

Таблица 1. Минимумы на ППЭ диоксана I и его водного кластера (ккал/моль)*

Соединение	<i>Ka</i>	<i>2,5-T</i>	<i>1,4-T</i>
Диоксан-I	0.8	3.4	3.2
Кластер: диоксан-I · 39 H ₂ O	3.0	5.1	5.5

*^o) Относительно формы *Ke*.

Полученные результаты свидетельствуют о заметном возрастании различий между главным и локальными минимумами при конформационной изомеризации соединения I в водном кластере. Подобный эффект проявляется при исследовании конформационного поведения незамещенного 1,3-диоксана в присутствии одной [7] либо двух молекул воды [8], однако в данном случае он становится особенно заметным: различия между локальными минимумами возрастают в 1.5-3.7 раза. Второй особенностью конформационной изомеризации диоксана-I в окружении воды является реализация прямого перехода *Ka* ↔ *Ke*, невозможного при конформационных превращениях этого соединения в разряженной газовой фазе.

Таким образом, моделирование конформационной изомеризации 5-метил-1,3-диоксана в кластере, сформированном из 39 молекул воды, выявило существенные отличия в относительной стабильности локальных минимумов и доказало возможность прямой конформационной изомеризации кресло – кресло, минуя гибкие формы. Вероятной причиной таких отличий является повышение конформационной гибкости молекул исследуемого соединения в присутствии высокополярного растворителя.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Итоги науки и техники. Технология органических веществ. Т.5. Химия и технология 1,3-диоксациклоалканов / Д.Л. Рахманкулов, Р.А. Караханов, С.С. Злотский, Е.А. Кантор и др. // М.: ВИНТИ, 1979. - 288 с.
2. Внутреннее вращение молекул / под ред. В.Дж. Орвилл-Томаса. М.: Мир, 1975. – С.355.
3. Кузнецов В.В. ХГС. – 2006. С.643.
4. Кузнецов В.В. Изв. АН. Сер. хим. - 2005. С.1499.
5. Курамшина А.Е., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. ЖОрХ. – 2009. Т.45. С.511.

Таблица 1. Структура базы данных Streets

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10		11	
№	S1	S2	S3	S4	Control	Priority	Length	Col	IntA1	...	IntB1	...

- 1) № – номер квартала (дуги графа) в улично-дорожной сети, соединяющего перекрестки I и II;
- 2) S1 и S2 – пересекающиеся улицы, образующие перекресток I (вершину I графа);
- 3) S3 и S4 – пересекающиеся улицы, образующие перекресток II (вершину II графа);
- 4) Control – наличие светофорного регулирования;

6. HyperChem 5.02. Trial version. www.hyper.com.
7. Курамшина А.Е., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. Современные наукоемкие технологии. – 2008. № 9. С.47.
8. Курамшина А.Е., Кузнецов В.В. Материалы международной научно-технической конференции «Актуальные проблемы технических, естественных и гуманитарных наук». Уфа: УГНТУ, 2009. Вып.4. С.160.

АЛГОРИТМ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОПТИМАЛЬНОГО МАРШРУТА ДВИЖЕНИЯ АВТОМОБИЛЯ В РАМКАХ УЛИЧНО-ДОРОЖНОЙ СЕТИ

Наумова Н.А., Данович Л.М., Савин В.Н.,
Булатникова И.Н., Круглова И.А.
Кубанский государственный технологический
университет,
Краснодар, Россия

В авторской модели движения автотранспортных средств по улично-дорожной сети города распределение интервалов по времени между автомобилями по всем направлениям движения принято подчиненным закону Эрланга *k*-го порядка. В этих предположениях была разработана аналитическая реализация модели, позволяющая рассчитывать основные характеристики обслуживания автомобилей как на нерегулируемом, так и на регулируемом перекрестках.

Вся улично-дорожная сеть города представлена в виде ориентированного графа, вершинами которого являются перекрестки. Необходимую для расчетов информацию об улично-дорожной сети конкретного населенного пункта предлагается хранить в двух связанных базах данных, структура которых представлена ниже.

- 5) Priority – главная или второстепенная улица;
- 6) Length – длина квартала;
- 7) Col – количество полос для движения;
- 8) IntA1, IntA2 и т.д. – интенсивность по полосам в направлении A;
- 9) IntB1, IntB2 и т.д. – интенсивность по полосам в направлении B.

Таблица 2. Структура базы данных Intersections

1	2	3	4	5
№	S1	S2	IntC line1	IntD line1

1) № - совпадает с номером квартала, соединяющего перекрестки I и II в таблице 1;

2) S1 и S2 – пересекающиеся улицы, образующие перекресток I (вершину I графа);

3) IntC line1, IntC line2 и т.д. – интенсивность по полосам в направлении С улицы, пересекающей перекресток I;

4) IntD line1, IntD line2 и т.д. – интенсивность по полосам в направлении D улицы, пересекающей перекресток I.

Маршрут задается последовательным перечислением вершин (перекрестков). Для каждого из возможных маршрутов рассчитывается интегрированный показатель K его эффективности, позволяющий выбрать оптимальный маршрут:

$$K = \alpha_1 \cdot \frac{K_1}{(K_1)_{\max}} + \alpha_2 \cdot \frac{K_2}{(K_2)_{\max}} + \alpha_3 \cdot \frac{K_3}{(K_3)_{\max}} + \alpha_4 \cdot \frac{K_4}{(K_4)_{\max}}$$

где K_1 – длина маршрута (в километрах);

K_2 – математическое ожидание числа заторов на маршруте;

K_3 – математическое ожидание времени, проведенного в «пробках» на данном маршруте;

K_4 – затраченное время при движении по данному маршруту.

$\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ – уровни значимости соответствующих характеристик.

Оптимальный маршрут выбирается по принципу $K \rightarrow \min$.

Для реализации данного алгоритма авторами разработана программа в среде Delphi 6.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 08-08-12169.

Новые медицинские технологии

К ВОПРОСУ О ДИАГНОСТИКЕ БОТУЛИЗМА

Бондарев А.В., Лобанов А.В., Кузнецов В.И., Самарова С.А., Перминова Т.А., Сретенская Д.А.,
ГОУ ВПО «Саратовский ГМУ Росздрава»,
Саратов, Россия

Ботулизм – пищевая токсикоинфекционная болезнь, вызываемая экзотоксином ботулинического микроба. Несмотря на достаточно чётко очерченную клиническую картину, ботулизм является заболеванием, при котором допускаются диагностические ошибки. Выделяют три клинические формы этой болезни: пищевой ботулизм, раневой ботулизм и ботулизм новорождённых.

Диагноз ботулизма ставится клинически. Решающее значение в диагностике имеет наличие офтальмоплегической симптоматики – птоз, нарушение движений глазных яблок, аккомодации, конвергенции, мидриаз, нарушение реакции зрачка на свет, снижение корнеального рефлекса, горизонтальный нистагм, диплопия; бульбарной симптоматики – парез мягкого нёба и как следствие гнусавость голоса, отсутствие рефлекса с корня языка и задней стенки глотки, парез надгортанника (при приёме воды поперхивание), нарушение глотания; парез дыхательных мышц и, как следствие этого, развитие острой дыхательной недоста-

точности, нарушение речи; поражение вегетативной нервной системы сопровождается сухостью ротовой полости. Большое значение имеет наличие эпидемиологического фактора.

Целью настоящей работы являлось проведение анализа особенностей ранней диагностики ботулизма, в связи с чем была проведена клиническая разработка 20 историй болезни пациентов с диагнозом ботулизма. Необходимо отметить, что количество симптомов, характерных для ботулоинфекции, заявленных в литературе, не соответствовало симптомам, изученным в ходе разработки историй болезни, что возможно связано с их малой выраженностью или отсутствием, а возможно, недостаточным вниманием со стороны врачей. Клинические проявления ботулоинфекции учитывались в первые сутки поступления больных в стационар и на 3-4 сутки от начала заболевания. При легкой форме ботулизма диагноз в 100% случаев устанавливался в 1-2 сутки от начала клиники. У всех больных этой формой развивался гастроинтестинальный синдром. В 60% случаев, в начале болезни, присутствовала диплопия, которая в таком же количестве случаев встречалась в разгаре болезни. Через несколько дней присоединялись нарушения глотания (80%), охриплость голоса (40%), сухость ротовой полости (80% случаев).