



WEB-ІНТЕГРОВАНЕ ПРОГРАМНЕ СЕРЕДОВИЩЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ФАРМАКОКІНЕТИКИ НАНОЧАСТИНОК

Меленчук І.Б.

Тернопільський державний медичний університет імені І.Я. Горбачевського
майдан Волі, 1, Тернопіль, 46001, E-mail: university@tdmu.edu.te.ua

При проведенні системних медичних та фармацевтичних досліджень у створенні лікарських препаратів з використанням наночастинок виникають питання прогнозування переміщення лікарського препарату в організмі людини. При цьому виникають питання не лише кількісних, але і якісних змін величини концентрації ліків в окремому органі та тканині організму людини. При цьому слід враховувати цілий ряд невизначеностей – рух лікарського препарату між органами та тканинами внаслідок біоперетворень, нелінійність функції переміщення препарату, схема введення ліків та інше. Розв'язування проблем такого роду вимагає розробки відповідних алгоритмів системного аналізу. Для цього здійснено огляд властивостей наночастинок, основних підходів до побудови фізіологічно обґрунтованих фармакокінетичних (ФОФК) моделей та застосування таких моделей для визначення концентрації наночастинок в організмі людини. Фізіологічно обґрунтовані моделі ґрунтуються на реальних фізіологічних параметрах тканин, органів і систем організму, об'єднаних кровотоком. При компартментному моделюванні структура та значення кінетичних параметрів фізіологічно обґрунтованих моделей визначається виключно шляхом формального аналізу кінетики препаратів в органі чи тканині. Тому надається перевага саме компартментному підходу, який, будучи більш реальним в реалізації в науково-дослідних медичних установах, також дає адекватний прогноз щодо фармакокінетики лікарського препарату. Достатньо формально представити організм у вигляді ФОФК-моделі, яка складається із одного або більше компартментів, визначити зв'язки між цими компартментами і скласти балансові співвідношення між ними. Тому виникає потреба в нових зручних алгоритмах для побудови і аналізу математичних моделей в класах нелінійних функціонально-диференціальних рівнянь та їх реалізації у вигляді відповідних програмних середовищ з інтерфейсами, орієнтованими на користувача. Такий спрощений підхід до математичного моделювання дозволяє складати досить точні математичні прогнози отримання бажаного рівня концентрації препарату в певному органі, ґрунтуючись на використанні добре розробленого математичного апарату і теорії оптимізації. В результаті роботи запропоновано ФОФК-модель для лікарського препарату на основі наночастинок, яка описується системою нелінійних диференціальних рівнянь, що включають рівняння Хілла для виведення наночастинок із компартментів печінки та нирок.

На основі аналізу принципів і підходів до комп'ютерного моделювання та на основі існуючого програмного забезпечення, яке використовується у фармакокінетичних дослідженнях, запропоновано веб-інтегроване програмне середовище, яке реалізує основні математичні моделі введення лікарського препарату на основі наночастинок та прогнозування концентрації препарату в певному органі та тканині організму.