

ІНФОРМАЦІЙНІ ТА ІННОВАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ В ФАРМАЦІЇ

Рекомендована д. фармац. наук, проф. Т. Г. Калинюком

УДК 615:378.1].001.11/004.14

КОНЦЕПЦІЯ ФОРМУВАННЯ ФАРМАЦЕВТИЧНИХ ЗНАНЬ (ТЕОРЕТИЧНІ ТА ПРАКТИЧНІ АСПЕКТИ)

©А. І. Бойко

Львівський національний медичний університет імені Данила Галицького

Резюме: опрацьовано концепцію формування знань у фармацевтичній галузі, розроблено методологію виділення фармацевтичних знань на моделі взаємодії протидіabetичних лікарських засобів.

Ключові слова: семантична фармацевтична інформація, інформаційний тезаурус, фармацевтичні знання, онтологія фармацевтичної діагностики, бази даних, бази знань.

Вступ. Одним із основних завдань, яке вирішувала класична інформатика 70 – 80 років ХХ ст., було опрацювання (на основі існуючої на той час електронно-обчислювальної техніки) систем для пошуку та отримання релевантної інформації. Для цього розробляли та використовували різні інформаційно-пошукові системи (ІПС), які вели пошук інформації за запитом у формі ключових слів (дескрипторів). Еволюція фармацевтичних ІПС та перспективи їх розвитку розглянуто у публікації [5].

Одночасно з цифровими технологіями, «паперова» інформатика активно використовувала пошук інформації за системою Універсальної десяткової класифікації (УДК), індексами якої формувався пошуковий образ наукового документа та запит для його виявлення. Інформаційні мови, в тому числі класифікаційного та дескрипторного типу, детально розглянуто у монографії [12].

Для оперативного доведення інформації до споживача створено систему науково-технічної інформації (НТИ), яка готувала аналітичні огляди, реферати тощо з різних наукових напрямків (у тому числі фармацевтичного характеру).

З 80-х років ХХ ст. через динамічне зростання чисельності публікацій (в т.ч. у галузі медицини та фармації), для полегшення інформаційного пошуку розпочалося проектування та використання комп’ютерних баз даних (БД). Огляд ідеології формування та розвитку фармацевтичних БД наведено у публікаціях [2, 3].

У 90-х роках ХХ ст., на початку ери Інтернету, обмежене наповнення мережі дозволяло проводити ефективний пошук необхідної інформації. Однаке з його розвитком та динамічним зростанням накопичених даних швидкий пошук великих обсягів релевантної інформації став утрудненим. Констатовано прагматичні проблеми систематичного отримання даних доказової ме-

дицини [10]. Наприклад, пошук доказової інформації у бібліотеці Коクリана (The Cochrane Library) за дескриптором «diabetes» станом на 15.01.2012 р. видає 558 релевантних інформаційних джерел.

Тому теоретичною та практичною проблемою сучасної інформатики є опрацювання концепції забезпечення оперативними знаннями наукового або науково-практичного характеру з високими показниками повноти одержаних даних. Одним з шляхів вирішення цієї проблеми є переїзд до комп’ютерних баз знань (БЗ).

Методи дослідження. При проведенні дослідження використано методи фармацевтичної інформатики, теорії семантичної інформації, побудови термінологічних тезаурусів, створення баз даних та баз знань.

Результати й обговорення. Базовим елементом теорії переходу від комп’ютерних БД до БЗ є концепція поняття «знання». Цікаво зазначити, що св. Тома Аквінський (St. Thomas Aquinas), у класичному трактуванні «знання – це висновки»[13], фактично розглядає це поняття за сучасними канонами інформатики. Серед них проблематиці створення фармацевтичних БЗ найбільше відповідає теорія семантичної інформації Ю. А. Шрейдера (1965), що обрана та доведена нами як фундаментальна для їх створення та функціонування [5]. Згідно з даною теорією, сукупність семантичної нової інформації певної галузі знань або окремої людини (впорядковані терміни, поняття, узагальнення, концепції, методології) формує галузевий або індивідуальний тезаурус («скарбницю знань»). Якщо отримана у будь-якій формі інформація поповнює або змінює тезаурус споживачів (споживача), вона є семантичною [14]. Закономірно, що під час такої зміни тезаурусу формуються нові знання. Цей процес відбувається за схемою, представленою на рисунку 1.

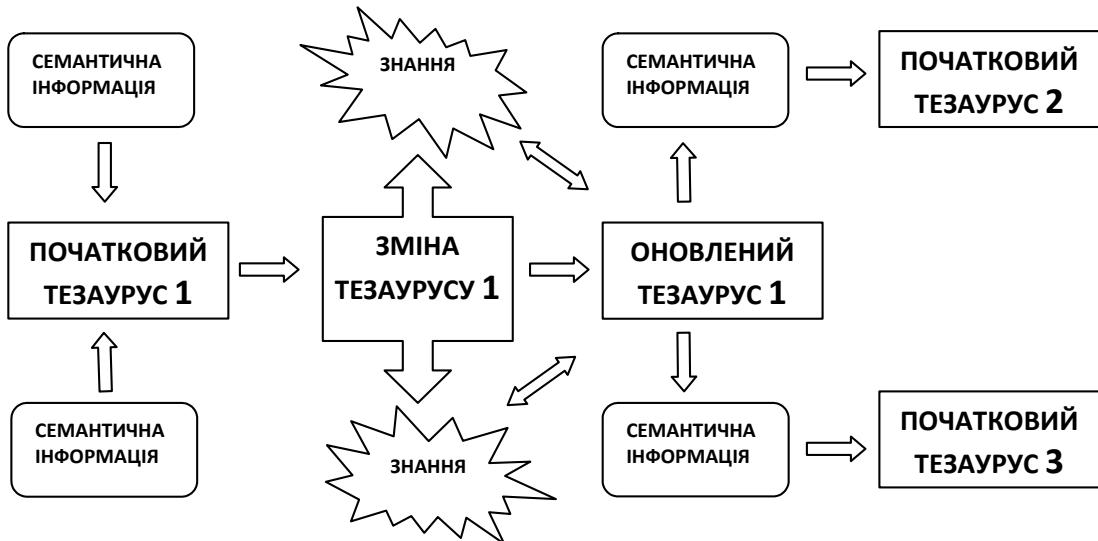


Рис. 1. Формування знань згідно з теорією семантичної інформації Ю. А. Шрейдера (1965).

Розглянемо додатково «знання» з позиції сучасної теорії управління. Знання слід трактувати як фактор обґрунтування прийняття рішення на основі аналізу управлінської ситуації, інформаційних потоків тощо. Тобто, спостерігається певний процес «вилучення» знань для прийняття управлінського рішення.

Сучасні теоретичні дослідження з інформатики розглядають шляхи переходу від комп’ютерних БД до БЗ. Метою функціонування БЗ є оперативне інформаційне забезпечення споживачів, але вже не просто даними, а знаннями, тобто новою семантичною інформацією для допомоги у прийнятті раціональних наукових та господарських рішень. Наприклад, згідно з теорією про наявність зв’язку між хімічною структурою і біологічною дією різних речовин, на основі численних окремих даних про такі функціональні зв’язки існує інтегроване знання про загальні закономірності цього процесу; доказова медицина на основі численних статистично опрацьованих даних про результати клінічних спостережень, зокрема, за дією лікарських засобів, отримує узагальнені висновки (доказові знання).

В останні роки проводяться дослідження з комп’ютеризації процесів аналізу інформації, зокрема, розвиваються системи пошуку знань у БД (knowledge discovery in databases), які дозволяють автоматизувати виявлення прихованих закономірностей у великих сукупностях даних [16]. Але пошук відповіді на питання: «Чи може сучасний комп’ютер повністю замінити людину в когнітивному процесі?» залишається класичною філософською проблемою кібернетики.

Для концепції, яка розглядається в даній публікації, питання можна сформулювати у такий спосіб: «Чи може комп’ютер, використовуючи

будь-яке сучасне програмне забезпечення, аналізувати та узагальнювати серед сукупності даних семантично нові, на основі яких формувати нові знання?» Відповідь є негативною. Аналіз інформації та отримання необхідних знань залишається сферою, де участь людини-експерта є очевидною необхідною умовою якісного виконання завдання, що було передбачено в класичних працях основоположника кібернетики Н. Вінера (N.Wiener) [8].

Тобто, отримані нові дані потребують експертної оцінки в плані можливої доцільності переворення їх в знання.

Тому, на наш погляд, пошук інформаційних матеріалів в БД та їх обробку з наступним доведенням до релевантного споживача може виконувати лише експерт-когнітолог, ідеальна модель тезаурусу якого охоплює всю предметну область (сферу, галузь) (наприклад, абсолютні знання (на певний період часу) з взаємодією лікарських засобів) та вміє на основі отриманих нових даних, опрацьовуючи їх за допомогою власного тезаурусу, аналізувати ступінь новизни отриманого знання.

Експерт-когнітолог повинен володіти:

- 1) методами пошуку даних (знань) певної предметної області (сфери, галузі);
- 2) джерелами релевантної інформації (БД, оглядові публікації, наукова продукція, досягнення практики тощо);

З проблемними питаннями даної науки (наукового напрямку).

Експерт-когнітолог при роботі зі споживачами може:

- допомогти визначити потребу в інформації, сформулювати запит, знайти джерело можливих відповідей;

– допомогти зрозуміти споживачу те, чого він не знає, але повинен знати (пробільний аналіз);

– системно та систематично особисто/навчаючи інших опрацьовувати нові дані (концепція, теорія, метод, методика, результати тощо) з оцінкою факту зміни новими даними тезаурусу даної предметної галузі (або підтвердження його незмінності);

– формалізувати (комп'ютеризувати) експертний процес та вислід роботи експерта (при цьому не має значення чи сформовані нові знання, чи отримано підтвердження "старих" знань, вже наявних в БЗ).

Розглянемо вищепередоване на прикладі формування знань з фармацевтичної діагностики (в частині аналізу та прогнозування можливої взаємодії лікарських засобів при одночасному прийомі) у фармацевтичній БЗ, що функціонує на основі доказової фармації. В термінології теорії управління, фактор взаємодії є вердиктом прийняття управлінського рішення (можна (не можна) відпускати/застосовувати лікарський засіб).

Фактично ми розглянемо комплекс "експерт – база знань", які потенціюють взаємну роботу та взаємний розвиток за рахунок нових можливостей комп'ютерних технологій (збільшення швидкодії, розширення пам'яті, зміна програмного забезпечення тощо) та за рахунок появи нових наукових напрямів, методологій досліджень (наприклад, впровадження нанотехнологій у фармацію).

При цьому виникає проблема оптимізації конгрегації комп'ютерної БЗ з досвідченим експертом-фармацевтом (провізором)-когнітологом. У реальності, БЗ повинна відповідати онтології певної предметної області (сфери, галузі) [1,11]. В онтології кожної предметної області різних розділів медицини (наприклад, фтизіатрії, онкології тощо) існує фармацевтична складова (лікарські засоби, лікарські форми, лікарське забезпечення, потреба в препаратах, інформаційне забезпечення тощо). Закономірно, що таким експертом може бути виключно висококваліфікований спеціаліст фармацевтичної галузі – експерт в онтології фармації. Проблема підготовки таких спеціалістів вимагає окремого розгляду, однаке певні джерела інформації для них вже опрацьовані [7].

Практичні аспекти формування та використання фармацевтичних знань ми проілюструємо на прикладі фармацевтичної складової діабетології. Вибір цієї онтології пов'язаний з численними факторами, зокрема, значною поширеністю цукрового діабету, значною динамікою арсеналу протидіабетичних лікарських засобів, використанням багатьох профільних та супутніх препа-

ратів різних фармакотерапевтичних груп у різноманітних лікарських формах тощо.

Алгоритм системокомплексу «експерт – база знань» передбачає два варіанти прийняття управлінського рішення:

1. Автоматизоване прийняття рішення, назване нами "вердиктна система" [6]: наприклад, якщо при фармацевтичній діагностиці електронного рецептуту експертна комп'ютерна система отримує інформацію про можливе одночасне застосування хворим на цукровий діабет II типу глібенкламіду та флуконазолу, відбувається:

- запит до комп'ютерної бази знань експертної системи, де комбінація глібенкламід-флуконазол представлена як «комбінація з потенційно небезпечною взаємодією, якої необхідно уникати» (джерела інформації з високим рівнем доказовості: Модельний Формуляр ВООЗ (WHO model formulary) (2008р.) [17]; Британський Національний Формуляр 62 видання (BNF No. 62) (вересень 2011 р.) [15]; Державний формуляр лікарських засобів України (випуск третій, 2011 р.) [9];

- заключення (висновок) вердиктної системи: "відпуск заборонено" (при обов'язковому узгодженні з лікарем, що виписав рецепт);

- прийняття лікарем управлінського рішення.

2. Експертне обґрунтування прийняття рішення з необхідністю врахування його позитивних та негативних наслідків (на основі використання комп'ютерної бази знань експертом-когнітологом): наприклад, коли експертна комп'ютерна система отримує інформацію про можливе одночасне застосування хворим на цукровий діабет II типу глібенкламіду та β-адреноблокаторів (атенололу, пропанололу, тимололу), відбувається:

- запит до комп'ютерної бази знань експертної системи, де комбінація глібенкламід-β-адреноблокатор (атенолол, пропанолол, тимолол) представлена як «комбінація препаратів з відомою взаємодією, яка, зазвичай, не призводить до серйозних наслідків» (джерела інформації з високим рівнем доказовості: Модельний Формуляр ВООЗ (WHO model formulary) (2008р.) [17]; Британський Національний Формуляр 62 видання (BNF No. 62) (вересень 2011 р.) [15]; Державний формуляр лікарських засобів України (випуск третій, 2011 р.) [9];

- повідомлення дорадчої системи для експерта-когнітолога та підготовка експертом матеріалів щодо інформування лікаря для прийняття ним науково обґрунтованого рішення про одночасне застосування комбінації глібенкламід-β-адреноблокатор;

- прийняття лікарем управлінського рішення.

Отже, сформовані фармацевтичні знання мають за мету узагальнення інформації позитив-

ного/негативного, оперативного/довгострокового (про віддалені наслідки) характеру, яке допомагає лікареві приймати науково обґрунтоване (на максимальному можливому сучасному рівні стану розвитку відповідних знань) управлінське рішення.

Висновки. Опрацьована концепція формування знань у фармацевтичній галузі. Розглянуто трактування поняття “знання” на класичних

фармацевтичних прикладах. Практичні аспекти формування та використання фармацевтичних знань проілюстровано на моделі фармацевтичної складової діабетології. Опрацьовано алгоритм функціонування системокомплексу “експерт(прогресор/фармацевт) – база знань” для отримання фармацевтичних знань та допомоги спеціалістам галузі охорони здоров’я у прийнятті науково обґрунтованих управлінських рішень.

Література

1. Артем’єва І. Л. Модель онтологии предметной области (на примере органической химии) / И. Л. Артем’єва, В. И. Высоцкий, Н. В. Рештатенко // НТИ. Сер. 2. Информационные процессы и системы. – 2005. – № 8. – С. 19–27.
2. Бойко А. І. Еволюція сучасних фармацевтичних баз даних і шляхи їх розвитку на перспективу. Повідомлення I. Становлення теорії побудови фармацевтичних баз даних / А. І. Бойко // Фармацевтичний журнал. – 2008. – № 4. – С. 29–33.
3. Бойко А. І. Еволюція сучасних фармацевтичних баз даних і шляхи їх розвитку на перспективу. Повідомлення II. Розвиток теорії фармацевтичних баз даних та впровадження їх у практику / А. І. Бойко // Фармацевтичний журнал. – 2008. – № 5. – С. 46–50.
4. Бойко А. І. Етапи розвитку інформатизації вітчизняної практичної фармації та спеціалізації її комп’ютерного забезпечення / А. І. Бойко // Прогізор. – 2008. – № 18. – С. 55–58.
5. Бойко А. І. Розвиток методології фармацевтичної інформатики від комп’ютерних баз даних до баз знань / А. І. Бойко, Н. А. Прилипко, Б. Л. Парновський // Ліки України плюс. – 2010. – № 2. – С. 76–78.
6. Бойко А. І. Трансформація фармацевтичної інформації у фармацевтичні знання та комп’ютерних баз даних в базі знань на прикладі створення експертних систем по взаємодії лікарських засобів, що функціонують на основі методів доказової фармації / А. І. Бойко // Фармацевтичний часопис. – 2011. – № 3. – С. 83–89.
7. Бойко А. І. Фармацевтична інформатика [навчальний посібник] / А. І. Бойко; за ред. Б. Л. Парновського. – Львів: Кварт, 2010. – 140 с.
8. Винер Н. Твореці робот/Н. Винер; пер. с англ. М. Н. Аронэ и Р. А. Фесенко. – М. : Прогресс, 1966. – 104 с.
9. Державний формуляр лікарських засобів України (випуск третій, 2011 р.). – [Електронний ресурс]: Режим доступу: <http://www.pharma-center.kiev.ua/view/formylar>
10. Каменская М. А. Медицинская информатика и доказательная медицина / М. А. Каменская // НТИ. Сер. 1. Организация и методика информационной работы. – 2006. – № 2. – С. 6–16.
11. Клещёв А. С. Модель онтологии предметной области «Медицинская диагностика». Часть 1. Неформальное описание и определение базовых терминов / А. С. Клещёв, Ф. М. Москаленко, М. Ю. Черняховская // НТИ. Сер. 2. Информационные процессы и системы. – 2005. – № 12. – С. 1 – 7.
12. Фармацевтична інформатика: [монографія] / [Парновський Б. Л., Слабий М. В., Заліська О. М. та ін.]. – Львів: Кварт, 2008. – 446 с.
13. Фома Аквінський. Сумма теології. Ч.1. / Фома Аквінський. – К. : Эльга, Ніка-Центр, 2002. – 560 с.
14. Шрейдер Ю. А. Об одной модели семантической теории информации / Ю. А. Шрейдер // Проблемы кибернетики. – 1965. – Вып. 13. – С. 234–240.
15. British National Formulary. – [Електронний ресурс]: Режим доступу: www.bnf.org
16. Fayyad U. From Data Mining to Knowledge Discovery in Databases / U. Fayyad, G. Piatetsky-Shapiro, P. Smyth / AI Magazine. – 1996. – № 3. – Р. 37–54.
17. WHO model formulary / edit.: M. Stuart, M. Kouimtzi, S.Hill. – WHO, 2008. – 634р.

КОНЦЕПЦИЯ ФОРМИРОВАНИЯ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ ЗНАНИЙ (ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И ПРАКТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ)

А. І. Бойко

Львовский национальный медицинский университет имени Данила Галицкого

Резюме: проработана концепция формирования знаний в фармацевтической отрасли, разработана методология выделения фармацевтических знаний на модели взаимодействия противодиабетических лекарственных средств.

Ключевые слова: семантическая фармацевтическая информация, информационный тезаурус, фармацевтические знания, онтология фармацевтической диагностики, база данных, база знаний.

THE CONCEPTION OF FORMATION OF PHARMACEUTICAL KNOWLEDGE (THEORETICAL AND PRACTICAL ASPECTS)

A. I. Boyko

Lviv National Medical University by Danylo Halytskyi

Summary: conception of forming of knowledges is developed in pharmaceutical industry, methodology of selection of pharmaceutical knowledges is developed on the model of drug interaction of antidiabetic medicines.

Key words: semantic pharmaceutical information, information thesaurus, pharmaceutical knowledges, ontology of pharmaceutical diagnostics, database, knowledge base.