

место в структуре детской плановой хирургии. Согласно современным представлениям, структура пахового канала определяется уровнем дифференцировки тканей мезенхимального происхождения, что играет важную роль в патогенезе крипторхизма. Одной из причин таких мезенхимальных нарушения является недифференцированная дисплазия соединительной ткани.

Целью нашей работы явилось морфофункциональное и гистохимическое исследование тканей пахового канала у детей с односторонним крипторхизмом в структуре недифференцированной дисплазии соединительной ткани.

Интраоперационно выполнялась биопсия тканей пахового канала с дальнейшим анализом соединительнотканной патологии.

При анализе клеточной популяции соединительной ткани пахового канала, у 94% детей степень зрелости фибробластического ряда характеризовалось преобладанием юных фибробластов, что указывало на явный фибробластический дисбаланс. В 87,5% случаев в биопсийном материале преобладали тучные клетки над остальными клеточными элементами, с накоплением гликозаминогликанов (ГАГ). При гистохимическом исследовании межклеточного матрикса отмечались дезорганизация и лизис коллагеновых волокон, изменение состава и пространственной структуры, которые имели неравномерную толщину, часто были истончены и располагались пучками неравномерной формы. Обнаружена деструкция и в ряде случаев утолщение, огрубление эластических волокон. Наличие микрофибрилл. Аргирофильные волокна были вихреобразно закручены, наблюдались участки их разрежения. Отмечалось увеличение метакроматических гранул с накоплением ГАГ. О нарушении микроциркуляционного русла свидетельствовало наличие подэндотелиального отека, кровоизлияний, полнокровие сосудов.

Обнаруженные в ходе исследования соединительно-тканые нарушения, позволяют рассматривать односторонний крипторхизм как проявление общей патологии пластических процессов в организме ребенка.

ДИФФЕРЕНЦИРОВАННЫЙ МЕТОДИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ОЦЕНКЕ РИСКА ЙОДНОГО ДЕФИЦИТА

Бурлуцкая О.И., Конюхов А.В.

*Оренбургский государственный университет,
Оренбург*

Для оценки риска йодных заболеваний на уровне производителя йодированной соли требуется дифференцированный методический подход, отличающийся от других этапов госсанэпиднадзора.

При этом исходя из изложенных особенностей независимо от объема партии и временных промежутков, в течении которых они были произведены, должна быть принята единая математическая модель анализа партии риска, включающая в себя три методических приема:

1. Формулу математического описания партии с позиций риска:

$$П = П_с + П_p + П_{пр} + П_r$$

Условные обозначения:

П - партия йодированной соли;

П_с - партия абсолютного риска, то есть с полным отсутствием йода;

П_p - партия реализованного риска, то есть партия соли с заниженным содержанием йода, отгруженная потребителю;

П_{пр} - партия предотвращенного риска, то есть партия соли с заниженным содержанием йода, отгрузка которой была предотвращена и, таким образом в связи с направлением на повторную переработку риск следует считать нереализованным;

П_r - партия с избыточным содержанием йода.

2. Уравнение соотношения партий предотвращенного и реализованного риска:

$$П_{пр} = П - П_a - П_p - П_r$$

при этом следует учитывать, что П_a, П_p, П_r исходя из требований санитарного законодательства, следует относить к неприемлемым (недопустимым) рискам здоровью. В этом случае, очевидно, что описание партии в идеальном случае будет сведено к следующему уравнению.

3. Балансовое уравнение партии с позиций йод-дефицитных заболеваний

$$П (=) \rightarrow П_{пр}$$

в противном случае возможен расчет структуры партии риска в % соответственно долевого весу в общем объеме. При расчетах используется методика средневзвешенной с учетом количества соответствующих лабораторных исследований.

ЗАДАЧИ И МЕТОДЫ СИСТЕМЫ ПОДДЕРЖКИ ПРИНЯТИЯ УПРАВЛЕНЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ В СФЕРЕ СОЦИАЛЬНОЙ ЗАЩИТЫ РЕГИОНА

Вдовичев Н.М., Зайнуллина Э.Ш.

*Казанский государственный
технический университет им. А.Н.Туполева,
Казань*

В деятельности подразделений системы социальной защиты (СЗ) можно выделить следующие направления:

1. Технологическая деятельность, определяемая нормативными документами, методическими указаниями и должностными инструкциями по выполнению процессов социальной защиты.

2. Аналитическая деятельность с целью принятия организационных решений на основании накопленной информации.

Используемые в настоящее время информационные системы направлены в основном на обеспечение технологических процессов социальной защиты и поддержание в актуальном состоянии детальной информации с персонализированной информацией. В этих системах автоматизированы такие трудоемкие операции как: ввод анкетных данных, учет оказанных социальных услуг, расчет пособий и льгот, формирование справок, платежной документации. Принятие

управленческих решений основывается на статистической отчетности, получаемой так же из этих систем.

В настоящее время на территории республики Татарстан в 52 управлениях СЗ городов и районов, а также министерстве внедрена автоматизированная система организационного управления «Социальная защита», основой которой является распределенный банк данных социальной защиты региона. Объем данных, накопленный в процессе эксплуатации системы, составляет порядка 40 Гбайт.

Актуальной является задача оснащения органов управления социальной защиты регионального и муниципального уровней системами поддержки принятия решений (СППР). Назначение СППР: изучение больших объемов взаимосвязанных данных при помощи оперативного интерактивного отображения информации на разных уровнях детализации с различных точек зрения для принятия управленческих решений. Современные СППР базируются на принципах многомерного анализа данных (OLAP) и использовании технологий хранилищ данных (Data Warehouse), оперируют агрегированной и хранимой во времени информацией.

В соответствии с функциональным назначением в СППР должны быть включены следующие подсистемы: загрузки данных, администрирования, обработки запросов и представления данных. Подсистема загрузки данных предназначена для преобразования данных к единому формату, агрегирования, преобразования и загрузки данных в хранилище. Подсистема администрирования предназначена для поддержки архитектуры хранилища, защиты и восстановления данных, разграничение доступа, администрирования метаданных. Подсистема представления и обработки данных является основным инструментом аналитика и должна включать регламентированную отчетность с предопределенными запросами, средства выполнения нерегламентированных запросов, извлечения закономерностей и новых знаний. В процессе работы с СППР специалист должен оперировать с данными в терминах предметной области.

Перед социальной защитой в настоящее время стоит широкий спектр задач, связанных как непосредственно с социальным обслуживанием населения, так и с хозяйственной деятельностью учреждений. Для выработки управляющих воздействий, направленных на эффективное решение этих задач, специалистам и руководителям необходимо:

1. Оценивать текущую социальную обстановку, уметь выделять основные проблемы и задачи.
2. Оценивать тенденции развития социальной обстановки, чтобы к моменту внедрения принятых решений они не потеряли свою актуальность.
3. Оценивать эффективность ранее внедренных решений и методов.
4. Прогнозировать состояние показателей, связанных с тем или иным решением.
5. Распределять финансовые, организационные и технические ресурсы в условиях их ограниченности.

В связи с выше перечисленными задачами в состав подсистемы обработки запросов и представления данных СППР должны быть включены следующие группы задач:

1. Статистический анализ.
2. Выявление тенденций и прогнозирование.
3. Планирование.

Решение задач статистического анализа должно быть направлено на количественную оценку социальной структуры населения районов и региона в целом, эффективности работы территориальных органов социальной защиты и министерства. В эту группу должны быть включены следующие задачи: построение распределений численности отдельных категорий населения, показателей уровня жизни пенсионеров, обеспечение гарантируемого государством дохода для отдельных категорий и др. Задачи группы статистического анализа должны базироваться на методах статистики, теории статистических решений и кластерного анализа.

Решение задач выявления тенденций и прогнозирования позволяют оценивать параметры социальной обстановки во времени, а именно: изменение распределения численности населения по возрастным группам, демографической нагрузки, обеспеченности прожиточного минимума, размера средней пенсии и др. При этом используются методы построения и анализа динамических рядов, модели трендов для определения основных тенденций, методы прогнозирования на основе моделей трендов и временных рядов.

Этап планирования является основой реализации решений, а также формирования программ адресной социальной защиты и постановлений правительства. Решение задач планирования позволит определить размер необходимых ресурсов для реализации управленческих решений, а также распределить ресурсы среди объектов социальной защиты. Одни из наиболее часто встречающихся задач следующие: открытие и закрытие учреждений социального обслуживания, репрофилирование уже существующих учреждений, распределение обслуживаемых населенных пунктов между учреждениями, распределение средств на капитальный ремонт между учреждениями, планирование бюджетных средств. Задачи группы планирования должны базироваться на методах оптимизации. Анализ задач планирования показывает, что значительная часть задач оптимизации имеет комбинаторный характер, решение которых требует определенных усилий и времени. Поскольку структура СЗ региона имеет иерархическую структуру, а количество выполняемых ею функций велико, можно предположить, что размерность задач оптимизации будет значительной, а поиск решения - трудоемким. Поэтому в составе аналитической системы должны быть предусмотрены методы, которые не только находят решение задачи, но и делают это за приемлемое время.

В ряде случаев эффективную альтернативу традиционным методам решения задач кластеризации, прогнозирования и оптимизации могут составить методы, основанные на аппарате нейронных сетей. В частности, для поиска решения задач комбинаторной оптимизации используется нейронные сети Хопфилда.

В настоящее время определены структура и состав хранилища данных СППР. Разработаны математическое и алгоритмическое обеспечение перечис-

ленных выше задач планирования, включенных в подсистему обработки и представления данных.

СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ И СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВ: МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Виноградова М.Г., Артемьев А.А., Папулов Ю.Г.
*Тверской институт экологии и права, Тверь,
Клинский институт экономики и права, Клин,
Тверской государственный университет, Тверь*

Разработка теории и методов расчета свойств веществ, исходя из сведений о строении молекул, составляет фундаментальную научную задачу химии [1].

Наличие надежных расчетных методов позволяет предсказывать характеристики вещества (прежде, чем оно синтезировано, а свойство измерено) и тем самым выбрать из многих (еще не изученных и даже не полученных) соединений те, которые (согласно прогнозу) удовлетворяют поставленным требованиям. Это закладывает научные основы создания новых веществ и материалов с заранее заданными свойствами.

В принципе все физико-химические свойства можно вывести из фундаментальных положений квантовой механики и физической статистики. Однако полные неэмпирические расчеты (*ab initio*) весьма трудоемки и дорогостоящи. Различные же упрощения (на полуэмпирическом уровне) не всегда дают должную количественную информацию (из-за низкой точности). Ясно, что нужны феноменологические методы, которые более просты в обращении и успешно справляются с решениями задач массового расчета и прогнозирования, хотя и требуют для своего использования определенное количество исходных (реперных) данных.

Без таких методов невозможно создание информационно-поисковых систем, полноценных баз и банков данных по свойствам органических соединений (число которых исчисляется миллионами), целенаправленный поиск новых структур, решение задач молекулярного дизайна. Всё это требует дальнейшего развития теории, связывающей свойства веществ со строением молекул, расширения исследований по математической химии (теории графов, комбинаторному анализу) и математическому моделированию.

Основной задачей работы является разработка расчетных методов исследования, явно (или неявно) основывающихся на идее разложения данного свойства вещества (молекулы) по свойствам, приходящимся непосредственно на внутримолекулярные валентные и невалентные взаимодействия атомов (атом-атомное представление).

Выбор этих методов определили следующие обстоятельства. Во-первых, ясные и глубокие исходные предпосылки, дающие возможность строить обоснованные расчётные схемы и тем самым избежать произвола в выборе параметров, не имеющих физического смысла; во-вторых, широта применения, позволяющая охватить такие мало изученные ряды соединений, как замещенные метана и его аналогов - силана, моногермана, станнына и т.д., где многие традици-

онные аддитивные схемы (например, схемы Бенсона или Лайдлера) ограничено применимы и неприменимы вовсе.

За последние десятилетия в теоретической химии широкое распространение получили представления топологии и теории графов. Они полезны при поиске количественных соотношений "структура - свойство" (КССС) и количественных соотношений "структура-активность" (КССА), а также в решении теоретико-графовых и комбинаторно-алгебраических задач, возникающих в ходе сбора, хранения и обработки информации по структуре и свойствам веществ. Поэтому важное значение имеет развитие расчетных методов исследования, получение с помощью них новой (ранее недоступной) информации.

Для решения поставленных задач использовались: методы линейной алгебры, в частности, матричного исчисления, методы комбинаторного анализа и теории перечисления графов, связанные, в свою очередь, с методами теории групп (групп симметрии и групп подстановок), методы статистической обработки численных данных и методы регрессионного анализа. Широко использовался метод наименьших квадратов (МНК), позволяющий находить наилучшие (наиболее вероятные) значения параметров и др.

Нами разработаны эффективные методы расчета физико-химических свойств веществ на основе концепции попарных и более сложных взаимодействий атомов [1, 2]. Специальное внимание обращено на обоснование методов, их алгоритмическую и вычислительную реализуемость, определение параметров схем. Выявлены также взаимоотношения с другими методами, встречающимися в литературе.

Проведены численные расчеты энтальпий образования ($\Delta_f H^\circ_{298}$) X-замещенных этана ($X = \text{CH}_3, \text{Cl}$) и метилсилана ($X = \text{CH}_3$), а также энергий разрыва Э-Э связей в ряде замещенных. Результаты расчетов согласуются с экспериментальными данными. Предсказаны новые значения.

Проведен анализ экспериментальных (и расчетных) данных по энергиям связей в различных классах органических (частично неорганических и элементо-органических) соединений. Проведена систематизация средних энергий связей и энергий разрыва связей в этих соединениях. Выявлены определенные закономерности.

Полученные результаты могут найти применение:

§ в промышленных производствах (по мере технологических запросов), связанных с переработкой углеводородов и их производных, позволят оптимизировать производственные процессы и снизить отходы сырья, повышая экономическую эффективность ряда отраслей и предприятий нефте, газо-химической промышленности.

§ при проведении дальнейших теоретических исследований по данной теме,

§ при подготовке справочных изданий по соответствующим свойствам и др.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 04-03-96703p2004Центр-а)