

- государственный технический университет им. И. И. Ползунова (АлтГТУ). – 2016. – № 2. – С. 65-68.
6. Редько В.В. Разработка методов и средств электроискрового технологического контроля изоляции кабельных изделий: дис. на соиск. учен. степ. канд. техн. наук. – Томск, 2013 – 207 с.
 7. Вавилова Г.В., Гольдштейн А.Е. Прибор для технологического контроля погонной ёмкости электрического провода // Измерительная техника. – 2018. – № 3. – С. 46-50.

УДК 620.179.162

ПРИМЕНЕНИЕ ГРАФИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ В ФАРМАКОЛОГИИ

Шарычев Иван Павлович, Фех Алина Ильдаровна

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск

E-mail: ips1@tpu.ru, fehai@tpu.ru

APPLICATION OF GRAPHIC METHODS OF RESEARCH IN PHARMACOLOGY

Sharychev Ivan Pavlovich, Feh Alina Ildarovna

National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk

Аннотация: в статье приведены примеры использования графических методов для изучения и создания новых лекарственных средств. Проведенное исследование позволяет утверждать, что фармакология во многом зависит от инженерной графики, так как большинство биомедицинских процессов не осуществимо без чертежа или модели. В работе рассматриваются ключевые этапы развития фармакологии, однако особое внимание уделено современным графическим методам создания лекарств и изучения их активности. Поднятая в статье проблема имеет большое значение в век развития компьютерных технологий.

Abstract: the article provides examples of the use of graphic methods for the study and creation of new drugs. The conducted research suggests that pharmacology largely depends on engineering graphics, since most biomedical processes are not feasible without a drawing or model. The paper discusses the key stages in the development of pharmacology, but special attention is paid to modern graphical methods for creating drugs and studying their activity. The problem raised in the article is of great importance in the age of development of computer technology.

Ключевые слова: фармакология; инженерная графика; моделирование; графические методы; лекарственные средства.

Keywords: pharmacology; engineering graphics; modeling; graphic methods; medicines.

Значение инженерной графики во многих областях знаний велико. Прав был П.К. Галактионов, некогда сказавший: «Способом начертательной геометрии можно представить весь вещественный мир в одной прекрасной верной картине, понятной для каждого». Действительно, чертёж является основой практически любого проекта в строительстве и машиностроении, в артиллерийском, ткацком и горном деле, в работе плотника, кузнеца и токаря. Кроме того, важную роль в фармакологии играет моделирование, компьютерная и инженерная графика. Эти методы имеют огромное значение в процессе разработки новых лекарственных средств и в дальнейшем их испытании.

Ещё в далёкой древности, когда фармакология только начинала развиваться, люди пытались лечить болезни с помощью лекарственных средств. Свои знания они передавали из поколения в поколения, об этом свидетельствуют древнейшие памятники культуры. В Институте рукописей Национальной Академии Наук Азербайджана хранится труд XIII века, где описаны фармацевтические свойства растений, субстанций животного происхождения, минералов, а также различных лекарств [1-4].

В период Средневековья широкое распространение получила алхимия, смежная дисциплина с медициной и химией. Чертежи примитивных установок, для получения лекарственных препаратов хранятся до сих пор. В XVI китайский врач Ли Шичжэнь написал 25-томный труд «Компендиум по фармакологии», в котором были собраны около 11000 рецептов и около двух тысяч лекарственных, полученных из природного сырья: минералов, растений и животных (см. рисунок 1).



Рисунок 1 - Страница из рукописи «Компендиум по фармакологии»

Основы современной фармакологии были заложены лишь в конце XVIII — начале XIX вв. К этому времени в Западной Европе появились первые фармацевтические фабрики и заводы, на которых производили нашатырь, серную кислоту, различные алкалоиды, синтетические препараты. С развитием науки происходило усложнение технологии производства лекарственных средств. Всё чаще чертежи стали применяться для создания новых машин, современного оборудования (см. рисунок 2). Крупнейшие достижения последних лет в области медицинской генетики, биологии положили начало развитию клеточной и молекулярной фармакологии, а также наукам, способствующим росту эффективности и безопасности фармацевтической терапии болезней человека [1-5].

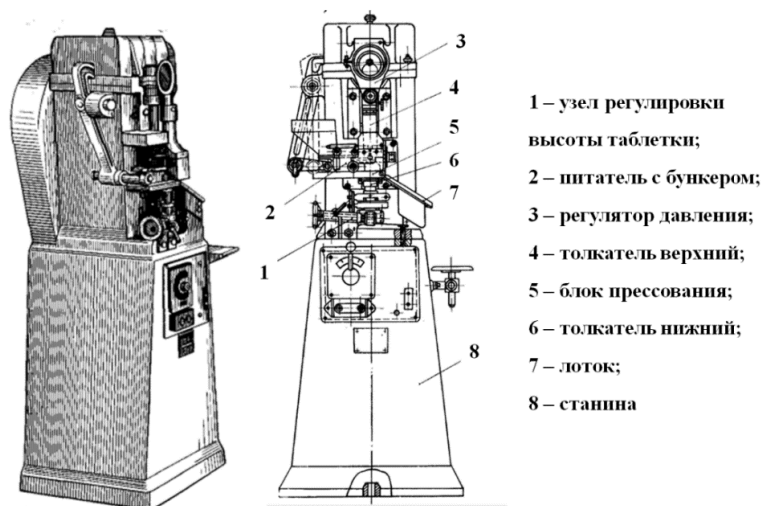


Рисунок 2 - Устройство кривошипной таблеточной машины

В период развития компьютерного моделирования фармакология «открыла» новые методы создания лекарственных средств и получения активных веществ. Среди способов

изучения активности вещества с использованием графических технологий можно выделить методику QSAR. Аббревиатура расшифровывается как Quantitative Structure Activity Relationships, что в переводе с английского означает Количественное Соотношение Структура Активность. Метод основан на составлении математического уравнения и построения графика (см. рисунок 3), с помощью которого можно описать как физиологическую активность, так и вообще любое свойство исследуемого вещества [6].

Если существует пусть даже весьма небольшое количество химических соединений с изученной активностью, то благодаря методике QSAR можно предопределить структуру необходимых веществ. Это в разы уменьшает время поиска соединений с определённой активностью.

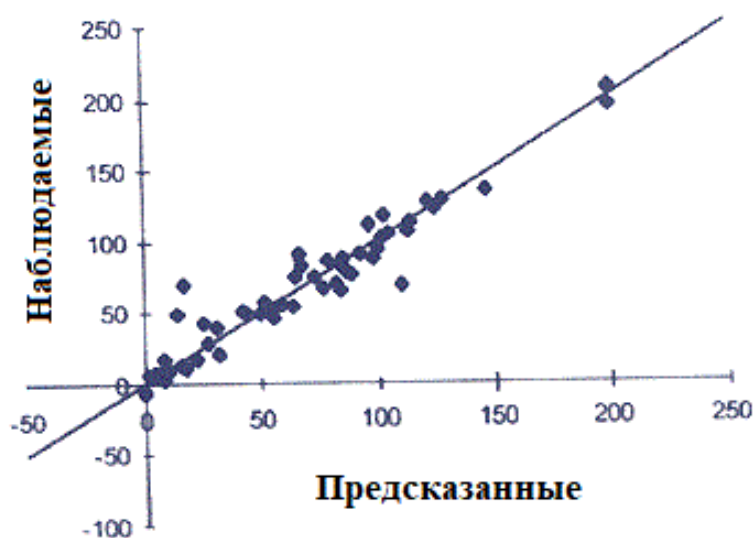


Рисунок 3 – Графические технологии изучения активности вещества

Ещё один метод, часто используемый в современной фармакологии и лежащий в основе структурного дизайна лекарственных средств – это молекулярный докинг. Он предназначен для определения наиболее выгодного положения в пространстве одних молекул относительно других. Этот процесс заключается в расчёте энергии взаимодействия двух молекул при их сближении и установлении наиболее выгодного взаимного расположения. В программе создаются графические модели белков: один из них фиксируется в пространстве, а другой поворачивается вокруг первого различными способами до достижения наибольшей энергии взаимодействия (см. рисунок 4). Данный метод лежит в основе дизайна лекарств.

Процесс молекулярного докинга представлен в упрощённом виде на схеме (см. рисунок 4).

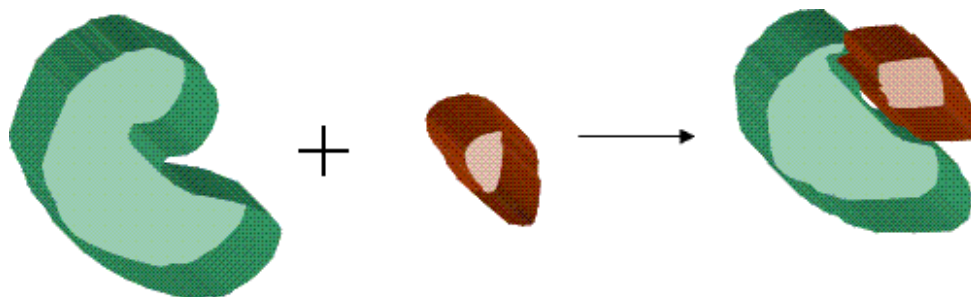


Рисунок 4 – Процесс молекулярного докинга

В данном случае лиганд (красного цвета) размещается в пространстве относительно белка (голубого цвета) так, чтобы их энергия взаимодействия была максимальной.

Для объяснения многих фармакологических и физиологических процессов, связанных с действием на организм лекарственных препаратов, зачастую используют графические симуляторы. Они воссоздают на дисплее изображения той или иной заданной ситуации. Чаще всего используют программы Rat CVS (Cardiovascular System) и The Virtual Cat. Здесь в качестве интерфейсного устройства используется «мышь» или «кошка». Симуляторы изображают зарегистрированные изменения артериального давления, частоты сердечных сокращений в виде графиков функций, что упрощает работу с данными (см. рисунок 5) [1,4,6].

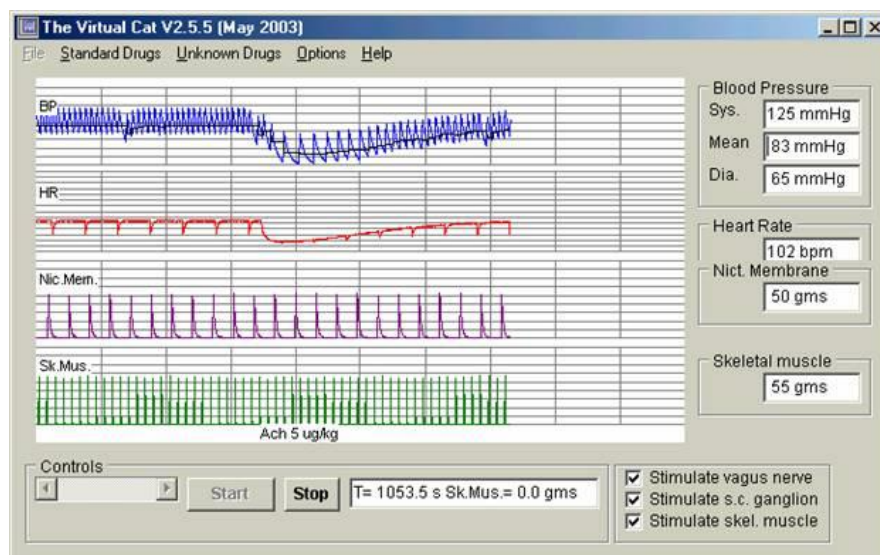


Рисунок 5 – Графики изменения показателей при введении в организм кошки ацетилхолина в дозе 5 мкг/кг в программе The Virtual Cat

Таким образом, графические методы представления информации являются незаменимыми в такой сфере знаний, как фармакология. Существует немало примеров, подтверждающих это. Безусловно, в будущем методы компьютерного моделирования фармакологических процессов и лекарственных средств усовершенствуются и увеличат эффективность разработок.

Список литературы

1. Инновационные технологии и оборудование фармацевтического производства [Текст] / Н.В. Меньшутина, Ю.В. Мишина, С.В. Алвес [и др.]. – Т. 2. – М.: БИНОМ, 2013. – 480 с.
2. Лунина И.Н., Покровская М.В., Резчикова Е.В. Об опыте интеграции педагогических технологий в техническом университете // Высшее образование в России. 2013. №2. С. 90–95.
3. Покровская, М. В. Инженерная графика: теория и практика межпредметных связей / М. В. Покровская, И. Н. Лунина. – Москва: МГТУ им. Баумана, 2016. – 179-183 с.
4. Компьютерное моделирование в фармакологии [Электронный ресурс] // Интернет-портал. – URL: <http://bioinformatics.ru/Raznoe/Kompiuternoe-modelirovanie-v-farmakologii> (дата обращения: 25.10.2020).
5. Технология производства таблеток [Электронный ресурс] // Интернет-портал. – URL: <https://gmpua.com/Process/Tablet/index.html> (дата обращения: 21.10.2020).
6. Bioinformatix.ru [Электронный ресурс] // Интернет-портал. – URL: <http://www.bioinformatix.ru/bioinformatika/qsar-kolichestvennaya-vzaimosvyaz-mezhdu-strukturoy-i-aktivnostyu.html> (дата обращения: 22.10.2020).