzer, E. H. K.. Nat. Rev. Mol. Cell Biol. 2007, **8** (10), 839–845.

DOI:10.1038/nrm2236.

[2] *“Recent Advances on Cell Culture Platforms for In Vitro Drug Screening and Cell Therapies: From Conventional to Microfluidic Strategies”* by Cardoso, B. D.; Castanheira, E. M. S.; Lanceros-Mendez, S.; Cardoso, V. F.. Adv. Healthcare Mater. 2023, **12** (18), 2202936.

DOI:10.1002/adhm.202202936.

[3] *“Strategies to Capitalize on Cell Spheroid Therapeutic Potential for Tissue Repair and Disease Modeling”* by Griffin, K. H.; Fok, S. W.; Kent Leach, J. npj Regen. Med. 2022, **7** (1), 70.

DOI:10.1038/s41536-022-00266-z.

[4] *“Hydrogel Microparticles for Biomedical Applications”* by Daly, A. C.; Riley, L.; Segura, T.; Burdick, J. A. Nat. Rev. Mater. 2020, **5** (1), 20–43.

DOI:10.1038/s41578-019-0148-6.

[5] *“Microfluidic Generation of Microgels from Synthetic and Natural Polymers”* by Tumarkin, E.; Kumacheva, E.. Chem. Soc. Rev. 2009, **38** (8), 2161–2168.

DOI:10.1039/b809915b.

Синтез и дизайн гибких металл органических каркасов для оптического определения органических соединений

А.И. Курилова,^{1),*} В. А. Харитонов²⁾, А. Д. Деникаев²⁾

¹⁾ *Академический лицей «Физико-техническая школа» им. Ж.И. Алфёрова, Санкт-Петербург, Россия*

²⁾ *Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия*

*email: kurilova_nastasya@bk.ru

МОК – металл-органические конструкции, класс пористых материалов, состоящих из металлических ионов или кластеров, соединённых органическими лигандами.

Сольватохромизм – свойство веществ изменять свой цвет в зависимости от полярности растворителя.

Cu-MOF – класс металлоорганических каркасов на основе ионов меди.

Сорбция – поглощение твёрдым телом либо жидкостью различных веществ из окружающей среды.

Введение. Одной из актуальных задач современной аналитической химии является :нитросоединений, которые могут быть использованы в качестве взрывчатых материалов. Одним из наиболее простых методов детектирования аналитического сигнала является оптический метод. Существующие соединения, используемые для такого определения, обладают рядом проблем: токсичность, низкая устойчивость на воздухе и невозможность регенерации.

Возможным решением данной научной проблемы является использование металл-органических каркасов (МОК), гибридных материалов, которые состоят из органических молекул и ионов металлов. Широко известно, что металл-органические каркасы находят применения в различных областях, таких как оптоэлектроника [1], биосенсинг [2], электрокатализ [3,4], таргетная доставка лекарств [5,6] и хранение и разделение газов [7].

Основная часть. Анализ литературы показал, что МОК на основе ионов меди обладают сольватохромным эффектом. Для разработки оптически прозрачных и крупных кристаллов была проведена оптимизация параметров синтеза Cu-MOK, а именно, природа лиганда, природа соли, соотношение исходных соединений, использование модуляторов, температурного режима и объема реакционной смеси. Был получен ранее не описанный в литературе кристалл $[\text{Cu}_2\text{L}]\text{H}_2\text{O}$, (L-4,4' – (сукцинил-бис(азандиил))добензойная кислота) охарактеризованный физико-химическими методами анализа, такими как сканирующая электронная микроскопия (SEM), энерго-дисперсионная микроскопия (EDX), порошковая рентгеновская дифракция (PXRD), рентгеноструктурный анализ (RSA), КР и ИК-спектроскопия. С помощью методов DFT был рассчитан колебательный спектр получаемого соединения.

Исследование оптических свойств показало, что при сорбции в таких органических растворителях как метанол, ацетонитрил, ДМФ, толуол и ДМСО кристалл меняет окраску, что говорит об изменении локальной структуры его поры.

Вывод. В работе был успешно синтезирован новый Cu-MOK состава $[\text{Cu}_2\text{L}]\text{H}_2\text{O}$ на основе гибкого лиганда, был обнаружен сольватохромизм, с помощью расчётных и экспериментальных методов определена локальную структуру поры при взаимодействии с растворителем, доказана возможность использования соединения в сенсинге. Дальнейшие исследования будут направлены на исследование ряда органических со-

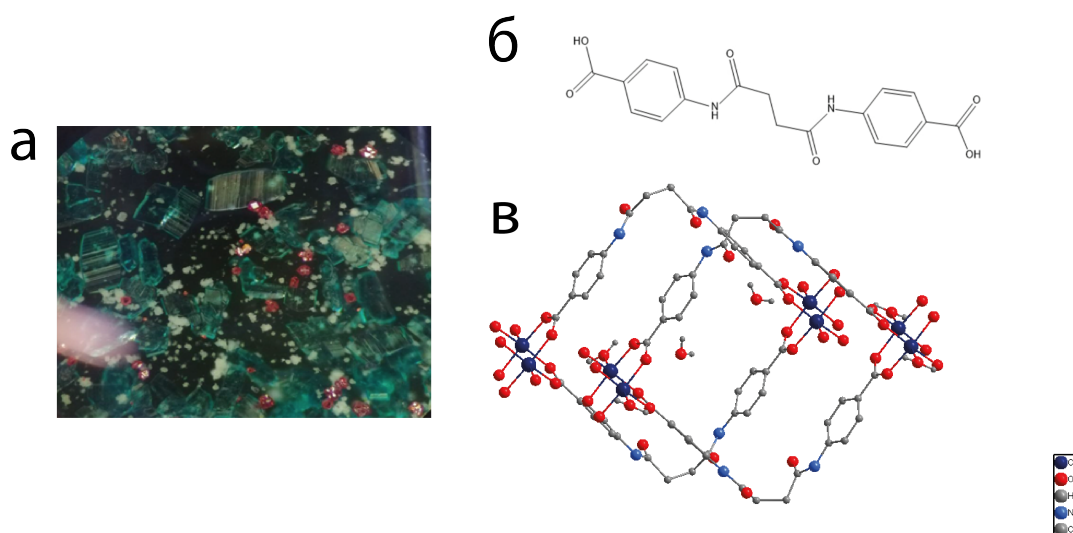


Рис. 1: а) Оптические фотографии кристаллов, б) структурная формула лиганда L, в) структурная формула кристаллов, определённая методом PCA.

единений, которые могут быть определены с помощью получаемых кристаллов, а также на расчетное описание изменения структуры при взаимодействии с конкретными растворителями.

Список литературы

- [1] Stavila V., Talin A.A., Allendorf M. D. *"MOF-based electronic and optoelectronic devices"*, Chemical Society Reviews. – 2014. – Vol. 43,– No. 16. – P. 5994-6010.
- [2] Stassen I., Burtch N., Talin A.A., Falcaro P., Allendorf M., Ameloot R. *"An updated roadmap for the integration of metal–organic frameworks with electronic devices and chemical sensors"*, Chemical Society Reviews. – 2017. – Vol. 46. – P.3185–3241.
- [3] Lee J.Y., Farha O.K., Roberts J., Scheidt K.A., Nguyena S.T., Hupp J.T. *"Metal–organic framework materials as catalysts"*, Chemical Society Reviews. – 2009. – Vol. 38. – P.1450-1459.
- [4] Zheng W., Tsang C., Lee L., Wong K. *"Two-dimensional metal-organic framework and covalent-organic framework: synthesis and their energy-related applications"*, Materials Today Chemistry. – 2019. – Vol .12. – P.34–60.
- [5] An J., Geib S.J, Rosi N.L. *"Cation-Triggered Drug Release from a Porous Zinc-Adeninate Metal-Organic Framework"*, Journal of the American Chemical Society. – 2009. – Vol. 131. – No. 24. – P.8376–8377.
- [6] Wu M.X., Yang Y.W. *"Metal-Organic Framework (MOF)-Based Drug/Cargo Delivery and Cancer Therapy"*, Advanced Materials. – 2017. – Vol. 29. – No. 23. –P.3341-3369.
- [7] Rosi N.L., Ecket J., Eddaoudi M., Vodak D.T., Kim J., O’Keeffe M., Yaghi O.M. *"Microporous metal-organic frameworks"*, Science. – 2003. – No. 300. – P.1127-1129.

Гордиев узел

М. Фофонов^{1),*}

¹⁾ *Академический университет им. Ж. И. Алфёрова, Санкт-Петербург, Россия*

Фолдинг – процесс, в ходе которого полипептидная цепь после синтеза рибосомой переходит из случайно свернутого состояния в компактную трёхмерную конформацию, необходимую для биологической функции белка.

Slipknot-структура — это конформация, в которой лишь внутренняя часть полипептидной цепи образует узел, тогда как при рассмотрении всей цепи или её замыкании концевых фрагментов структура оказывается тривиальной (распутанной).

Лассо-пептид – пептид, в котором часть цепи образует макрокольцо за счёт ковалентной связи между N-терминальным амином и боковой цепью заряженной аминокислоты, а длинный C-конец протягивается сквозь это кольцо и фиксируется.

?-структуры – топологические конфигурации, в которых цепь содержит две петли, соединённые общей дугой через дисульфидные или ионные мостики, образуя «?-кривую» в схеме связей аминокислот.

Алгоритм КМТ (Koniaris–Muthukumar–Taylor) – итеративный метод упрощения полигональной ломаной (C?-скелета белка) за счёт удаления фрагментов, не пересекаемых остальными сегментами.

Преобразования Рейдемейстера – три типа локальных изменений диаграммы узла, при которых фиксируется топологический тип, а любые два эквивалентных узла связываются последовательностью таких превращений.

Косы (braids) – Система из n параллельных ориентированных нитей, пересекающихся под/над друг другом в фиксированном порядке. Замыкание таких нитей даёт классический узел.

L-moves – локальные изменения диаграммы косы, разрезающие одну нить и пропускающие под ней или над ней вторую нить.

Ядро узла – кратчайшая по длине подпоследовательность C α -скелета белка, сохраняющая топологический тип узла. При удалении любого остатка из концов этой подпоследовательности узел исчезает.

Threading pathway – последовательность конформационных изменений белковой цепи, при которой сначала образуется петля, а затем один из концов продвигается сквозь эту петлю, что приводит к формированию узла в процессе сворачивания молекулы.

В последние два десятилетия стало очевидно, что топологическая запутанность белков и пептидов вовсе не редкий курьёз, а важный структурно-функциональный фактор. И действительно, согласно базе KnotProt 2.0 из 374 000 проанализированных структур PDB (Protein Data Bank) около 2 000 демонстрируют нетривиальную топологию, в том числе 770 классических узлов и 1 267 slipknot-структур; кроме того, в PDB представлено свыше двадцати экспериментально решённых лассо-пептидов, а также нескольких десятков ?-кривых, обусловленных дисульфидными и ионными мостиками в полипептидных цепях [1,2]. Механизмы их образования разнообразны: часть белков «протягивает» C-конец через петлю уже во время трансляции, а у лассо-пептидов кольцо формируется посттрансляционно при помощи специфических циклаз, после чего C-концевая часть протягивается сквозь кольцо и фиксируется.

Однако простое осознание наличия узлов и slipknots в белковых структурах недостаточно: важно уметь определять их точный топологический тип, чтобы затем со-

отнести с кинетикой фолдинга, термодинамической стабильностью и эволюционной консервативностью этих молекул. Для анализа топологии открытых полипептидных цепей классический метод замыкания концов и вычисления многочлена Джонса дополняется стохастическим замыканием, при котором концы цепи многократно соединяют с равномерно распределёнными точками на сфере и строят распределение типов узлов вместо единственного результата. Затем строят fingerprint-матрицу, где каждый элемент (i,j) отражает преобладающий узел в подцепи от i до j , что позволяет точно локализовать ядро узла и оценить его «глубину».

Однако замыкание концов и fingerprint-анализ могут искажать реальные конформации открытых цепей, что особенно критично при малых петлях и глубоких узлах. Решение пришло с появлением knotoid — обобщения узловой теории на открытые кривые, допускающего преобразования Рейдемейстера без замыкания концов — и braidoid, расширяющего косы (braids) на открытые цепи через L-moves и дающего аналоги теорем Александера и Маркова [3]. Существующие инструменты автоматически вычисляют доминантный knotoid-тип по статистике проекций цепи и извлекают ядро узла, избегая искажений, связанных с замыканием концов. Кроме того, применяют альтернативные методы на основе баркодов и особых инвариантов, позволяющие проводить анализ запутанности без замыкания цепи, избавляясь от артефактов [4].

Незавершённость вопросов о топологической запутанности белков открывает захватывающие перспективы для биологии и биомедицины: каким образом выбор конкретного threading pathway влияет на скорость и надёжность фолдинга в разных клеточных условиях, какие вспомогательные факторы (шапероны, клеточные маркеры) направляют пост-трансляционное «продевание» петель, и какую эволюционную цену платит организм за сохранение узловых ансамблей? Ведь узлы не только защищают ферменты от агрессивных сред и протеазной деградаци, но могут служить «молекулярными замками», регулирующими доступ к активному центру или удерживающими субстраты в точке катализа. Анализ сложных π -структур и bonded knotoids в вирусных капсидах и внутриклеточных комплексах обещает пролить свет на механизмы сборки макромолекулярных машин. И, наконец, баланс между топологической выгодой (стабильность, функциональная селекция) и энергетическими затратами на threading остаётся одной из ключевых тайн, решение которой позволит нам не только лучше понять жизнь на молекулярном уровне, но и разрабатывать «топологически управляемые» биомолекулы.

Список литературы

- [1] "*KnotProt 2.0: a database of proteins with knots and other entangled structures*", P. Dąbrowski-Tumański, P. Rubach, D. Goundaroulis, J. Dorier, P. Sułkowski, K. C. Millett, E. J. Rawdon, A. Stasiak и J. I. Sułkowska, *Nucleic Acids Research*. Vol. 47, Issue D1, 2019, P. 367–375. doi:10.1093/nar/gky1140
- [2] "*KnotProt: A database of proteins with knots and slipknots*", M. Jamroz, W. Niemyska, E. J. Rawdon, A. Stasiak, K. C. Millett, P. Sułkowski и J. I. Sułkowska, *Nucleic Acids Research*. Vol. 43, Issue D1, 2015, P. 306–314. doi:10.1093/nar/gku1059
- [3] "*Knotoids* ", V. Turaev, *Osaka Journal of Mathematics*. Vol. 49, No. 1, 2012, P. 195–223.
- [4] "*Knoto-ID: a tool to study the entanglement of open protein chains using the concept of knotoids*", J. Dorier, D. Goundaroulis, F. Benedetti и A. Stasiak, *Bioinformatics*. Vol. 34, No. 20, 2018, P. 3402–3406. doi:10.1093/bioinformatics/bty365

Идемпотентная арифметика. «Тропический» подход к алгоритмам. Алгоритм Нидлмана-Вунша, как тропикализация скрытой марковской модели

И. Третьяков^{1),*}

¹⁾ *Академический университет им. Ж. И. Алфёрова, Санкт-Петербург, Россия*

*email: 79814555743@yandex.ru

Идемпотентность операции \oplus : $\forall a : a \oplus a = a$.

Полуполе – множество с двумя введенными операциями \oplus и \odot , со свойствами ассоциативности, коммутативности, существования нейтрального для них, а также идемпотентности для первой, существования обратного для второй. И дистрибутивности второй относительно первой.

Тропическое полукольцо – множество вещественных чисел с элементом "бесконечностью" с операцией сложения (как взятия минимума) и умножения (как сложения) $\{\mathbf{R} \cup \infty, \oplus, \odot\}$.

Матрица весов в ориентированном графе на n вершинах – матрица $n \times n$, где на i -ом j -ом месте располагается вещественное число – вес ребра.

Алгоритм Флойда-Уоршалла – алгоритм для поиска кратчайших путей в графах между всеми его вершинами.

Тропикализация – операция взятия предела от логарифма, реализующая переход от классической арифметики к тропической $\text{tropical} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \log(\text{classical}(\varepsilon))$.

Перманент матрицы $\text{perm}(A) = \sum_{\sigma \in S_n} a_{1,\sigma(1)} \dots a_{n,\sigma(n)}$

Класс $\#P$ -задач – класс задач, решение которых имеет сложность большую чем для NP -полных задач, в числе которых вычисление перманента матрицы в классической арифметике.

Скрытая марковская модель (СММ) – модель процесса, который считается марковским, причем неизвестно текущее состояние процесса, но с определенной вероятностью, может произойти одно из событий, которое можно наблюдать.

$$\Theta = \begin{matrix} & \Theta_{A,A} & \Theta_{A,C} & \Theta_{A,G} & \Theta_{A,T} & \Theta_{A,-} \\ \Theta_{C,A} & \Theta_{C,C} & \Theta_{C,G} & \Theta_{C,T} & \Theta_{C,-} & \Theta'_{H,H} & \Theta'_{H,I} & \Theta'_{H,D} \\ \Theta_{G,A} & \Theta_{G,C} & \Theta_{G,G} & \Theta_{G,T} & \Theta_{G,-} & \Theta'_{I,H} & \Theta'_{I,I} & \Theta'_{I,D} \\ \Theta_{T,A} & \Theta_{T,C} & \Theta_{T,G} & \Theta_{T,T} & \Theta_{T,-} & \Theta'_{D,H} & \Theta'_{D,I} & \Theta'_{D,D} \\ \Theta_{-,A} & \Theta_{-,C} & \Theta_{-,G} & \Theta_{-,T} & & & & \end{matrix} \quad \Theta' = \begin{matrix} & \Theta'_{H,H} & \Theta'_{H,I} & \Theta'_{H,D} \\ \Theta'_{I,H} & \Theta'_{I,I} & \Theta'_{I,D} \\ \Theta'_{D,H} & \Theta'_{D,I} & \Theta'_{D,D} \end{matrix}$$

$\{\mathbf{H}, \mathbf{I}, \mathbf{D}\}$ – гомологии, инсерции и делеции.

$\mathbf{A}_{n,m}$ – множество всевозможных выравниваний двух последовательностей длин n и m .

Классические модели алгебраических структур обычно не строятся с идемпотентными операциями, когда речь заходит об арифметике, однако в конце XX века ученые нашли новый подход, разработав алгебру для идемпотентных полуполей. Тропическая математика, будучи абсолютно новой и непривычной структурой, находит множество приложений в различных сферах современной математики от геометрии многообразий до теории алгоритмов и статистики.

Рассматривая привычные алгоритмы в терминах тропической математики, можно найти полезные закономерности и использовать их. Так, например, знаменитый *алгоритм Флойда-Уоршалла* для поиска отношения связности вершин в ориентированном графе, может быть элегантно представлен в виде простого возведения в степень матрицы весов графа в тропической арифметике.

Классическое определение определителя будет не совсем уместно в терминах тропической математики, в силу отсутствия обратного элемента по сложению, а вследствие невозможности обеспечения слагаемого в сумме знаком. Однако перманент матрицы, являющийся сложным при вычислении в классической арифметике, находит неожиданное приложение в алгоритме поиска наибольшего (наименьшего) паросочетания, а точнее соответствует решению его поиска. А известный венгерский алгоритм для поиска сочетания может являться «тропическим» аналогом метода Гаусса.

Связь классической арифметики и тропической обеспечивает тропикализация вычислений, что, также позволяет легко переходить к тропическому случаю, зная решения в привычных нам обстоятельствах.

Финальная часть посвящена представлению наблюдения, для зрителей, знающих основы теории вероятности, статистики и теории алгоритмов в биоинформатике, а также знакомых с марковскими цепями.

Структуру выравнивания двух последовательностей можно рассматривать как скрытую парную марковскую модель $f : R^{33} \rightarrow R^{4^{n+m}}$. Где область определения соответствует множеству вероятностей переходов ($24+9$ – две матрицы Θ и Θ' , характеризующие модель), а область прибытия является множеством всевозможных состояний (генетических последовательности на 4 буквах $\{A, T, G, C\}$ длины n и m).

Пусть есть σ_1, σ_2 – две последовательности, тогда $f_{\sigma_1, \sigma_2} : \sum_{h \in A_{nm}} \prod_{i=1}^{|h|} \Theta_{\mu_i^1 \mu_i^2} \cdot \prod_{i=2}^{|h|} \Theta'_{h_{i-1} h_i}$, (где h – *выравнивание*, т.е. пара двух последовательностей быть может с «гэпами»)-координатная функция для двух заданных последовательностей, которая показывает вероятность появления пары (σ_1, σ_2) с вероятностями переходов Θ и Θ' .

Теорема. Задача поиска выравнивания эквивалентна вычислению тропикализации заданного координатного полинома f_{σ_1, σ_2} .

$$\text{trop}(f_{\sigma_1, \sigma_2}) : \bigoplus_{h \in A_{nm}} \bigodot_{i=1}^{|h|} W_{\mu_i^1 \mu_i^2} \cdot \bigodot_{i=2}^{|h|} W'_{h_{i-1} h_i}$$

Где $W = -\log \Theta$ – соответствующие, веса для выравнивания, полученные взятием логарифма от Θ .

В свою очередь, алгоритм Нидлмана-Вунша, может быть легко представлен разбиением полученного тропического полинома на три случая (гомологий, инсерций и делеций) с последующим применением рекурсии.

Список литературы

- [1] *Introduction to Tropical Geometry*. Joswig, M. Diane Maclagan, Bernd Sturmfels/Jahresber. Dtsch. Math. Ver. 118, 233–237 (2016). <https://doi.org/10.1365/s13291-016-0133-6>
- [2] *Algebraic Statistics for Computational Biology*. L. Pachter, B. Sturmfels. ISBN:978-0-542-82409-8
- [3] *Дискретная математика для программистов* [Презентация]: учебник для вузов, Ф. А. Новиков.- Санкт-Петербург: 2024.–URL <https://yadi.sk/i/g6JvWFBBmfvr0g>

