УДК 658.01+004.02

РЕСУРСНО-РЕЗУЛЬТАТИВНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ПАРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МЕДИЦИНСКОЙ ОРГАНИЗАЦИИ КАК ПОДСКАЗКА ПО АНАЛОГИИ С ПОТЕНЦИАЛОМ ЛЕННАРДА-ДЖОНСА

Гольдштейн С.Л.[1], Грицюк Е.М.[2], Дугина Е.А.[2], Зимин А.О.[1]

[1] ФГАОУ ВПО «УрФУ», г. Екатеринбург, Россия
[2] ГАУЗ СО МКМЦ «Бонум», г. Екатеринбург, Россия

Предложено использовать известный в физике и физико-химии потенциал Леннарда-Джонса как подсказку по аналогии для моделирования ресурсно-результативного потенциала медицинской организации и ее составляющих. Дана формулировка задачи, подобраны предпосылки, предложены модели, приведен пример. Исследование проводится для выхода на систему расчетов ресурсно-результативного потенциала в медицинской организации.

Ключевые слова: медицинская организация, ресурсно-результативный потенциал, оригиналы и аналоги, потенциал Леннарда-Джонса, моделирование.

Resource and productive potential of a partner interaction in the medical institution as a prompting for analogy with Lennard-Jones potential

Goldshtein S.L.[1], Gritsyuk E.M.[2], Dugina E.A.[2], A.O. Zimin[1]

[1] Ural Federal University, Ekaterinburg
[2] State Autonomous Health Institution Sverdlovsk Region Multidisciplinary Clinical Medical Center "Bonum", Ekaterinburg

It is proposed to use the known physical and physico-chemical potential of Lennard-Jones as a tip similar to modelling resource-productive potential of the medical organization and its components. Given the wording of the tasks are prerequisites of the proposed model, an example is given. The study is carried out for access to the payment system of resource-productive potential in the medical organization.

Keywords: medical institution, resource-productive potential, originals and analogues, Lennard-Jones potential, modeling.

Введение

В физике и физико-химии с 1924 г. известен потенциал Леннарда-Джонса (ПЛД), описывающий взаимодействие полярных объектов в зависимости от расстояния между ними [1] и его варианты [2,3]. При этом значимы три зоны этого расстояния: без взаимодействия (самая удаленная), с притяжением (средняя) и с отталкиванием (самая близкая).

Можно полагать, что полярные объекты присущи и социоорганизационным объектам, например, медицинской организации (МО) с ее структурой и функциями. Это, прежде всего,

персонал, служебные задания, лечебно-диагностические технологии, лекарственные препараты и т.п. Однако, моделей такого взаимодействия в собственно медицинской и в организационно-медицинской науке нет, хотя в социологии имеются публикации об использовании ПЛД при моделировании социальных процессов, в частности [4].

В данной статье поставлена и решена задача об использовании ПЛД в качестве оригинала для выхода на аналоги ресурсно-результативных потенциалов (РРП) медицинской организации (в развитие [5-9]).

Предпосылки и их аналоги в МО

Из литературных источников нами отобраны 4 предпосылки.

Предпосылка 1 - наличие объектов взаимодействия: физических оригиналов и аналогов в МО.

Физический оригинал - во всякой молекуле имеются как положительно заряженные частицы - ядра атомов, так и отрицательно заряженные - электроны. Для каждого рода частиц (или, вернее, зарядов) можно найти такую точку, которая будет как бы их «электрическим» центром тяжести. Эти точки называются полюсами молекулы. Если в молекуле электрические центры тяжести положительных и отрицательных зарядов совпадут, то молекула будет неполярной. Таковы, например, молекулы H2, N2, образованные одинаковыми атомами, у которых общие пары электронов в равной мере принадлежат обоим атомам, а также многие симметрично построенные молекулы с атомной связью, например метан CH_4, Но если молекула построена несимметрично, например состоит из двух разнородных атомов, то в большей или меньшей степени полюс смещен в сторону одного из атомов. Очевидно, что тогда (вследствие неравномерного распределения положительных и отрицательных зарядов внутри молекулы) их электрические центры тяжести не совпадут и получится полярная молекула-диполь. Почти также образованы и атомы-диполи V-VIII групп таблицы элементов Менделеева (рис.1).

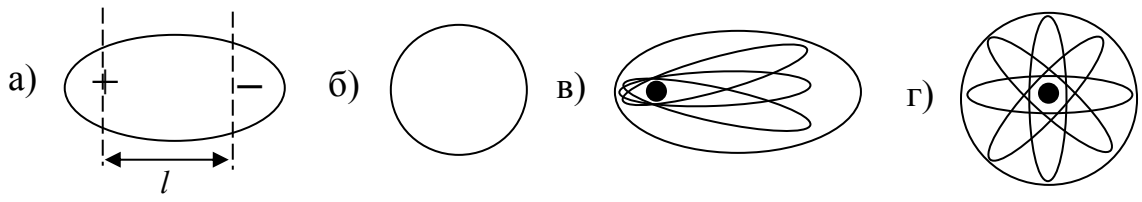


Рис. 1. Образы полярной (а) и не полярной (б) молекул и атомов (в,г) с ядром и электронными орбитами

Термином «диполь» обозначают вообще всякую электронейтральную систему, т. е., состоящую из положительных и отрицательных зарядов, распределенных таким образом,

что их электрические центры не совпадают. Расстояние между электрическими центрами тех и других зарядов (между полюсами диполя) называется длиной диполя (ℓ), она характеризует степень его полярности (см. рис. 1а).

Аналоги в МО также можно рассматривать с позиции полярности, которая обеспечивается положительным (лечебным) и отрицательным (побочные реакции и другие, часто обозначаемые как ятрогенные) воздействиями в рамках каждой медицинской технологии. Это можно перенести на медицинское оборудование, лекарственные препараты, персонал, кадры и даже нормативно-методическое обеспечение. Субъекты (сотрудники МО и пациенты) также могут быть представлены полярно-активно и неполярно-пассивно. Документы могут иметь неполярный (нейтральный) или полярный (благодарность / выговор) контент. Но поляризации может и не быть, тогда такие структурные элементы МО похожи на «заготовку», которая внешними силами может быть заряжена (настроена, промотивирована, простимулирована) по разному. Очевидно, что процессами поляризации объектов/субъектов в МО следует управлять, например, через подсказки от отдела аналитики и катамнеза (с привлечением достижений психологии, педагогики, теории управления и т.п.), исходя из сопоставления оригинала (из физики) и аналогий (в МО) типа: атом – субъект, молекула - микроколлектив. ядро - руководитель, оболочка – исполнители и т.п.

В соответствии с оригиналом в физике потенциал U диполя в произвольной точке P представляют в виде:

$$U = \frac{q}{4\pi\varepsilon_o \cdot r}\frac{\Delta r}{(r+\Delta r)}, \qquad (1)$$

где q – заряд, r – расстояние от точки P до положительного заряда, r+Δr – до отрицательного, $\Delta r \approx l \cdot \cos\theta$ (рис.2), ε_o – диэлектрическая постоянная.

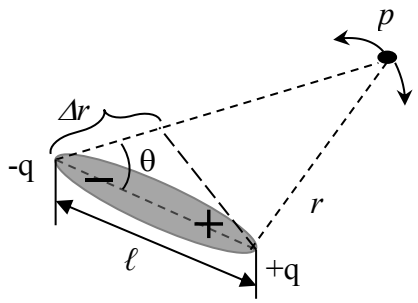


Рис. 2. Схема для оценки потенциала диполя

Чем больше r, тем меньше U. Потенциал U положителен при 0°<θ<90° и отрицателен при 90°< θ <180°, при θ = 90° U = 0.

Упрощенно справедливо:

$$U = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{q \cdot \ell \cdot \cos\theta}{r\,(r + \Delta r)} \quad для\ r \rangle\rangle \ell, \tag{2}$$

с учетом того, что cos0° = 1, cos180° = -1.

Аналогично пусть для диполя в МО q – ресурс, измеряемый в [руб.], ℓ– количество противоречий между разными полюсами одного ресурса (его положительным и отрицательным качествами), определяемое в [шт./руб.], $4\pi\varepsilon_0$ - внутреннее сопротивление движению ресурсов, оцениваемое в [руб.], r – длина списка работ и ресурсов, назначенных диполю для достижения цели – в [шт./руб.]. Тогда потенциал U диполя в МО имеет размерность:

$$[U] = \frac{1}{[руб]} \cdot \frac{[руб] \cdot [шт/руб]}{\left[шт^2 / руб^2\right]} = \left[\frac{руб}{шт}\right], \tag{3}$$

где шт. – количество элементов какого-либо списка.

Предпосылка 2 - пары взаимодействия: физические оригиналы и аналоги в МО.

Физический оригинал – взаимодействие полярных частиц, например, как показано на рис. 3

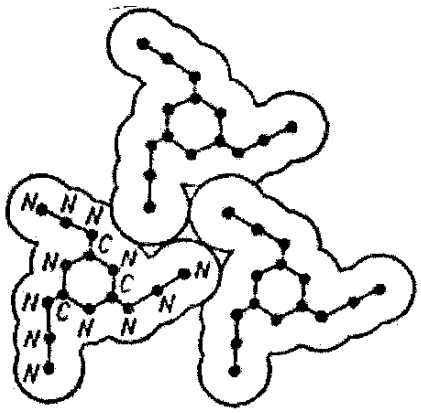


Рис. 3. Образы упаковки трех молекул триазидциануровой кислоты (на атомарный «скелет» надета молекулярная «шуба»).

Если две частицы находятся на бесконечном расстоянии друг от друга, то суммарная энергия взаимодействия состоит из индивидуальных вкладов, т.е. энергий (E_1 и E_2) двух изолированных частиц. Приведенные в контакт они взаимодействуют друг с другом, и суммарная энергия E взаимодействия определяется уравнением:

$$E = E_1 + E_2 + U(r), \tag{4}$$

где U – межчастичный (межмолекулярный) потенциал.

Потенциал U при этом равен работе, которую необходимо совершить для переноса частиц из бесконечного удаления на расстояние r друг от друга:

$$U(r) = -\int_{\infty}^{r} F(r)\,dr, \;\; m.e.\; F(r) = -\frac{dU}{dr}, \qquad (5)$$

где F - сила, действующая между двумя полярными частицами.

Аналоги в МО – например, взаимодействие лекарственных веществ, диагностических и лечебных технологий, исполнителей и руководителей, двух и более исполнителей, пациента и персонала, нескольких документов, баз данных или медицинских информационных систем и т.п.

Предпосылка 3 - образ потенциалов парного взаимодействия: оригиналы из физики и аналоги в МО.

Физический оригинал – потенциал парного взаимодействия Леннарда-Джонсона (рис.4)

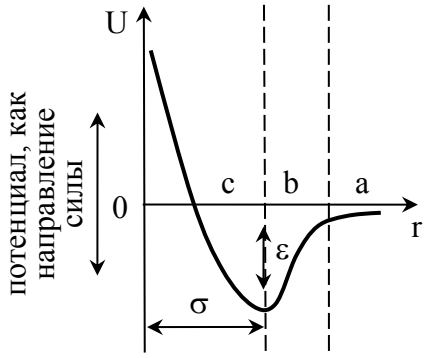


Рис. 4. Графический образ ПЛД (зоны взаимодействия: a – без взаимодействия, b – притяжения, c – отталкивания, U - потенциал, r – расстояние, ε и σ – координаты точки минимума).

Отталкивание в зоне «c» связано с противодействием электронных оболочек, притяжение в зоне «b» – с силами Ван-дер-Ваальса [10-11].

Аналоги в МО - например, потенциал в зоне «a» - нейтрального отношения исполнителя к перечню еще только планируемых руководством МО перспективных заданий, потенциал в зоне «b» - интереса исполнителя к этим заданиям в связи с ожидаемыми преференциями, потенциал в зоне «c» - отталкивания при ближайшей оценке исполнителем трудоемкости заданий. Расстояние между участниками (исполнителем и руководителем) может быть интерпретировано как разница оценок служебных и личных качеств этих сотрудников. Чем больше разница оценок, тем нейтральнее взаимодействие. По мере уменьшения разницы оценок может начаться приязнь, связанная со стороны исполнителя с перспективой карьерного роста, а со стороны руководителя – с увеличением числа своих сторонников и помощников. Однако, при минимальной разнице оценок

служебных и личных качеств может возникнуть тенденция соперничества и взаимного отталкивания.

Предпосылка 4 - модели потенциалов парного взаимодействия: оригиналы физики и аналоги в МО.

Физический оригинал – расчет по модели ПЛД как разности двух составляющих:

$$U(r) = \frac{a1}{r^{12}} - \frac{a2}{r^{6}}, \quad (6)$$

где *a* – составляющие потенциала:

$$a1 = 4 \cdot \varepsilon \cdot \sigma^{12}, \quad a2 = 4 \cdot \varepsilon \cdot \sigma^{6}, \quad (7)$$

где ε и σ приведены по рис.4.

Первое слагаемое (a1) описывает отталкивание, второе (a2) – притяжение.

$$U(r) = \begin{cases} \infty \ \ при \ \ r \le 0.5\,\sigma, \\ -\varepsilon \ \ при \ \ r \approx |\sigma|, \\ 0 \ \ при \ \ 0{,}5\,\sigma \ и \ при \ r \ \rangle\rangle \ \sigma. \end{cases} \quad (8)$$

При этом различают несколько видов притяжения. Так, между полярными объектами для энергии взаимодействия в рамках ориентационного механизма (рис. 5а) справедливо:

$$E_k = -2\mu_1 \cdot \mu_2 / 4\pi \cdot \varepsilon_0 \cdot r^{0}, \quad (9)$$

где E_k – энергия Кеезома, μ_i – дипольные моменты, ε_o – диэлектрическая постоянная.

Между полярным и неполярным объектами (исходный постоянный и наведенный диполи) при индуктивном (наводящем) механизме (рис. 5б) справедливо:

$$E_D = -2\mu^{2} \cdot \gamma / r^{6}, \quad (10)$$

где E_D – энергия Дебайя, γ – поляризуемость.

Между неполярными объектами в дисперсионном (рассеивающем) механизме (рис.5 в):

$$E_Л = 2\mu^{2} \cdot \gamma^{2} / r^{6}, \quad (11)$$

где $E_Л$ – энергия Лондона.

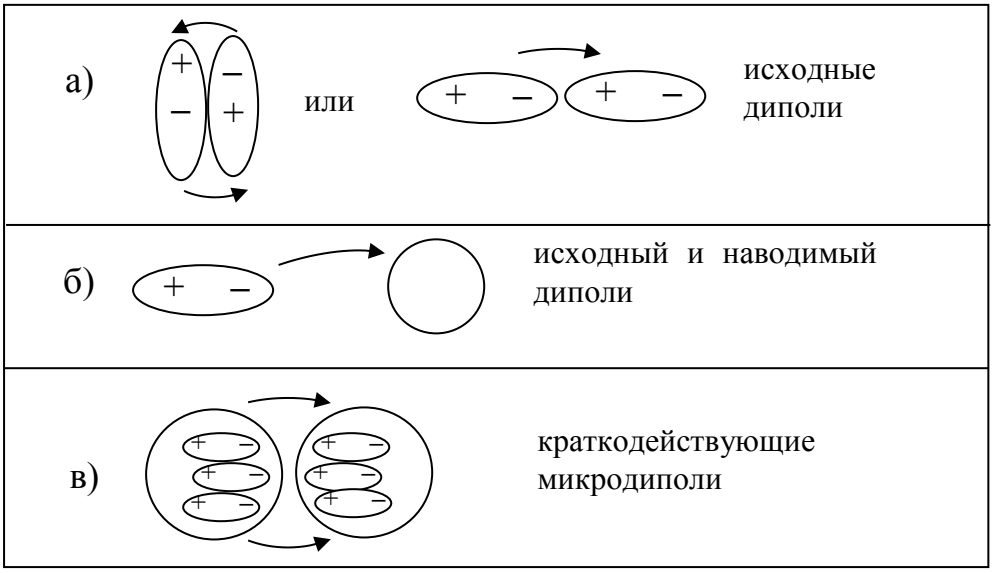


Рис. 5. Графические образы механизмов притяжения объектов

Для отталкивания известна модель:

$$E = k / r^{n}, \tag{12}$$

где k – постоянная отталкивания.

Аналоги для МО: пусть ресурсный потенциал парного взаимодействия по аналогии $\left(\overline{PcП}\right)$ описывается суммой:

$$\overline{PcП} = \sum_{i=1}^{m}\left(\overline{PcП} * \alpha\right)_i, \quad \sum \alpha_i = 1, \tag{13}$$

где управляющая переменная i: 1 – первого взаимодействующего элемента, 2 – второго элемента; 3 – организатора взаимодействия, 4 – фиксатора (регистратора) взаимодействия и т.п.

При этом для любого из этих ресурсов будем различать исходную и наведенную составляющие:

$$\overline{PcП_x} = \overline{PcП}^{o} + \overline{PcП}(r), \tag{14}$$

где $\overline{PcП}^{0}$ – исходный потенциал (при $r \to \infty$), r – как в модели (4).

Тогда результативный потенциал $\left(\overline{PзП}\right)$ аналогичен по форме модели (13):

$$\overline{PзП} = \sum_{j}^{n}\left(\overline{PзП_1} * \beta\right)_j, \qquad \sum \beta_j = 1, \tag{15}$$

где управляющая переменная j нужна для перебора результатов: 1 – у первого элемента, 2 – у второго элемента; 3 – у совместного эффекта, 4 – у организатора, …, α и β - веса.

При этом напомним, что потенциал целесообразно нормировать (фактическое значение относить к требуемому), если возникают трудности с использованием модели (3). По-видимому, в МО наибольший интерес представляют для поиска аналогий энергии притяжения по оригиналам (9)-(11).

Пример оценки РРП парного взаимодействия в МО

Будем полагать, что силовое поле фармакологического лечения антибиотиком образовано врачом за счет назначения фармпрепаратов в определенной дозировке и динамики их приема пациентом. Частный пример назначения приведен в табл. 1.

Таблица 1

Пример характеристик приема антибиотика и пробиотика [12, 13]

№ п/п	Характеристика	Значения характеристик:	
		амоксициллин	линекс
1	доза	500мг 3 раза/сутки	280мг×2 3 раза/сутки
2	курс лечения	(5-12) дней	дольше в 2 раза
3	последовательность	–	через 2 часа после антибиотика
4	связь с едой	после	после

Общее действие (D) антибиотика и пробиотика в комплексе на состояние здоровья будет отличаться от влияния этих препаратов по отдельности на организм и зависит, как правило, от соблюдения дозировки, кратности и длительности интервала между приемами ($\tau_П$). Эффект от комплексного воздействия антибиотика и пробиотика в зависимости от интервала между приемами ($\tau_П$) между их приемами пациентом качественно отражает рис.6, внешне аналогичный рис.4, что позволяет довести эту аналогию до оценок потенциалов.

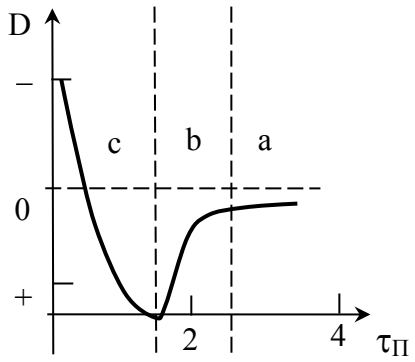


Рис. 6. Графический образ действия линекса на эффективность амоксициллина (зоны: a – без взаимодействия, b – помогающего действия, c - препятствующего действия)

Для этого нужна дополнительная информация, представленная на рис.7.

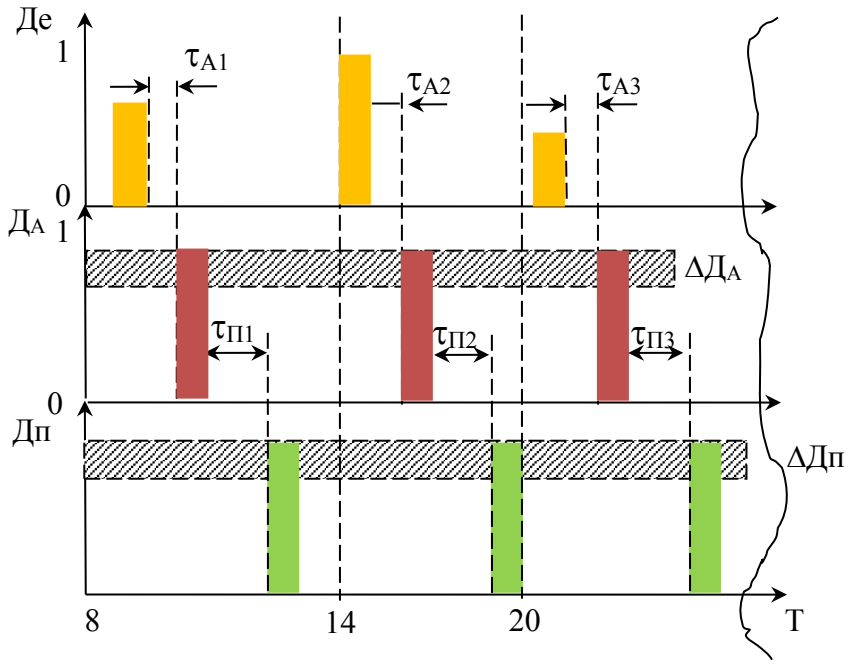


Рис. 7. Графический образ рекомендаций таблицы 1 (дозы: Де – еды, $Д_A$ – антибиотика, Дп – пробиотика, τ - интервалы между приемами, ΔД – разброс дозы; τ, Т - время).

С учетом этой информации, а также моделей (13)÷(15) можно предложить следующий формализм для оценки РРП пары антибиотик-пробиотик («А-П»).

$$РРП_{А-П} = РсП_{А-П}^{\alpha_1} * РзП_{А-П}^{\alpha_2}, \quad (16)$$

$$РсП_{А-П} = РсП_{А} \cdot \alpha_{11} + РсП_{П} \cdot \alpha_{12}, \quad (17)$$

$$РзП_{А-П} = РзП_{А} \cdot \alpha_{21} + РзП_{П} \cdot \alpha_{22}, \quad (18)$$

$$РсП_{А} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left(\frac{Д_{А}^{ф}}{Д_{А}^{н}} \times \beta_1 + \frac{\tau_{А}^{ф}}{\tau_{А}^{н}} \times \beta_2\right)_i, \quad (19)$$

где i – управляющая переменная для циклов приема А, значения: ф – фактические, н – нормативное, ф < н.

$$РсП_{П} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\left(\frac{Д_{П}^{ф}}{Д_{П}^{н}} \times \beta_1 + \frac{\tau_{П}^{ф}}{\tau_{П}^{н}} \times \beta_2\right)_j, \quad (20)$$

где j – управляющая переменная для циклов приема П, ф < н, α, β - веса..

Оценка ресурсного потенциала антибиотика ($РсП_A$) приведена в табл. 2.

Таблица 2

Оценка $РсП_А$ ($\beta_1=\beta_2=0,5$)

i	$Д_А$, мг		$\tau_А$, час		$\frac{Д_А^{ф}}{Д_А^{н}}\cdot 0,5$	$\frac{\tau_А^{ф}}{\tau_А^{н}}\cdot 0,5$	$(РсП_А)_i$	$РсП_А$
	ф	н	ф	н				
1	450		0,3		0,45	0,30	0,75	
2	420		0,2		0,40	0,20	0,60	
3	500		0,5		0,50	0,50	1,00	
4	410		0,4		0,40	0,40	0,80	
5	470		0,1		0,45	0,10	0,55	
6	450		0,5		0,40	0,50	0,90	
7	500	500	0,3	0,5	0,50	0,30	0,80	0,75
8	500		0,2		0,50	0,20	0,70	
9	420		0,1		0,40	0,10	0,50	
10	430		0,5		0,40	0,50	0,90	
11	450		0,5		0,45	0,50	0,95	
12	500		0,4		0,50	0,40	0,90	
13	480		0,1		0,45	0,10	0,55	
14	430		0,2		0,40	0,20	0,60	
15	420		0,4		0,40	0,40	0,80	

Для составляющих результативного потенциала справедливо:

$$РзП_А = \left(\frac{ПОЗ^{ф}}{ПОЗ^{н}} \cdot \gamma_1 + \frac{ПП^{ф}}{ПП^{н}} \cdot \gamma_2 \right)_А , \quad (21)$$

$$РзП_П = \left(\frac{ПОЗ^{ф}}{ПОЗ^{н}} \cdot \gamma_1 + \frac{ПП^{ф}}{ПП^{н}} \cdot \gamma_2 \right)_П , \quad (22)$$

где ПОЗ – показатель снижения проявлений основного заболевания от А, ПП – показатель помехи (осложнения от А), γ - вес.

Оценка $РсП_А$ по модели (19) при i = 1÷15 (5 суток × 3 раза/сутки) составила 0,75 (табл.2). С достаточной вероятностью можно считать, что при j=1÷30 (10× 3 раза/сутки) оценка $РсП_П$ по модели (20) будет пониже (≈0,50). Тогда при α_{11} = 0,6 и α_{12} = 0,4 $РсП_{А\text{-}П}$ по модели (17) составит 0,7. При $\gamma_1=\gamma_2=0,5$ для $ПОЗ^{ф}/ПОЗ^{н} \approx 0,8$ и $ПП^{ф}/ПП^{н} \approx 0,2$ получим оценку $РзП_А$ по модели (21) ≈ 0,5. Так же и для оценки $РзП_П$ по модели (22). Тогда $РзП_{А\text{-}П}$ по модели (18) ≈ 0,5. В итоге для $РРП_{А\text{-}П}$ по модели (16) при $\alpha_1=\alpha_2=0,5$ получим оценку ≈ 0,6.

Т.о. несоблюдение назначений врача может заметно навредить выздоровлению, что часто подтверждается практикой.

Результаты и выводы

Поставлена задача использования потенциала Леннарда-Джонса в качестве оригинала для выхода на аналоги ресурсно-результативного потенциала медицинского учреждения и его составляющих.

1. Представлено четыре предпосылки для решения задачи: об объектах, парах объектов, моделях и потенциалах взаимодействия.
2. Рассмотрен пример моделей и расчетов по ним;
3. Сделан вывод об информативности подхода.

Проведенное исследование позволяет выйти на систему расчетов ресурсно-результативного потенциала в медицинской организации.

Список литературы

1. Каплан И. Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. — М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы. 1982. 312 с.

2. Потенциал Ми. Технический справочник / [Официальный сайт Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Институт прикладной математики и механики (Физико-Механический факультет, кафедра “Теоретическая Механика”)]. URL: http:/tm.spbstu.ru/Потенциал_Ми

3. Потенциал Морзе / [Официальный сайт Студопедия]. URL: https://studopedia.ru/3_11688_potentsial-morze.html

4. Rozanova L.V. On applications of Lennard-Jonnes potential as a social force for crowd behavior modeling / L.V. Rozanova, A.J.Temerov, E.V.Myakisheva // Mathematical Structures and Modeling. 2014. №4(32). P. 134-145.

5. Грицюк Е.М. О ресурсно-результативном потенциале медицинского учреждения / Е.М. Грицюк, Е.А. Дугина, С.Л. Гольдштейн, С.И. Блохина // «Здоровье и образование в XXI веке» по результатам международного конгресса Здоровье и образование в XXI веке 2017 г. №4 С. 69-73 URL: https://clinical-journal.co.uk/ru/journal-archive/

6. Грицюк Е.М. Совершенствование представлений о ресурсно-результативном потенциале медицинского учреждения / Е.М. Грицюк, Е.А. Дугина, С.Л. Гольдштейн и др. // Электронный научный журнал "Системная интеграция в здравоохранении". 2016. № 2. С. 40-53 URL: http://sys-int.ru/sites/default/files/sys-int-28-40-53.pdf

7. Гольдштейн С.Л. О системно-интеграционной методологической базе определения и оценки потенциалов, релевантно-пертинентных деятельности медицинского учреждения / С.Л. Гольдштейн, Е.М. Грицюк, Е.А. Дугина и др. // Электронный научный журнал "Системная

интеграция в здравоохранении". 2016. № 4. С. 5-21 URL: http://www.sys-int.ru/ru/journals/2016/4-30/o-sistemno-integracionnoy-metodologicheskoy-baze-opredeleniya-i-ocenki

8. Гольдштейн С.Л. О возможности оценки ресурсно-результативного потенциала пары «руководитель-исполнитель» на основе эквивалентных схем / С.Л. Гольдштейн, Е.М. Грицюк, Е.А. Дугина // Электронный научный журнал "Системная интеграция в здравоохранении". 2017. № 1. С. 5-17 URL: http://www.sys-int.ru/ru/journals/2017/1-31/o-vozmozhnosti-ocenki-resursno-rezultativnogo-potenciala-pary-rukovoditel

9. Гольдштейн С.Л. О механических аналогиях для моделирования ресурсно-результативного потенциала медицинского учреждения / С.Л. Гольдштейн, Е.М. Грицюк, Е.А. Дугина [и др.] // Электронный научный журнал "Системная интеграция в здравоохранении". 2017. № 3. С. 6-21 URL: http://www.sys-int.ru/ru/journals/2017/3-33/o-mehanicheskih-analogiyah-dlya-modelirovaniya-resursno-rezultativnogo-potenciala

10. Бараш Ю.С.Силы Ван-дер-Вальса. - М: Наука. 1988. 344 с.

11. Каплан И.Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы. - М: Бином. Лаборатория знаний. 2014. 397 с.

12. Амоксициллин (Amoxicillin) / РЛС Энциклопедия лекарств и товаров аптечного ассортимента. URL: https://www.rlsnet.ru/tn_index_id_222.htm

13. Линекс (Linex) / РЛС Энциклопедия лекарств и товаров аптечного ассортимента. URL: https://www.rlsnet.ru/tn_index_id_1929.htm

Гольдштейн Сергей Людвигович - д.т.н., профессор физико-технологического института Уральского федерального университета, действительный член РАЕН, научный консультант ГАУЗ СО МКМЦ «Бонум», 620149, Екатеринбург, ул. Бардина, 9а, тел: (343)240-42-68 bonum@bonum.info