

## ПРИНЦИПИ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ У ФАРМАЦЕВТИЧНИХ ТЕХНОЛОГІЧНИХ ДОСЛІДЖЕННЯХ

**Кутова О. В., Сагайдак-Нікітюк Р. В.**

*Національний фармацевтичний університет, м. Харків, Україна*

*raxtoxt@gmail.com*

**Вступ.** Широке впровадження комп'ютерних технологій у наукові дослідження сприяє поширенню і розвитку методу математичного моделювання для аналізу та проєктування різноманітних технологічних процесів, зокрема у фармацевтичній галузі.

**Мета:** вивчення принципів математичного моделювання у фармацевтичних технологічних дослідженнях.

**Методи дослідження.** У дослідженні застосовувалися методи узагальнення, аналізу та синтезу.

**Результати та їх обговорення.** При складанні математичного опису об'єктів дослідження використовують два підходи:

- перший здійснюється на підставі глибокого вивчення об'єкту з метою виявлення механізму й основних теоретичних закономірностей його функціонування. Такі моделі базуються на законах природи, якісно правильно характеризують поведінку об'єкту і пояснюють результати експериментальних спостережень;

- другий заснований на встановленні математичного виду, за допомогою якого можна аналітично описати поведінку об'єкту або результати спостережень. Головна перевага другого підходу – простота отримання математичного опису, недоліки пов'язані з вузькою областю використання для реального об'єкту, що передбачає виконання необхідного об'єму експериментальних досліджень.

Безсумнівно, ефективнішими є дослідження, в яких побудова математичної моделі заснована на розумінні взаємодії і взаємозв'язку всіх процесів, що відбуваються в досліджуваній системі. Проте, на сучасному етапі розвитку фармацевтичної науки при розробці технології лікарських засобів фармацевтичні технологічні об'єкти вивчають з позицій другого підходу внаслідок того, що вони формуються в умовах певної невизначеності та неповноти інформації внаслідок випадковості зв'язків між факторами.

Випадковість у фармацевтичних дослідженнях полягає в тому, що на зміну одного із факторів можуть реагувати інші зміною своїх законів розподілу.

Залежні від технологічних факторів фармакопейні показники лікарського засобу приймають не одне конкретне значення для різних комбінацій факторів у досліджуваному інтервалі, а отримують деяке з множини можливих.

Шукана залежність впливу факторів на фармакопейний показник може бути визначена лише в результаті спільної математичної обробки отриманих експериментальних даних у факторному просторі й просторі значень відповідних фармакопейних характеристик.

Аналіз стохастичних зв'язків між факторами об'єктів фармацевтичного технологічного дослідження призводить до необхідності різних постановок

завдань статистичного аналізу математичних залежностей, які спрощено можна класифікувати як завдання кореляційного та регресійного аналізу.

Важливою закономірністю, яка має бути виявлена в математичній моделі, є правильний опис фармако-технологічних характеристик лікарської форми з урахуванням певної обумовленості між ними і впливовими досліджуваними технологічними факторами.

Використання зазначених залежностей дозволяє проводити всебічний аналіз дії кількісних факторів на досліджувану систему. Отримуючи такі рівняння, дослідники мають можливість подальшого вирішення завдань оптимізації з декількома критеріями якості, що мають забезпечити необхідні функціональні характеристики розроблюваних лікарських форм. Оптимізація проводиться з використанням різних методів, які поділяються на три групи:

- інтерактивні, до яких належать методи аналізу ієрархій та метод Парето;
- лексикографічна оптимізація, яка використовує метод поступок;
- зведення до однокритеріальної задачі включає методи головного критерію, згортання, цільового програмування, що передбачають впорядкування вихідних критеріїв за рівнем ієрархії або визначення деякого вектору вагових коефіцієнтів для відображення важливості критеріїв.

Для визначення оптимального рішення пропонується задіяти комбінований підхід до вирішення завдання багатокритеріального вибору, що синтезує два напрямки до формалізації. Один з них є математичною процедурою, пов'язаний з вектором критеріїв та заснований на визначенні ідеальної точки та введенні поняття норми в простір функціоналів. Другий не є математично обґрунтованим, але являє собою практично корисний алгоритм прийняття рішення.

Для обробки результатів досліджень застосовують синтез аналітичних методів математичного аналізу, математичної статистики та обчислювальної математики.

Варто зазначити, що існують універсальні пакети символічних обчислень, які дозволяють без знання алгоритмів та програм вирішувати за допомогою комп'ютера найскладніші чисельні й аналітичні завдання. Проте, з урахуванням особливостей фармацевтичної технології для обробки дослідних даних у фармацевтичних дослідженнях доцільно застосовувати такі програмні засоби, що дозволяють ефективно реалізовувати алгоритми, розроблені дослідником, і не потребують специфічних знань з вищої математики в науковців-фармацевтів, наприклад, табличний редактор MS Excel математичних пакет MathCad.

**Висновки.** Проведено аналіз принципів математичного моделювання у фармацевтичних технологічних дослідженнях. Вивчено можливості застосування аналітичних методів розв'язання задач багатокритеріальної оптимізації у фармацевтичних дослідженнях.

**Ключові слова:** математичне моделювання, фармацевтичне технологічне дослідження, принцип, лікарський засіб, технологія.