

**І.Є. БУЛАХ
Л.П. ВОЙТЕНКО
І.П. КРИВЕНКО**

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ У ФАРМАЦІЇ

Навчальний посібник

Друге видання, виправлене

РЕКОМЕНДОВАНО

Міністерством охорони здоров'я України
як навчальний посібник для студентів
фармацевтичних факультетів вищих
навчальних закладів МОЗ України

Київ
ВСВ «МЕДИЦИНА»
2017

УДК 00494;615.1
ББК 32973202;48;5282я73
Б90

*Рекомендовано Міністерством охорони здоров'я України
як навчальний посібник для студентів фармацевтичних факультетів
вищих навчальних закладів МОЗ України
(протокол № 2 від 02.06.2016)*

Автори: *І.Є. Булах, Л.П. Войтенко, І.П. Кривенко*

Рецензенти:

Ю.В. Козаченко — доктор фізико-математичних наук, професор кафедри теорії ймовірностей, статистики та актуарної математики Київського національного університету імені Тараса Шевченка;

В.Л. Макаров — доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач відділу обчислювальної математики Інституту математики НАН України, академік НАН України;

В.В. Краснов — доктор медичних наук, кандидат педагогічних наук, професор, завідувач кафедри педагогіки, психології, медичного та фармацевтичного права Національної медичної академії післядипломної освіти імені П.Л. Шупика

Булах І.Є.

Б90 Комп'ютерне моделювання у фармації : навч. посіб. / І.Є. Булах, Л.П. Войтенко, І.П. Кривенко. — 2-е вид., випр. — К. : ВСВ «Медицина», 2017. — 208 с.

ISBN 978-617-505-555-7

У навчальному посібнику викладено комплексний дидактичний матеріал для набуття теоретичних знань і відпрацювання відповідних практичних навичок щодо застосування методів математичного моделювання у фармації та статистичної обробки даних за допомогою комп'ютерних технологій. Посібник відповідає чинній програмі з дисципліни «Комп'ютерне моделювання у фармації». Навчальний матеріал посібника структуровано за вимогами кредитно-трансферної системи організації навчального процесу на два змістових модулі: «Математичне моделювання у фармації засобами комп'ютерних технологій» та «Комп'ютерні технології у плануванні експерименту для контролю якості та аналізу даних».

Комплексний дидактичний матеріал навчального посібника включає теоретичні відомості з теми, комплекс дидактичних завдань для відпрацювання відповідних практичних навичок, демонстраційні приклади розв'язання типових завдань теми, завдання для самостійної роботи студентів, матеріали для самоконтролю та тестові завдання.

Для студентів фармацевтичних факультетів вищих медичних навчальних закладів МОЗ України.

УДК 00494;615.1
ББК 32973202;48;5282я73

ISBN 978-617-505-555-7

© І.Є. Булах, Л.П. Войтенко, І.П. Кривенко, 2017
© ВСВ «Медицина», оформлення, 2017

ЗМІСТ

Передмова	5
ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 1. Математичне моделювання у фармації засобами комп'ютерних технологій.....	7
Моделювання як метод дослідження у фармації. Основні етапи розв'язування задач фармації засобами комп'ютерних технологій	7
<i>Теоретичні відомості</i>	7
<i>Демонстраційні приклади</i>	22
<i>Практичні завдання</i>	26
<i>Завдання для самоконтролю</i>	27
Основи роботи зі спеціальним програмним забезпеченням. Математичне моделювання хімічних, фармацевтичних і медико-біологічних задач	29
<i>Теоретичні відомості</i>	29
<i>Демонстраційні приклади</i>	45
<i>Практичні завдання</i>	49
<i>Завдання для самоконтролю</i>	52
Дослідження моделей багатокомпонентних хімічних, фармацевтичних і харчових сумішей на основі розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь.....	55
<i>Теоретичні відомості</i>	55
<i>Демонстраційні приклади</i>	62
<i>Практичні завдання</i>	68
<i>Завдання для самоконтролю</i>	69
Моделювання фармацевтичних, медико-біологічних та хімічних процесів на основі чисельного розв'язання звичайних диференціальних рівнянь першого порядку та систем лінійних диференціальних рівнянь першого порядку.....	72
<i>Теоретичні відомості</i>	72

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ У ФАРМАЦІЇ

<i>Демонстраційні приклади</i>	86
<i>Практичні завдання</i>	93
<i>Завдання для самоконтролю</i>	96
ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 2. Комп'ютерні технології у плануванні експерименту, контролі якості та аналізі даних	99
Планування та проведення експерименту. Способи представлення результатів експерименту	99
<i>Теоретичні відомості</i>	99
<i>Демонстраційні приклади</i>	116
<i>Практичні завдання</i>	123
<i>Завдання для самоконтролю</i>	125
Вибірковий метод оцінювання параметрів. Вибіркові розподіли. Довірчі інтервали	127
<i>Теоретичні відомості</i>	127
<i>Демонстраційні приклади</i>	144
<i>Практичні завдання</i>	150
<i>Завдання для самоконтролю</i>	152
Задачі статистичної перевірки гіпотез. Критерії для перевірки статистичних гіпотез. Оцінювання параметрів розподілу за малими вибірками.....	155
<i>Теоретичні відомості</i>	155
<i>Демонстраційні приклади</i>	174
<i>Практичні завдання</i>	180
<i>Завдання для самоконтролю</i>	183
Застосування кореляційного та регресійного аналізу у фармації	186
<i>Теоретичні відомості</i>	186
<i>Демонстраційні приклади</i>	198
<i>Практичні завдання</i>	202
<i>Завдання для самоконтролю</i>	204
Література	206

ПЕРЕДМОВА

Сучасні комп'ютерні технології знайшли широке застосування у фармації. Комп'ютерне моделювання є важливим засобом дослідження складних процесів і систем, на якому базуються сучасні підходи до оптимізації та управління у фармації. Використання методів математичного моделювання за допомогою комп'ютерних технологій дає змогу значно підвищити ефективність опрацювання результатів фармацевтичних досліджень.

У сучасних умовах активного використання комп'ютерних технологій у галузі охорони здоров'я, особливої актуальності набувають уміння майбутніх фахівців фармацевтичної галузі ефективно опрацювати та аналізувати статистичні дані, застосовувати методи математичного моделювання під час дослідження фармацевтичних процесів. Цей навчальний посібник створено з метою забезпечення належної підготовки майбутніх фахівців фармацевтичної галузі у сфері застосування комп'ютерного моделювання у професійній діяльності.

Навчальний посібник «Комп'ютерне моделювання у фармації» підготовлено відповідно до чинної програми з дисципліни «Комп'ютерне моделювання у фармації» згідно з вимогами кредитно-трансферної системи організації навчального процесу. За змістом він охоплює теми двох змістових модулів: «Математичне моделювання у фармації засобами комп'ютерних технологій» та «Комп'ютерні технології у плануванні експерименту для контролю якості та аналізу даних».

У посібнику представлено навчальний матеріал для ознайомлення студентів з основними математичними моделями хімічних, фармацевтичних і медико-біологічних задач, зокрема знаходження розв'язків алгебраїчних рівнянь, систем рівнянь, звичайних диференціальних рівнянь першого порядку та систем лінійних диференціальних рівнянь за допомогою комп'ютерних технологій, статистичних методів опрацювання результатів фармацевтичних досліджень.

Кожна із тем посібника містить цілі заняття, основні поняття, теоретичні відомості, що допоможуть студентам у теоретичній підготовці з відповідної теми, набір практичних завдань, які є професійно-орієнтованими та сприяють оволодінню студентами поставленими цілями

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ У ФАРМАЦІЇ

заняття. Для кращого засвоєння матеріалу, а також набуття практичних навичок застосування статистичних методів і математичного моделювання після кожної теми детально розглядаються типові приклади виконання завдань.

ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 1

Математичне моделювання у фармації засобами комп'ютерних технологій

**МОДЕЛЮВАННЯ ЯК МЕТОД ДОСЛІДЖЕННЯ У ФАРМАЦІЇ.
ОСНОВНІ ЕТАПИ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ЗАДАЧ ФАРМАЦІЇ ЗАСОБАМИ
КОМП'ЮТЕРНИХ ТЕХНОЛОГІЙ**

Конкретні цілі заняття: інтерпретувати застосування математичного моделювання у фармації, ідентифікувати етапи розв'язування задач фармації засобами комп'ютерних технологій, аналізувати зразки моделей у фармації та медицині, проводити фрагменти фармакологічних експериментів на віртуальних лабораторних тваринах.

Основні поняття теми

Модель, типи моделей, моделювання, математичне моделювання, комп'ютерне моделювання, ступені складності математичних моделей.

Теоретичні відомості

«...Весь попередній досвід доводить нам, що природа являє собою реалізацію найпростіших математичних елементів. Я впевнений, що, застосовуючи суто математичні конструкції, ми зможемо знайти ті поняття та закономірні зв'язки між ними, які дадуть нам ключ до розуміння явищ природи...»

А. Ейнштейн

На початку ХХ ст. численні дослідження в медицині та фармації виконували переважно емпіричним шляхом, що призводило до економічних та екологічних проблем. Експериментальні методи в медичних і фармацевтичних дослідженнях з часом зазнали низки обмежень, що було зумовлено такими факторами:

- втручання в біологічні системи може призводити до неможливості встановлення причин змін, що виникають при цьому;
- деякі теоретично обґрунтовані експерименти неможливо здійснити через недостатній рівень розвитку експериментальної техніки;

— низку експериментів неможливо проводити з морально-етичних і правових питань.

Одним із методів, який дає змогу мінімізувати вищеперераховані проблеми, є комп'ютерне моделювання. Завдяки використанню методу моделювання скорочується термін виконання експериментальних досліджень, підвищується точність, достовірність, рівень інтерпретації результатів наукових досліджень. Метод моделювання допомагає якісно проводити медичні й фармацевтичні дослідження, отримувати цінну інформацію, яку складно або неможливо було б здобувати емпіричним шляхом.

Широке застосування математичних і статистичних методів у фармації, стрімкий розвиток комп'ютерних технологій зумовили появу у фаховій підготовці нової дисципліни — «Комп'ютерне моделювання у фармації». Метою вивчення цієї дисципліни є оволодіння студентами теоретичними та практичними знаннями, вміннями у сфері моделювання фармацевтичних процесів і явищ, опрацювання результатів наукових досліджень, здійснення аналізу й оцінювання отриманих даних з використанням засобів сучасних комп'ютерних технологій.

Сучасні технології комп'ютерного моделювання у фармації необхідні для розуміння причинно-наслідкових зв'язків, планування, прогнозування, прийняття обґрунтованих рішень тощо. Математичне комп'ютерне моделювання стало головним засобом дослідження складних процесів і систем, на якому базуються сучасні підходи до проектування, оптимізації та управління у фармації.

Дисципліна «Комп'ютерне моделювання у фармації» є спільною областю, в межах якої відомі математичні методи (зокрема, методи розв'язання систем лінійних і нелінійних рівнянь, диференціальне й інтегральне числення, диференціальні рівняння, математична статистика, теорія ймовірностей) застосовуються для розв'язання хімічних, фармацевтичних і медичних задач за допомогою комп'ютерних технологій.

Поняття «модель», типи моделей.

Моделювання як метод дослідження явищ та процесів

Природні процеси і системи різноманітні і складні, а тому під час їх вивчення ми розглядаємо моделі, які певною мірою відтворюють властивості і поведінку реальних систем, що дає змогу прогнозувати функціонування таких об'єктів.

Модель — це штучно створений людиною об'єкт будь-якої природи, за допомогою якого відтворюють й імітують поведження та основні властивості досліджуваного об'єкта для їх вивчення і дослідження. Метод дослідження об'єктів, заснований на побудові та вивченні моделей, теорій їх використання, отримав назву *моделювання*.

Модель завжди простіша порівняно з реальним об'єктом, тому що відтворює тільки ті його властивості, які є предметом вивчення. Походження поняття «модель» пов'язують з такими поняттями, як «міра», «норма», «образ», які за певних умов пізнання сукупності об'єктів означають «еталон», «зразок», «копія».

Існує багато різних моделей, що відрізняються одна від одної складністю, розмаїттям завдань і цілей моделювання, галузями застосування. На моделях зовнішньої подоби проводять попередні дослідження. Тренажери, електрифіковані навчальні таблиці і схеми, а також моделі, за допомогою яких імітують поведження реальних об'єктів у складних ситуаціях, використовують для навчання. Моделями-ерзацами замінюють об'єкти під час виконання певних функцій, їх називають також функціональними: протези, пристрої за типом штучної нирки, система «серце—легені», мікропроцесорні маніпулятори та ін. Дослідницькими моделями — математичними й імітаційними — замінюють реальні об'єкти в ході наукових досліджень.

Виділяють чотири типи *моделей*, які застосовують у медицині та фармації:

— *біологічні* — використовують під час вивчення загальних біологічних закономірностей, методів лікування, впливу фармакологічних препаратів тощо (лабораторні тварини, культури клітин та ін.). Такий вид моделювання дотепер зберігає своє значення в сучасній медицині і фармації;

— *фізичні* — це фізичні пристрої, що мають подібну до досліджуваного об'єкта фізичну природу. Фізична модель може реалізуватися у вигляді механічного або електронного пристрою. До фізичних моделей відносять технічні пристрої, що замінюють органи і системи живого організму (штучне серце, легені та ін.), електронні схеми, що імітують процеси в біологічній тканині. Фізичне моделювання є традиційним у медицині і лікувальній практиці;

— *кібернетичні* — це різні системи, за допомогою яких моделюють інформаційні процеси. До них належать «чорна скринька», інформаційні моделі та ін. Модель «чорної скриньки» широко застосовують