

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ В ФАРМАЦІЇ

ГАРЬКАВА В. Ф.
БАНДУРА В. М.
ГАЙША О. О.
ІГНАТОВА Т. В.
РЕДЬКІНА Є. А.
ЛУК'ЯНЧУК В. Д.
ПРОЗОРОВА Г. О.



RS Global

Warsaw 2021

**МІЖНАРОДНИЙ КЛАСИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ПИЛИПА ОРЛИКА**

**ГАРЬКАВА В. Ф., БАНДУРА В. М., ГАЙША О. О., ІГНАТОВА Т. В.,
РЕДЬКІНА Є. А., ЛУК'ЯНЧУК В. Д., ПРОЗОРОВА Г. О.**

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ В ФАРМАЦІЇ

МОНОГРАФІЯ

**RS Global
Warsaw, Poland
2021**

УДК 811.521

DOI: 10.31435/rsglobal/029

*Монографію розглянуто та рекомендовано до друку вченою радою
Міжнародного класичного університету
імені Пилипа Орлика
(протокол № 3 від 28 жовтня 2020 р.)*

**Гарькава В. Ф., Бандура В. М., Гайша О. О., Ігнатова Т. В., Редькіна Є. А.,
Лук'янчук В. Д., Прозорова Г. О.**

Комп'ютерне моделювання та інформаційні технології в фармації:
Монографія. – Warsaw: RS Global Sp. z O.O., 2021. – 43 с.

ISBN 978-83-960619-7-3

ISBN 978-83-960619-8-0 (eBook)

У монографії вирішено актуальне науково-практичне завдання, що полягає в аналізі сучасних методів моделювання та розробки комп'ютерних систем та побудові на даній основі автоматизованих систем управління фармацевтичною галуззю.

ISBN 978-83-960619-7-3

ISBN 978-83-960619-8-0 (eBook)

© Гарькава В. Ф., 2021

© Бандура В. М., 2021

© Гайша О. О., 2021

© Ігнатова Т. В., 2021

© Редькіна Є. А., 2021

© Лук'янчук В. Д., 2021

© Прозорова Г. О., 2021

© RS Global Sp. z O.O., 2021

ЗМІСТ

ВСТУП.....	4
РОЗДІЛ 1. СУЧАСНІ НАПРЯМИ ЗАСТОСУВАННЯ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ У ФАРМАЦІЇ.....	5
1.1 Поняття та основні властивості моделі.....	5
1.2 Методи та етапи математичного моделювання.....	7
1.3 Сучасні напрями застосування комп'ютерного моделювання у фармації.....	10
РОЗДІЛ 2. РЕАЛІЗАЦІЯ МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ЗАСОБАМИ КОМП'ЮТЕРНИХ ТЕХНОЛОГІЙ.....	12
2.1 Робота в MathCAD.....	12
2.2 Розрахунки в MathCAD.....	17
2.3 Побудова графіків і функцій в Mathcad.....	20
РОЗДІЛ 3. РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ І ПОРЯДКУ ЗА ДОПОМОГОЮ КОМП'ЮТЕРНИХ ТЕХНОЛОГІЙ.....	29
3.1 Система диференціальних рівнянь.....	29
3.2 Розв'язок системи диференціальних рівнянь.....	30
РОЗДІЛ 4. ОСНОВНІ НАПРЯМКИ ВИКОРИСТАННЯ ІНФОРМАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ У ФАРМАЦІЇ.....	36
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	41

ВСТУП

Фармацевтичні торгові і виробничі підприємства, фармацевтичні заводи і фабрики в даний час в умовах ринкової економіки потребують оперативного отримання інформації, її обробці і в використанні результатів її аналізу в процесі своєї діяльності. Розробка повноцінної системи управління в фармацевтичних підприємствах являє собою ключовий крок до висновку виробництва на рівень міжнародних стандартів.

Організаційна структура фармацевтичних підприємств, в більшості випадків, є системою, що складається з безлічі віддалених один від одного філій з централізованим органом обліку і контролю. В таких умовах здійснення оперативного документообігу стає найбільш важливим завданням.

Сучасний рівень розвитку виробництва диктує нові вимоги до підходів в управлінні виробництвом. Автоматизація виробництва зводить «нанівець» горезвісний «людський фактор», тобто зменшує ризик виникнення браку у виробництві в результаті помилок, допущених персоналом. Це особливо важливо в умовах фармацевтичного виробництва, де найменше порушення технології продукції, що виготовляється може призвести до втрати здоров'я споживачів лікарських засобів – хворих людей.

Єдиним вирішенням цих проблем є розробка та впровадження так званих інформаційних технологій, тобто технологій, що ґрунтуються на використанні обчислювальної техніки і електронних засобів комунікації.

Фармацевтична промисловість – одна з найскладніших галузей хімічної індустрії, що відрізняється великою кількістю підгалузей, високим рівнем НДДКР і величезними капітальними витратами. Продукція сучасної фармацевтичної промисловості набуває все більшого значення для охорони здоров'я постійно зростаючого населення планети.

В умовах глобалізації світової економіки фармацевтична індустрія зазнає якісних змін внаслідок великих геополітичних процесів, що трансформують масштаб ринків збуту продукції галузі, які ліквідують анклавні країн і регіонів, відокремлені від світової патентної системи, що спонукають до уніфікації предклінічних і клінічних методик дослідження в процесі створення лікарських засобів.

Сучасні масштаби і темпи впровадження засобів автоматизації управління в народному господарстві з особливою гостротою ставить задачу проведення комплексних досліджень, пов'язаних з всебічним вивченням і узагальненням виникаючих при цьому проблем як практичного, так і теоретичного характеру.

РОЗДІЛ 1. СУЧАСНІ НАПРЯМИ ЗАСТОСУВАННЯ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ У ФАРМАЦІЇ

1.1 Поняття та основні властивості моделі

Основою для аналізу та синтезу систем є інформація стосовно варіантів, що розглядаються. Джерелами такої інформації можуть бути:

- літературні або інші дані стосовно аналогічних рішень (використання існуючого, у тому числі – особливого досвіду);
- результати досліджень, що отримані на *моделях*.

Модель (фр. *modèle*, від лат. *Modulus* – «міра, аналог, зразок») – це *спрощене уявлення* реального пристрою та / або процесів і явищ, що перебігають в ньому.

Побудова та дослідження моделей, тобто *моделювання*, полегшує вивчення наявних в реальному пристрої (процесі) властивостей і закономірностей. Моделювання є обов'язковою частиною досліджень і розробок, невід'ємною частиною нашого життя, оскільки складність будь-якого матеріального об'єкту та його оточення нескінченна внаслідок невичерпності матерії і форм її взаємодії всередині себе і з зовнішнім середовищем.

Нині прийнято розрізняти наступні види моделей:

- натурні (фізичні);
- інформаційні (віртуальні)

Натурні (фізичні) моделі представляють собою матеріальні копії реальних об'єктів, що є подібними до них за фізичною сутністю або основними рисами. Ними можуть бути реальні вироби, зразки, експериментальні або натурні моделі, коли між параметрами системи і моделі однакової фізичної природі існує однозначна відповідність. Вибір розмірів таких моделей ведеться з дотриманням *теорії подібності*.

В медичних дослідженнях фізичні моделі використовуються дуже широко. Якщо дослідження стосується нових ліків, то на перших етапах дослідження проводять швидкий скринінг на мікроорганізмах (*in vitro*), з метою відбору діючих речовин. Потім дослідження проводять на лабораторних тваринах, які у тій чи іншій мірі імітують організм людини, визначають особливості дії, токсичність, метаболізм, результати побічної дії. У цьому випадку організм лабораторної тварини у деякій мірі моделює характерні риси людського організму. Але ця модель не є абсолютно *адекватною* (тобто такою, що повністю передає особливості організму людини). Тому після ретельного відбору проводяться клінічні випробування на людях – спочатку здорових добровольців, а потім – на хворих, з ретельним виконанням норм медичної етики. Відмітимо, що у даному дослідженні люди, на організмі яких проводились клінічні дослідження,

виступають, у середньому, як моделі всього людства. Але оскільки організм кожної людини є індивідуальним, то отримані результати теж розглядаються, як отримані на моделях. Нарешті, за результатами розширених клінічних випробувань приймається рішення стосовно можливості впровадження препарату у медичну практику. В середньому до промислових ліків у сучасній фармакології доходить лише 1 речовина зі 100000.

Специфічним видом фізичних моделей є *аналогові моделі*. Їх сутність полягає в тому, що замість одного фізичного явища вивчають інше, що описується подібними математичними закономірностями. Наприклад поведінка. Наприклад зараз широко використовують будівництво склепінчастих покриттів стадіонів, великих магазинів, ангарів і т. п. Було встановлено, що під впливом навантажень поведінка цих коритів описується такими ж самими математичними структурами, що й поведінка гумових мембран. Тоді гумову мембрану можна розглядати, як аналогову фізичну модель склепінчастих покриттів і закономірності поведінки мембран, що легко вивчати у лабораторних умовах, переносити на покриття, з врахуванням масштабу і коефіцієнту пропорційності між явищами різної розмірності. Це знаходить використання у проектуванні покриттів великих споруд. Аналогічно рух рідин і розповсюдження електричного току описується такими ж за формою диференціальними рівняннями. Це дає можливість моделювати складний рух рідин (наприклад крові у системі кровообігу) за допомогою аналогових електричних схем.

Інформаційна модель – модель об'єкту (явища, процесу, пристрою), що представлена у вигляді інформації, яка описує:

- істотні для даного об'єкту параметри і змінні величини,
- зв'язки між ними,
- входи і виходи об'єкта

Вона дозволяє шляхом подачі інформації про зміни входних величин моделювати можливі стани об'єкта. Інформаційні моделі *не мають матеріального втілення*, тому що будуються тільки на інформації.

Різновидами інформаційних моделей є:

• *вербальні моделі*, що описують характер об'єкту, взаємозв'язок його частин і т.д. *на природній мові*. Вербальним шляхом будують *змістовну модель* об'єкту (*модель предметної галузі*). Для медицини характерні у більший мірі вербальні моделі;

• *математичні моделі*, що описують характер об'єкту (процесу), взаємозв'язок між входними та вихідними змінними, механізм функціонування і т. д. *мовою математики*, за допомогою математичних конструкцій (формул, рівнянь, алгоритмів і т. д.)

Побудова математичних моделей відбувається за наступними способами:

- *аналітичним шляхом* – виводом з фізичних законів, математичних аксіом та теорем;

- *експериментальним шляхом* – в результаті обробки результатів спостережень або експериментів отримують наближені (апроксимуючі) залежності.

Результатом моделювання можуть бути:

- аналітичні вирази (формули);
- числові значення (як правило у формі таблиці залежностей);
- графічні образи (2-х – і 3-х вимірні графіки, діаграми, гістограми, номограми і т. д.)

1.2 Методи та етапи математичного моделювання

Математичні моделі, як суцільно абстрактні й нематеріальні, існують у людської свідомості. Важним засобом їх реалізації являються сучасні комп'ютери. Один з видатних російських математиків академік А. А. Самарський писав: «Створивши тріаду "модель-алгоритм-програма", дослідник отримує в руки універсальний, гнучкий і недорогий інструмент, який спочатку налагоджують в пробних обчислювальних експериментах. Після того, як адекватність (достатній відповідність) тріади початковому об'єкту встановлена, з моделлю проводяться різноманітні й докладні "досліди", що дають всі необхідні якісні та кількісні властивості й характеристики об'єкта». У цьому висловлюванні виражено сутність сучасного напрямку у моделюванні – *комп'ютерного моделювання*, коли на основі математичної моделі у вигляді алгоритму обчислень, реалізованому у формі комп'ютерної програми, створюється певний образ об'єкту дослідження, подібний у основних рисах оригіналу, властивості якого можна вивчати у формі математичних залежностей і наочно уявляти засобами комп'ютерної техніки (у формі таблиць, двох- і трьохвимірних графіків, анімації і т. д.).

Простішою моделлю системи є модель «чорного ящика». Система розглядається у вигляді невідомого «пристрою», що розташований всередині чорного ящика, скрізь стінки якого неможливо розглянути будову і механізм дії системи. Але система має канали входу, на які можна подавати «вхідні сигнали» – речовини, енергію, інформацію. В результаті функціонування системи на виході будуть формуватися «вихідні сигнали», які система спрямовує у зовнішню середу (рис. 1.1).

Вивчення таких систем складається з вивчення кількісної залежності вихідних сигналів y_1, y_2, \dots, y_n від вхідних x_1, x_2, \dots, x_m . На основі таких залежностей можна будувати гіпотези та теорії відносно будови та структури системи, які спробувати перевірити незалежним шляхом, наприклад подаючи на вхід сигнали за певним законом і вивчаючи реакцію системи на це. Такий підхід є загальним для природничих та технічних наук, він лежить у основі

більш загальної кібернетичної моделі чорного ящика. У цій моделі враховуються не тільки вхідні і вихідні сигнали, але так звані *збурюючі сигнали*, що випадково поступають у систему з навколишнього середовища і впливають певним чином на вихідні сигнали і керуючі сигнали, які надходять з боку особи, що керує системою, щоб перевести систему у потрібний стан. Схема такої системи наведена на рис. 1.2.

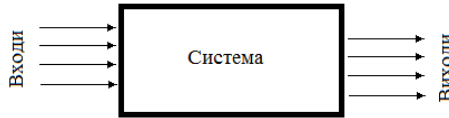


Рисунок 1.1 – Модель системи як простого чорного ящика

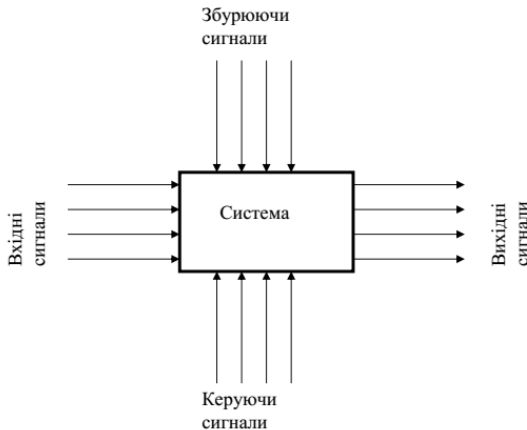


Рисунок 1.2 – Модель «чорного ящика» зі збуреннями та керуванням

Обидва типи моделей можна проілюструвати такими прикладами. Якщо лікар досліджує вплив дози розчину деякого препарату на популяцію бактерій, він підраховує питому кількість мікроорганізмів у колонії під впливом дози у зразку, що досліджується і порівнює його зі зміною питомої кількості таких ж бактерій у контрольному досліді, що проводиться у відсутності впливу. У даному випадку вхідний сигнал – це доза препарату у розрахунку на певну кількість мікроорганізмів, а вихідний – відношення питомої кількості бактерій у дослідженому і контрольному зразкам. Вплив випадкових факторів враховується тим, що використовуються 2 зразка з однаковою початковою концентрацією бактерій, а експерименти проводять в однакових умовах. Тобто це – модель простого чорного ящика.

Другий приклад: лікар прописує хворому певні препарати і слідкує за станом його здоров'я протягом лікування. В разі, якщо у хворого у процесі лікування зміниться певний показник (підвищиться температура або кров'яний тиск), він призначає хворому препарати, що впливають на ці симптоми і тим самим керує станом системи – організму хворого, з тим, щоб симптоми базового захворювання змінювались у необхідний бік. У цьому випадку ми маємо справу з керованою системою. Як правило лікування – це процес керованої спрямованої дії на організм подібного комплексу заходів.

Модель не може бути повністю ідентичною об'єкту-оригіналу. Важливо, щоб вона відображала принципи, найбільш важливі властивості оригіналу у даному випадку. Тому моделювання, особливо математичне, завжди передбачає прийняття припущень тій чи іншій мірі важливості. При цьому повинні задовольнятися наступні вимоги до моделей:

□ адекватність, тобто відповідність моделі вихідної реальній системі і врахування, перш за все, найбільш важливих якостей, зв'язків і характеристик. Оцінити адекватність обраної моделі, особливо, на початковій стадії досліджень, коли вид створюваної системи ще невідомий, дуже складно. У такій ситуації часто покладаються на досвід попередніх розробок або застосовують певні методи, наприклад, метод послідовних наближень;

□ точність, тобто ступінь збігу отриманих в процесі моделювання результатів із задалегідь встановленими, бажаними. Тут важливим завданням є оцінка необхідної точності результатів і наявної точності вихідних даних, погодження їх як між собою, так і з точністю використовуваної моделі;

□ універсальність, тобто застосовність моделі до аналізу ряду однотипних систем в одному або декількох режимах функціонування. Це дозволяє розширити область застосовності моделі для вирішення більшого кола завдань;

□ доцільна економічність, тобто точність отримуваних результатів і спільність рішення завдання повинні ув'язуватися з витратами на моделювання. Вдалий вибір моделі, як показує практика, – результат компромісу між відпущеними ресурсами та особливостями використовуваної моделі та ін.

Вибір моделі і забезпечення точності моделювання вважається однією з найбільш важливих завдань моделювання. Похибки моделювання викликаються:

- *об'єктивними причинами*, пов'язаними зі спрощенням реальних систем,
- *суб'єктивними причинами*, обумовленими недоліком знань і навичок, особливостями характеру тієї чи іншої людини.

Похибки можна:

- запобігти;
- компенсувати;
- врахувати.

Тому завжди обов'язкова оцінка правильності отримуваних результатів. У техніці швидку оцінку точності моделі часто проводять наступними способами:

- ✓ перевіряють відповідність результатів фізичному сенсу (здоровому глузду) Зручно це робити для окремого випадку моделі, коли рішення очевидно. Іноді навіть говорять, що ще перед рішенням завдання фахівець вже повинен представляти характер і порядок очікуваного результату. Точність такого подання залежить від:

- ✓ розвиненості фізичної уяви стосовно об'єкту;
- ✓ досвіду роботи з подібними системами;
- ✓ перевіряють виконання окремих очевидних умов завдання, що дозволяє відсікти неприйнятні рішення;
- ✓ перевіряють дотримання тенденції зміни величин і знаків результатів (монотонність, циклічність, плавність і т. п.);
- ✓ перевіряють правильність розмірності отриманого результату (якщо робота ведеться з аналітичними залежностями).

Точність подання результатів моделювання повинна співвідноситись із точністю контрольно-вимірних приладів, що використовуються на реальному об'єкті. Відомо, що за допомогою грубих вимірів, використання контрольно-вимірювальних приладів з низькою точністю або наближених вихідних даних неможливо отримати точні результати. Тому важливо пам'ятати про наступне:

- ❑ точність результатів розрахунків і експериментальних досліджень моделі *не може перевищити* точності вихідних даних, використовуваних приладів, вимірювальних інструментів і т. п.;
- ❑ вид обраної моделі повинен *узгоджуватися* з точністю вихідних даних і необхідною точністю результатів;
- ❑ бажана точність результатів повинна *відповідати потребам і реаліям практики*.

1.3 Сучасні напрями застосування комп'ютерного моделювання у фармації

В даний час для передбачення фізіологічної активності, сумісності ліків та допоміжних речовин встановлення залежності між структурою і властивостями речовин застосовується комп'ютерне та математичне моделювання. Для цього використовуються такі засоби:

Методологія QSAR. Методологією QSAR є дослідження кількісної взаємозв'язку між структурою та активністю, при використанні якої структура хімічної сполуки виражається певними дескрипторами (параметрами): молекулярною масою, числом атомів певного типу, зв'язків або груп, молекулярного об'єму, часткові заряди на атомах. Для передбачення фізіологічної активності в QSAR використовують дескриптори, що розраховані на основі стеричних, топологічних особливостей структури,

електронних ефектів, ліпофільності. Використання моделі QSAR (математичного рівняння) за кордоном при створенні нових сполук із заданими властивостями дозволяє значно скоротити час і ресурси, а також здійснювати більш цілеспрямований синтез сполук.

Комп'ютерне моделювання лікарських препаратів (ЛП) або комп'ютерний дизайн ліків (CADD) являє собою сукупність обчислювальних методів (включаючи QSAR) і програм, використовуваних для спрямованого молекулярного дизайну ліків. Повний обчислювальний дизайн неможливий, бо багато властивостей потенційних ЛП можна визначити виключно експериментальним шляхом (обчислювальні оцінки носять лише якісний характер). Комп'ютерний дизайн CADD розглядається як окремий напрямок CAMD – комп'ютерного молекулярного дизайну.

Використання Інтернету. Реалізована можливість прогнозу спектру біологічної активності речовин через Інтернет. Використовуючи стандартні браузері Google Chrome або Internet Explorer, можна направити на прогноз структурну формулу речовини (у вигляді mol-файлу) і автоматично отримати на дисплеї прогноз видів біологічної активності найбільш ймовірних для досліджуваного хімічної сполуки.

Клітинні автомати, аналогічно до методології QSAR, активно використовуються як інтуїтивно понятійний інструмент моделювання фізико-хімічних явищ. Це метод дискретно-динамічного моделювання з можливістю використання паралельних обчислень. Об'єкт представляється моделлю, утвореної безліччю рівновеликих клітин. Кожній клітині може бути приписано деяке значення властивості системи (концентрація, температура, тиск і ін.), Які періодично можуть змінюватися. Клітинно-автоматна модель використовується при вивченні вивільнення лікарських речовин, для прогнозування розвитку епідемій.

Драг-дизайн. Направлене конструювання нових лікарських препаратів або драгдизайн має пряме відношення до нанотехнологій, оскільки взаємодіючі об'єкти (ліки і мішені) є молекулярними об'єктами. На сьогоднішній день конструювання ліків – це синергізм геноміки, протеоміки, хімії, медицини та інформатики.

РОЗДІЛ 2. РЕАЛІЗАЦІЯ МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ЗАСОБАМИ КОМП'ЮТЕРНИХ ТЕХНОЛОГІЙ

2.1 Робота в MathCAD

Mathcad є унікальною системою для наукових і інженерних розрахунків і дозволяє працювати з формулами, числами, текстом і графіками.

За допомогою Mathcad можна розв'язати майже будь-яку математичну задачу символічне або чисельне. *Mathcad дозволяє записувати на екрані комп'ютера формули в їх звичному вигляді.*

Mathcad має свою власну довідкову систему. Електронні Книги роблять доступними для використання в робочому документі безліч корисних формул, довідкових даних і діаграм простим натисканням кнопки.

Об'єднуючи в одному робочому аркуші текст, графіку, і математичні викладки, Mathcad полегшує розуміння найскладніших обчислень.

Особливості Mathcad:

- ❑ Повна сумісність з Windows: зміна розмірів вікон та їх переміщення, відкриття декількох вікон, підтримка миші.

- ❑ Можливість комбінування тексту, математичних викладок і графіки в будь-якому місці екрану.

- ❑ Вбудований алгоритм вирішення систем рівнянь і нерівностей.

- ❑ Дії з похідними та інтегралами.

- ❑ Обчислення сум рядів, добутків та ітерацій.

- ❑ Розрахунок тригонометричних, гіперболічних, експоненціальних і Беселевих функцій.

- ❑ Статистичні функції, включаючи лінійну регресію, гамма-функцію Ейлера, інтеграл похибок, функції імовірнісних розподілів.

- ❑ Вектори і матриці, включаючи операції матричного множення, обертання, матриць, транспонування, обчислення визначника матриць, скалярне і векторне множення.

- ❑ Символьне інтегрування і диференціювання.

- ❑ Обернення, транспонування і обчислення визначника матриць.

- ❑ Розмаїття типів графіків: в декартових координатах, графіки в полярних координатах, побудова поверхонь в трьох вимірах, побудова ліній рівня, картини векторних полів, тривимірних гістограмм, точкові графіки.

- ❑ Анімація графіків і будь-яких інших об'єктів робочого документа.

Робоче вікно Mathcad зображено на рис. 2.1

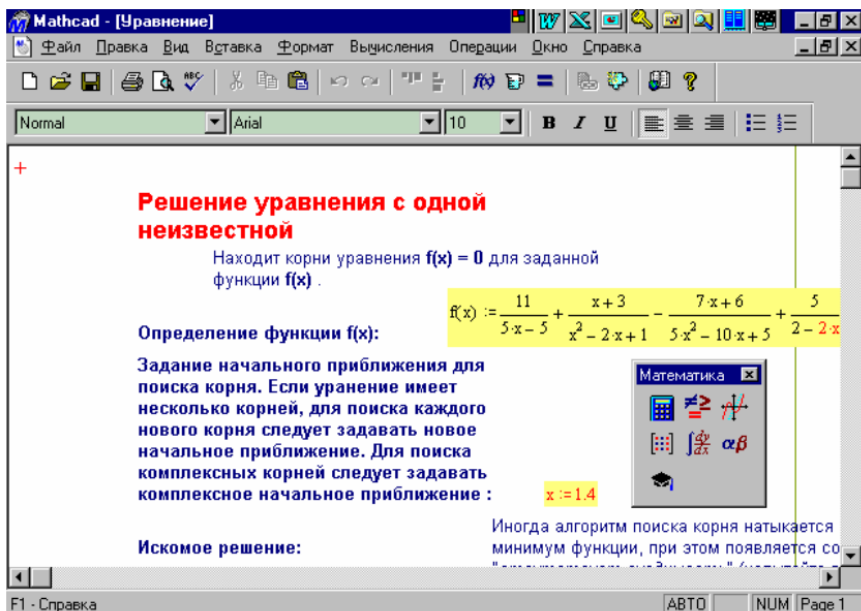


Рисунок 2.1 – вікно програми Mathcad

Робоче вікно Mathcad є стандартним вікном Windows – додатку. Зверху розташовується рядок заголовка, де наводиться назва програми (Mathcad) і ім'я робочого листа (документа). Нижче розташовується рядок меню, де всі команди пакета згруповані за функціональним призначенням. Нижче рядка меню розташовуються панелі інструментів **Стандартна** і **Форматування**. Панель **Математика** зазвичай знаходиться в робочій зоні документа. Для відкриття інших панелей необхідно виконати послідовність – Вид / Панелі. За допомогою курсору можна міняти положення і форму панелей. Сама нижня рядок – рядок стану, де наводиться інформація про поточні режими. Для зручності роботи з великими листами є лінійки вертикального і горизонтального прокручування.

Основним документом Mathcad є робочий лист, межі якого показуються суцільною лінією, а поля – штриховий. Mathcad допускає введення формул і тексту в будь-якому місці робочого документа. Кожен математичний вираз або фрагмент тексту є *областю*. Робочий документ Mathcad є сукупність таких областей. Mathcad створює три типи областей:

- текстове,
- математичне
- графічне.

Щоб зробити області видимими необхідно виконати команду **Межі / Вид**. Mathcad відобразить порожній простір сірим кольором, зайняті області фоновим кольором. Для скасування видимості знову повторити комбінацію – **Межі / Вид**.

Для більшої наочності об'єкти Mathcad – вираження, текст, графіки і т. п. виконуються *різним стилем шрифту і кольору*, налаштування яких можна змінити.

Для виклику контекстного меню, необхідно натиснути праву кнопку миші, з'явиться меню відповідне сучасному стану курсора або обраного об'єкта Mathcad.

Панель Стандартна зображена нижче.



Позначення:

1. - створити новий робочий лист;
2. - відкрити існуючий робочий лист;
3. - зберегти поточний робочий лист на диску;
4. - друк робочого аркуша;
5. - попередній перегляд робочого листа перед друком;
6. - перевірити текст на наявність орфографічних помилок;
7. - перемістити виділене в Буфер Обміну;
8. - скопіювати виділене в Буфер Обміну;
9. - вставити вибрану з буфера обміну в документ;
10. - скасувати останню редагування;
11. - відновити останній редагування;
12. - розділити області в разі їх накладення;
13. - вирівняти області по лівій межі;
14. - вставити функцію;
15. - вибрати одиницю виміру для виділеного виразу;
16. - обчислити робочий лист;
17. - зв'язати робочий лист з файлом або адресою в Internet;
18. - вставити компонент (використання баз даних, наприклад Excel);
19. - доступ до Ресурс Центру;
20. - Допомога.

Панель Математика. На цій панелі розташовані такі кнопки:



Арифметичні прилади



Прилади знаків



Побудова графіків



Векторні та матричні операції



Оператори математичного аналізу



Символьні оператори



Грецька абетка

Панелі розташовані в декількох рядках:

1. *Рядок заголовка.* Містить назву системи та ім'я поточного файлу. На початку кожного нового етапу роботи з системою поточному файлу привласнюється ім'я Untitled.

2. *Рядок головного командного меню.* Містить найбільш важливі команди керування системою: File – робота з файлами; Edit – засоби редагування; View – змінення зовнішнього оформлення інтерфейсу; Insert – вставлення різних об'єктів; Math – керування обчисленнями; Graph – засоби роботи з графікою; Symbolic – засоби проведення символьних обчислень; Window – керування вікнами; Help – доступ до довідкової системи.

3. *Рядок стандартної панелі інструментів.* Містить деякі команди керування системою, які найбільш часто використовуються при роботі з поточними файлами. Кожна з кнопок цієї панелі фактично дублює аналогічні команди головного командного меню.

4. *Рядок панелі інструментів форматування.* Дозволяє встановлювати стиль зовнішнього оформлення документа, тип та розмір шрифту для вбудованого в систему текстового редактора та ін.

5. Рядок панелі математичних операцій. Це найважливіший елемент інтерфейсу. За допомогою панелі математичних операцій проводиться організація та проведення всіх можливих типів обчислень. Кожна з кнопок цієї панелі може бути активізованою, і при цьому на екрані з'являються інші панелі, призначені для організації та проведення конкретних обчислювальних операцій. Структуру повністю активізованої панелі Math представлено на рис. 2.2

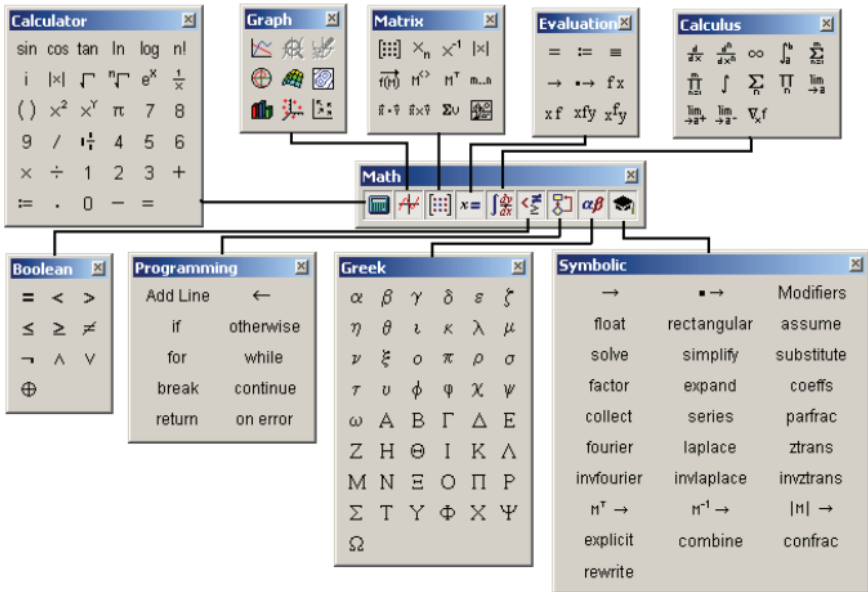


Рисунок 2.2 – Структура повністю активізованої панелі Math (математика) системи Mathcad

Панель Calculator дає змогу використовувати систему в режимі звичайного калькулятора, тобто проводити звичайні арифметичні обчислення. Всі символи, які відповідають кожній позиції цієї панелі, візуалізуються на екрані після підведення курсора миші до відповідного символу та натиснення лівої кнопки миші. Кожний з символів можна також вводити безпосередньо з клавіатури.

Активізована панель Graph робить доступними засоби створення та редагування графічної інформації: побудови графіків у декартових, полярних координатах, відображення на екрані різних видів тривимірної графіки та ін.

За допомогою панелі Matrix можна працювати з матричними об'єктами та використовувати при проведенні обчислень засоби лінійної алгебри.

Палітра Evaluation дозволяє здійснювати операції привласнення та виведення інформації.

Палітра Calculus забезпечує проведення основних обчислювальних операцій, пов'язаних з диференціюванням, інтегруванням, розрахунками рангованих сум та добутків, обчисленням границь.

За допомогою панелі Boolean можна вводити логічні оператори та проводити обчислення за допомогою апарата алгебри логіки.

Панель Programming призначена для формування користувачем програмних блоків. Mathcad має власні засоби програмування, які базуються, як бачимо, на застосуванні поширених у традиційних мовах операторів while, for, if тощо. Аналітичні обчислення в системі Mathcad проводяться за допомогою палітри Symbolics.

Символи грецького алфавіту в іменах змінних або в інших математичних конструкціях вводяться за допомогою панелі Greek.

Уся інша частина екрана є *робочим полем* документа. В робочому полі створюються різноманітні обчислювальні конструкції, проводиться візуалізація результатів обчислень, вставляються текстові, графічні зони, а також об'єкти, створені з використанням інших програмних засобів (наприклад, файли, створені засобами Microsoft Office, графічні зображення в форматах jpg, bmp, gif тощо).

Істотним доповненням довідкової системи є *центр ресурсів* Mathcad (доступ до центра ресурсів здійснюється активізацією відповідної кнопки на стандартній панелі інструментів). Він містить керівництво для починаючих користувачів (розділ Overview and Tutorial), довідкові таблиці, необхідні для проведення багатьох типів прикладних розрахунків, колекцію зразкових документів, що ілюструють застосування вбудованих функцій системи в конкретних задачах (розділи QuickSheets, Reference Tables).

2.2 Розрахунки в MathCAD

Робота в середовищі системи Mathcad здійснюється шляхом формування за допомогою засобів інтерфейсу відповідних математичних конструкцій та їх обчислень за певними командами. За умовчанням пакет встановлює автоматичний режим обчислень, тобто після формування будь-якого обчислюваного виразу та подання відповідної команди зразу здійснюються обчислення. Конструкції можна формувати у будь-якому місці робочого поля документа, але всі обчислення проводяться у послідовності «зліва-направо» та «зверху вниз». Особливістю роботи в системі Mathcad є те, що будь-який вираз у процесі його набору приймає на екрані звичну для сприйняття форму. Це є однією з причин її широкої популярності. Для успішного розв'язання відносно простих задач достатньо засвоїти лише декілька головних команд. Серед них відзначимо наступні:

`=` – («звичайний» знак рівності). Команда, що повертає результат чисельного розв'язання;

`→` – команда на проведення символічних (аналітичних) обчислень;

`≐` – («жирний» знак рівності). Пов'язує ліву та праву частини рівнянь у розв'язуючих блоках, а також використовується при проведенні символічних обчислень;

`:=` – оператор привласнювання чисельного значення змінній (оператор локального визначення);

`≡` – оператор глобального визначення змінної;

`←` – оператор привласнювання значення змінній у програмних блоках.

Усі команди та оператори можна вводити або безпосереднім набором з клавіатури або натисненням відповідної кнопки на панелі інструментів. Окрім математичних конструкцій (*обчислювальних зон*), у робочому полі можна створювати також *графічні* та *текстові зони*, вставляти об'єкти, створені за допомогою інших програмних продуктів. Готовий документ можна записати у вигляді файлу. Якщо цей файл буде використовуватися для подальших обчислень, йому необхідно привласнити розширення ``.xmc`` або ``.mcd``. При цьому є можливість запису файлу в форматі різних версій системи. Можна також записувати документ у форматах ``.rtf``, ``.htm``, але після цього його не можна використовувати для проведення обчислень.

Приклад 1. Для розбавлених розчинів неелектролітів осмотичний тиск p визначається простою формулою *Вант-Гоффа*:

$$p = cRT.$$

C – концентрація, моль/л, R – універсальна газова постійна.

Необхідно розрахувати значення осмотичного тиску розчину неелектроліту з концентрацією $c = 0,005$ моль/л при $T = 293$ К.

Розв'язання. В загальному випадку складання документа для розв'язання задач подібного типу має три етапи:

а) визначення констант, тобто привласнення їм конкретних чисельних значень;

б) запис розрахункових формул у вигляді комбінації визначених змінних;

в) застосування команди на проведення обчислень з візуалізацією результату.

Отже, для розв'язання задачі достатньо привласнити чисельні значення трьом змінним: концентрації c , універсальній газовій сталій R та температурі T , визначити обчислювальну конструкцію та дати команду на проведення обчислень.

Привласнювання чисельних значень та формування обчислювальних конструкцій здійснюється за допомогою операторів:

`:=` або `≐`.

Подання команди на обчислення здійснюється введенням «звичайного» знаку рівності.

Зауваження.

1. При використанні локального визначення змінних наведеної послідовності етапів розрахунків порушувати не можна – це призведе до синтаксичної помилки.

2. Будь-яка змінна повинна бути визначена до того, як в документі зустрічається та обчислювальна конструкція, в якій зустрічається ця змінна.

3. Паралельно з проведенням обчислень система Mathcad автоматично діагностує стан поточного документа, виявляючи різні синтаксичні помилки або так звані аварійні ситуації – неможливість проведення обчислень з якихось причин (наприклад, такою аварійною ситуацією може бути спроба ділення на нуль). У таких випадках некоректно визначені конструкції або їх певні елементи на екрані набувають червоного кольору і безпосередньо в тому місці, де вони розташовані, з'являється діагностичне повідомлення з вказівкою конкретної причини неможливості подальшого проведення розрахунків. На рис. 2.2 показано, як саме діагностується синтаксична помилка при некоректному складанні документа. Зараз змінній r привласнюється значення $r:=c.R.T$, але при цьому змінна s ще не визначена (This variable or function is not defined above). Виправити помилку можна, якщо перенести всі конструкції, в яких локально визначені змінні c , R , T , у будь-яке вільне місце робочого поля перед конструкцією $r:=c.R.T$. Сказане стосується лише тих ситуацій, коли при визначенні змінних використовується оператор *локального привласнювання*.

У документах можна застосовувати також і *глобальне визначення змінних*. При глобальному визначенні порядок розташування в робочому полі відповідних конструкцій, призначених для привласнювання чисельних значень, не має значення. Зокрема, цілком коректне скласти документ так, як це показано на рис. 2.2. Відзначимо, що для визначення необхідних змінних використано оператор глобального привласнювання чисельного значення, і всі відповідні конструкції при цьому розташовані у *кінці документа*. Звернемо увагу на те, що в процесі формування обчислювальних конструкцій вони набувають свого «природного» вигляду – такого, до якого ми звикли, коли записуємо будь-які формули на папері. Звичайно, ці конструкції можуть мати будь-який рівень складності, і забезпечення високої наочності розрахунків є дуже характерним для документів системи Mathcad. Додатковим засобом підвищення наочності документів є формування у просторі робочого поля текстових зон. Текстову зону можна сформувати за допомогою команд головного командного меню `Insert|Text Region`. При цьому стають доступними для роботи засоби вбудованого текстового редактора. Вся інформація, яку містять текстові зони, відіграє лише роль коментарю й не бере участі в обчисленнях. Можна підключати і більш потужні текстові редактори. Наприклад, за командами головного командного меню `Insert|Object|Document Microsoft Word` у робочому полі можна формувати текстові зони, використовуючи офісні засоби Windows.

2.3 Побудова графіків і функцій в Mathcad

Для задання діапазону зміни з рівномірним кроком значень змінної у пакеті MathCad використовується діапазонна чи, як ще її називають, ранжована (від англійського *range* – діапазон) змінна. Така змінна може бути аналогом циклу зі сталим кроком в алгоритмічній мові і задається так:

$$\text{Name} := \text{Nbegin}, (\text{Nbegin} + \text{Step}) .. \text{Nend}$$

де *Name* – ім'я змінної,
Nbegin – початкове значення змінної,
Step – крок зміни змінної,
Nend – кінцеве значення змінної.
Приклади задання ранжованої змінної:


1. Змінна *x* змінюється від **0** до **10** з кроком **1**, тобто $0 \leq x \leq 10$, $\Delta x = 1$
Тоді в Mathcad це буде задаватися так ***x:=0..10***
2. Змінна *x* змінюється від **1** до **9** з кроком **2**, тобто $0 \leq x \leq 9$, $\Delta x = 2$.
Тоді в Mathcad це буде задаватися так ***x:=1,3..9***
3. Змінна *x* змінюється від **1** до **10** з кроком **0.5**, тобто $1 \leq x \leq 10$, $\Delta x = 0.5$.
Тоді в **Mathcad** це буде задаватися так ***x:=1,(1+0.5)..10***
4. Змінна *x* змінюється від **10** до **1** з кроком **0.5**, тобто $10 \geq x \geq 1$, $\Delta x = 0.5$.
Тоді в **Mathcad** це буде задаватися так ***x:=10,(10-0.5)..1***

Задача табулювання функції на заданому проміжку полягає в наступному: необхідно обчислити значення заданої функції $f(x)$ при кожному значенні аргументу x на заданому проміжку із заданим кроком зміни аргументу x . Розглянемо розв'язування цієї задачі засобами MathCad на прикладі.

Приклад 1. Виконати табулювання функції (1.1) та побудувати графік засобами MathCad.

$$f(x) = 2 \cdot (x - 5)^2 + \frac{5x}{2} - 2, \quad 0 \leq x \leq 5, \quad \Delta x = 1. \quad (1.1)$$

Розв'язання.

Крок 1. Табулювання. Створити ранжовану змінну: вказати позицію курсора-хреста у вільному місці та набрати на клавіатурі ***x:0;5***. Вказати покажчиком миші в іншому місці і отримати ***x:=0..5***. Зауважимо, що коли натискається клавіша “;”, то на екрані можна бачити “..”, а за ними місцезаповнювач. Ці дві крапки є оператором області визначення змінної у **MathCad**. Також цей оператор можна ввести, натиснувши кнопку 

палітри 



Визначити функцію $f(x)$ та побудувати таблиці для x та $f(x)$, набираючи знак "=" після відповідної величини, після чого можна бачити:

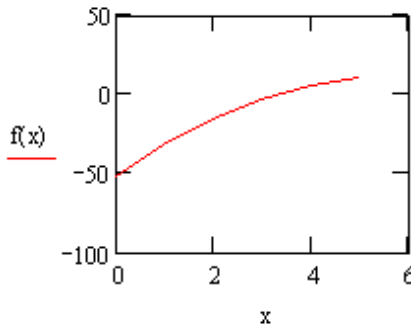
$x:=0..5$

$$f(x) := -2 \cdot (x - 5)^2 - 2 + \frac{5 \cdot x}{2}$$

$x =$	$f(x) =$
0	-52
1	-31.5
2	-15
3	-2.5
4	6
5	10.5

Крок 2. Побудова графіку. Створити на вільному місці шаблон для

графіка, використовуючи кнопку  палітри графіків  математичної панелі, і надрукувати символ x в середній мітці горизонтальної та символ $f(x)$ в середній мітці вертикальної осей. Буде побудований графік, подібний наведеному:



Mathcad вбудовано декілька різних типів графіків, які можна розбити на дві великі групи:

1. Двовимірні графіки:

- **X-Y** графік (**X-Y Plot**);
- Полярний графік (**Polar Plot**).

2. Трьохвимірні графіки:

- Графік тривимірної поверхні (**Surface Plot**);

- Графік ліній рівня (**Contour Plot**);
- Тривимірна гістограма (**3D Bar Plot**);
- Тривимірна множина точок (**3D Scanner Plot**);
- Векторне поле (**Vector Field Plot**).

Поділ графіків на типи є умовним, так як керуючи установками багатьох параметрів, можна створювати комбінації типів графіків, а також нові типи графіків.

Створення графіка. Всі графіки створюються за допомогою панелі інструментів **Graph** (График). Щоб створити, наприклад, двовимірний графік в декартовій системі координат, необхідно:

Помістити курсор вводу в те місце документа, куди потрібно вставити графік.

Якщо на екрані немає панелі **Graph** (График), то викличте її натисканням кнопки із зображенням графіків на панелі **Math** (Математика).

Натисніть на панелі **Graph** (График) кнопку **X-Y Plot** для створення графіка в декартовій системі координат, або натисніть іншу кнопку для створення іншого графіка.

В результаті цих дій з'явиться порожня область графіка з одним або декількома місцезаповнювачами. Введіть в місцезаповнювачі імена змінних або функцій, які повинні бути відображені на графіку. В нашому випадку це два місцезаповнювачі – один на осі **x**, другий – на осі **y**. Якщо імена даних введені правильно, то графік з'явиться на екрані.

Створений графік можна змінювати:

- ✓ змінюючи дані,
- ✓ форматуючи його зовнішній вигляд,
- ✓ додаючи додаткові елементи оформлення.

Щоб видалити графік, потрібно клацнути в його межах і вибрати в меню **Edit** (Правка) пункт **Cut** (Вирезать) або **Delete** (Удалить).

Побудова декількох рядів даних. На одному графіку можна побудувати до 16 різних залежностей. Щоб побудувати на графіку ще одну криву, необхідно виконати такі дії:

Помістити лінії вводу таким чином, щоб вони повністю захоплювали вираз, який стоїть в надпису координатної осі **y**.

Натиснути клавішу **<, >**.

В результаті цих дій з'явиться місцезаповнювач, в який потрібно ввести вираз для другої кривої.

Клацніть в будь-якому місці поза цим виразом (на графіку або за його межами). Після цього друга крива буде відображена на графіку.

Щоб в одній системі координат побудувати графіки функцій різних аргументів, потрібно ввести імена цих аргументів через кому біля осі **x**.

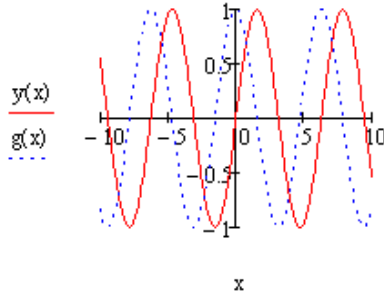
Приклад 2. Побудувати графіки функцій $y = \sin(x)$ та $g = \cos(x)$, $-10 \leq x \leq 10$, $\Delta x = 0,2$

Розв'язання. Задаємо ранжовану змінну x та функції $y(x)$ та $g(x)$:

$$x := -10, (-10 + 0.2) .. 10$$

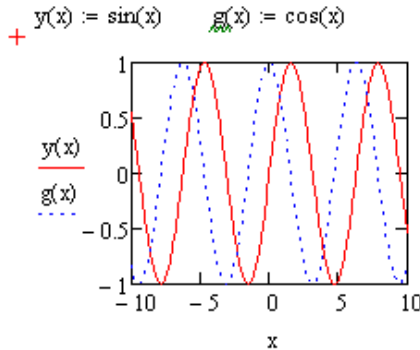
$$y(x) := \sin(x) \quad g(x) := \cos(x)$$

Побудуємо графіки функцій $y(x)$ та $g(x)$:



Форматування графіків. Форматування графіків включає в себе управління їх зовнішнім виглядом, діапазоном, шкалою та відображенням деяких значень на осях за допомогою маркерів.

Коли графік будується вперше і користувач не задав діапазон даних для аргументу функції, Mathcad автоматично задає діапазон для обох координатних осей.



Щоб змінити цей діапазон, необхідно:

- Перейти до редагування графіка, клацнувши мишкою в його межах.
- Графік буде виділений, а поблизу кожної із осей з'являться два поля з числами, які означають межі діапазону. Клацніть мишею в області одного із полів, щоб редагувати відповідні межі осі.
- Користуючись клавішами управління курсором і клавішами **<BackSpace>** та ****, вилучіть вміст поля.

- Введіть нове значення діапазону.
- Клацніть за межами поля і графік буде автоматично перебудований в нових межах.

Зміна зовнішнього вигляду шкали, нанесеної на координатну вісь, виконується за допомогою вікна діалогу **Formatting Currently Selected X-Y**:

- Plot** (Форматирование выбранного графика), в якому необхідно перейти на вкладку **X-Y Axes** (Оси X-Y). Викликати вікно діалогу можна подвійним клацанням миші в області графіка або виконанням команди **Format/Graph/X-Y Plot** (Формат/График/X-Y График), або вибором в контекстному меню команди **Format** (Формат). За допомогою прапорців та перемикачів можна легко змінити зовнішній вигляд кожної із осей. Назвемо доступні опції та пояснимо їх дію:
- Grid lines** (Линии сетки) – показати лінії сітки;
- Numbered** (Нумерация) – показати нумерацію шкали;
- Autoscale** (Автоматический масштаб) – вибор діапазону осі виконується автоматично процесором **Mathcad**;
- Show markers** (Показать маркеры) – виділення значень на осях;
- AutoGrid** (Автоматическая шкала) – розбиття шкали виконується автоматично процесором **Mathcad**;
- Equal scales** (Одинаковый масштаб) – осі **x** та **y** примусово малюються в однаковому масштабі;
- Axes Style** (Вид оси) – можна вибрати один із трьох видів системи координат:
- Boxed** (Прямоугольник) – графік будується в прямокутній області;
- Crossed** (Пересечение) – координатні осі відображаються у вигляді двох прямих, що перетинаються;
- None** (Нет) – координатні осі не відображаються на графіку.
- Щоб відформатувати стиль побудованих кривих, необхідно перейти на вкладку **Trace** (Кривые) вікна діалогу **Formatting Currently Selected X-Y Plot** (Форматирование выбранного графика). На цій вкладці можна вибрати тип кривої, форму та розмір маркерів точок, тип і товщину ліній, а також задати колір та легенду для кожної з кривих:
- Legend label** (Метка легенды) – текст легенди;
- Symbol Frequency** (Частота символов) – частота символів, які відмічають точки (цей параметр визначає, або буде відмічатися кожна точка графіка, або кожна 2-га, 3-я і т. д.);
- Symbol** (Символ) – символ, яким позначаються окремі точки даних;
- Symbol Weight** (Размер символа) – розмір точок даних;
- Line** (Линия) – стиль лінії: суцільна, пунктирна, штрихова тощо;
- Line Weight** (Толщина) – товщина лінії і точок даних;
- Color** (Цвет) – колір лінії і точок даних;

- Type** (Тип) – тип представлення ряду даних:
- lines** (линії);
- points** (точки);
- error** (помилка);
- bar** (стовпець);
- step** (крок);
- draw** (рисунок);
- stem** (стебель);
- solid bar** (гістограма).

Маркерами на координатних осях відмічаються мітки деяких значень. Маркер – це лінія, перпендикулярна до осі та підписана числом. Щоб створити маркер, необхідно:

- ✓ Двічі клацнути на графіку.
- ✓ На вкладці **X-Y Axes** (Оси X-Y) діалогу **Formatting Currently Selected X-Y Plot** (Форматирование выбранного графика) встановити прапорець **Show markers** (Показать маркеры).
- ✓ Натиснути кнопку **OK**.
- ✓ В місцезаповнювачі введіть число або ім'я змінної, значення якої ви хочете відобразити на осі маркером.
- ✓ Клацніть зовні маркера.

Будь-яке алгебраїчне або трансцендентне рівняння, що містить невідоме x , можна записати у вигляді $F(x) = 0$. Точним (нульовим) коренем рівняння є таке значення x , при якому ліва частина рівняння тотожно дорівнює нулю. У більшості чисельних розрахунків можна досягти лише наближеного розв'язку рівняння з деякою точністю. ϵ .

Наближеним розв'язком рівняння з точністю $\epsilon > 0$ є таке знайдене значення x^* , при підстановці якого у вихідне рівняння виконується умова

$$|F(x^*)| \leq \epsilon. \quad (1.2)$$

Велика кількість обчислювальних задач потребує чисельного розв'язання алгебраїчних рівнянь. Не кожне рівняння можна розв'язати «ручним способом», тому комп'ютерні засоби розв'язання мають велике значення.

Звичайно, в Mathcad без особливих зусиль можна створити відповідні конструкції, які дозволяють чисельно розв'язувати рівняння. Так, документ Mathcad може містити в явному вигляді відповідний алгоритм, що базується на стандартних чисельних методах (метод половинного ділення, метод січних, метод дотичних тощо). Розглянемо, наприклад, яким чином можна реалізувати чисельний метод *Ньютона* (метод дотичних).

Пошук кореня рівняння за методом Ньютона здійснюється за допомогою ітераційної формули:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}. \quad (1.3)$$

На кожній ітерації використовується значення x_{i+1} , яке розраховується на основі попередніх значень функції $f(x_i)$ та її похідної $f'(x_i)$. Для того щоб почати обчислення, необхідно задати певне значення початкового наближення x_0 для шуканого кореня.

Точність ε чисельних розрахунків у середовищі Mathcad задається наперед визначеною змінною TOL. За умовчанням автоматично встановлюється значення TOL = 0,001. Отже, якщо обчислене значення x_{i+1} задовольняє умові $f(x_{i+1}) \leq \text{TOL}$, його можна вважати коренем рівняння.

Розглянемо задачу про визначення рН розчину слабкого електроліту, важливу для фізико-хімічної медицини.

Розрахувати рН 0,1 М розчину ацетатної кислоти.

Розв'язання. Відомо, що для розчину слабкої кислоти зв'язок між концентрацією іонів $[H^+]$, сумарною концентрацією кислоти C_{HA} , константою дисоціації кислоти K_d та іонним добутком води K_w передається рівнянням:

$$C_{HA} = \frac{\{H^+\} - K_w}{K_d} + [H^+] - \frac{K_w}{H^+}. \quad (1.4)$$

Отже, для отримання результату необхідно чисельно розв'язати це рівняння відносно $[H^+]$ при відомих значеннях C_{HA} , K_d , K_w . Розглянутих раніше засобів роботи з ітеративними змінними цілком достатньо, щоб скласти наведений на рис. 2.1 документ.

Отже, рН розчину кислоти заданої концентрації складає 2,869. Як видно з документа (рис. 2.1), запис алгоритму методу Ньютона не викликає труднощів, оскільки Mathcad має дуже зручні засоби роботи з індексними змінними.

Слід визнати, що такий варіант розрахунку містить надлишкову проміжну інформацію щодо ходу обчислень. Зрештою нас цікавить лише результат розв'язання, а не значення чергового наближення на певній ітерації. У даному випадку розв'язок знайдено за певну кількість кроків. Для іншого рівняння може статися, що задана кількість ітерацій недостатня для отримання кінцевого результату. Тоді кількість ітерацій необхідно збільшувати, що призведе, відповідно, до збільшення кількості проміжної інформації. Крім того, обидва варіанти розв'язку містять алгоритм методу Ньютона безпосередньо в структурі документа. Очевидно, що користувач цих документів повинен чітко уявляти собі суть цього чисельного методу. Тому наведені приклади корисні більше для освоєння ідеології чисельних методів розв'язання рівнянь, а не для дослідження конкретної проблеми. Наявність операторів програмування в середовищі Mathcad також дозволяє формувати алгоритмічні конструкції.

Перейдемо тепер до огляду вбудованих засобів безпосереднього пошуку коренів рівнянь у системі Mathcad. Для розв'язання алгебраїчних та трансцендентних рівнянь у середовищі Mathcad передбачена вбудована функція $\text{root}(F(x), x)$. Параметрами функції root є алгебраїчне рівняння $F(x)$, записане у вигляді $F(x) = 0$ та змінна x , відносно якої розв'язується рівняння. Перед застосуванням цієї функції в чисельних розрахунках обов'язково необхідно задати початкове наближення x_0 для шуканого кореню рівняння.

Отже, при роботі вбудованої функції root організується автоматичний процес пошуку кореня рівняння. Процес припиняється якщо досягнута умова $|F(x^*)| \leq \text{TOL}$. Таким чином, при роботі в середовищі Mathcad не потрібно думати про вибір методу розв'язання рівняння та, більше того, кодувати алгоритм методу. Обсяг документа, як бачимо, став значно меншим у порівнянні з попереднім прикладом.

Зауважимо, однак, що й останній документ має деякі недоліки. По перше, не зовсім зрозуміло, на підставі яких міркувань було визначено початкове наближення для шуканої величини N . По-друге, вигляд розрахункового рівняння свідчить про те, що воно кубічне відносно невідомої N і тому повинне мати три корені. У процесі ж обчислень, як бачимо, був знайдений лише один із коренів. У зв'язку з цим виникає питання, чи є знайдений корінь таким, що задовольняє умові задачі. Подібні проблеми можуть виникати в будь-якій задачі, що потребує застосування функції root , тому завжди при проведенні чисельних розрахунків слід аналізувати фізичний зміст задачі.

З математичного погляду розв'язок є цілком коректним: перед застосуванням вбудованої функції root було визначено початкове наближення і в результаті знайдений ще один корінь вихідного рівняння, яке цілком задовольняє умову заданої точності. Але, як бачимо з рис. 2.2, початкове наближення не має фізичного змісту, тому що відповідає від'ємним значенням концентрації іонів Гідрогену. Відповідно не має фізичного змісту і знайдений корінь. Таким чином, попередній варіант розв'язання (див. рис. 2.2), був правильним, оскільки з можливих коренів був знайдений саме той, що задовольняє фізичному змісту задачі. З наведених прикладів випливає, що за наявності в рівнянні декількох коренів вбудована функція root знаходить лише один корінь, а саме той з них, що найближче розташований від заданого початкового значення. Отже, залишається важливим питання, яке саме початкове значення для шуканого кореня слід задавати при розв'язанні конкретної задачі.

У загальному випадку доцільним було б увести певні обмеження на величину шуканого кореня рівняння, наприклад обмежити інтервал пошуку кореня.

Очевидно, що для будь-якого рівняння $F(x) = 0$ коренем є те значення x , при якому графік функції $F(x)$ перетинається з віссю абсцис.

Іншим засобом розв'язання рівнянь у середовищі Mathcad є застосування вбудованої функції polyroots . Ця функція дозволяє одночасно

знайти всі корені рівняння, яке може бути поданим у вигляді ступеневого полінома. Для здійснення цієї операції слід сформувати конструкцію $\text{polyroots}(v)$,

де v – вектор коефіцієнтів полінома.

При формуванні вектору v значення коефіцієнтів заносяться до нього в порядку збільшення ступеня, при якому вони розташовані. При застосуванні функції polyroots визначати початкові наближення також не потрібно.

У задачах моделювання досить часто потрібний чисельний розв'язок систем алгебраїчних рівнянь. Зокрема, велике коло подібних задач утворюють різноманітні випадки розрахунків рівноваг. При цьому складена система може містити велику кількість рівнянь, мати громіздкий вигляд і для її розв'язку необхідно використовувати комп'ютерну техніку. У переважній більшості системи рівнянь взагалі не мають аналітичного розв'язку, і в цьому випадку не можна обійтися без засобів чисельного розв'язання.

У середовищі Mathcad розв'язувати системи алгебраїчних рівнянь можна декількома способами. Розглянемо найбільш загальний з них, який можна застосовувати для всіх видів систем алгебраїчних рівнянь як лінійних, так і нелінійних. Цей спосіб можна здійснити шляхом формування розв'язуючого блока GIVEN/FIND. Важливо пам'ятати, що при використанні розв'язуючих блоків у чисельних розрахунках *перед* їх формуванням необхідно задати початкові наближення для змінних, відносно яких розв'язується система.

Отже, пакетом Mathcad знайдено розв'язок: $x = 2,286$; $y = 2,962$. При цьому результат обчислень подається у формі *вектора-стовпця*. Перевіримо точність розрахунку коренів системи, застосувавши вбудовану функцію ERR. Як бачимо з рис. 2.2, знайдений результат задовольняє заданій точності розрахунку і міг би розглядатися як кінцевий. Але якщо змінити значення початкових наближень та повторити обчислення, то можна побачити, що результат обчислень буде зовсім іншим. При цьому також задовольняється умова точності. Отже, система має й інший розв'язок. Наведений приклад свідчить, що як і у випадку розв'язання рівнянь з одним невідомим, при наявності у системи декількох розв'язків у результаті роботи розв'язуючого блока повертається тільки один, розташований найближче до заданих початкових наближень. Це слід мати на увазі у всіх випадках розв'язання конкретних хімічних задач. Важливо проаналізувати, скільки саме розв'язків може мати досліджувана система рівнянь і якщо є підстави вважати, що система має декілька розв'язків, слід відокремити ті з них, що відповідають фізичному змісту задачі.

**РОЗДІЛ 3. РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ
ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ І ПОРЯДКУ ЗА ДОПОМОГОЮ
КОМП'ЮТЕРНИХ ТЕХНОЛОГІЙ****3.1 Система диференціальних рівнянь**

Систем з n звичайних диференціальних рівнянь першого порядку (ЗДР) має вид:

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = f_1(t, x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \frac{dx_2}{dt} = f_2(t, x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \dots\dots\dots \\ \frac{dx_n}{dt} = f_n(t, x_1, x_2, \dots, x_n) \end{cases} \quad (3.1)$$

де $f_i(t, x_1, x_2, \dots, x_n)$ ($i=1, 2, \dots, n$) – функції заданого вигляду від змінної диференціювання t і невідомих x_1, x_2, \dots, x_n , що є функціями від t і підлягають визначенню.

Розв'язком системи (3.1) є набір функцій $\{x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)\}$, який, після підстановки у (3.1), перетворює цю систему на тотожність.

Необхідною умовою існування розв'язку системи є її *замкненість*, тобто кількість рівнянь системи повинно дорівнювати кількості невідомих функцій $x_i(t)$. У цьому системи ЗДР нагадують системи алгебраїчних рівнянь.

У реальних задачах за допомогою систем типу (3.1) описують динамічні системи де відбувається зміна з часом ряду показників: координат, концентрацій, зарядів та ін. Тому змінна диференціювання – це частіше за все – час (тому вона й позначена літерою t). В задачах фізико-хімічної медицини і фармакокінетики x_i – це частіше за все концентрації ліків та їх метаболітів у плазмі крові.

Подібно одиничним диференціальним рівнянням, системи ЗДР мають *загальний та частковий розв'язки*. Загальний розв'язок визначено з точністю до свавільного набору констант C_1, C_2, \dots, C_n . Частковий розв'язок визначається початковими умовами: набором з n значень функцій $\{x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0\}$, яке вони приймають у точці t_0 . Як і для окремих диференціальних рівнянь, цій набір називається *початковими умовами*, в задача нахождення часткового розв'язку, що проходить через початкове рішення – *задачею Коші*. У практичних задачах фізико-хімічної медицини та фармакології за точку відліку обирається $t = 0$, при якому величини $\{x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0\}$ мають сенс початкових концентрацій.

3.2 Розв'язок системи диференціальних рівнянь

Точний розв'язок задачі Коші є можливим лише в порівняно рідких випадках. Для знаходження часткового рішення в основному використовують чисельні методи.

Загальний принцип чисельного розв'язання: починаючи з точки (x_0, y_0) , рухаючись на обраній послідовності точок x_0, x_1, \dots, x_n обчислюють наближені значення y_0, y_1, \dots, y_n шуканого розв'язку задачі Коші.

Більшість чисельних методів можна представити у вигляді рекурентної формули

$$y_{i+1} = \varphi(y_{i-r}, y_{i-r+1}, \dots, y_i, y_{i+1}, \dots, y_{i+s}), \quad (3.2)$$

де:

φ – функція, що визначає обчислювальну схему методу;

r – кількість попередніх кроків, що використані для отримання розв'язку;

s – кількість наступних кроків, що використані для отримання розв'язку.

При цьому:

✓ якщо $r=0, 0 \leq s \leq 1$ – метод називається *однокроковим*;

✓ якщо $r \geq 1$ або $s > 0$ – метод називається *багатокроковим*.

Одно- та багатокрокові методи називають:

➤ *явними* при $s=0$;

➤ *неявними* при $s=1$;

➤ *методами із забіганням вперед* при $s > 1$.

Більшість чисельних методів розроблено для розв'язання одиничного диференціального рівняння. Але вони можуть бути застосовані для розв'язання систем рівнянь або рівнянь другого та більш високого порядків, шляхом зведення до послідовності одиничних рівнянь першого порядку.

Найпростішим однокроковим методом наближеного чисельного розв'язання задачі Коші є метод Ейлера (*метод ламаних*). У цьому методі наближені значення часткового розв'язку $y(x_i)$ на відрізку $[x_0, x_1 = x_0 + \ell]$ визначаються за допомогою дотичних.

Нехай $A(x_0, y_0)$ – точка через яку проходить інтегральна крива AC, що є розв'язком диференціального рівняння $y'(x) = f(x, y)$ при початковій умові $y(x_0) = y_0$ (рис. 3.1). Виконаємо наступні дії:

а) проведемо через точку A дотичну АВ до кривої AC. При цьому за визначенням:

$$\operatorname{tg} \alpha = y'(x_0) = f(x_0, y_0); \quad (3.3)$$

б) розрахуємо ординату точки перетину дотичної АВ і прямої $y=x_1$ (рис. 3.1);

в) з прямокутного трикутника ABD маємо при $\Delta x = x_1 - x_0$:

$$y_1 - y_0 = (x_1 - x_0) \cdot \operatorname{tg} \alpha = (x_1 - x_0) \cdot f(x_0, y_0) = f'(x_0, y_0) \cdot \Delta x; \quad (3.4)$$

в) будемо розглядати точку перетину y_1 за *наближене значення* розв'язку диференціального рівняння $y(x_1)$ точки x_1 , тобто $y(x_1)=y_1^{(b)} \approx y_1$. Звідси:

$$y(x_1) \approx f(x_0, y_0) \cdot \Delta x. \quad (3.5)$$

Вираз (3.5) дозволяє отримати *наближене значення* невідомої функції у точці x_1 через *значення дотичної* цієї функції у точці x_0 та її *відстані* Δx від точки x_0 . Воно буде тим точніше, чим менше величина $\Delta x = x_1 - x_0$.

Користуючись формулою (3.5), можна побудувати наступний алгоритм наближеного чисельного розв'язку диференціального рівняння у точці x_f :

а) розділимо відстань від x_0 до x_f на N кроків однакової довжини h :

$$h = \frac{x_f - x_0}{N}; \quad (3.6)$$

б) на першому кроці візьмемо $x_1 = x_0 + h$, обчислимо по формулі (3.5) наближене значення $y_1 = y(x_1)$

в) на другому кроці використаємо одержане значення y_1 замість y_0 у формулі (3.5) для розрахунку наближеного значення y_2 в точці $x_2 = x_1 + h$;

г) подібний процес продовжуємо далі, так, що на довільному i -му кроці буде:

$$y(x_i) \approx y(x_{i-1}) + f(x_{i-1}, y_{i-1}) \cdot h, \quad (i = 1, 2, \dots, N); \quad (3.7)$$

д) після N -го кроку одержимо шуканий наближений розв'язок у точці x_f .

Геометрична інтерпретація: рух до кінцевої точки відбувається по ламаній, що наближено передає характер інтегральної кривої (рис. 3.2).

Метод Ейлера має *перший порядок* точності: похибка є пропорційною величині кроку h . З видаленням від початкової точки погрішності в значеннях y_i починають накопичуватись.

Приклад. Методом Ейлера знайти розв'язок диференціального рівняння $y' = y$ при початкових умовах $y(0)=1$ у точці $x = 1$, обрав кількість кроків 10. Вивчити, як буде змінюватись абсолютна погрішність із збільшенням кількості кроків. Оцінити, яку величину кроку необхідно обрати, щоб погрішність склала не більше 10^{-6} .

Розв'язання. Точний розв'язок рівняння: $y = \exp(x)$, що надає можливості розрахувати абсолютну похибку.

Розв'язання проводимо у середовищі Excel (скріншот зображено на рис. 3.2). Хід розв'язання:

а) у комірці F2 задаємо величину кроку;

б) у комірках стовпця C розраховуємо поточні значення y ;

в) у комірку D5 записуємо початкову умову $y(0)=1$;

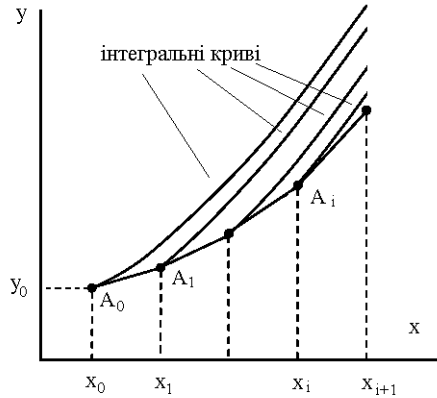


Рисунок 3.1 – Метод ламаних

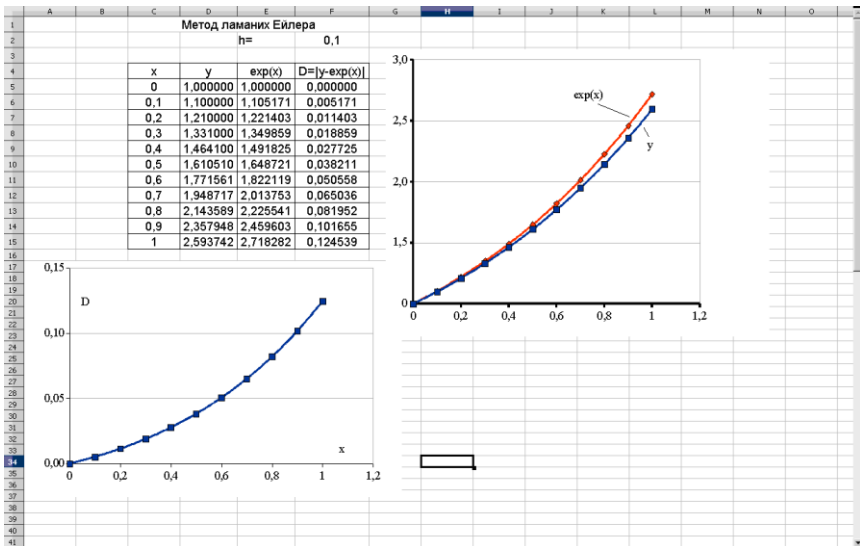


Рисунок 3.2 – Скріншот проекту «Метод ламаних Ейлера» (до прикладу 3.1)

г) у комірці D6 розраховуємо методом Ейлера наступне значення. Формула комірки: =D5+\$F\$2*D5. Далі протягуємо униз до кінця таблиці, отримуємо рішення;

д) у комірках стовпця E розраховуємо значення функції exp(x);

е) у комірках стовпця F розраховуємо абсолютну похибку;
 ж) за отриманими даними будуємо графіки функцій і залежності абсолютної похибки D від величини x .

Другу частину завдання виконуємо аналогічно, змінюючи величину кроку у ряду від 0,05 до 0,01. Відповідно, збільшуємо кількість кроків і знаходимо величину абсолютної погрішності. Будуємо таблицю залежності h від D та десятинні логарифми цих значень (табл. 3.1)

За даними таблиці 3.1 будуємо графік залежності $-\lg(D)$ від $-\lg(h)$, що являє собою добру лінійну залежність (рис. 3.2). Будуємо лінійний тренд і знаходимо його рівняння (рис. 3.2):

$$-\lg(D) = -0,9672 \cdot \lg(h) - 0,0672 \quad (3.8)$$

Користуючись цим рівнянням, підставимо $D = 10^{-6}$; $-\lg(d) = 6$:

$$6 = -0,9672 \cdot \lg(h) - 0,0672.$$

Таблиця 3.1 – Результати рішення прикладу 3.1.

h	D	$-\lg(h)$	$-\lg(D)$
0,1	0,1245	1	0,904831
0,05	0,06498	1,30103	1,18722
0,025	0,03322	1,60206	1,4786
0,02	0,02669	1,69897	1,573651
0,0125	0,01679	1,90309	1,774949

Розв'язок: $-\lg(h) = 5,95$; $h = 1,17 \cdot 10^{-6}$. Необхідна кількість кроків:

$$N = \frac{1}{1,17 \cdot 10^{-6}} = 8,5 \cdot 10^5$$

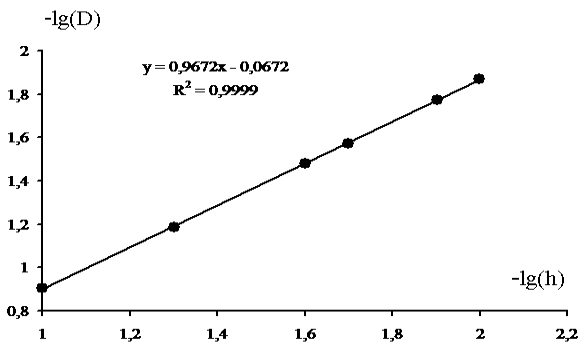


Рисунок 3.3 – Залежність $-\lg(D)$ від $-\lg(h)$. До прикладу 3.1

Тобто, щоб отримати рішення з похибкою меншою за 10^{-6} необхідно зробити майже *1000000 кроків*, що забагато для практичного використання.

Внаслідок низької точності метод Ейлера «у чистому вигляді» на практиці не використовують. Але він є наочний для показу шляхів побудови рішень диференціальних рівнянь. Його ідеї покладені до основи більш ефективних методів.

Однією з модифікацій метода Ейлера є *модифікований метод Ейлера-Коші*. В ньому на $i+1$ – му кроці:

а) визначають наближення, як у методі Ейлера:

$$y_{i+1}^* = y_i + h \cdot f(x_i, y_i); \quad (3.9)$$

б) розраховують у цій точці напрямком поля:

$$f(x_{i+1}, y_{i+1}^*); \quad (3.10)$$

в) розраховують нове наближення по формулі:

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot \frac{f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^*)}{2}. \quad (3.11)$$

Інша модифікація метода Ейлера – *ітераційний метод Ейлера-Коші*:

а) методом Ейлера одержують грубе початкове наближення:

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot f(x_i, y_i); \quad (3.12)$$

б) далі відбувається ітераційний процес:

$$y_{i+1}^{(k)} = y_i + \frac{h}{2} \cdot [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(k-1)})], \quad (k = 1, 2, \dots); \quad (3.13)$$

Наведені модифікації метода Ейлера носять назви *методів прогнозу і корекції*. На першому етапі відбувається *прогноз* – розрахунок грубого наближення. На другому етапі – *корекція прогнозу* за формулами (3.11) або (3.13). Обидві модифікації мають *другий порядок* точності (похибка є пропорційною h^2).

Метод Рунге-Кути дозволяє будувати схеми розв'язків різного порядку точності й найбільш часто використовується в практичних розрахунках. Найбільш часто у обчислювальній практиці реалізується метод Рунге-Кути 4-го порядку точності. Його часто за замовчуванням в літературі часто називають «метод Рунге-Кути», без вказання порядку точності. Базова формула для диференціального рівняння першого порядку має вид:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{P_1 + 2 \cdot (P_2 + P_3) + P_4}{6}, \quad (3.14)$$

де:

$$\begin{aligned} P_1 &= f(x_i, y_i) \cdot h_i; & P_2 &= f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{P_1}{2}\right) \cdot h_i \\ P_3 &= f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{P_2}{2}\right) \cdot h_i; & P_4 &= f(x_i + h, y_i + P_3) \cdot h_i \end{aligned} \quad (3.15)$$

Достоїнства методу Рунге-Кути 4-го порядку:

- ✓ він *легко програмується*,
- ✓ обчислювальний процес є *стійким* для широкого кола задач,
- ✓ у методі можна легко змінювати величину кроку,
- ✓ гранична абсолютна *похибка* на кожному кроці мала і *пропорційна* h^4 .

Метод Рунге-Кути 4 порядку використовують в усіх програмах прикладної математики, зокрема у Mathcad, у різних модифікаціях. Він дозволяє дуже ефективно розв'язувати диференціальні рівняння першого порядку, системи диференціальних рівнянь 1 порядку, а також диференціальні рівняння та системи другого та вищих порядків. Про ефективність може свідчити розв'язання прикладу 14.1 методом Рунге-Кути. Для його розв'язання з точність до 10^{-6} достатньо всього 10 кроків. Оскільки на кожному кроці проводиться 4 розрахунку функції, то функцію слід розраховувати всього 40 разів (проти майже 100000 для методу Ейлера). Відмітимо однак, що метод Рунге-Кути також слід розглядати, як певну модифікацію методу Ейлера.

РОЗДІЛ 4. ОСНОВНІ НАПРЯМКИ ВИКОРИСТАННЯ ІНФОРМАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ У ФАРМАЦІЇ

Серед основних напрямків розвитку сучасних інформаційних технологій в забезпеченні розвитку фармацевтичного бізнесу можна виділити:

- Автоматизація документообігу комунікації
- Управління технологією фармацевтичного виробництва
- Автоматизація бухгалтерського обліку і планування
- Розробка систем прийняття рішень
- Автоматизація банківських операцій
- Створення автоматизованих робочих місць.

Для реалізації ідеї розподіленого управління необхідне створення для кожного рівня управління і кожної предметної області автоматизованих робочих місць (АРМ) на базі обчислювальної техніки.

Величезне значення в автоматизації роботи підприємства має об'єднання існуючих автоматизованих робочих місць в єдину інформаційну систему підприємства.

Впровадження систем автоматизації документообігу (текстові процесори та ін.) призводить до виникнення концепції «електронного документа» і «безпаперової технології». Такі електронні документи існують тільки в електронному вигляді, тобто створюються, обробляються і пересилаються за допомогою комп'ютерів, хоча і існує можливість створення так званої «твердої копії», тобто можливості друку документа на папері.

«Безпаперова технологія» передбачає вести повну обробку документів в електронному вигляді, тобто повністю відмовитися від використання таких фізичних носіїв інформації, як папір. Ведення документації по цій схемі надає наступні переваги:

Мінімальні витрати на канцелярські засоби (бланки, папір, канцелярське приладдя);

Відпадає необхідність в дорогих засобах захисту від несанкціонованого доступу (сейфи і т. п.), так як надати доступ до документа можна тільки обмеженому колу осіб за допомогою паролів і т. п.;

Відпадає необхідність у виділенні спеціальних приміщень (архівів) та спеціальних меблів, громіздких папок і т. д.;

Прискорюється процес пошуку потрібного документа; сам процес пошуку переходить в якісно нову площину (пошук за ключовими словами, пошук серед декількох документів та ін.);

З'являється можливість організувати спільну роботу декількох осіб або навіть відділів над одним документом;

Прискорюється процес створення документів за рахунок можливості включення в нього фрагментів з інших документів і можливості редагування вже існуючого тексту;

Останнім часом великої популярності мають електронні документи, засновані на «гіпертекст». Це поняття означає включення в документ посилань на інші документи, за допомогою яких можна миттєво підняти документ, на який посилаються.

Авторизація електронних документів представляє основну проблему переходу на «безпаперову технологію». Для авторизації паперових документів в даний час використовуються печатки організації і підпису посадових осіб, однозначно визначають приналежність документа. Електронні документи, які належать громадянам ідентифікувати складно внаслідок можливості відтворення копії, яка не вирізняється від оригіналу, в даний час в якості звітних, фінансових документів не використовуються. Вирішенням цієї проблеми є розробка єдиного стандарту «електронного підпису», за допомогою якої можна буде однозначно ідентифікувати автора документа і захистити документ від змін сторонніми особами.

Комунікації відіграють найважливішу роль у функціонуванні підприємства. Як показують дослідження, для забезпечення підприємства необхідною інформацією та для передачі вихідної інформації в інші ланки організації керуючий персонал організації витрачає понад 70% свого робочого часу. Для забезпечення оперативного обміну інформацією, електронними документами, була введена система електронної пошти. Система електронної пошти передбачає передачу повідомлень і електронних документів за допомогою якої-небудь комп'ютерної мережі (засоби телекомунікації) з одного комп'ютера на інший. Перевагами електронної пошти в порівнянні з іншими способами передачі інформації (звичайна пошта, кур'єри, факсиміле, телефон, телеграф та ін.) Такі:

Дуже висока швидкість передачі повідомлень в незалежності від віддаленості абонента – документ доставляється адресатові через кілька секунд після того, як відправлений;

Відсутність необхідності вдаватися до допомоги інших осіб (листонош, оператора телеграфу та ін.), Тому що документи відправляються і приймаються за допомогою комп'ютера безпосередньо в організації. Цей факт додатково забезпечує конфіденційність або одержуваних відомостей;

Можливість передачі інформації, яку неможливо передати такими існуючими засобами, як телефон, телеграф, факс. За допомогою електронної пошти можна передавати одночасно голосові повідомлення, відеозображення, текст, малюнки, графіки та інші;

Вияткова дешевизна електронної пошти (найчастіше це взагалі безкоштовна послуга) для передачі повідомлень в будь-які регіони (включаючи інші країни) [10].

Крім системи електронної пошти, важливим джерелом отримання інформації є глобальна комп'ютерна мережа Internet [10].

Робота систем прийняття рішень заснована на графічному поданні поточних і прогнозованих економічних показників роботи підприємства.

Менеджер може змінювати деякі параметри і наочно бачити зміни показників роботи підприємства в цілому, що полегшує винесення рішення про будь-які нововведення. Без використання комп'ютерів цей процес може займати тижні, а то й місяці, тому що для отримання інформації про економічні показники роботи підприємства проводиться велика кількість розрахунків. Для успішної реалізації інформаційних технологій в даний час застосовуються, в основному, персональні комп'ютери. Для організації єдиної комп'ютерної системи підприємства окремі персональні комп'ютери об'єднують разом, утворюючи, таким чином, локальну обчислювальну мережу. Локальні обчислювальні мережі являють собою системи розподіленої обробки даних і, на відміну від глобальних та регіональних обчислювальних мереж, охоплюють невеликі території (діаметром 5-10 км) всередині окремих установ. За допомогою загального каналу зв'язку ЛОМ може об'єднувати від десятків до сотень абонентських вузлів, що включають персональні комп'ютери (ПК), які друкують і копіюють пристрої, касові і банківські апарати. ЛВС можуть підключатися до інших локальних і великим (регіональним, глобальним) мереж за допомогою спеціальних шлюзів, мостів і маршрутизаторів, які реалізуються на спеціалізованих пристроях або на ПК з відповідним програмним забезпеченням.

Відносно невелика складність і вартість ЛВС, що використовують в основному ПК, забезпечують широке застосування мереж в автоматизації комерційної, банківської та інших видів діяльності, діловодства, технологічних і виробничих процесів, для створення розподілених керуючих, інформаційно-довідкових, контрольно-вимірювальних систем, систем промислових роботів і гнучких виробничих виробництв. Багато в чому успіх використання ЛОМ обумовлений їх доступністю масовому користувачу, з одного боку, і тими соціально-економічними наслідками, які вони вносять в різні види людської діяльності, з іншого боку.

Завдяки цьому стали з'являтися центри машинної обробки ділової (документальної) інформації (ЦМОДІ) – наказів, звітів, відомостей, калькуляцій, рахунків, листів і т.п. Такі центри є сукупністю автоматизованих робочих місць (АРМ) і є новим етапом на шляху створення в майбутньому безпаперових технологій для застосування в керуючих, фінансових, облікових та інших підрозділах.

Сучасна стадія розвитку ЛВС характеризується майже повсюдним переходом від окремих, як правило, вже існуючих, мереж, до мереж, які охоплюють все підприємство (фірму, компанію) і об'єднують різноманітні обчислювальні ресурси в єдиному середовищі. Такі мережі називаються корпоративними.

Локальні мережі ПК повинні не тільки швидко передавати інформацію, але і легко адаптуватися до нових умов, мати гнучку архітектуру, яка дозволяла б розташовувати АРМ (або робочі станції) там, де це буде потрібно.

Специфічними компонентами ЛВС є сервери. Вони управляють функції управління розподілом мережевих ресурсів загального доступу. Сервери – це апаратно-програмні системи. Апаратним засобом зазвичай є досить потужний ПК або комп'ютер, спроектований спеціально як сервер. ЛВС може мати кілька серверів для управління мережевими ресурсами, проте завжди повинен бути один або більше файл-сервер або сервер без даних. Він керує зовнішніми пристроями, що запам'ятовують загального доступу і дозволяє організувати певні бази даних.

Робочими станціями в ЛВС служать, як правило, персональні комп'ютери. Окремі користувачі (різні посадові особи підрозділів фірми) реалізують на робочих станціях свої прикладні системи. В основному це певні функціональні завдання (ФЗ) або комплекси задач (Функціональні підсистеми).

Крім чисто технічних засобів (Hardware) для успішного функціонування інформаційної системи на підприємстві необхідна наявність відповідних програмних засобів (Software).

Програмні засоби є тим інструментом, який забезпечує функціонування технічних засобів і реалізацію завдань інформаційних технологій.

В даний час розроблена величезна кількість програмних засобів, спрямованих на вирішення більшості завдань будь-якої організації. Однак, є тенденція до розробки єдиної корпоративної програмної системи для вирішення специфічних завдань організації, так як об'єднання розрізаних програмних засобів в єдине ціле в більшості випадків неможливо.

Розвиток сучасної фармацевтичної галузі неможливо без активного застосування нових інформаційних технологій, і це усвідомлюють керівники всіх фарм-підприємств. Великі кошти витрачені на модернізацію та оптимізацію роботи засобів зв'язку та обробки інформації, проведено комп'ютеризацію підприємства, що включає облік товарообігу з використанням скануючих пристроїв для зчитування штрих-коду, ведення обліку касових операцій, обмін діловою документацією, доступ до Інтернету. Закуповується все більше нова оргтехніка, яка дозволяє розробити і впровадити на підприємствах нові програми, що дають можливість оптимізувати закупівлі, вибрати більш низькі ціни постачальників. Створені відділи автоматизації, які беруть під контроль всю наявну інформаційно-обчислювальну техніку. Організовується внутрішній електронний документообіг, автоматизований витрата в кожному підрозділі. З метою приведення підвідомчих структурних підрозділів у відповідність до вимог сучасності, керівники фарм-компаній приділяють велику увагу розвитку матеріально-технічної бази та проведення поточних ремонтів. У сучасних умовах сфера фармацевтики значно змінилася. Цьому сприяло встановлення ринкових відносин, зміна структури фармацевтичного ринку, швидке збільшення числа оригінальних і відтворених лікарських препаратів, реєстрація великої кількості лікарських препаратів – синонімів, що

утруднюють їх ефективне використання, збільшення безрецептурного відпуску ліків, фальсифікація лікарських засобів. Зросло значення грамотних фармацевтів, здатних запропонувати той чи інший препарат. Важливим стало і продумане розміщення товарів і реклами.

Розроблені в даний час інформаційні системи і бази даних дозволяють створити єдиний інформаційний простір, який об'єднає виробників та споживачів, державні структури та фармацевтичні компанії, і, крім того, такі системи дають можливість проведення різних досліджень ринку в реальному режимі часу. Важливою областю стало інформаційне забезпечення, яке полягає в зборі та переробці інформації, необхідної для прийняття обґрунтованих управлінських рішень. Передача інформації про стан і діяльність підприємства на вищій рівень управління і взаємний обмін інформацією між усіма взаємними підрозділами фірми здійснюються на базі сучасної електронно-обчислювальної техніки та інших технічних засобах зв'язку.

У діяльності фарм-компаній, що представляють собою комплекси великої кількості повсякденно зв'язаних та взаємодіючих підприємств, передача інформації є першорядним і неодмінним фактором нормального функціонування. При цьому особливого значення набуває забезпечення оперативності та достовірності інформації. Для багатьох фірм внутрішньофірмова система інформації вирішує завдання організації технологічного процесу і носить виробничий характер. Це стосується, перш за все, процесів забезпечення підприємствам кооперуватися продукцією, що надходить зі спеціалізованих підприємств по внутрішньофірмових каналах. Тут інформація відіграє важливу роль в наданні відомостей для прийняття управлінських рішень і є одним з факторів, що забезпечують зниження витрат виробництва і підвищення його ефективності.

У прийнятті рішень відіграє науково-технічна інформація, що містить нові наукові знання, відомості про винаходи, технічні новинки своєї фірми, а також, фірм-конкурентів. Це безперервно поповнюваний загальний фонд і потенціал знань і технічних рішень, практичне і своєчасне використання якого забезпечує фірмі високий рівень конкурентоспроможності.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Кондратов, С. О. Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології: навчальний посібник [Текст] / С. О. Кондратов, І. В. Ситак, Т. М. Матейко – Харків: Лідер, 2019. – 565 с.
2. Мочернюк, Д. Ю. Физическое моделирование инженерных процессов [Текст] / Д. Ю. Мочернюк. Львов: Вища школа, 1987ю – 160 с.
3. Walas, S. M. Chemical reaction engineering handbook of solved problems [Text] / S. M. Walas. – Gordon and Breach, 2005. – 888 p.
4. Вдовин, В. М. Теория систем и системный анализ: Учебник / В. М. Вдовин, Л. Е. Суркова, В. А. Валентинов. — М.: Издательско-торговая корпорация «Дашков и К°», 2010. — 640 с.
5. О'Коннор, Дж. Искусство системного мышления: Необходимые знания о системах и творческом подходе к решению проблем / Дж. О'Коннор, И. Макдермотт. — М.: Альпина Бизнес Букс, 2006. — 256 с.
6. Волкова, В. Н. Теория систем и системный анализ [Текст] / В. Н. Волкова, А. А. Денисов. – М.: Юрайт, 2010. – 679 с.
7. Ковальчук, П. І. Моделювання і прогнозування стану навколишнього середовища [Текст] / К.: Либідь, 2003. – 208 с.
8. Моделювання медико-біологічних систем. Методичні вказівки... /укл. Кісарін О.). – Запоріжжя: Вид. ЗДІА, 2006. – 25 с.
9. Чуйко Г. П. Математичне моделювання систем і процесів: [навчальний посібник] / Г. П. Чуйко, О. В. Дворник, О. М. Яремчук. – Миколаїв: Вид-во ЧДУ імені Петра Могили, 2015. – 244 с.
10. Марценюк В.П. Компаративний та перфузійний підходи до побудови моделей фармакокінетики [Текст] / В. П. Марценюк, Ш. Є. Андрущак. – Медична інформатика та інженерія, 2008. – №3. С. 7 – 16.
11. Кузнецов С. Р. Математическая модель иммунного ответа [Текст] / С. Р. Кузнецов – Вестник СПбГУ, 2015. –Сер. 10. Вып. 4. – с. 72–87
12. Лосенкова С. О. Компьютерное моделирование как один из современных методов прогнозирования в фармацевтической технологии [Текст] / С.О. Лосенкова, А.В. Погребняк, Ю.А. Морозов, Э.Ф. Степанова. – Фармация и фармакология, 2014. – № 6 (7). – С. 105-113
13. Беркович С. Я. Клеточные автоматы как модель реальности: поиски новых представлений физических и информационных процессов. М.: Изд-во МГУ, 1993. – 112 с.
14. Гильберт А. Как работать с матрицами [Текст]. / А. Гильберт – М.: Статистика, 1981. – 157 с.
15. Алексеев Е. Р. Решение задач вычислительной математики в пакетах Mathcad12, MATLAB 7, Maple 9 [Текст] \ Е. Р. Алексеев, О. В. Чеснокова. – М.: ИТ Пресс, 2006. – 496 с.

16. Серогодский В. В. EXCEL 2010. Готовые ответы и полезные приемы профессиональной работы. / В. В. Серогодский, А. В. Рогозин, Д. А. Козлов, А. Ю. Дружинин, и др.— СПб.: Наука и Техника, 2013. – 352 с.
17. Антонов В. И. Линейная алгебра и аналитическая геометрия. Опорный конспект: учебное пособие [Текст]. / В. И. Антонов, М. В. Лагунова, Н. И. Лобкова, Ю. Д. Максимов, В. М. Семенов, Ю. А. Хватов – М.: Проспект, 2011. – 144 с.
18. Кирьянов Д.В. Mathcad 15/Mathcad Prime 1.0 [Текст]. / Д. В. Кирьянов – СПб: БХВ-Петербург, 2012. – 432 с.
19. Гмурман, В. Е. Теория вероятностей и математическая статистика: Учеб. пособие для вузов / В. Е. Гмурман. – М.: Высш. шк., 2003. — 479 с:
20. Венцель Е. С. Исследование операций: задачи, принципы, методология [Текст]. /Е. С. Венцель – М.: Наука, 1988. — 208 с.
21. Гельман В. Я. Решение математических задач средствами Excel: Практикум / В. Я. Гельман. — СПб.: Питер, 2003. — 240 с.



RS Global

Гарькава В. Ф., Бандура В. М., Гайша О. О., Ігнатова Т. В.,
Редькіна Є. А., Лук'янчук В. Д., Прозорова Г. О.

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ В ФАРМАЦІЇ

МОНОГРАФІЯ

Passed for printing 10.03.2021. Appearance 15.03.2021.

Typeface Times New Roman.

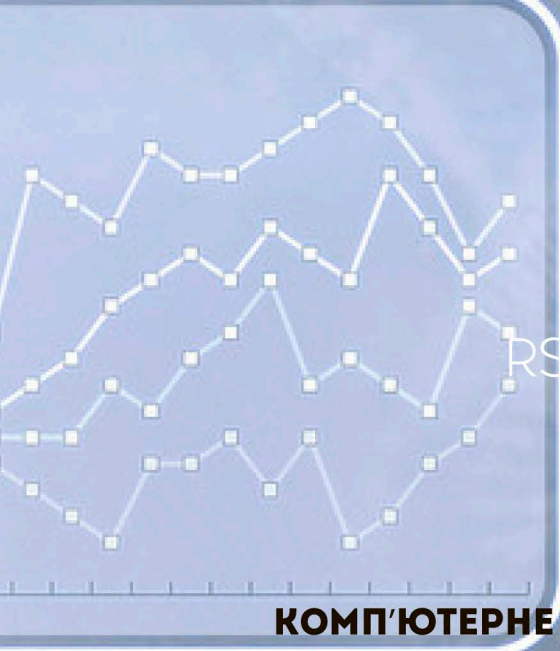
Circulation 30 copies.

RS Global Sp. z O.O., Warsaw, Poland, 2021

Numer KRS: 0000672864

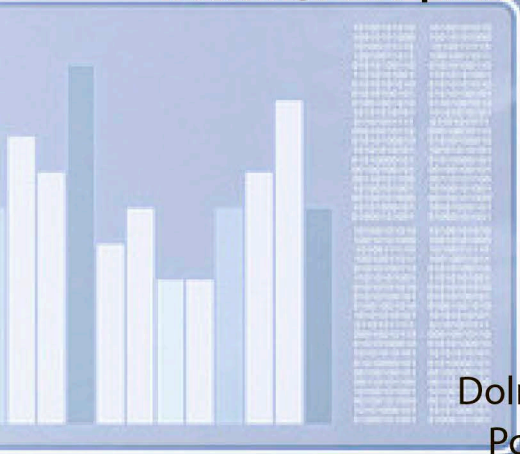
REGON: 367026200

NIP: 5213776394



RS Global

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ В ФАРМАЦІЇ



Publisher:
RS Global

Dolna 17, Warsaw,
Poland 00-773

<https://monographs.rsglobal.pl/>

Tel: +48 226 0 227 03

Email: monographs@rsglobal.pl

