

УДК 519.6

**АНАЛИЗ НЕКОТОРЫХ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ  
РЕАЛИЗАЦИИ ПОЛИКОМПОНЕНТНОГО ВНУТРИВЕННОГО НАРКОЗА**

*Сокольский Виталий Михайлович, начальник отдела медицинской техники, Александрo-Мариинская областная клиническая больница, 414056, Россия, Астрахань, ул. Татищева, 2, e-mail: sokolskiy\_vm@mail.ru.*

*Брумштейн Юрий Моисеевич, кандидат технических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, Астрахань, Татищева, 20а, e-mail: brum2003@mail.ru.*

*Рассмотрены цели использования и виды наркоза. Показаны преимущества применения внутривенного поликомпонентного наркоза. Рассмотрены факторы, которые принимаются во внимание при определении количества препаратов, вводимых при наркозе. Предложена модель компромиссного выбора их количества, которая обеспечивает достижение заданных целей анестезии при минимальной дозировке препаратов. Обоснована целесообразность и описаны возможности динамического управления глубиной наркоза по ходу операции. Проанализирован состав факторов, которые целесообразно принимать во внимание в моделях управления глубиной наркоза. Предложены варианты описания моделей динамики во времени концентраций препаратов в крови пациента в виде систем дифференциальных уравнений. Отдельно рассмотрен учет в таких моделях стохастических факторов. Указаны особенности численного моделирования предложенных уравнений. Отдельно рассмотрены фактические причины и способы учета в моделях запаздывания реакций пациентов на вводимые препараты. Описаны варианты формализованной оценки величины мгновенной глубины наркоза. Предложены методы интегральной оценки отличий по ходу операции совокупностей фактических концентраций препаратов от желаемых. В рамках таких методов учтено полифункциональное действие вводимых препаратов на параметры состояния пациента. Рассмотрены варианты политики управления совокупностями параметров состояния пациента, основанные на правиле максимальной близости к идеалу и инвариантности значений параметров в пределах заданной зоны. Указаны направления дальнейшего совершенствования моделей.*

**Ключевые слова:** *многокомпонентный наркоз, математические модели, физиологическое состояние, параметры состояния, оптимальное управление, обратные связи, стохастические факторы.*

**THE ANALYSIS OF SOME MATHEMATICAL MODELS FOR  
POLYCOMPONENTAL INTRAVENOUS NARCOSIS REALIZATION**

*Sokolskij Vitalij M., the chief of medical technique department Alexandro-Mariinsky regional clinical hospital, 414056, Russia, Astrakhan, Tatishcheva 2, e-mail: sokolskiy\_vm@mail.ru.*

*Brumshiteyn Urij M., Candidate of Technical sciences Astrakhan State University, Tatishcheva 20 a, Astrakhan, 414056, Russia, e-mail e-mail: brum2003@mail.ru.*

*The purposes of use and narcosis kinds are considered. Advantages of intravenous multi-component narcosis are shown. Factors, which are taken into consideration, when defining preparations quantities entered for narcosis, are considered. The compromise choice model of such quantities, which provides specified anesthesia purposes achievement at the minimum preparations*

---

---

## СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

---

---

*dosage is offered. The expediency is proved and possibilities of dynamic management for narcosis depth, during operation, are described. The factors structure, which are reasonable for taking into consideration in models of narcosis depth management, is analyzed. Variants of the description for dynamics models of preparations concentration in patients blood, in the form of differential equations systems, are offered. The account of stochastic factors in such models is considered separately. Features of numerical modeling for offered equations are specified. The actual reasons and ways of account in models for delayed reactions of patients on entered preparations are separately considered. Variants of the formalized estimation for narcosis instant depth size are described. Methods of an integrated estimation for differences between actual preparations concentrations sets and the wished values of them, during the operation, are offered. In the limits of this methods the description of entered preparations multifunctional action on patients condition parameters is considered. Variants of policy management for patients sets of condition parameters, based on a rule of the maximum affinity to an ideal and invariance of parameters values within the specified zone, are considered. Directions of the further perfection of models are shown.*

**Key words:** *multicomponent narcosis, mathematical models, physiological condition, condition parameters, optimum control, feedback, stochastic factors.*

Открытие эффекта наркоза и его последующее использование в медицинской практике позволило значительно расширить возможности проведения сложных хирургических операций, включая полостные [1]. Уже в XIX веке начал применяться газовый наркоз (эфир, позже хлороформ), однако он давал нежелательные побочные эффекты. Позже начал использоваться внутривенный наркоз. В последние годы были предприняты успешные попытки применения для общего наркоза инертных газов (сначала гелия, позже ксенона). Пациенты хорошо переносят такой наркоз, очень легко выходят из него. К сожалению, стоимость использования указанных технологий (особенно при длительных операциях) весьма высока. Поэтому в современной клинической практике для общего наркоза применяется в основном внутривенное введение совокупности препаратов разного функционального назначения [1]. Однако заранее оценить реакцию конкретного пациента на хирургическое и медикаментозное вмешательство можно лишь приближенно. Поэтому весьма актуальны задачи управления глубиной наркоза (ГН) по ходу операции. Решение этих задач требует разработки соответствующих математических моделей (ММ).

При принятии априорных решений по количествам вводимых препаратов обычно учитываются такие факторы: масса пациента; его возраст; пол; общее физическое состояние; вид операции; ее предполагаемая продолжительность; риски, связанные с проведением операции в целом и осуществлением общего наркоза в частности.

Для проведения поликомпонентной анестезии обычно используются четыре группы препаратов, различающихся по функциональному назначению [1]: анальгетик, релаксант, нейролептик и гипнотик. При этом считать, что каждый компонент действует независимо от остальных и только на «свою подсистему» организма, можно лишь в первом приближении.

Количество вводимых при внутривенном наркозе препаратов, с одной стороны, должно обеспечивать достижение заданного мышечного тонуса, нахождение гемодинамических и анестезиологических параметров в пределах норм (1-ая цель). С другой стороны, пациент должен получить минимально возможную медикаментозную нагрузку от вводимых препаратов. Это позволит затем легче вывести его из состояния наркоза после операции, нормализовать самостоятельное дыхание и пр. (2-ая цель).

Существенно, что оценки количеств препаратов, необходимых для достижения этих целей, осуществляются в условиях неопределенностей и рисков [1, 4, 7]. Эти количества за

период наркоза могут быть определены путем компромиссного решения в отношении достижения указанных выше двух целей на основе системы уравнений

$$\{S_n = (w_{x,n}S_n^{(1)} + w_{A,n}S_n^{(2)})/(w_{x,n} + w_{A,n})\}_{n=1...N} \quad (1)$$

где  $N$  – общее количество компонентов (препаратов) используемых для внутривенного наркоза; верхние индексы «1», «2» относятся соответственно к 1-ой и 2-ой целям;  $S_n; S_n^{(1)}; S_n^{(2)}$  – количества препаратов  $n$ -ого типа для компромиссного решения, достижения 1-ой и 2-ой целей;  $w_{x,n}; w_{A,n}$  – весовые коэффициенты, определяющие относительную «важность» достижения 1-ой и 2-ой целей. На основе математических моделей риск-менеджмента [4] могут быть сформулированы и иные подходы.

Непосредственно (1) может использоваться только в случае однократного введения препаратов перед началом хирургического вмешательства. Этот подход неэффективен, по крайней мере, для длительных операций, так как требует введения такого количества препаратов, чтобы глубина наркоза оставалась достаточной даже к концу операции. Следовательно, в начале операции концентрации препаратов (КП) будут избыточны, что может затем осложнить вывод пациента из состояния наркоза и пр.

Далее мы будем рассматривать модели, связанные с введением препаратов перед началом операции и по ходу ее. В техническом плане это может быть реализовано не только вручную, но и с использованием автоматизированных инфузионных насосов, управляемых сигналами с ПЭВМ. Эти сигналы могут вырабатываться на основе данных о состоянии пациента (информация «обратной связи»). В связи с этим отметим: динамический мониторинг инструментальными средствами КП в крови пациентов затруднителен; детерминированной связи текущих КП с совокупностью параметров пациента обычно нет; при управлении КП необходимо учитывать не только текущую ситуацию, но и ее вероятный прогноз для разных вариантов (сценариев) введения препаратов – этот прогноз может быть выполнен на основе многомерных временных рядов о параметрах пациента за предшествующий период или с помощью ММ.

В общем случае скорости введения препаратов по ходу операции могут изменяться исходя из результатов мониторингирования параметров пациента, а также представлений о процессах, происходящих в организме с вводимыми веществами. Последнее требует использования адекватных ММ. В рамках таких ММ мы будем учитывать следующие процессы: внутривенное введение препаратов в организм; разрушение их в организме; выведение из кровеносной системы. В литературе встречается и иная категоризация процессов, основанная на «трехкомпартаментальной модели» [2], которая учитывает разложение/выведение препаратов в «ближнюю периферию» (лимфа) и «дальнюю» (жир, моча и пр.).

В данной статье мы не будем учитывать в ММ возможность сорбции препаратов на стенках кровеносных сосудов и пр., а также их последующей десорбции при прекращении наркоза и падении КП в крови. Эти процессы могут в начальный период наркоза оттягивать достижение необходимых параметров пациента, а после завершения введения препаратов затягивать период выхода из наркоза; демпфировать колебания КП в крови при динамическом изменении интенсивности его введения. Также мы не будем принимать далее во внимание возможность изменения объема крови за счет кровопотерь, связанных с нарушением целостности сосудов в процессе хирургического вмешательства; увеличения объема за счет переливания крови, плазмы крови, введения физиологического раствора и пр.

Если принять, что для разных препаратов процессы «введения/разрушения/выведения» независимы друг от друга и происходят с разной интенсивностью, то получим совокупность дифференциальных уравнений

---



---

## СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

---



---

$$\left\{ \frac{dQ_n}{dt} = I_n(t)/\gamma_1 - (\beta_{1,n} + \beta_{2,n})Q_n \right\}_{n=1\dots N}, \quad (2)$$

где  $\frac{dQ_n}{dt}$  – скорость изменения концентрации n-ого препарата во времени в крови пациента [кг/(м<sup>3</sup>\*сек)];  $I_n(t)$  – интенсивность (скорость) введения в организм n-ого препарата [кг/сек];  $\gamma_1$  – коэффициент, учитывающий массу пациента (фактически – объем крови) [м<sup>3</sup>];  $\beta_{1,n}; \beta_{2,n}$  – коэффициенты, определяющие интенсивности процессов разрушения n-ого препарата и его выведения из кровеносной системы [1/сек]. Для большинства препаратов типично  $\beta_1 < \beta_2$ . Система (2) должна быть дополнена совокупностью начальных условий для всех «n» компонент. Целесообразно принять, что в начальный момент концентрации всех препаратов в крови пациента нулевые

$$\{Q_n = 0\}_{n=1\dots N} \quad (3)$$

Естественным обобщением (2) представляется учет нелинейностей в процессах разложения и выведения препаратов, например, в виде

$$\left\{ \frac{dQ_n}{dt} = I_n(t)/\gamma_1 - \beta_{1,n}Q_n^{\alpha_1} - \beta_{2,n}Q_n^{\alpha_2} \right\}_{n=1\dots N}, \quad (4)$$

где  $\alpha_1, \alpha_2$  – некоторые безразмерные параметры. Однако калибровка моделей типа (4) или априорная оценка коэффициентов в них более сложные, чем для уравнения (2).

Численное моделирование на основе (2), (3) или (2), (4) можно осуществлять, например, с использованием простейшей явной разностной схемы по времени [6] с постоянной величиной шага по времени  $\varepsilon$ . Для (2), (3) могут быть эффективны и неявные схемы. Однако для (2), (4) такие схемы на каждом шаге по времени потребуют организации итерационного процесса.

Из результатов экспериментальных исследований известно, что при внутривенном введении препаратов эффект от них может достигаться с некоторым запаздыванием по отношению к моменту введения. Это связано с процессами распространения препаратов в кровеносной системе и их перемешивания в общем объеме крови. Такие процессы в условиях нахождения пациента под наркозом и, как следствие, снижения интенсивности кровотока, могут занимать около 2–3 минут.

Для учета «реакций с запаздыванием» (2) или (4) должно было бы быть заменено совокупностью интегро-дифференциальных уравнений. Однако, имея в виду возможность в дальнейшем компьютерного моделирования процессов, целесообразно реализовать иной подход, который мы проиллюстрируем на примере модификации уравнений типа (2).

Примем, что процессы распространения/перемешивания препарата в крови заканчиваются за период времени « $K^* \varepsilon$ », который можно рассматривать как «скользящее окошко», сцепленное с текущим моментом времени  $t$ . Также будем считать, что изменение интенсивностей введения препаратов изменяется скачкообразно на границах шагов по времени, равных  $\varepsilon$ , а в пределах этих шагов оно остается неизменным. Перейдем от концентраций  $Q$  к действующим концентрациям препаратов ( $Q^*$ ), выраженным в тех же единицах [кг/л]. Примем «весовую» схему в отношении скорости распространения/перемешивания препаратов в крови в виде совокупности коэффициентов  $\{\mu_k\}_{k=0\dots K-1}$ , где  $\mu_k$  относится к моменту времени « $t-k^* \varepsilon$ ». При этом естественным условием нормировки является

$$\sum_{k=0}^{K-1} \mu_k = 1 \quad (5)$$

Тогда, дискретно распределяя в (2) введение препаратов по времени в пределах «скользящего окошка» шириной « $K \cdot \varepsilon$ », будем иметь

$$\left\{ \frac{dQ_n^*}{dt} = \left( \sum_{k=0}^{K-1} (\mu_k I_n(t - \varepsilon k)) \right) / \gamma_1 - (\beta_{1,n} + \beta_{2,n}) Q_n^* \right\}_{n=1..N} \quad (6)$$

Для формулы (6) целесообразно отметить: для начальных моментов моделирования ( $t \approx t_1$ ) величины  $I_n(t < t_1)$  должны быть взяты нулевыми; эта формула справедлива и для  $t > t_2$  (выведение пациента из наркоза).

Выбором подходящей величины  $\varepsilon$  и весовой схемы для  $\{\mu_k\}_{k=0..K-1}$  можно обеспечить задание практически любой зависимости для скорости перемешивания/распространения препарата, в том числе такой, которую сложно выразить аналитической формулой.

Переходим к задачам управления ГН. Мы будем ниже рассматривать «рабочую зону» операции по времени ( $t_1; t_2$ ), соответствующую периоду, когда ГН достаточна для проведения необходимых хирургических действий. При этом момент начала введения препаратов ( $t_0$ ) предшествует ( $t_1$ ), а момент завершения введения ( $t_3$ ) примерно соответствует ( $t_2$ ). Понятно, что момент прихода пациента в сознание ( $t_4$ ) наступает позже чем  $t_3$ . Разница ( $t_1 - t_0$ ) может быть уменьшена за счет повышения интенсивности ввода препаратов на начальном этапе наркоза, но такое повышение возможно лишь до определенных пределов.

Формализуем понятие ГН. Пусть  $m$ -ый показатель, описывающий состояние пациента ( $m=1..M$ ), имеет при отсутствии наркоза среднее значение  $\bar{P}_m$ , а при максимально глубоко наркозе –  $P_m^{(\max)}$ . Модуль разницы между этими значениями

$$\Delta_m = \left| \bar{P}_m - P_m^{(\max)} \right| \quad (7)$$

определяет потенциально возможный диапазон регулирования ГН по этому параметру. Частную ГН (ЧГН) по  $m$ -ому параметру в момент времени « $t$ » целесообразно определить как

$$G_m(t) = \left| P_m(t) - \bar{P}_m \right| / \Delta_m \quad (8)$$

При этом «максимальная ЧГН» по этому параметру по (8) равна «1».

Для совокупности « $M$ » параметров (мы предполагаем, что они слабо коррелируют друг с другом) оценка мгновенной интегральной ГН (МИГН) возможна как средневзвешенная по всем параметрам

$$G^*(t) = \sum_{m=1}^M (\eta_m G_m(t)) / \sum_{m=1}^M (\eta_m), \quad (9)$$

где  $\{\eta_m\}_{m=1..M}$  – набор весовых коэффициентов, определяющих относительную важность параметров (в простейшем случае все эти коэффициенты можно принять равными  $1/M$ ).

Другой возможный подход к оценке МИГН

$$G^{**}(t) = \min_{m=1..M} \{G_m(t)\}, \quad (10)$$

---



---

## СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

---



---

т.е. на основе «минимального уровня» из всех показателей ЧГН. Подход по формуле (9) кажется предпочтительным, но он, в свою очередь, может быть заменен на более общий (см. далее).

Задача управления во времени МИГН формализовано может выглядеть так. Пусть на период хирургического вмешательства  $\Delta t = t_2 - t_1$  необходимо обеспечить запланированную зависимость МИГН от времени:

$$G^{*(Z)}(t); \quad t_1 \leq t \leq t_2 \quad (11)$$

В силу стохастических факторов, запаздывания реакций физиологических параметров пациента и пр. фактическое изменение МИГН может отличаться для рассматриваемого промежутка времени от (11). Примем, что эта зависимость представлена как

$$G^{*(F)}(t); \quad t_0 \leq t \leq \max(t_2; t_3) \quad (12)$$

Тогда отличие заданной и фактических интегральных ГН

$$D(t) = G^{*(F)}(t) - G^{*(Z)}(t); \quad t_1 \leq t \leq t_2 \quad (13)$$

Целью управления введением совокупности препаратов при внутривенном наркозе может быть минимизация функционала

$$R_1 = \int_{t_1}^{t_2} \lambda * (D(t))^2 * dt, \quad (14)$$

где  $\lambda = \lambda_+ (npu \_ D(t) > 0); \quad \lambda = \lambda_- (npu \_ D(t) < 0) \quad (15)$

Формула (15) позволяет учесть различную «важность» отклонений МИГН от желаемой величины в большую и меньшую стороны. Зависимости (14), (15) являются одним из вариантов общего случая

$$R_1 = \int_{t_1}^{t_2} f_1(D(t)) * dt, \quad (16)$$

где  $f_1$  описывает вид нелинейной зависимости.

Переходим к анализу модели полифункционального влияния совокупности вводимых препаратов. Как и ранее, будем считать, что состояние пациента описывается совокупностью «М» параметров (характеристик), которые могут быть измерены количественно, причем обычно  $M > N$ . Если же значения параметров сильно коррелируют друг с другом, то может быть целесообразным переход от натуральных показателей состояния пациента к некоторым «синтетическим», полученным, например, по методу главных компонент [3]. Примем, что оценка МИГН для момента времени  $t$  по совокупности параметров пациента может быть дана как

$$G^{*(F)}(t) = f_2(\{P_m(t); \bar{P}_m\}_{m=1..M}) \quad (17)$$

Формулы (8), (9) можно рассматривать как частные случаи (17).

Примем, что «матрица влияния» КП на изменение значений параметров (характеристик) пациента в линеаризованной форме представляет собой совокупность значений частных производных

$$[\partial P_m / \partial Q_n]_{n=1..N; m=1..M} \quad (18)$$

Если не учитывать эффекты запаздывания реакций параметров пациента на введение препаратов, то (18) может непосредственно использоваться для определения необходимых изменений КП в крови. Можно оценить количества препаратов, которые следует вводить, учитывая при этом процессы их разложения/выведения из организма и, возможно, перемешивания в кровеносной системе. Это могло бы соответствовать переходу в М-мерном пространстве параметров, характеризующих состояние пациента, от фактической точки, ото-

бражающей состояние пациента (ТОСП) к желаемой точке. Однако в рамках управления приходится учитывать, что желаемый набор значений параметров пациента  $\{P_m^J(t)\}_{m=1..M}$  обычно не может быть достигнут одновременно по всем параметрам. Поэтому управление (путем ввода препаратов) соответствует переходу не к желаемой ТОСП в  $M$ -мерном пространстве, а к некоторой другой точке, в некотором смысле близкой к ней. Математически процесс перехода можно представить в виде матричного уравнения в конечно-разностной форме

$$\{P_m^F(t + \varepsilon)\} = \{P_m^F(t)\} + [\partial P_m / \partial Q_n] * \{(dQ_n / dt) * \varepsilon\}, \quad (19)$$

где  $\{P_m^F(t); P_m^F(t + \varepsilon)\}$  – фактические значения наборов параметров в текущий и последующий моменты времени;  $\varepsilon$  определяет дискретность во времени моментов управления (выработки решений об изменении интенсивности введения препаратов); умножение матрицы на вектор в правой части уравнения осуществляется по правилам матричного умножения. Дискретность  $\varepsilon$  может либо быть равной частоте дискретизации съема значений параметров пациента, либо быть более длительной (кратной ей). Последний вариант позволит «сгладить» влияние коротковолновых гармоник для происходящих процессов. С учетом влияния стохастических факторов формула (19) должна быть изменена (например, согласно [5]) на

$$\{P_m^F(t + \varepsilon)\} = \{P_m^F(t)\} + [\partial P_m / \partial Q_n] * \{(dQ_n / dt) * \varepsilon\} + \{\delta P_m\}, \quad (20)$$

где  $\{\delta P_m\}$  – вектор случайных погрешностей для параметров. При этом в (20) мы не учитываем погрешности фактических количеств вводимых препаратов по сравнению с планируемыми в процессе управления (ошибки обработки сигналов инфузионными насосами, в том числе из-за люфта электромеханических устройств и по другим причинам).

Итак, можно считать, что в отношении управления внутривенным наркозом решается задача управления «ансамблем параметров» пациента при наличии стохастических факторов. При этом мгновенным критерием качества управления может быть, например,

$$R_2(t) = \left( \sum_{m=1}^M v_m |P_m^J(t) - P_m^F(t)| \right) / \sum_{m=1}^M v_m, \quad (21)$$

где  $\{v_m\}_{m=1..M}$  – набор весовых коэффициентов, отвечающих этим параметрам. Формула (21) является, очевидно, простейшим вариантом оценки. В более общем случае необходимо, как минимум, назначать разные  $\{v_m\}$  для положительных и отрицательных величин разностей  $P_m^J(t) - P_m^F(t)$ . Соответственно, за весь период операции необходимо минимизировать функционал

$$R_3 = \int_{t_1}^{t_2} R_2(t) * dt \quad (22)$$

Возможно, в (22) более правильным было бы осуществлять интегрирование не до  $t_2$ , а до момента прихода пациента в сознание.

С учетом различных «важностей» приближения фактических состояний пациента к желаемым для различных стадий (фаз) наркоза вместо (22) в общем случае будем иметь

$$R_3 = \left( \int_{t_1}^{t_2} \Theta(t) R_2(t) * dt \right) / \left( \int_{t_1}^{t_2} \Theta(t) dt \right), \quad (23)$$

где функция  $\Theta(t)$  описывает изменение «важности» отклонений в состоянии пациента от времени. Подчеркнем, что вид  $\Theta(t)$  зависит и от характера операции. Поэтому механическое

---

---

## СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

---

---

масштабирование (растяжение/сжатие) некоторого стандартного эталона для  $\Theta(t)$  на фактическую продолжительность операции может быть не лучшим решением.

На практике управление ансамблем  $\{P_m^F(t)\}$  может осуществляться не только исходя из критерия максимальной близости к «динамическому идеалу» в виде набора  $\{P_m^J(t)\}$ . Другим подходом (он используется более часто) может быть обеспечение нахождения ТОСП, соответствующей  $\{P_m^F(t)\}$ , внутри области допустимых значений параметров (ОДЗП) в «М»-мерном пространстве. Такая ОДЗП может быть многомерным параллелепипедом или иной замкнутой фигурой. При этом значения мгновенных «функций штрафа», вычисляемые по формулам, аналогичным (21), будут ненулевыми только, если ТОСП будет покидать ОДЗП. Если же ТОСП – внутри ОДЗП, то «функция штрафа» равна нулю.

В максимально упрощенном варианте управление совокупностью параметров  $\{P_m^F(t)\}$  может соответствовать случаю:  $N=M$ ; в матрице (18) ненулевыми являются лишь диагональные элементы. Тогда, в частности, дозирование миорелаксанта можно связать с данными только о нейромышечной блокаде, которые обычно непрерывно мониторируются в процессе хирургической операции инструментальными средствами.

В дальнейшем авторами предполагается развитие рассмотренных моделей путем учета запаздываний физиологических реакций пациента на КП в крови и «предыстории» достижения им текущих состояний.

Итак, сделаем выводы. 1. Улучшение качества управления общим наркозом пациентов может быть важным средством повышения эффективности сложных хирургических операций, снижения их рисков. 2. Автоматизация управления введением препаратов в процессе операции нуждается в адекватной математической и алгоритмической поддержке. 3. В данной статье в общем виде предложены некоторые базовые модели, описывающие процессы внутривенного наркоза и определяющие подходы к управлению им. 4. В дальнейшем предполагается развитие этих моделей в направлении более полного учета реальных факторов, связанных с проведением внутривенного наркоза.

### Список литературы

1. Анестезиология и реаниматология / под ред. О. А. Долиной. – М. : ГЭОТАР-Медиа, 2006. – 576 с.
2. Бунятян А. А. Тотальная внутривенная анестезия пропофолом по целевой концентрации / А. А. Бунятян, Е. В. Флеров, В. И. Стамов, К. М. Толмачев. – Режим доступа: [http://tele.med.ru/fler\\_tci.html](http://tele.med.ru/fler_tci.html), свободный. – Заглавие с экрана. – Яз. рус.
3. Бююль А. SPSS: искусство обработки информации. Анализ статистических данных и восстановление скрытых закономерностей / А. Бююль, П. Цефель. – СПб. : ООО «ДиаСофтЮП», 2002. – 608 с.
4. Долматов А. С. Математические модели риск-менеджмента / А. С. Долматов. – М. : Экзамен, 2007. – 319 с.
5. Оксендаль Б. Стохастические дифференциальные уравнения / Б. Оксендаль. – М. : Мир : АСТ, 2003. – 408 с.
6. Самарский А. А. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры / А. А. Самарский, А. П. Михайлов. – М. : Наука. Физматлит, 1997. – 320 с.
7. Черноуцкий И. Г. Методы принятия решений / И. Г. Черноуцкий. – СПб. : БХВ-Петербург, 2005. – 416 с.

### References

1. Anesteziologija i reanimatologija / pod red. O. A. Dolinoj. – M. : GJeOTAR-Media, 2006. – 576 s.
2. Bunjatjan A. A. Total'naja vnutrivennaja anestezija propofolom po celevoj koncentracii / A. A. Bunjatjan, E. V. Flerov, V. I. Stamov, K. M. Tolmachev. – Rezhim dostupa: [http://tele.med.ru/fler\\_tci.html](http://tele.med.ru/fler_tci.html), svobodnyj. – Zaglavie s jekrana. – Jaz. rus.



3. Bjujul' A. SPSS: iskusstvo obrabotki informacii. Analiz statisticheskikh dannyh i vosstanovlenie skrytyh zakonomernostej / A. Bjujul', P. Cefel'. – SPb. : ООО «DiaSoftJuP», 2002. – 608 s.
4. Dolmatov A. S. Matematicheskie modeli risk-menedzhmenta / A. S. Dolmatov. – M. : Jekzamen, 2007. – 319 s.
5. Oksendal' B. Stohasticheskie differencial'nye uravnenija / B. Oksendal'. – M. : Mir : AST, 2003. – 408 s.
6. Samarskij A. A. Matematicheskoe modelirovanie: Idei. Metody. Primery / A. A. Samarskij, A. P. Mihajlov. – M. : Nauka. Fizmatlit, 1997. – 320 s.
7. Chernoruckij I. G. Metody prinjatija reshenij / I. G. Chernoruckij. – SPb. : BHV-Peterburg, 2005. – 416 s.

УДК 539.193

**СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ МОДЕЛЬНЫХ РАСЧЕТОВ  
ПАРАМЕТРОВ АДИАБАТИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА  
ДИМЕРОВ КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ**

*Элькин Михаил Давыдович, доктор физико-математических наук, профессор, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, Астрахань, Татищева, 20 а, e-mail: elkinmd@mail.ru.*

*Нуралиева Диана Мухамеджановна, аспирант, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, Астрахань, Татищева, 20 а, e-mail: kof1@aspu.ru.*

*Джалмухамбетова Елена Азатуллаевна, кандидат физико-математических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, Астрахань, Татищева, 20 а, e-mail: alenna@list.ru.*

*Гайсина Альфия Рафаилевна, ассистент, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, Астрахань, Татищева, 20 а, e-mail: gaisinaalfiya@mail.ru.*

*Алыкova Ольга Михайловна, кандидат педагогических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, Астрахань, Татищева, 20 а, e-mail: kof@aspu.ru.*

*Данная работа посвящена построению структурно-динамических моделей димеров карбоновых кислот. Для исследуемых соединений определены геометрические параметры молекул, такие, как длины валентных связей и величины углов между ними. Описана методика оценки ангармонического смещения полос в колебательных спектрах полициклических соединений, на основании результатов неэмпирических квантовых расчетов параметров адиабатического потенциала – кубических и квартичных силовых постоянных. Получены частоты колебательных состояний и величины их интегральных интенсивностей. Моделирование димеров молекул и их ангармонических колебательных состояний осуществлялось в предположении плоской конфигурации соединений. Расчет проводился квантовым методом функционала плотности DFT/B3LYP с различными базисами. Проведена полная интерпретация фундаментальных колебательных состояний исследуемых соединений. Оценивается влияние поляризационных и диффузионных эффектов атомного базиса на интерпретацию колебательных состояний. Проведен анализ параметров адиабатического потенциала, оценивается ангармоническое смещение полос колебательных спектров. Сопоставление результатов моделирования рассмотренных молекул с имеющимися экспериментальными данными по колебательным спектрам исследуемых соединений позволяет сделать вывод о достоверности предсказательных квантовых расчетов параметров адиабатического потенциала для димеров карбоновых кислот и о возможности их спектральной идентификации.*