

- взаимосвязь и координация между различными направлениями образования;
- взаимосвязь образования и самообразования взрослых;
- активность и самостоятельность слушателей в процессе обучения;
- целенаправленная организация и руководство самообразованием;
- дифференцированный подход к образованию слушателей разных возрастных категорий.

В связи с этим, преподавательская деятельность в системе последиplomного образования, прежде всего, основывается на методах обучения практической направленности, которые могут сближаться с методами самой медицинской деятельности. Применение деловых игр, интерактивных семинаров, решение практических задач, анализ профессиональных ситуаций могут обеспечивать реализацию вышперечисленных принципов обучения в системе последиplomного образования, а также гибкость и разнообразие в содержании образовательных программ.

При этом, анализ сложной, многоплановой, постоянно развивающейся системы последиplomного образования, требует поиска новых подходов к преподавательской деятельности и раскрытия психологических особенностей усвоения знаний взрослым человеком, педагогических условий организации образовательного процесса.

Опыт работы отделения повышения квалификации медицинских работников Московского областного медицинского колледжа № 1 позволил выявить, что к числу наиболее актуальных проблем преподавания относится проблема сти-

мулирования обучения слушателей, их мотивации.

В настоящее время форма классно – урочного обучения не приносит должных результатов и необходимы изменения в работе со слушателями. Разработка и реализация комплекса педагогических условий организации преподавательской деятельности с учетом индивидуальных особенностей слушателей, вариативности форм повышения квалификации, может улучшить эффективность системы последиplomного образования специалистов. Это подтвердил и анализ опроса слушателей по вопросу улучшения качества преподавания на циклах повышения квалификации. Слушатели отмечали, что важными условиями повышения их учебной мотивации и качества обучения являются:

- гибкий график образовательного процесса;
- обучение на базе медицинских организаций;
- преподавателям больше времени уделять разбору проблемных и сложных профессиональных вопросов;
- не давать учебный материал «под диктовку»;
- предоставлять возможность приобретать методические материалы по различным направлениям профессиональной деятельности;
- увеличить объем часов на консультативные занятия по подготовке к сдаче компьютерного тестирования.

Таким образом, изучение особенностей преподавательской деятельности в системе медицинского последиplomного образования требует «раздвижения» границ традиционных педагогических подходов к обучению слушателей и создания гибкой системы преподавания без отрыва от медицинской практики.

*«Компьютерное моделирование в науке и технике»,
Доминиканская Республика 19-26 декабря, 2013 г.*

Технические науки

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ МЕХАНОАКТИВАЦИИ В ДИСКОВОМ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ МЕХАНОАКТИВАТОРЕ (ЭДМА) В ПРОГРАММНОМ КОМПЛЕКСЕ ANSYS

Беззубцева М.М., Волков В.С.

*Санкт-Петербургский государственный аграрный университет, Санкт-Петербург,
e-mail: mysnegana@mail.ru; vol9795@yandex.ru*

Дисковый электромагнитный механоактиватор (ЭДМА) представляет собой новый перспективный вид измельчающего оборудования для ресурсо- и энергосберегающих технологий переработки вторичного сырья. Принцип действия ЭДМА основан на нетрадиционном способе передачи механической энергии слою размольных элементов с использованием постоянного

по знаку и регулируемого по величине электромагнитного поля [1, 2, 3].

Условием получения продукта с ровным гранулометрическим составом в узком диапазоне дисперсности при обработке в ЭДМА является равномерное распределение силовых нагрузок во всем объеме рабочей камеры [4, 5, 6, 7, 8, 9].

Для определения оптимальных параметров работы ЭДМА процесс электромагнитной механоактивации смоделирован в среде программного комплекса ANSYS [10]. При моделировании использован стационарный магнитный с открытыми границами трехмерный тип анализа.

Поле анализируемой магнитной системы – трехмерное. Расчет проведен методом скалярных магнитных потенциалов с использованием специально предназначенных для этого метода 8-узловых конечных элементов SOLID96, за-

полняющих все пространство внутри модели (и воздух, и магнитопровод, и объем, занимаемый намагничивающей обмоткой). Поскольку конечно-элементная сетка создавалась в режиме свободного построения, эти конечные элементы применяются в их частном виде – в форме тетраэдров (четырёхгранников) с четырьмя узлами вместо восьми. Использована разновидность метода скалярного магнитного потенциала – дифференциальный скалярный потенциал (DSP).

При моделировании введены следующие допущения:

1) теоретически поле рассматриваемой системы простирается в бесконечность. Поэтому бесконечно протяженное пространство на модели ограничивается поверхностями сплошного круглого цилиндра. Конечные элементы типа INFIN, моделирующие границы, простирающиеся в бесконечность, не использованы;

2) связь между магнитной индукцией и напряженностью магнитного поля в любой точке магнитопровода определена основной кривой намагничивания по индукции ($B=f(H)$) [1] материала магнитопровода;

3) предполагаем, что магнитный поток параллелен вертикальным плоскостям симметрии zy и zx (это обеспечивается в методе скалярного магнитного потенциала по умолчанию) и перпендикулярен горизонтальной плоскости симметрии $xу$. Последнее обеспечено тем, что скалярный магнитный потенциал всех точек

плоскости $xу$ модели принят одинаковым и равен нулю;

4) на верхней горизонтальной и боковой цилиндрических внешних поверхностях модели поток имеет параллельное граничное условие.

В результате расчета определены скалярные магнитные потенциалы (MAG) всех узлов модели (в данном расчете 999999 узлов). Каждый узел модели имеет индивидуальный номер, по которому его можно найти на конечно-элементной модели.

После приложения нагрузок к узлам конечно-элементной модели был произведен расчет. В результате были получены градиентная и векторная картины поля, показывающие параметры электромагнитного поля в виде интенсивности значений индукции и направлений магнитных потоков во всем объеме ЭДМА. Также определены кривые изменения суммарной магнитной индукции по ширине, глубине и высоте рабочего объема (BWIDTH, BDEPTH, BUP) [10,11].

Результаты компьютерного моделирования ЭДМА дают возможность рассчитать силовое взаимодействие между размольтными элементами активатора в любой точке рабочего объема. [1, 4, 7]

По результатам компьютерного моделирования ЭДМА [10,11] рассчитано силовое взаимодействие между размольтными элементами активатора в любой точке рабочего объема по формуле [1, 9]:

$$F = -\frac{3}{256} H^2 R_0^2 \frac{(\mu-1)^2}{(\mu-1)^3} ((13\mu+11) + 9(3\mu+5) \cos 2\varphi) . \quad (1)$$

где μ – магнитная проницаемость размольтных элементов; H – напряженность магнитного поля (принимая значение H_1 – напряженность магнитного поля во внешней части камеры измельчителя – механоактиватора, H_2 – напряженность магнитного поля во внутренней части измельчителя – механоактиватора); R_0 – радиус размольтных элементов; φ – угол деформации структурной цепочки.

Спроектированные с помощью программного комплекса аппараты [1, 2, 3] обеспечивают получение продукта с ровным гранулометрическим составом в оптимальном диапазоне дисперсности [1, 7].

Список литературы

1. Беззубцева М.М. Электромагнитные измельчители для пищевого сельскохозяйственного сырья. Теория и технологические возможности: дис...докт. техн. наук. – СПб. 1997. – 495 с.
2. Беззубцева М.М. Электромагнитный измельчитель // Патент России 2045195,1995. Бюл № 7.
3. Волков В.С. Электромагнитный измельчитель // Патент России 84263. 2009. Бюл. № 19.
4. Беззубцева М.М., Волков В.С. Прикладная теория способа электромагнитной механоактивации // Известия Международной академии аграрного образования. –2013. – № 16. Том 3. С. 93-96.

5. Беззубцева М.М., Волков В.С. Обеспечение условий управления процессом измельчения продуктов в электромагнитных механоактиваторах (ЭММА) //Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2012. – № 7. С. 93 – 94.

6. Беззубцева М.М., Волков В.С. Исследование режимов работы электромагнитных механоактиваторов // Успехи современного естествознания. – 2012. – № 8. – С. 109–110.

7. Беззубцева М.М., Волков В.С., Зубков В.В. Исследование аппаратов с магнитооживленным слоем // Фундаментальные исследования. – 2013. – № 6. Ч.2. С. 258 – 262.

8. Беззубцева М.М., Волков В.С., Платашенков И.С. Интенсификация технологических процессов переработки сельскохозяйственной продукции с использованием электромагнитных механоактиваторов постоянного тока // Известия Санкт-Петербургского государственного аграрного университета. 2008. 39. с. 190 – 192.

9. Беззубцева М.М., Волков В.С. Исследование физико-механических процессов в дисковом электромагнитном механоактиваторе (ЭДМА) // Международный журнал экспериментального образования. 2012. Т. 2012. № 12 – 1. С.116.

10. Беззубцева М.М., Волков В.С., Прибытков П.С. Расчет электромагнитного механоактиватора с применением программного комплекса ANSYS // Известия Санкт-Петербургского государственного аграрного университета. 2009. № 15. С. 150-154.

11. Волков В.С., Прибытков П.С., Елисеев А.Н. Расчет электромагнитного механоактиватора с применением программного комплекса ANSYS: учеб.-метод. пособие. 2009. СПб.: СПбГАУ. – 50 с.

12. Беззубцева М.М., Волков В.С. Исследование энергоэффективности дискового электромагнитного механоактиватора путем анализа кинетических и энергетиче-

ских закономерностей. // *Фундаментальные исследования*, 2013. – № 10 Ч.9. С. 1899-1903.

13. Беззубцева М.М. Энергоэффективный способ электромагнитной активации // *Международный журнал экспериментального образования*. – 2012. – № 5. С. 92–93.

Фармацевтические науки

КОМПЬЮТЕРНОЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЕ БИОМОЛЕКУЛ

Кодониди И.П., Бандура А.Ф., Манвелян Э.А., Сыса В.Ю., Сочнев В.С., Смирнова Л.П., Оганесян Э.Т., Савенко И.А., Сергиенко А.В., Арлыт А.В., Ивашев М.Н.

Пятигорский медико-фармацевтический институт, филиал ГБОУ ВПО ВолгГМУ Минздрава России, Пятигорск, e-mail: ivashev@bk.ru; ФГАОУ ВПО «Северо-Кавказский федеральный университет», Ставрополь

В современных условиях развития фармацевтики компьютерное прогнозирование и моделирование биомолекул является перспективным методом создания лекарственных средств.

В психиатрической практике и других сферах медицины используется большой спектр психотропных лекарственных средств, в том числе анксиолитические препараты. Однако вопросы эффективности и безопасности препаратов этой группы, являются весьма актуальными для современной фармакологии [1, 2, 3, 4, 5, 7, 9].

Цель исследования. Компьютерный прогноз и экспериментальное подтверждение психотропного действия новых производных 4-оксопиримидина и производных орто-бензоиламинобензойной.

Материал и методы исследования. Выборка виртуальных соединений, влияющих на функции нервной системы, для проведения молекулярного докинга осуществлялась с помощью логико-структурного подхода. Автоматизированный поиск расположения лигандов в активном центре фермента проводился с использованием программы Molegro Virtual Docker. Для этого в процессе докинга была выбрана пространственная область, ограничивающая поиск и включающая активный центр рецептора. При этом учитывалась конформационная подвижность молекул лигандов и наиболее важных аминокислот сайта связывания. В качестве белковой мишени для докинга использовали дофаминовый D₂- и ГАМК_A-рецептор, влияющие на медиаторные процессы в нервной системе и обуславливающие анксиолитические свойства соединений. Синтез ряда N-гетероциклических производных 4-оксопиримидина осуществлен реакцией циклоконденсации N-ацил-бета-кетоамидов с первичными гетериламинами в среде ледяной уксусной кислоты с добавлением ДМСО [3, 5, 8]. На основе логико-структурного подхода, также осуществлен отбор виртуальных производных о-бензоиламинобензойной кислоты и с использованием компьютерной про-

граммы PASS выявлены наиболее перспективные из них. Эти соединения подвергались процессу молекулярного докинга лиганд-рецептор программой Molegro Virtual Docker. В качестве белковой мишени для докинга использовали дофаминовый D₂-рецептор и ГАМК_A-рецептор, так как они принимают участие в регуляции нейробиохимических процессов в организме. Для оценки психотропной активности виртуальных соединений использовалась минимальная энергия образования лиганд-рецепторного комплекса. Синтез целевых соединений осуществлялся путем взаимодействия 2-фенилбензоксазина-4 с первичными аминами в среде уксусной кислоты при добавлении полярного апротонного растворителя диметилсульфоксида.

Строение полученных соединений подтверждено данными ¹H ЯМР-, ИК- и УФ-спектроскопии.

Экспериментальные исследования проводили на лабораторных животных (белые крысы) в соответствии с руководством по экспериментальному (доклиническому) изучению новых фармакологических веществ под редакцией Р.У. Хабриева. Статистическую обработку материала проводили с использованием критерия Стьюдента [6].

Результаты исследования и их обсуждение. Результаты молекулярного докинга свидетельствуют что все соединения производные 4-оксопиримидина могут образовывать устойчивые комплексы с D₂-дофаминовым и ГАМК_A-рецептором, а N-меркаптотриазолпроизводное 4-оксопиримидина предположительно обладает наибольшим влиянием на активность центральной нервной системы. Осуществленный синтез N-гетерилпроизводных 4-оксопиримидинов на основе гетериламинов показал, что значительное влияние на протекание реакций оказывают нуклеофильные свойства аминогруппы гетериламинов, зависящие от характера гетероатома и имеющихся заместителей. Сопоставление выходов соединений (PDMTz) и (PDMTzS), синтезированных на основе аминотриазолов, подтверждает наше предположение о дезактивирующем влиянии гетероатомов пиридинового типа. Как известно, степень взаимодействия неподеленной пары электронов аминогруппы с пи-электронной системой гетероцикла за счёт пи-сопряжения определяется соотношением индуктивного и мезомерного эффектов, что в свою очередь влияет на реакционную способность амина. Увеличение электронной плотности на атоме углерода, с которым связана аминогруппа, способствует повышению выхода вещества