

Рост и развитие детского организма является циклическим процессом и протекает во времени. Индивидуальная оценка физического развития независимо от выбранных методов требует учета не только абсолютных величин основных весоростовых показателей, но и их динамику. Возрастные показатели физического развития детей и подростков можно рассматривать как временной ряд. Использование методов прогнозирования временных рядов позволяет выполнить анализ траектории физического развития ребенка и оценить перспективы на краткосрочный период. В качестве базового метода анализа и прогнозирования траектории физического развития ребенка рассматривается метод эмпирической спецификации и идентификации трендов с последующей экстраполяцией тренда на краткосрочный и среднесрочный периоды.

Созданная программа учитывает основные разделы электронной медицинской карты, рекомендации по обеспечению функциональных возможностей медицинских информационных систем медицинских организаций (утверждены министром здравоохранения РФ 01.02.2016 г.). Программа автоматически оценивает параметры физического развития по нескольким шкалам с учетом следующих методов: метод индексов (весоростовые соотношения), процентильный (центильный) метод – вероятностное распределение в процентных интервалах), метод регрессионного анализа (расчет коэффициента регрессии массы тела по длине тела). Учитываются данные по физическому развитию детей Российской Федерации (референтные таблицы) и Сибирского Федерального округа, референтные ростовые таблицы Всемирной организации здравоохранения. Использование методов прогнозирования временных рядов позволяет оценить индивидуальный и возможный тренд в развитии физического развития ребенка или подростка. После проведения оценки заключение о физическом развитии ребенка или подростка программа выдает в обобщенном виде - физическое развитие высокое или низкое, гармоничное или дисгармоничное (за счет роста или массы тела), среднее, пропорциональное или непропорциональное, гипотрофия, трофологический статус и др. Таким образом, программа комплексно оценивает физическое развитие детей. Программа предусматривает использование облачных технологий. Данная программа может быть использована врачами-педиатрами, тренерами спортивных школ и родителями.

#### Библиографический список

1. Баранов А.А., Щеплягина Л.А. Физиология роста и развития детей и подростков (теоретические и клинические вопросы): руководство для врачей: В 2 т. – М.: ГЕОТАР-Медиа, 2006. – 464 с.
2. Баранов А.А., В.Р. Кучма. Физическое развитие детей и подростков Российской Федерации. Ф50 Сб. матлов (выпуск VI). – М.: Изд-во «ПедиатрЪ». 2013. –192 с.
3. Методические рекомендации по обеспечению функциональных возможностей медицинских информационных систем медицинских организаций (МИС МО). Утверждены Министром здравоохранения РФ Скворцовой В.И. 01.02.2016 г. // <http://portal.egisz.rosminzdrav.ru/materials/351>.

УДК 539.186.2 + 519.254

### Интервальный подход к построению полуэмпирической формулы для средней энергии возбуждения вещества

*В.А. Смоляр<sup>1</sup>, И.И. Маглеванный<sup>2</sup>, С.И. Жилин<sup>3,4</sup>*

<sup>1</sup>ВолГТУ, г. Волгоград; <sup>2</sup>ВГСПУ, г. Волгоград;

<sup>3</sup>ООО «СиСорт», г. Барнаул; <sup>4</sup>АлтГУ, г. Барнаул

Оценка средней энергии возбуждения вещества  $I$  в зависимости от его атомного номера  $Z$  является важной составляющей при описании процессов взаимодействия частиц с веществом. Средняя энергия возбуждения вещества  $I(Z)$ , в частности, входит в известную формулу Бете-Блоха, позволяющую с высокой точностью вычислять тормозную способность вещества для энергий электронов, превышающих энергию связи электронов  $K$ -оболочки. Экспериментально установленные значения средней энергии возбуждения для элементов с атомными номерами от 1 до 100 приведены в [1] и доступны в архиве NIST [2] (см. рисунок).

Для оценивания средней энергии возбуждения  $I$  как функции атомного номера  $Z$  известны [3] полуэмпирические формулы Штернхеймера (1963)

$$\frac{I_S}{Z} = \begin{cases} 12 + 7/ZeV, & Z < 13; \\ 9.76 + 58.8Z^{-1.19}eV, & Z \geq 13, \end{cases} \quad (1)$$

и Далтона – Тёрнера (1968, [4])

$$I_{DT} = \begin{cases} 11.2 + 11.7ZeV, & Z \leq 13; \\ 52.8 + 8.71ZeV, & Z > 13. \end{cases} \quad (2)$$

Однако эти формулы не отражают периодического характера зависимости  $I(Z)/Z$  от  $Z$ , очевидно проявляющегося в экспериментальных данных (рисунок).

В настоящей работе предлагается новая полуэмпирическая формула средней энергии возбуждения для атомных номеров от  $Z = 4$  до  $Z = 126$ , с более высокой точностью аппроксимирующая экспериментальные данные и пригодная для прогнозирования значений средней энергии возбуждения для ещё неоткрытых, но предсказанных нестабильных тяжелых элементов.

Согласно теории Томаса – Ферми средняя энергия возбуждения пропорциональна атомному номеру в степени  $4/3$ , т.е.  $I = CZ^{4/3}$ , с коэффициентом пропорциональности порядка нескольких эВ [5]. При использовании для функции экранирования аппроксимации Мольера [6], значение константы  $C$  оценивается величиной  $1.58$  эВ. Сопоставление значений этой степенной зависимости с экспериментальными данными, позволяет говорить об их согласованности лишь на интервалах быстрого роста средней энергии возбуждения  $I$ , когда с увеличением  $Z$  происходит заполнение глубоких электронных оболочек в блоках  $s, g, f, d$ .

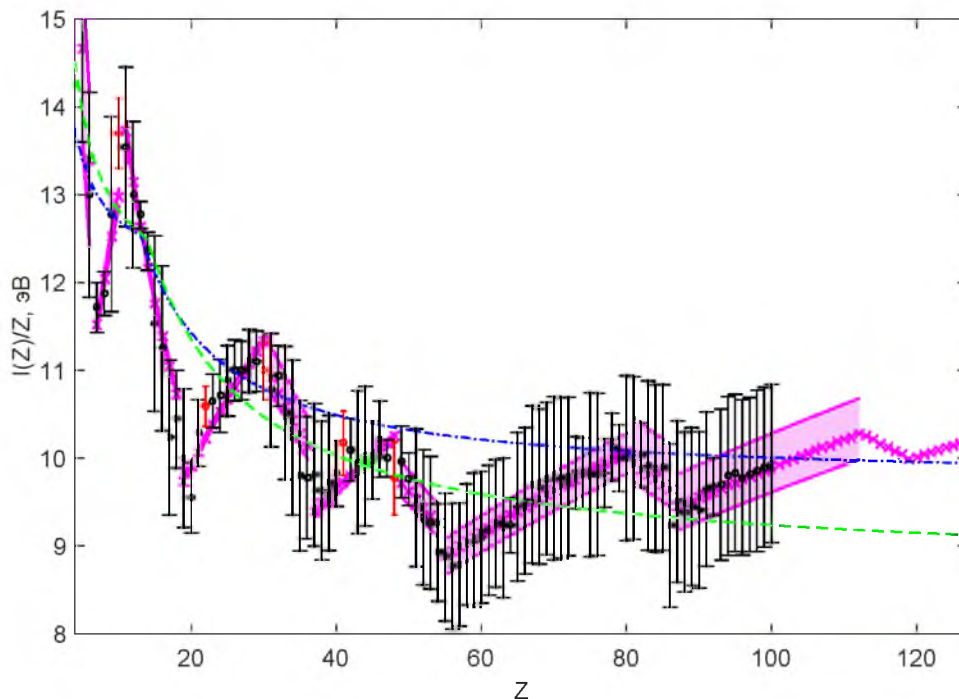


Рисунок 1 – Нормированные экспериментальные значения средней энергии возбуждения в зависимости от атомного номера. Закрашенные области – области моделей, соответствующих интервальным оценкам  $C$ .

Крестики – точечные оценки значений  $I(Z)/Z$ . Штрих-пунктирная линия – значения формулы Штернхеймера  $I_S(Z)$ . Пунктирная линия – нормированные значения формулы Далтона – Тёрнера  $I_{DT}(Z)/Z$

Каждый из периодов, начиная с третьего, заканчивается  $p$ -блоком с шестью атомами, в которых рост  $I$  с увеличением  $Z$  замедляется, а для отношения  $\frac{I(Z)}{Z}$  рост сменяется убыванием. Таким образом, модель Томаса – Ферми некорректно описывает поведение средней энергии возбуждения на атомных номерах в этих  $p$ -блоках.

В новой формуле средней энергии возбуждения предлагается, сохранив общую структуру

$$I = CZ^\alpha, \quad (3)$$

вытекающую из теории Томаса – Ферми, на участках возрастания отношения  $\frac{I(Z)}{Z}$  полагать значение показателя степени  $\alpha$  равным  $4/3$ , в то время как на участках убывания –  $1/2$ . Значение коэффициента пропорциональности  $C$  при этом подлежит оцениванию по имеющимся экспериментальным данным в отдельности на каждом из участков возрастания/убывания  $I(Z)/Z$ . Учитывая наличие в составе экспериментальных данных информации о неопределённости измерений, представляется целесообразным для оценивания значений коэффициента  $C$  использовать методы интервального анализа [7], позволяющие явным образом задействовать эту информацию.

Построение оценок коэффициента  $C$  для различных участков зависимости предварялось устранением выбросов с помощью метода, описанного в [7]. К выбросам были отнесены наблюдения при  $Z = 10, 22, 30, 41, 48$ . При этом три из пяти выбросов оказались граничными на своих участках. Следует отметить, что удаление наблюдений, нарушающих совместность данных и модели, не является единст-

венной возможной тактикой работы с выбросами, и, в зависимости от использованного подхода, целевые оценки коэффициентов  $C$  могут несколько различаться. Однако в данном конкретном случае эти различия не приводят к качественным изменениям в основных результатах и выводах.

Значения интервальных оценок коэффициентов  $C$  для различных участков зависимости, а также их точечные оценки, полученные стягиванием множества допустимых значений параметров при равномерном сужении интервалов неопределённости (т.н. центры Оскорбина) приведены в таблице. Соответствующие интервальным оценкам «трубки» зависимостей, а также зависимость, задаваемая точечной оценкой, графически представлены на рисунке. Подходящим образом экстраполируя последовательности значений оценок коэффициентов  $C$ , соответствующие а) участкам роста и б) участкам убывания значений  $I(Z)/Z$ , возможно построить оценки  $C$ , для диапазонов  $Z = 113 \dots 118$  и  $Z = 119 \dots 126$  соответственно (см. две последние строки таблицы и рисунок).

Таблица – Оценки коэффициентов в формуле средней энергии возбуждения

| Период | Блок    | Электронная конфигурация   | Интервалы $Z$       | $\alpha$ | Оценки         |       |
|--------|---------|--|---------------------|----------|----------------|-------|
|        |         |  |                     |          | $[C, \bar{C}]$ | $C^*$ |
| 1      | s       | H, He  | 1(H) – 2(He)        |          |                |       |
| 2      | s       | [He]2s <sup>1</sup> –2s <sup>2</sup>                             | 3(Li) – 4(Be)       |          |                |       |
|        | p       | [He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>1-2</sup>                            | 5(B) – 6(C)         | 1/2      | [30.4, 34.7]   | 32.8  |
|        | p       | [He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>3-6</sup>                            | 7(N) – 10(Ne)       | 4/3      | [5.97, 6.06]   | 6.02  |
| 3      | s-p     | [Ne]3s <sup>1-2</sup> 3p <sup>1-6</sup>                          | 11(Na) – 18(Ar)     | 1/2      | [45.5, 45.8]   | 45.5  |
| 4      | s-d     | [Ar]3d <sup>1-10</sup> 4s <sup>1-2</sup>                         | 19(K) – 30(Zn)      | 4/3      | [3.64, 3.67]   | 3.65  |
|        | p       | [Zn]4p <sup>1-6</sup>  | 31(Ga) – 36(Kr)     | 1/2      | [59.9, 62.8]   | 60.8  |
| 5      | s-d     | [Kr]4d <sup>1-10</sup> 5s <sup>1-2</sup>                         | 37(K) – 48(Zn)      | 4/3      | [2.80, 2.83]   | 2.82  |
|        | p       | [Cd]5p <sup>1-6</sup>  | 49(Ga) – 54(Kr)     | 1/2      | [66.9, 69.7]   | 68.0  |
| 6      | s-f-d   | [Xe]4f <sup>1-14</sup> 5d <sup>1-10</sup> 6s                     | 55(Cs) – 80(Hg)     | 4/3      | [2.28, 2.39]   | 2.34  |
|        | p       | [Hg]6p <sup>1-6</sup>  | 81(Tl) – 86(Rn)     | 1/2      | [87.6, 94.2]   | 89.4  |
| 7      | s-f-d   | [Rn]5f <sup>1-14</sup> 6d <sup>1-10</sup> 6s                     | 87(Fr) – 112(Cn)    | 4/3      | [2.07, 2.22]   | 2.13  |
|        | p       | [Cn]7p <sup>1-6</sup>  | 113(Uut) – 118(Uuo) | 1/2      |                | ≈109  |
| 8      | s-g-f-d | [Uuo]5g <sup>1-18</sup> 6f <sup>1-14</sup> 7d <sup>1-14</sup> 8s | 119(Uue) – 162(Uhb) | 4/3      |                | ≈2.03 |

Нетрудно заметить, что остаточные отклонения, обеспечиваемые формулой (3) с коэффициентами, приведенными в таблице существенно ниже, отклонений, соответствующих формулам (1) и (2), за счет более адекватного описания периодического характера поведения средней энергии возбуждения в зависимости от атомного номера. К вопросам, требующим отдельного внимания и выходящим за рамки настоящей работы, стоит отнести сравнительный анализ зависимостей, получаемых оцениванием параметров формулы (3) иными методами, а также обоснованный выбор способа экстраполяции коэффициентов  $C$  для качественного предсказания значений средней энергии возбуждения при  $Z > 113$ .

#### Библиографический список

1. Seltzer S.M., Berger M. J. Evaluation of the collision stopping power of elements and compounds for electrons and positrons // The International Journal of Applied Radiation and Isotopes 33(11), 1982, P. 1189. DOI:10.1016/0020-708X(82)90244-7.
2. Berger, M.J., Coursey, J.S., Zucker, M.A., and Chang, J. ESTAR, PSTAR, and ASTAR: Computer Programs for Calculating Stopping-Power and Range Tables for Electrons, Protons, and Helium Ions (version 1.2.3). – Режим доступа: <http://physics.nist.gov/Star.NIST>, 2005.
3. Ahlen S.P. Theoretical and experimental aspects of the energy loss of relativistic heavily ionizing particles // Reviews of Modern Physics 52 (1), 1980, P. 121. DOI:10.1103/RevModPhys.52.121.
4. Dalton P., Turner J.E. New evaluation of mean excitation energies for use in radiation dosimetry // Health Physics 15(3), 1968, P. 257–262.
5. Смоляр В.А., Чан Х.К. Аналитическая аппроксимация средней энергии возбуждения в формуле Бете для тормозной способности вещества на основе модели атома Томаса–Ферми // Известия Волгоградского государственного технического университета 11(3), 2015. С. 24-28. [http://vstu.ru/files/vstu\\_periodical/1789/upload/no\\_3\\_161\\_-2015.pdf](http://vstu.ru/files/vstu_periodical/1789/upload/no_3_161_-2015.pdf).
6. Moliere G. Theorie der Streuung schnell geladener Teilchen I. Einzelstreuung am abgeschirmten Coulomb-Feld, Zeitschrift fur Naturforschung – Section A Journal of Physical Sciences 2(3), 1947. – P. 133–145.
7. Zhilin S.I. Simple method for outlier detection in fitting experimental data under interval error // Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 88 (1), 2007. – P. 60-68. DOI:10.1016/j.chemolab.2006.10.004.