

явятся виртуальные отсчеты между реальными отсчетами. Однако характерной особенностью дескрипторов Фурье является то, что их амплитуда связана с частотой. Поэтому любые частотные морфизмы в реальном сигнале приводят к амплитудным изменениям спектральных составляющих. Критерием адекватности любых морфизмов в частотной области служит обратное преобразование Фурье и соответствующие различия между прямым и обратным преобразованием Фурье.

Таким образом, на втором этапе необходимо все спектральные составляющие в спектре границе  $i$ -го контура умножить на величину  $N_{\max}/N_i$ , где  $N_{\max} = 500$ ,  $N_i$  – количество отсчетов в границе  $i$ -го контура.

Третий этап – контрольный. Осуществляются обратные преобразования Фурье модифицированных спектров контуров границ сегментов и сравнение их с исходными границами сегментов, на основании чего осуществляется проверка адекватности модели признакового пространства.

*Работа была выполнена в рамках реализации федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы.*

#### Список литературы

1. Анализ гистологических изображений посредством морфологических операторов, синтезированных на основе преобразования Фурье и нейросетевого моделирования / С.А. Филлист, Р.А. Томакова, С.А. Горбатенко и др. // Биотехносфера. – 2010. – №3 (10). – С. 54–60.

### Химические науки

#### МЕТОД МНОГОУРОВНЕВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ОЦЕНКЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ РАСТВОРИТЕЛЕЙ.

##### 1. ЭНЕРГИИ ИОНИЗАЦИИ

Танганов Б.Б.

*Восточно-Сибирский государственный университет технологий и управления, Улан-Удэ, e-mail: tanganov@rambler.ru*

Метод многоуровневого моделирования (ММУМ), разработанный нами ранее [1-4], позволяет математически прогнозировать и моделировать те или иные химические процессы, а также оценивать отсутствующие (дефицитные) характеристики физико-химических, медицинских и биологических систем [5-8].

Было отмечено, что в ММУМ взаимосимости линейные (так как даже если все парные зависимости не имеют прямолинейный характер, но будучи объединены и представлены системой, например, не менее чем из 4 уравнений, функция от 4 параметров уже выражается системой линейных уравнений) определяются следующей исходной зависимостью, решаемой в дальнейшем из  $n$  уравнений [2–3, Приложение III, IV]:

$$Y = a + b_1 X_1 + b_2 X_2 + \dots + b_n X_n \quad (1)$$

Это может быть, например, зависимость аддитивного значения оптических плотностей смеси нескольких светопоглощающих компонентов от концентраций определяемых веществ, молярных коэффициентов поглощения, толщин поглощающих слоев и от длин волн светового потока.

Для определения входящих в уравнение (1) параметров  $a$ ,  $b_1$ , ...  $b_n$  потребуем, чтобы сумма квадратов отклонений фактических аппликат  $y_i$  от аппликат  $Y_i$ , вычисленных по уравнению

ММУМ (1), которую обозначим через  $f$ , было наименьшим:

$$f = S(y_i - Y_i)^2 = \min, (i = 1, 2, \dots, n). \quad (2)$$

Подставим в уравнение (2) значение  $Y$ , полученное из (1), опустив для упрощения индекс  $i$  у переменных  $y$ ,  $X$ .

Отметим важный физический смысл коэффициентов ММУМ в уравнении (1). Например, коэффициент  $b_1$  в формуле (1) отвечает на вопрос, на сколько единиц в среднем изменяется  $Y$ , если  $X_1$  изменяется на одну единицу в предположении, что  $X_2 \dots X_n$  при этом сохраняют постоянное значение.

Таким образом, формулы ММУМ позволяют исключить влияние факторов  $X_2 \dots X_n$  корреляционно связанных с фактором  $X_1$  на  $Y$  в чистом виде.

В связи с интенсивным развитием теории и практики растворов электролитов, методов исследований, вкладом математических методов, разработкой современных способов обработки результатов эксперимента и развитием компьютерных технологий, большую актуальность приобретает проблема оптимизации различных характеристик всевозможных систем. Так, для метода сравнительных расчетов физико-химических свойств веществ парной корреляцией необходимыми параметрами зачастую применяются те или иные свойства сложных растворов или растворителей, которые в большинстве случаев плохо изучены и отличаются значительным разбросом, а то и вовсе отсутствуют, что затрудняет их выбор для различных оценочных операций.

В последнее время нами предпринимаются попытки создания единой надежной обобщающей закономерности, связывающей изменения различных свойств сложных соединений в одном растворителе, не говоря об обобщенных

количественных соотношениях между основными, базисными, физико-химическими свойствами и различными производными свойствами сложных соединений в разных по своей природе средах.

Вывод множественной взаимосвязи и взаимной обусловленности свойств и их изменений для растворителей, включая и воду, и растворов электролитов возможен при обоснованном выборе базисных параметров, однозначно и с высокой степенью достоверности определяющих величины основных физико-химических свойств изучаемых систем.

Разработаны, многократно апробированы и внедрены в научно-исследовательский и образовательный процессы компьютерные программы на широком базисе (от 4 до 8), позволяющие с высокой вероятностью оценивать и прогнозировать отсутствующие параметры, уточнять неопределенные характеристики различных систем [2, 3, 9, 10].

Приемлемость рассматриваемого метода для уточнения, а также оценки отсутствующих величин энергий ионизации большого числа

растворителей различной природы иллюстрируется данными таблицы, рассчитанными по уравнению (3) с достаточно высоким коэффициентом ММУМ  $K_{\text{ММУМ}} = 0,8543$ :

$$Y_{\text{расч}} = -0,02889 \cdot X_1 + 0,01411 \cdot X_2 - 3,61064 \cdot X_3 + 0,16032 \cdot X_4 - 16,18026 \cdot X_5 + 0,02740 \cdot X_6 + 31,71835, \quad (3)$$

где  $Y_{\text{лит}}$  и  $Y_{\text{расч}}$  – литературные и рассчитанные по уравнению (3) энергии ионизации растворителей, эВ;  $X_1$  – молярная масса растворителя;  $X_2$  – температура кипения, К;  $X_3$  – плотность растворителя, г/см<sup>3</sup>;  $X_4$  – дипольный момент молекулы растворителя, D;  $X_5$  – коэффициент преломления,  $n$ ;  $X_6$  – вязкость растворителя, сП.

Так, ММУМ позволил (может быть, впервые) оценить энергии ионизации таких спиртов и дипольных растворителей, как пентанол, гексанол, N-метилформамид, N,N'-диметилформамид, N-метилацетамид, N,N'-диметилацетамид, гексаметилфосфортриамид, тетраметилсульфон (сульфолан), N-метилпирролидон и пропиленкарбонат.

Величины энергий ионизации растворителей (эВ), рассчитанные ММУМ по уравнению (3)

Растворитель	$X_1$	$X_2$	$X_3$	$X_4$	$X_5$	$X_6$	$Y_{\text{лит}}$	$Y_{\text{расч.}}$ (ур. 3)
01	18,00	373,0	0,9971	1,84	1,3333	1,005	12,610	11,610
02	32,00	338,0	0,7914	1,70	1,3288	0,541	10,850	11,492
03	46,00	351,3	0,7895	1,69	1,3611	1,052	10,250	10,772
04	60,10	370,2	0,7995	1,68	1,3854	1,968	10,150	10,225
05	74,10	390,2	0,8058	1,66	1,3993	2,616	10,040	9,867
06	88,10	411,0	0,8090	1,65	1,4070	3,718	-	9,651
07	102,2	430,5	0,8155	1,64	1,4158	4,314	-	9,368
08	58,00	329,2	0,7920	2,88	1,3588	0,316	9,690	10,312
09	72,10	352,6	0,8054	2,79	1,3789	0,428	9,540	9,850
10	86,20	375,5	0,8089	2,48	1,3902	0,500	9,470	9,522
11	100,1	400,5	0,8304	2,16	1,4360	0,542	9,440	8,605
12	45,00	466,0	1,1290	3,25	1,4453	3,310	10,160	10,143
13	59,00	456,0	1,0110	3,82	1,4319	1,650	-	10,286
14	73,10	425,5	0,9445	3,82	1,4269	0,796	-	9,749
15	59,10	494,2	1,1590	3,60	1,4278 (78°C)	1,320 (105°C)	9,650	10,309
16	73,10	479,0	0,9420	3,71	1,4277	3,385	-	10,550
17	87,10	438,5	0,9366	3,79	1,4351	0,919	-	9,419
18	179,2	508,0	1,0253	5,37	1,4582	3,340	-	7,364
19	78,00	462,0	1,1014	4,30	1,4783	2,000	8,850	8,831
20	120,0	558,0	1,2618	4,69	1,4742	10,13	-	8,744
21	99,10	475,0	1,0327	4,09	1,4706	1,830	-	8,739
22	41,00	353,1	0,7856	3,80	1,3441	0,345	12,390	11,550
23	102,0	514,7	1,0257	4,94	1,4212	2,510	-	10,195

Примечания: 1 – вода, 2 – метанол, 3 – этанол, 4 – пропанол, 5 – бутанол, 6 – пентанол, 7 – гексанол, 8 – ацетон, 9 – метилэтилкетон, 10 – метилпропилкетон, 11 – метилбутилкетон, 12 – формамид, 13 – N-метилформамид, 14 – N,N'-диметилформамид, 15 – ацетамид, 16 – N-метилацетамид, 17 – N,N'-диметилацетамид, 18 – гексаметилфосфортриамид, 19 – диметилсульфоксид, 20 – тетраметилсульфон, 21 – N-метилпирролидон, 22 – ацетонитрил, 23 – пропиленкарбонат.

**Список литературы**

1. Танганов Б.Б. Оценка констант автопротолиза неводных растворителей посредством множественной регрессии // Журнал физической химии. – 1986. – Т. 60, С. 1435–1437; Russian J. Phys.Chem. – 1986. – Vol. 60(6). – P. 856-857.
2. Танганов Б.Б. Математические методы в химии. – Улан-Удэ: Изд. ВСГТУ, 1999. – 104 с.
3. Танганов Б.Б. Взаимодействия в растворах электролитов: моделирование сольватационных процессов, равновесий в растворах полиэлектролитов и математическое прогнозирование: монография. – М.: Изд-во РАЕ, 2009. – 141 с.
4. Танганов Б.Б. Взаимодействия в растворах электролитов: моделирование сольватационных процессов, равновесий в растворах полиэлектролитов и математическое прогнозирование // Международный журнал экспериментального образования. – 2009– №4. – С. 10-11.
5. Танганов Б.Б., Балданов М.М., Мохосоев М.В. Множественные регрессии физико-химических характеристик неводных растворителей на расширенном базисе параметров // Журнал физической химии. – 1992. – Т. 66, №6. – С. 1476–1480; Russian J. Phys. Chem. – 1992. – Vol. 66(6). – P. 786-789.
6. Танганов Б.Б., Балданов М.М., Гребенщикова М.А., Балданова Д.М. Метод множественной регрессии в оценке

энергий кристаллических решеток солей // Доклады СО АН ВШ. – 2003. – Вып. 2. – С. 18-25.

7. Цыренжапов А.В., Николаев С.М., Танганов Б.Б. Моделирование нарушения поверхностно-активных свойств желчи // Вестник КазНУ им. Аль-Фараби / Вычислительные технологии. – Том 9. Серия математика, механика, информатика. – №3(42). – С. 238-243.

8. Жапова О.И., Анцупова Т.П., Танганов Б.Б. Математическое прогнозирование содержания флавоноидов и некоторых макро- и микроэлементов в красодневе малом, произрастающем на территории Восточного и Западного Забайкалья // Актуальные проблемы современной науки: труды II-го Междунар. Форума. – Часть 29. Биологические науки. – Самара, 2006. – С. 67-71.

9. Танганов Б.Б. Основы химии индивидуальных частиц и электролитов. – Улан-Удэ: Изд-во Бурятского государственного университета, 2005. – 223 с.

10. Танганов Б.Б., Крупеникова В.Е., Раднаева В.Д. Программа расчета математической модели по восьми параметрам методом многоуровневого моделирования / Свидетельство ФИСИПТЗ о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2010615116, зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 9 августа 2010 г.

**«Лазеры в науке, технике, медицине»,  
Андорра, 9-16 марта 2012 г.**

**Медицинские науки**

**ЛЕЧЕНИЕ АСЕПТИЧЕСКОГО НЕКРОЗА  
ГОЛОВКИ БЕДРЕННОЙ КОСТИ  
ИНЪЕКЦИЯМИ ПЕРФТОРАНА  
В СОЧЕТАНИИ С ЛАЗЕРОТЕРАПИЕЙ**

<sup>1</sup>Шушарин А.Г., <sup>2</sup>Половинка М.П.,  
<sup>3</sup>Прохоренко В.П., <sup>1</sup>Морозов В.В.

<sup>1</sup>Институт химической биологии и  
фундаментальной медицины СО РАН, Новосибирск;  
<sup>2</sup>Новосибирский институт органической химии  
СО РАН, Новосибирск;  
<sup>3</sup>ФГУ «Новосибирский научно-исследовательский  
институт травматологии и ортопедии»,  
Новосибирск, e-mail: shush8691@yandex.ru

Асептический некроз головки бедренной кости представляет собой тяжелое дегенеративно-дистрофическое поражение тазобедренного сустава, наблюдаемое в наиболее трудоспособном возрасте. Заболевание до настоящего времени остается малоизученным разделом костной патологии. В последние годы интерес к усовершенствованию технологий лечения асептического некроза головки бедренной кости (АНГБК) заметно возрос, что объясняется следящим рядом факторов:

- увеличение частоты заболевания, которое нередко является главной причиной деформирующего коксартроза;
- преимущественное поражение лиц молодого возраста, заболевание манифестирует в некоторых случаях после 20 лет, когда не рекомендуется проведение операции эндопротезирования;
- прогрессирующее течение заболевания с исходом на инвалидность;
- частая двусторонняя локализация патологического процесса (более 40% случаев).

В создавшихся условиях традиционное отношение к консервативному лечению, как малоуспешному, требует разработки новых эффективных технологий, позволяющих улучшить качество жизни пациентов и отсрочить проведение операции эндопротезирования.

Ранее нами было показано, что купирование выраженного болевого синдрома, замедление деструктивных процессов и уменьшение очагов деструкции при АНГБК достигается проведением внутрисуставных инъекций перфторана в тазобедренный сустав (ТБС) прямой навигацией под УЗ-контролем [1, 2]. На настоящий момент нами предприняты попытки разработки комплексных методик, сочетающих внутрисуставные инъекции перфторана с применением сеансов физиотерапии.

**Цель исследования:** улучшение результатов лечения АНГБК у взрослых на ранних стадиях патологического процесса с использованием в качестве ключевой стадии внутрисуставных инъекций эмульсии перфторан прямой навигацией под УЗ-контролем.

**Материалы и методы.** В исследовании участвовали 25 пациентов в возрасте 40–67 лет (средний возраст 50,3 г.; 16 мужчин и 19 женщин; у 22 пациентов билатеральная локализация АНГБК). Диагноз АНГБК верифицирован по рентген-, МРТ и КТ данным. Все пациенты испытывали при обращении в клинику сильные боли в одном или обоих суставах, у 15 пациентов (60%) процесс сопровождался синовитом ТБС. Лечение синовита проводили по авторской методике внутрисуставными инъекциями ксефокама с димексидом под УЗ-контролем [3]. Для нормализации кровообращения в субхондральной ткани и стимуляции процессов регенерации