



**ВЕСТНИК**  
**Башкирского**  
**государственного**  
**медицинского университета**  
сетевое издание ISSN 2309-7183  
специальный выпуск №2



**№ 2, 2026**  
**vestnikbgmu.ru**

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ МЕДИЦИНСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ  
МИНИСТЕРСТВО ЗДРАВООХРАНЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

# ВЕСТНИК

## Башкирского государственного медицинского университета

Сетевое издание  
специальный выпуск №2, 2026

Редакционная коллегия:

Главный редактор: проф. Храмова К.В. (Уфа)

Зам. главного редактора: проф. Нартайлаков М.А. (Уфа)

Члены редакционной коллегии:

проф. Ахмадеева Л.Р. (Уфа); проф. Валишин Д.А. (Уфа); проф. Верзакова И.В. (Уфа); проф. Викторова Т.В. (Уфа); проф. Галимов О.В. (Уфа); проф. Гильманов А.Ж. (Уфа); проф. Гильмутдинова Л.Т. (Уфа); проф. Еникеев Д.А. (Уфа); проф. Загидуллин Н.Ш. (Уфа); проф. Катаев В.А. (Уфа); к.м.н. Кашаев М.Ш. (Уфа); проф. Мавзютов А.Р. (Уфа); проф. Малиевский В.А. (Уфа); проф. Минасов Б.Ш. (Уфа); проф. Моругова Т.В. (Уфа); проф. Новикова Л.Б. (Уфа); проф. Сахаутдинова И.В. (Уфа);  
доц. Цыглин А.А. (Уфа)

Редакционный совет:

Член-корр. РАН, проф. Аляев Ю.Г. (Москва); проф. Бакиров А.А. (Уфа); проф. Вольф Виланд (Германия); проф. Вишневский В.А. (Москва); проф. Викторов В.В. (Уфа); проф. Гальперин Э.И. (Москва); проф. Ганцев Ш.Х. (Уфа); академик РАН, проф. Долгушин И.И. (Челябинск); академик РАН, проф. Котельников Г.П. (Самара); академик РАН, проф. Кубышкин В.А. (Москва); проф. Мулдашев Э.Р. (Уфа); проф. Прокопенко И. (Великобритания); проф. Созинов А.С. (Казань); член-корр. РАН, проф. Тимербулатов В.М. (Уфа); доц. Хартманн Б. (Австрия); академик РАН, проф. Чучалин А.Г. (Москва); доц. Шебаев Г.А. (Уфа); проф. Шигуан Ч. (Китай); проф. Боафен Я. (Китай)

Состав редакции сетевого издания «Вестник Башкирского государственного медицинского университета»:

зав. редакцией – к.м.н. Насибуллин И.М.

научный редактор – к.филос.н. Афанасьева О.Г.

корректор-переводчик – к.филол.н. Майорова О.А.

СМИ «ВЕСТНИК БАШКИРСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО МЕДИЦИНСКОГО УНИВЕРСИТЕТА»  
ЗАРЕГИСТРИРОВАН В ФЕДЕРАЛЬНОЙ СЛУЖБЕ ПО НАДЗОРУ В СФЕРЕ СВЯЗИ,  
ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ И МАССОВЫХ КОММУНИКАЦИЙ (РОСКОМНАДЗОР)  
31.01.2020. РЕГИСТРАЦИОННЫЙ НОМЕР В РЕЕСТРЕ ЗАРЕГИСТРИРОВАННЫХ СМИ СЕРИЯ Эл № ФС  
77-77722

© ФГБОУ ВО БГМУ МИНЗДРАВА РОССИИ, 2026

FEDERAL STATE BUDGETARY EDUCATIONAL INSTITUTION OF HIGHER EDUCATION  
BASHKIR STATE MEDICAL UNIVERSITY  
THE MINISTRY OF HEALTHCARE OF THE RUSSIAN FEDERATION

# VESTNIK BASHKIR STATE MEDICAL UNIVERSITY

**Special issue**  
**online news outlet № 2, 2026**

Editorial board:

Editor-in-chief: Professor Khranova K.V. (Ufa)

Deputy editor-in-chief: Professor Nartailakov M.A. (Ufa)

Members of editorial board:

professor Akhmadeeva L.R. (Ufa); professor Valishin D.A. (Ufa); professor Verzakova I.V. (Ufa); professor Viktorova T.V. (Ufa); professor Galimov O.V. (Ufa); professor Gilmanov A.Zh. (Ufa); professor Gilmudinova L.T.(Ufa); professor Yenikeev D.A. (Ufa); professor Zagidullin N.Sh. (Ufa); professor Kataev V.A. (Ufa); associate professor Kashaev M.Sh. (Ufa); professor Malievsky V.A. (Ufa); professor Minasov B.Sh. (Ufa); professor Morugova T.V. (Ufa); professor Novikova L.B. (Ufa); professor Rakhmatullina I.R. (Ufa); professor Sakhautdinova I.V. (Ufa); associate professor Tsyglin A.A. (Ufa)

Editorial review board:

Corresponding member of the Russian Academy of Sciences professor Alyaev Yu.G. (Moscow); professor Bakirov A.A. (Ufa); professor Wolf Wieland (Germany); professor Vishnevsky V.A. (Moscow); professor Viktorov V.V. (Ufa); professor Galperin E.I. (Moscow); professor Gantsev Sh.Kh. (Ufa); academician of the Russian Academy of Sciences, professor Dolgushin I.I. (Chelyabinsk); academician of the Russian Academy of Sciences, professor Kotelnikov G.P. (Samara); Academician of the Russian Academy of Sciences, Professor Kubyshkin V.A. (Moscow); professor Muldashev E.R. (Ufa); professor Prokopenko I. (Great Britain); professor Sozinov A.S. (Kazan); corresponding member of the Russian Academy of Sciences, professor Timerbulatov V.M. (Ufa); associate Professor Hartmann B. (Austria); academician of the Russian Academy of Sciences, professor Chuchalin A.G. (Moscow); associate professor Shebaev G.A. (Ufa); professor Shiguang Zh. (China); professor Yang B. (China)

Editorial staff of the online publication "Vestnik of Bashkir State Medical University":

Managing editor: Nasibullin I.M., MD, PhD

Science editor: Afanasyeva O.G., PhD

Translator-proofreader: Mayorova O.A., PhD

NEWS OUTLET "VESTNIK OF BASHKIR STATE MEDICAL UNIVERSITY" REGISTERED WITH THE  
FEDERAL SERVICE FOR SUPERVISION IN THE SPHERE OF COMMUNICATIONS, INFORMATION  
TECHNOLOGY AND MASS COMMUNICATIONS (ROSKOMNADZOR) 31.01.2020. REGISTRATION  
NUMBER IN THE REGISTER OF REGISTERED MEDIA EI No. FS 77-77722

© FSBEI HE BSMU OF THE MINISTRY OF HEALTH OF RUSSIA, 2026

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
МЕДИЦИНСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ МИНИСТЕРСТВА ЗДРАВООХРАНЕНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**Издание приурочено**

2-ой Международной конференции «Компьютерное моделирование физических процессов  
и новые цифровые технологии в медицине и фармации».

**Под редакцией**

Г.Т. Закирьяновой

**Редакционная коллегия:**

д.э.н., профессор Г.Г. Галиева  
к.ф.–м.н., доцент Г.Н. Загитов  
к.ф.–м.н., доцент М.Х. Зелеев  
к.ф.–м.н., доцент В.В. Войтик  
к.ф.–м.н., доцент Г.Т. Закирьянова  
к.ф.–м.н., доцент С.И. Хажина  
д.т.н., профессор И.А. Гайнуллин  
ст. преподаватель Р.И. Галеева  
ст. преподаватель Р.А. Байрамгулов  
ст. преподаватель З.Д. Юсупова  
ст. преподаватель Г.Р. Абушахмина  
ассистент Л.С. Муртазина

**Ответственный секретарь:**

Р.А. Байрамгулов

Уфа 2026

ОГЛАВЛЕНИЕ

Али М., Шакер А. <b>ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МНОГОСЛОЙНОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ДЛЯ КЛАССИФИКАЦИИ СИГНАЛА СЕРДЦЕБИЕНИЯ ЭЛЕКТРОКАРДИОГРАММА ...</b>	7
Арыстанбаев К.Е., Токсанбаева Ж.С., Усманова Р.М. <b>АЛГОРИТМИЧЕСКАЯ ПРЕДВЗЯТОСТЬ И РЕПРЕЗЕНТАТИВНОСТЬ ДАННЫХ: РИСКИ ЛОЖНОПОЛОЖИТЕЛЬНЫХ РЕШЕНИЙ В ЦИФРОВОЙ ФАРМАЦЕВТИКЕ .....</b>	12
Вишняков Р.С., Гончаров В.В. <b>ПЕРСПЕКТИВЫ ГЕНЕРАТИВНЫХ ПОДХОДОВ К ШИФРОВАНИЮ И ЗАЩИТЕ МЕДИЦИНСКИХ ДАННЫХ: ОБЗОР И ДЕМОСТРАЦИОННАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ..</b>	17
Гиззатуллина К.И.1, Лакман И.А.1, Усманова Д.И.2 <b>ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ И БОЛЬШИЕ ДАННЫЕ В ЛАБОРАТОРНОЙ ДИАГНОСТИКЕ: СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ТЕХНОЛОГИЙ АВТОМАТИЗАЦИИ ОБЩЕГО АНАЛИЗА МОЧИ .....</b>	23
Гольцев М.В., Мансуров В.А. <b>КАСАТЕЛЬНОЕ НАПРЯЖЕНИЕ НА СТЕНКЕ СОСУДИСТОЙ БИФУРКАЦИИ .....</b>	28
Горбачевич Г.И., Суббот К.В., Суббот А.В., Ганник Д.С., Комлач И.А. <b>СТАТИСТИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ НОРМАТИВНЫХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ КАЧЕСТВА ПЛОДОВЫХ ТЕЛ <i>GANODERMA APPLANATUM</i> .....</b>	33
Жанбырбаева А.А., Баймбетова Д.А., Абдрахманова А.Б., Шертаева К.Д., Умурзахова Г.Ж. <b>СОВЕРШЕНСТВОВАНИЮ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫХ ИНФОРМАЦИОННЫХ СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬЮ РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН .....</b>	39
Закирьянов И.Ф. <b>АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ ФОТОБИОРЕАКТОР С МИКРОВОДОРОСЛЯМИ КАК ЭЛЕМЕНТ БИОРЕГЕНЕРАТИВНОЙ СИСТЕМЫ ЖИЗНЕОБЕСПЕЧЕНИЯ В КОСМОСЕ: МЕДИЦИНСКИЕ ЭФФЕКТЫ И ТРЕБОВАНИЯ К ИТ-КОНТРОЛЮ .....</b>	43
Якименко Ю.Ю., Колесникова П.А. <b>ПРИМЕНЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ФАРМАКОКИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ РЕЖИМОВ ДОЗИРОВАНИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ .....</b>	48
Копыцкий А.В., Хильманович В.Н., Сацута П.П. <b>КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ ОЦЕНКИ ЦВЕТА ТОЧЕЧНОГО ИСТОЧНИКА СВЕТА С ПРОИЗВОЛЬНЫМ СПЕКТРОМ .....</b>	54
Кубор Е.С., Терлецкая В.А., Лукашов Р.И. <b>СКРИНИНГ МОЛЕКУЛЯРНЫХ МИШЕНЕЙ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКОГО ДЕЙСТВИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ РАСТЕНИЙ РОДА <i>LAMIMUM</i> С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ <i>IN SILICO</i> .....</b>	59
Лазукова К.С., Голденко Е.Е., Комиссарова В.А., Лукьянова Н.А., Орехова К.В. <b>ПРОТОТИП АЛГОРИТМИЧЕСКОГО ПОМОЩНИКА ОНКОЛОГА ПО ВЕРИФИКАЦИИ СТАДИИ И НАЗНАЧЕНИЮ ЛЕЧЕНИЯ ПРИ РАКЕ ЯИЧНИКОВ</b>	65
Лахвич Ф.Ф., Чернова М.И. <b>КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ИЗУЧЕНИИ ДОПОЛНИТЕЛЬНОЙ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ НА ПРИМЕРЕ ДИЗАЙНА АЛЬДОНАМИДА НА ОСНОВЕ СТРЕПТОЦИДА .....</b>	71

Гайнуллин И.А., Мередова М.Х. <b>ПРИМЕНЕНИЕ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА И ТЕХНОЛОГИЙ БОЛЬШИХ ДАННЫХ В ФАРМАЦЕВТИКЕ И ЗДРАВООХРАНЕНИИ</b> .....	77
Краснобаева Л.А., Мизина Е.П. <b>МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ГЕНОМЕ ЧЕЛОВЕКА НА ПРИМЕРЕ ГЕНА БРОНХИАЛЬНОЙ АСТМЫ ADRB2</b> .....	82
Молдоташев И. К., Назаров А. К., Календеров А. К. <b>ЭКСПРЕСС ДИАГНОСТИКА ДИАСТОЛИЧЕСКОЙ ДИСФУНКЦИИ ЛЕВОГО ЖЕЛУДОЧКА СЕРДЦА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА В КАРДИОХИРУРГИИ</b> .....	87
Мураталиева В.Ж., Тельтаева А.К., Бейшенбекова У.А. <b>ЦИФРОВОЙ МОНИТОРИНГ КАЧЕСТВА ВОЗДУХА: АНАЛИЗ ПОКАЗАТЕЛЕЙ СМОГА И ИХ ВЛИЯНИЯ НА ЗДОРОВЬЕ ЖИТЕЛЕЙ БИШКЕКА</b> .....	92
Прокопья Я.О., Лахвич Ф.Ф., Мушкина О.В. <b>РАЗРАБОТКА СКРИПТА МНОЖЕСТВЕННОГО МОЛЕКУЛЯРНОГО ДОКИНГА И ЕГО ВАЛИДАЦИЯ ПРИ СРАВНЕНИИ ЭКСПЕРИМЕНТОВ IN SILICO ДЛЯ КОМПОНЕНТОВ ЭКСТРАКТОВ ОЛЬХИ ЧЁРНОЙ И СЕРОЙ</b> .....	98
Ровенский Е.В., Мирошенко А.С., Лукьянова Н.А., Савельева А.С. <b>СЕГМЕНТАЦИЯ МУЛЬТИМОДАЛЬНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ LIFEX И RUTNOR ДЛЯ ОЦЕНКИ ОТВЕТА НА НЕОАДЬЮВАНТНУЮ ТЕРАПИЮ РАКА МОЛОЧНОЙ ЖЕЛЕЗЫ</b> .....	104
Рябушко Л. В., Гольцев М. В., Белая О.Н. <b>ЦИФРОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ КАК ОДИН ИЗ ФАКТОРОВ ПРАКТИКО- ОРИЕНТИРОВАННОГО ОБУЧЕНИЯ СТУДЕНТОВ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ МЕДИЦИНСКИХ ЗАВЕДЕНИЙ</b> .....	110
Сафиуллина А.Г. <b>ПРОГНОЗИРОВАНИЕ IN SILICO ТОКСИЧНОСТИ И ЛЕЧЕБНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НЕКОТОРЫХ 2-МЕТОКСИ-1,3-ДИГЕТЕРОЦИКЛОАЛКАНОВ</b> ..	121
Шакирьянова С.Р. <b>КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ БИОФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ТКАНЯХ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ МЕДИЦИНСКИХ ЛАЗЕРОВ</b> .....	126

УДК 004.032.26

Али М.<sup>1</sup>, Шакер А.<sup>2</sup>

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МНОГОСЛОЙНОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ДЛЯ КЛАССИФИКАЦИИ СИГНАЛА СЕРДЦЕБИЕНИЯ ЭЛЕКТРОКАРДИОГРАММА

<sup>1</sup>Тверской государственной медицинской университет, г.Тверь

<sup>2</sup>Тверской государственной университет, г.Тверь

Выявление аритмии является одним из важнейших этапов диагностики, помогающим кардиологу принимать решения. Когда данные, собранные за длительный период, достигают огромного объема, возникает необходимость в методе анализа этих данных, позволяющем сократить время их обработки. В данной работе предложено использовать нейронную сеть для анализа электрокардиограмма (ЭКГ) по пяти классам. Предложенный метод достигает точности 97,86%.

**Ключевые слова:** нейронная сеть, глубокое обучение, ЭКГ, многослойный перцептрон, машинное обучение.

Ali M.<sup>1</sup>, Shaker A.<sup>2</sup>

## USING MULTILAYER NEURAL NETWORK TO CLASSIFY HEARTBEAT SIGNAL ELECTROCARDIOGRAM

<sup>1</sup>Tver State Medical University, Tver

<sup>2</sup>Tver State University, Tver

Arrhythmia detection is a crucial diagnostic step, helping cardiologists make decisions. When data collected over a long period reaches enormous volumes, a method for analyzing this data that reduces processing time becomes necessary. This paper proposes using a neural network to analyze electrocardiogram (ECG) data into five classes. The proposed method achieves 97.86% accuracy.

**Keywords:** neural network, deep learning, ECG, multilayer perceptron, machine learning.

Классификация ЭКГ имеет решающее значение для своевременной диагностики, мониторинга и лечения сердечно-сосудистых заболеваний, которые являются ведущими причинами смертности во всем мире. Точная классификация анализирует сигналы ЭКГ для выявления аномалий, таких как нормальные сокращения, наджелудочковые экстрасистолы (НЖЭ), желудочковые экстрасистолы (ЖЭ), слияния сокращений и неизвестные сокращения, повышая эффективность диагностики по сравнению с ручным анализом. Это снижает количество ошибочных диагнозов, уменьшает нагрузку на врачей и помогает прогнозировать сердечно-сосудистые заболевания, даже в таких приложениях, как выявление COVID-19.

Важность использования компьютера для анализа ЭКГ-сигналов возрастает, если учесть холтеровское мониторирование, которое должно записывать ЭКГ-сигнал не менее 24 часов [8]. При таком огромном объеме данных нам необходимо компьютерные вычисления с точными результатами анализа. Следовательно, нам нужно разработать алгоритмы, обеспечивающие высокую точность.

Классические методы машинного обучения, например, метод опорных векторов (SVM) [2] или деревья решений [7], требуют предварительного извлечения признаков из

ЭКГ-сигналов вручную — например, характеристик variability сердечного ритма (BCR) [10], прежде чем применять классификаторы [4]. В отличие от этого, глубокое обучение представляет собой современный подход, который позволяет автоматически извлекать признаки, прогнозировать, обнаруживать и классифицировать различные категории, используя наборы данных. Методы глубокого обучения, такие как сверточные нейронные сети (CNN) и рекуррентные нейронные сети (RNN), обладают сильным преимуществом, так как способны самостоятельно находить закономерности в сырых сигналах или уже извлеченных признаках, показывая лучшие результаты при распознавании аритмий по сравнению с традиционными методами [3]. Например, CNN-модели для одномерных сигналов (1D-CNN), такие как ResNet и VGG16, демонстрируют точность от 97 до 99% на базе данных MIT-BIH для классификации по пяти категориям [6,12]. Они используют фильтры для выделения признаков, за которыми следуют слои пулинга и полносвязные слои, часто дополнительно применяя аугментацию данных для повышения устойчивости к шуму [5]. Рекуррентные сети, такие как LSTM и GRU [14,13], умеют улавливать временные зависимости между последовательностями сердечных сокращений; в одном из исследований [11] достигается точность классификации 92,3%.

### **Цель работы**

Настоящее исследование направлено на разработку системы для обнаружения аритмии – патологического состояния, характеризующегося нарушением регулярности сердечного ритма. Точная идентификация аритмии критически важна для своевременной диагностики и обоснованного выбора терапевтической стратегии кардиологом. В рамках данной работы будет разработана модель на основе методов глубокого обучения, предназначенная для автоматического выявления аритмии и последующей классификации электрокардиограмм (ЭКГ) по пяти ключевым категориям, детальное описание которых будет представлено далее.

### **Материал и методы**

Наша модель построена на базе многослойного перцептрона (MLP) [1]. Этот метод глубокого обучения выделяется автоматическим извлечением признаков, отличной приспособляемостью к большим и сложным наборам данных, а также устойчивостью к шуму, что делает его эффективным для реальных задач [15]. К тому же, простые модели (с небольшим количеством слоев, нейронов и данных) не требуют значительных вычислительных мощностей. Это позволяет встраивать обученные модели в больничное оборудование или устройства для помощи пациенту, как в случае с моделью, предложенной в этой статье, которая состоит из четырех слоев. Первый слой — это слой

«Сглаживание», который выравнивает входной массив до вектора. Остальные три слоя представляют собой плотный слой со следующим количеством нейронных узлов (128, 64 и 5 нейронов).

Как известно, модели нейронных сетей должны иметь достаточный размер и надежность данных для обучения и тестирования модели. В этой работе набор данных называется (База данных аритмии MIT-BIH) [9]. размер набора данных составляет пять сотен мегабайт и состоит из ста десяти тысяч выборок (87 тысяч для обучения и 21 тысяча для тестирования). частота снятия показаний каждой выборки составляет 125 Гц, и каждая выборка представлена 187 цифрами или столбцами. Основными классами, которые используются для классификации образцов, являются пять (Нормальный - N, Суправентрикулярный - S, Желудочковый - V, Слияние - F и Неизвестный - O). Распределение пяти классов описано на рисунке 1.

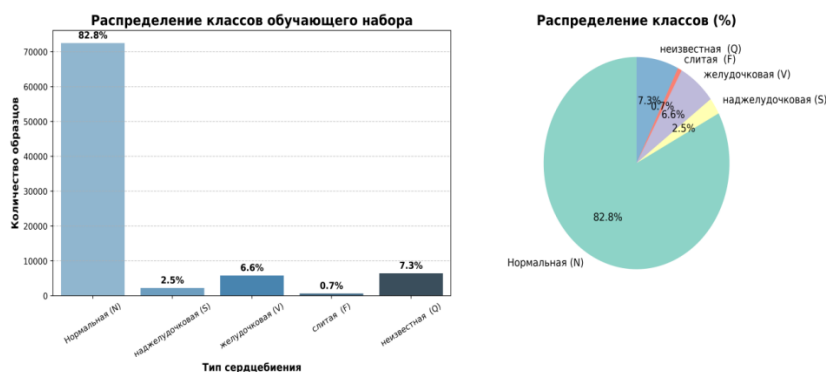


Рисунок 1. Распределение классов в наборе данных.

На рисунке 2 показан один пример из пяти классов, существующих в наборе данных, но после применения процесса нормализации, который преобразует диапазон амплитуд от [0,000, 0,062] до [0,000, 1,000], поскольку малые значения вызывают проблему исчезающего градиента [14] и замедляют процесс обучения, эту проблему решают с помощью процесса нормализации. Для выполнения этой работы использовалась среда Google Colab.

### Результаты и обсуждение

Как упоминалось ранее, мы используем набор данных, содержащий сто десять тысяч образцов, разделенных на 80% для обучения и 20% для тестирования. Время обучения предлагаемой модели составляет 146 секунд с 30 эпохами (один полный проход по всему обучающему набору данных через алгоритм, позволяющий модели обновлять свои внутренние параметры). Кривая точности модели на этапах обучения по эпохам показана

на рисунке 3. Как видно, точность модели достигает 98% на этапе обучения. При тестировании модели на тестовом наборе данных точность составляет 97,86%.



Рисунок 2. Примеры сигналов ЭКГ.

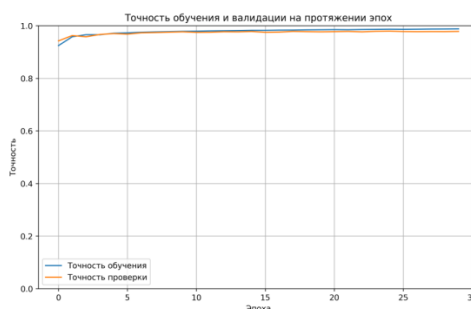


Рисунок 3. Точность обучения и валидации на протяжении эпох.

### Заключение и выводы

В данном исследовании мы разработали модель многослойного перцептрона (MLP), требующую доступных вычислительных мощностей, и модель достигла высокой точности, равной 97,86%. Модель может помочь в анализе довольно больших объемов данных ЭКГ и может быть встроена в медицинские устройства.

Необходимо учитывать, что используемый набор данных содержит достаточное количество образцов, но подвержен смещению, в результате чего нормальные случаи составляют 82%, тогда как случаи с наджелудочковым ритмом составляют не более 2,5% от общего числа образцов.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Томникова К. Е., Матвеева И. А. Многослойный перцептрон для классификации рамановских спектров кожи// Applied spectroscopy. – 2017. – №. 5 – С.767 – 93.

2. Ahmad Z. et al. ECG heartbeat classification using multimodal fusion //IEEE Access. – 2021. – Т. 9. – P. 100615-100626.
3. Caesarendra W. et al. An embedded system using convolutional neural network model for online and real-time ECG signal classification and prediction //Diagnostics. – 2022. – Т. 12. – №. 4. – P. 795.
4. Dagenais G. R. et al. Variations in common diseases, hospital admissions, and deaths in middle-aged adults in 21 countries from five continents (PURE): a prospective cohort study //The Lancet. – 2020. – Т. 395. – №. 10226. – P. 785-794.
5. Elyamani H. A. et al. Deep residual 2D convolutional neural network for cardiovascular disease classification //Scientific Reports. – 2024. – Т. 14. – №. 1. – P. 22040.
6. Khan F. et al. ECG classification using 1-D convolutional deep residual neural network //Plos one. – 2023. – Т. 18. – №. 4. – P. e0284791.
7. Kumari L. V. et al. Classification of ECG beats using optimized decision tree and adaptive boosted optimized decision tree //Signal, Image and Video Processing. – 2022. – Т. 16. – №. 3. – P. 695-703.
8. Martis R. J., Acharya U. R., Min L. C. ECG beat classification using PCA, LDA, ICA and discrete wavelet transform //Biomedical Signal Processing and Control. – 2013. – Т. 8. – №. 5. – P. 437-448.
9. Moody G. B., Mark R. G. The impact of the MIT-BIH arrhythmia database //IEEE engineering in medicine and biology magazine. – 2001. – Т. 20. – №. 3. – P. 45-50.
10. Nguyen D. et al. Real-Time Magnetic Tracking and Diagnosis of COVID-19 via Machine Learning //arXiv preprint arXiv:2311.00737. – 2023.
11. Niu L. et al. A deep-learning approach to ECG classification based on adversarial domain adaptation //Healthcare. – MDPI, 2020. – Т. 8. – №. 4. – P. 437.
12. Pham B. T. et al. Electrocardiogram heartbeat classification for arrhythmias and myocardial infarction //Sensors. – 2023. – Т. 23. – №. 6. – P. 2993.
13. Shaker A., Aldarf A., Bessmertny I. Extracting Entity Relationship from Arabic Texts //International Conference Artificial Intelligence in Engineering and Science. – Cham : Springer International Publishing, 2022. – P. 173-183.
14. Shaker A., Aldarf A., Bessmertny I. Using lstm and gru with a new dataset for named entity recognition in the arabic language //arXiv preprint arXiv:2304.03399. – 2023.
15. Wilson A., Anwar M. R. The future of adaptive machine learning algorithms in high-dimensional data processing //International Transactions on Artificial Intelligence. – 2024. – Т. 3. – №. 1. – P. 97-107.

УДК 004.89

Арыстанбаев К.Е., Токсанбаева Ж.С., Усманова Р.М.

**АЛГОРИТМИЧЕСКАЯ ПРЕДВЗЯТОСТЬ И РЕПРЕЗЕНТАТИВНОСТЬ ДАННЫХ:  
РИСКИ ЛОЖНОПОЛОЖИТЕЛЬНЫХ РЕШЕНИЙ В ЦИФРОВОЙ  
ФАРМАЦЕВТИКЕ**

*Южно-Казахстанская медицинская академия, г. Шымкент*

В статье исследуется проблема алгоритмической предвзятости в цифровой фармацевтике и её влияние на достоверность предиктивных моделей. Особое внимание уделено дефициту репрезентативности генетических данных населения Центральной Азии, на примере Республики Казахстан. Авторы анализируют механизмы возникновения ложноположительных решений при использовании графовых нейронных сетей (GNN) и трансформеров на этапе виртуального скрининга молекул. На основе данных Национального центра экспертизы лекарственных средств и медицинских изделий (НЦЭЛС) и Высшей аудиторской палаты РК показано, что ошибки второго рода ведут к существенным финансовым потерям — до 4,6 млрд тенге на проект — и повышают риски провала клинических исследований III фазы. В статье подробно рассматривается влияние нерепрезентативных выборок на работу алгоритмов, включая эффект *over-smoothing* для GNN и «химические галлюцинации» для трансформеров. На основе проведенного анализа предложены рекомендации по минимизации рисков: создание национального биобанка, внедрение протоколов объяснимого ИИ (XAI) и локальной валидации моделей. Эти меры направлены на повышение точности предсказаний и снижение экономических и клинических рисков.

**Ключевые слова:** цифровая фармацевтика, машинное обучение, ложноположительные решения, репрезентативность.

UDC 004.89

Arystanbayev K.E., Toksanbayeva Zh.S., Usmanova R.M.

**ALGORITHMIC BIAS AND REPRESENTATIVENESS OF DATA: RISKS OF FALSE  
POSITIVE DECISIONS IN DIGITAL PHARMACEUTICALS**

*South Kazakhstan Medical Academy, Shymkent*

The article examines the problem of algorithmic bias in digital pharmaceuticals and its impact on the reliability of predictive models. Special attention is paid to the lack of representativeness of the genetic data of the population of Central Asia, using the example of the Republic of Kazakhstan. The authors analyze the mechanisms of false positive decisions when using graph neural networks (GNNs) and transformers at the stage of virtual screening of molecules. Based on data from the National Center for Expertise of Medicines and Medical Devices (NCELS) and the Supreme Audit Chamber of the Republic of Kazakhstan, it is shown that errors of the second kind lead to significant financial losses — up to 4.6 billion tenge per project — and increase the risks of failure of phase III clinical trials. The article examines in detail the effect of unrepresentative samples on the operation of algorithms, including the over-smoothing effect for GNNs and "chemical hallucinations" for transformers. Based on the analysis, recommendations for minimizing risks are proposed: the creation of a national biobank, the implementation of protocols for explicable AI (XAI) and local model validation. These measures are aimed at improving the accuracy of predictions and reducing economic and clinical risks.

**Keywords:** digital pharmaceuticals, machine learning, false positive solutions, representativeness.

Цифровая трансформация фармацевтической отрасли, обозначаемая концепцией *Pharma 4.0*, характеризуется активной интеграцией методов искусственного интеллекта

(ИИ) в процессы поиска, проектирования и тестирования новых лекарственных молекул. Использование глубоких нейронных сетей, включая графовые архитектуры и трансформеры, позволило существенно сократить сроки доклинического этапа и повысить производительность виртуального скрининга [4].

Однако экономическая модель разработки лекарств остаётся крайне рискованной: глобальная стоимость вывода одного оригинального препарата на рынок превышает 2,6 млрд долларов США, при этом до 90% молекул-кандидатов не проходят клинические испытания [4]. В этих условиях даже незначительное систематическое смещение алгоритмов способно привести к масштабным экономическим и социальным последствиям.

Для Республики Казахстан данная проблема приобретает стратегическое значение. Анализ данных Высшей аудиторской палаты Республики Казахстан (РК) выявил, что крупные инвестиции в фармацевтические научно-исследовательские и опытно-конструкторские работы (НИОКР) до 4,6 млрд тенге [1] не всегда являются успешной коммерциализацией проектов. Например, Национальный центр экспертизы лекарственных средств (НЦЭЛС) отмечает, что около 6% регистрируемых лекарств не проходят проверку из-за проблем с безопасностью или эффективностью. Существенной, но часто упускаемой из виду причиной таких провалов является алгоритмическая предвзятость. Она возникает, когда обучающие выборки для систем искусственного интеллекта содержат искажённую информацию. В частности, в мировых биомедицинских базах данных преобладают сведения о европеоидной расе (до 80%), где не учитывается генетическое разнообразие населения Центральной Азии [5]. Это создаёт так называемый "эффект domain shift", когда модель ИИ, обученная на одних данных, сталкивается с совершенно иными данными в реальной практике.

### **Цель исследования**

Изучить, как для цифровой фармацевтики в системах искусственного интеллекта возникает алгоритмическая предвзятость, особенно из-за недостатка данных о населении Центральной Азии (на примере Казахстана). Мы также оценим риски ошибочных положительных результатов (ложноположительных решений), вызванных этой предвзятостью.

### **Материал и методы**

Мы провели системный анализ архитектур нейронных сетей и ретроспективно изучили данные фармацевтического рынка Казахстана за 2023-2025 годы. Основное внимание уделено двум типам алгоритмов: графовым нейронным сетям (GNN), где молекулы представлены как графы, и молекулярным трансформерам, которые анализируют

химические последовательности. В GNN мы исследовали проблему "over-smoothing", которая может скрывать уникальные свойства редких соединений, а в трансформерах – "химические галлюцинации", возникающие из-за несбалансированных данных.

Молекулы были представлены в виде графов

$$G=(V,E), \tag{1}$$

где V - атомы, E - химические связи. Анализируются механизмы внимания (Graph Attention Networks), позволяющие дифференцированно учитывать вклад отдельных структурных элементов в предсказание молекулярной активности. Отдельно рассматривается феномен over-smoothing, при котором многократная агрегация признаков приводит к усреднению характеристик и потере уникальных свойств, что критично для редких соединений, включая эндемичные фитопрепараты Казахстана.

Эмпирическая база исследования включает:

- открытые отчеты НЦЭЛС по регистрации лекарственных средств;
- данные о структуре клинических исследований в РК, где 64% проектов сосредоточены на III фазе [8];
- финансовые и регуляторные отчеты Высшей аудиторской палаты РК [1].

Методика включала анализ показателей FPR (False Positive Rate), изучение влияния локальных генетических маркеров на точность моделей и оценку экономических последствий ошибок II рода.

### **Результаты и обсуждение**

Технологические детерминанты предвзятости

В ходе анализа было установлено, что современные GNN-модели подвержены эффекту «over-smoothing», при котором уникальные химические свойства редких соединений (например, эндемичных фитопрепаратов Казахстана) нивелируются в пользу усредненных характеристик из глобальных баз данных [7]. Трансформеры, в свою очередь, склонны к «химическим галлюцинациям», предсказывая высокую аффинность там, где она отсутствует физически, основываясь на текстовых аналогиях.

Математическое обоснование ложноположительных рисков

Риск использования предвзятых моделей выражается через рост ошибки II рода ( $\beta$ ). В процессе виртуального скрининга алгоритм рассчитывает вероятность активности молекулы. При смещенной выборке показатель ложноположительных решений (False Positive Rate, FPR) увеличивается:

$$FPR = FP/(FP + TN) \quad (1)$$

Где FP - клиническая неэффективность или токсичность - событие, при котором молекула обладает искомым терапевтическим эффектом, но фактически эффекта нет; TN - верно отклоненные неэффективные соединения.

Математическое моделирование показывает, что если генетический маркер популяции РК не включен в обучающий датасет, порог активации модели ( $\tau$ ), определяющий чувствительность модели, становится нерелевантным. Это создает иллюзию перспективности препарата, который в реальности окажется токсичным или неэффективным для локальной группы пациентов [6].

#### Риски для фармацевтического сектора Казахстана

Высокая концентрация клинических исследований III фазы в РК (свыше 60%) делает отечественную индустрию крайне уязвимой к алгоритмическим ошибкам [10]. Ложноположительный прогноз на этапе *in silico* ведет к нецелевому расходованию бюджетных и частных средств на поздних стадиях разработки.

Поскольку 80% данных в мировых биобанках принадлежат европеоидной расе, адаптация ИИ без локальной валидации неизбежно ведет к снижению качества лекарственной терапии и повышению рисков неэффективности и токсичности препаратов [5]. Экономические последствия могут составлять до нескольких миллиардов тенге на один проект, что подтверждают данные НЦЭЛС и отчеты Высшей аудиторской палаты РК [1–2].

#### Заключение и выводы

По результатам проведенного исследования сформулированы следующие выводы:

1. Алгоритмическая предвзятость в цифровой фармацевтике является следствием дефицита региональных данных, а не исключительно программной ошибки, что напрямую коррелирует с 6% долей отказов в регистрации ЛС в Казахстане [2,3,6].
2. Ошибки предиктивных моделей второго рода увеличивают вероятность провала III фазы и ведут к потерям до нескольких миллиардов тенге на проект [1–2,10].
3. Высокая концентрация III фазы усиливает чувствительность отрасли к статистическим и алгоритмическим искажениям [10].
4. Для минимизации рисков необходимо создание национального биобанка и внедрение протоколов объяснимого ИИ (ХАИ), обеспечивающих верификацию логики принятия решений нейросетью [5–6].

## ЛИТЕРАТУРА

1. О государственном регулировании фармацевтической отрасли в Республике Казахстан: Отчет Высшей аудиторской палаты РК за 2024 год. — Астана: ВАП РК, 2024. — 45 с.
2. Аналитический отчет о регистрации лекарственных средств и медицинских изделий в РК за 2023–2024 гг. / РГП на ПХВ «Национальный центр экспертизы лекарственных средств и медицинских изделий». — Алматы: НЦЭЛС, 2025. — 112 с.
3. Genetic Diversity and Precision Medicine in Central Asia: A Study of the Kazakh Population / Center for Life Sciences, Nazarbayev University. — Astana: NU Press, 2023. — 210 p.
4. Goodfellow, I. Deep Learning / I. Goodfellow, Y. Bengio, A. Courville. — MIT Press, 2016. (Обновленное издание 2024). — 800 p.
5. Ethics and governance of artificial intelligence for health: Guidance for regulatory bodies. — Geneva: World Health Organization (WHO), 2024. — 156 p.
6. The Lancet Digital Health. Algorithmic bias in global health: challenges for underrepresented populations. — 2024. — Vol. 6, No. 2. — P. 115–128.
7. Hamilton, W. L. Graph Representation Learning. — Synthesis Lectures on Artificial Intelligence and Machine Learning. — Morgan & Claypool Publishers, 2020. — 159 p.
8. Кодекс Республики Казахстан «О здоровье народа и системе здравоохранения» от 7 июля 2020 года № 360-VI (с изменениями и дополнениями по состоянию на 2025 г.).
9. Jumper, J. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold / J. Jumper, R. Evans, B. Pritzel [et al.] // Nature. — 2021. — Vol. 596. — P. 583–589.
10. Статистический сборник «Здравоохранение Республики Казахстан» / Бюро национальной статистики АСПиР РК. — Астана, 2024. — 88 с.

УДК 61:004.8:004.056

Вишняков Р.С., Гончаров В.В.

## ПЕРСПЕКТИВЫ ГЕНЕРАТИВНЫХ ПОДХОДОВ К ШИФРОВАНИЮ И ЗАЩИТЕ МЕДИЦИНСКИХ ДАННЫХ: ОБЗОР И ДЕМОСТРАЦИОННАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ

*Приволжский исследовательский медицинский университет, г. Нижний Новгород*

В статье анализируются современные подходы к защите медицинских данных, основанные на сочетании генеративных технологий и криптографических методов. Рассматриваются возможности применения генеративных моделей для повышения уровня конфиденциальности и формирования синтетических медицинских данных. Разработан и описан демонстрационный прототип системы защищённой обработки и хранения информации пациента, подтверждающий практическую реализуемость рассматриваемого подхода.

**Ключевые слова:** медицинские данные, информационная безопасность, генеративные модели, шифрование, конфиденциальность.

Vishnyakov R.S., Goncharov V.V.

## PROSPECTS OF GENERATIVE APPROACHES TO ENCRYPTION AND PROTECTION OF MEDICAL DATA: REVIEW AND PROTOTYPE IMPLEMENTATION

*Privolzhsky Research Medical University, Nizhny Novgorod*

The article analyzes contemporary approaches to medical data protection based on the integration of generative technologies and cryptographic methods. The potential application of generative models for enhancing confidentiality and generating synthetic medical datasets is discussed. A demonstration prototype of a secure patient data processing and storage system has been developed and described, confirming the practical feasibility of the proposed approach.

**Keywords:** medical data, information security, generative models, encryption, confidentiality.

Начиная с 2019 года активно увеличивается цифровизация системы здравоохранения в Российской Федерации. Объём медицинской информации, создаваемой, передаваемой и хранимой в электронных форматах, последовательно растёт. С развитием цифровых систем обработки данных всё большее значение приобретают вопросы защиты информации, её сохранности и стабильной работы информационных систем.

Значимость проблемы информационной безопасности подтверждается данными отраслевой аналитики. По данным экспертно-аналитического центра InfoWatch, Россия по итогам первого полугодия 2025 года вошла в число стран с наибольшим количеством зарегистрированных утечек медицинской информации [1]. Более того около 15% всех кибератак приходится именно на сферу здравоохранения [2]. Подобная статистика указывает не только на распространённость инцидентов, но и на сохраняющуюся уязвимость цифровой инфраструктуры здравоохранения.

Медицинская информация наиболее чувствительна к утечкам данных. Её специфика определяется длительным периодом актуальности, высокой степенью персонализации и потенциальной необратимостью последствий раскрытия. Компрометация сведений о

состоянии здоровья затрагивает частную сферу пациента и сопряжена с более сложными социальными и правовыми рисками.

Криптографические механизмы остаются фундаментальной основой защиты информации. Вместе с тем развитие распределённых архитектур, увеличение объёмов обрабатываемых данных и усложнение моделей угроз формируют потребность в дополнительных подходах, способных повысить адаптивность и вариативность защитных преобразований.

Одно из перспективных направлений — использование генеративного искусственного интеллекта для криптозащиты. Такие подходы создают разнообразные варианты шифрования, что усложняет анализ и взлом.

### **Цель работы**

В связи с этим целью данной работы является исследование возможностей применения генеративных моделей в задачах защиты медицинских данных и разработка демонстрационного прототипа соответствующей системы. Для достижения поставленной цели были проанализированы современные подходы к генеративной криптографии, в частности методы, основанные на использовании GAN.

### **Теоретические основы генеративной криптографии:**

В современных исследованиях активно обсуждается концепция GAN-криптографии. В рамках данного подхода генеративная нейросеть используется не для синтеза изображений или текста, а для построения криптографических преобразований. Генератор формирует зашифрованные представления данных, тогда как дискриминатор выполняет функции оценки корректности преобразования либо участвует в моделировании процесса расшифровки.

Подход GAN-based encryption предполагает использование состязательных генеративных сетей (Generative Adversarial Networks) в качестве инструмента формирования криптографических преобразований. Стохастический характер генерации позволяет получать различные представления данных при каждом запуске шифрования, снижая повторяемость структуры шифротекста.

В рамках рассматриваемой архитектуры генератор выполняет функцию построения зашифрованного представления входных данных, тогда как дискриминатор анализирует статистические и структурные характеристики полученного результата. Параметры преобразования соотносятся с криптографическим ключом, задающим режим функционирования модели. Процесс можно представить выражением:

$$E = G(I, K)$$

где

I — входное изображение,

K — криптографический ключ,

G — генератор,

E — зашифрованное изображение [4].

Концепция adversarial cryptography получила развитие в работе M. Abadi и D. G. Andersen (2016) [5], где криптографические преобразования рассматриваются как функции, формируемые в процессе состязательного обучения. Модель включает нейросети Alice (шифрование), Bob (расшифровка) и Eve (атака), что обеспечивает адаптацию параметров шифрования в ходе оптимизации.

Noise-mimicking encryption представляет собой генеративный подход к формированию шифротекста, при котором распределение зашифрованных данных оптимизируется с целью приближения к статистическим характеристикам случайного шума. Такой подход делает шифротекст менее структурированным и более случайным, что затрудняет статистический криптоанализ.

Это соотношение можно записать в виде:

$$P(E) \approx P(\text{noise})$$

где:

P(E) — распределение шифротекста;

P(noise) — распределение идеального шума [6].

Исследования, посвящённые применению генеративных и состязательных моделей в задачах криптографической защиты, преимущественно ориентированы на разработку теоретических концепций и архитектурных схем. Практические вопросы реализации таких систем, включая экспериментальную проверку их свойств и оценку поведения в условиях функционирования прикладных информационных сред, освещаются существенно реже.

Для медицинских информационных технологий это ограничение приобретает особую значимость. Эксплуатация систем здравоохранения требует не только формальной криптографической стойкости, но и стабильности алгоритмов, воспроизводимости результатов и контролируемости характеристик защиты. В связи с этим возникает необходимость экспериментально оценить возможности применения генеративных криптографических механизмов при обработке медицинских данных.

В настоящей работе предложена демонстрационная модель системы генеративного шифрования, основанная на принципах GAN-based encryption. Разработанная архитектура позволяет анализировать работу генеративного шифрования и оценивать его поведение на практике.

### Материал и методы

В целях практической апробации предложенного подхода разработана экспериментальная программная реализация на языке Python. Реализация ориентирована на моделирование защищённой регистрации и хранения медицинских данных с предварительным симметричным шифрованием сохраняемых значений. В качестве среды хранения использовалось табличное хранилище формата XLSX, воспроизводящее типовой сценарий прикладных медицинских информационных систем.

Архитектура прототипа включает следующие основные компоненты: модуль генерации и управления криптографическим ключом, блок шифрования данных, реализующий генеративное преобразование, и подсистему хранения данных на основе табличного хранилища. Взаимодействие компонентов организовано по последовательной схеме обработки данных: ввод → шифрование → сохранение → доступ.

В качестве базового алгоритма криптографической защиты применялась схема Fernet, реализованная в библиотеке cryptography. Выбор данного механизма обусловлен поддержкой симметричного шифрования с контролем целостности и аутентичности данных [7]. Для обеспечения устойчивости демонстрационной модели к ограничениям экспериментальной среды была предусмотрена резервная процедура потокового шифрования, основанная на генерации псевдослучайной последовательности с использованием хеш-функции SHA-256.

Функционирование системы предполагает последовательное выполнение этапов генерации либо загрузки криптографического ключа, шифрования отдельных полей записи перед сохранением, записи зашифрованных значений в табличное хранилище и последующей модификации данных при необходимости.

```
enc_fio = _encrypt_value(fio, self._key)
enc_tg = _encrypt_value(telegram, self._key)
enc_empty = _encrypt_value("", self._key)
```

Рисунок 1.

Тестирование проводилось на наборе из 50 записей, содержащих типовые медицинские данные.

### **Результаты и обсуждение**

В работе разработан программный прототип системы генеративного шифрования медицинских данных и проведён анализ его функционирования. В процессе тестирования прототипа была подтверждена корректность работы системы при обработке тестовых данных. При повторных запусках наблюдалось изменение структуры шифротекста. Время выполнения операций шифрования составляло менее 0,1 секунды на запись, что позволяет использовать систему в прикладных задачах.

### **Заключение и выводы**

Разработанная реализация подтверждает возможность интеграции криптографических механизмов защиты на уровне прикладной архитектуры без существенного усложнения пользовательского взаимодействия. Такой подход можно использовать как основу для учебных и исследовательских систем, а также небольших медицинских сервисов.

### **ЛИТЕРАТУРА**

1. Russia ranks second in the world by number of healthcare data breaches / Expert-Analytical Center InfoWatch // Habr : электрон. репозиторий. — 2025. — [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <https://habr.com/ru/companies/infowatch/news/937060/> (дата обращения: 19.02.2026).
2. Федорова К. Медданные: прослушки и утечки / К. Федорова // Te-st.org : электрон. репозиторий. — 2024. — [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <https://te-st.org/2024/03/29/why-medical-data-leaks-and-what-state-does/> (дата обращения: 19.02.2026).
3. Pranav P., Patel A., Jain S. — GAN Cryptography // In: Machine Learning in Healthcare and Security: Advances, Obstacles, and Solutions (CRC Press, 2024). — [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <https://doi.org/10.1201/9781003388845-16> (дата обращения: 19.02.2026).
4. Jassim M. R., Salih Q. M., Al-Kateb G. DGEN: A Dynamic Generative Encryption Network for Adaptive and Secure Image Processing / M. R. Jassim, Q. M. Salih, G. Al-Kateb // Mesopotamian Journal of Computer Science. — 2025. — Vol. (2025). — P. 371–384. — DOI: 10.58496/MJCSC/2025/024. — [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <https://doi.org/10.58496/MJCSC/2025/024> (дата обращения: 19.02.2026).
5. Abadi M., Andersen D. G. Learning to Protect Communications with Adversarial Neural Cryptography // arXiv preprint. — 2016. — arXiv:1611.00391.
6. Jassim M. R., Salih Q. M., Al-Kateb G. DGEN: A Dynamic Generative Encryption Network for Adaptive and Secure Image Processing / M. R. Jassim, Q. M. Salih, G. Al-Kateb // Mesopotamian Journal of Computer Science. — 2025. — P. 371–384. — DOI: 10.58496/MJCSC/2025/024. — [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <https://doi.org/10.58496/MJCSC/2025/024> (дата обращения: 19.02.2026).

7. Fernet: Symmetric Encryption Specification // cryptography.io. — [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <https://cryptography.io/en/latest/fernet/> (дата обращения: 19.02.2026).

УДК 004.891.3

Гиззатуллина К.И.<sup>1</sup>, Лакман И.А.<sup>1</sup>, Усманова Д.И.<sup>2</sup>

**ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ И БОЛЬШИЕ ДАННЫЕ В ЛАБОРАТОРНОЙ  
ДИАГНОСТИКЕ: СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ТЕХНОЛОГИЙ  
АВТОМАТИЗАЦИИ ОБЩЕГО АНАЛИЗА МОЧИ**

<sup>1</sup>Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа

<sup>2</sup>Башкирский государственный медицинский университет, г. Уфа

В статье рассматривается роль искусственного интеллекта и больших данных в автоматизации общего анализа мочи. Проведен сравнительный анализ технологий: от традиционной микроскопии до цифровых анализаторов с глубоким обучением. Показаны преимущества ИИ в точности, скорости и стандартизации лабораторных исследований.

**Ключевые слова:** искусственный интеллект, большие данные, общий анализ мочи, автоматизация, цифровая микроскопия, машинное обучение, лабораторная диагностика.

Gizzatullina K.I.<sup>1</sup>, Lakman I.A.<sup>1</sup>, Usmanova D.I.<sup>2</sup>

**ARTIFICIAL INTELLIGENCE AND BIG DATA IN LABORATORY DIAGNOSTICS:  
COMPARATIVE ANALYSIS OF AUTOMATION TECHNOLOGIES FOR GENERAL  
URINALYSIS**

<sup>1</sup>Ufa University of Science and Technology, Ufa

<sup>2</sup>Bashkir State Medical University, Ufa

The article examines the role of artificial intelligence and big data in the automation of general urinalysis. A comparative analysis of technologies has been carried out: from traditional microscopy to digital analyzers with deep learning. The advantages of AI in the accuracy, speed and standardization of laboratory research are shown.

**Keywords:** artificial intelligence, big data, general urinalysis, automation, digital microscopy, machine learning, laboratory diagnostics.

Общий анализ мочи (ОАМ) является одним из наиболее востребованных и информативных лабораторных исследований, предоставляя ключевую информацию о состоянии почек, мочевыводящих путей и метаболических процессах в организме. Несмотря на относительную простоту сбора биоматериала и низкую себестоимость, рутинное выполнение ОАМ традиционно считалось трудоемким и субъективным процессом, особенно на этапе микроскопии осадка.

Современный этап развития лабораторной медицины характеризуется внедрением технологий искусственного интеллекта и методов обработки больших данных. Это привело к технологической революции, позволившей не только автоматизировать рутинные операции, но и выйти на качественно новый уровень точности, стандартизации и прогностической ценности исследований.

**Цель работы**

Провести сравнительный анализ технологий автоматизации общего анализа мочи – от традиционных методов до современных интеллектуальных систем на базе искусственного интеллекта и больших данных.

## **Материал и методы**

Исследование представляет собой аналитический обзор научной литературы, технической документации производителей лабораторного оборудования и клинических отчетов о внедрении автоматизированных систем. Проведен сравнительный анализ характеристик анализаторов физико-химических свойств мочи и осадка, а также оценены клинические преимущества их применения.

## **Результаты и обсуждение**

Автоматизация лабораторной диагностики прошла несколько этапов. Первоначально были внедрены анализаторы физико-химических свойств мочи, работающие с тест-полосками. Они позволили стандартизировать измерение таких параметров, как рН, белок, глюкоза, кетоны и другие, исключив ошибки визуальной оценки реакционных зон.

Следующим этапом стала автоматизация микроскопии осадка – наиболее трудоемкой и субъективной части анализа. Ручная микроскопия требует высокой квалификации специалиста, при этом результаты могут варьировать в зависимости от "человеческого фактора". Внедрение автоматических анализаторов осадка мочи ознаменовало переход к объективным и воспроизводимым методам. Современные лаборатории, особенно с высоким потоком образцов, переходят на модульные мочевые станции, объединяющие в себе оба типа анализаторов и работающие на основе единой лабораторной информационной системы (ЛИС). Как показывает опыт Кировской областной клинической больницы, централизация и автоматизация позволяют ежедневно выполнять более 1000 анализов, выдавая до 80% окончательных результатов уже на этапе первичного скрининга [1].

Ключевым отличием современного поколения анализаторов является использование технологий искусственного интеллекта. В контексте ОАМ ИИ применяется в двух основных направлениях:

Алгоритмы глубокого обучения, особенно сверточные нейросети, проходят обучение на миллионах изображений клеточных структур для распознавания и классификации компонентов осадка мочи – такой подход позволяет анализировать образцы с высокой детализацией. Образец помещают в одноразовую кювету, подвергают центрифугированию для формирования тонкого слоя клеток, после чего цифровой микроскоп делает серию снимков. Встроенная программа сравнивает полученные кадры с базой данных, определяя форму и тип форменных элементов. Так, команда Ozelle сообщает об обучении своего алгоритма более чем на 40 миллионах клинических образцов, что обеспечивает точность в оценке клеточной морфологии [6].

Обработка больших массивов данных (Big Data), накапливаемых при диспансеризации и профосмотрах, с помощью методов машинного обучения позволяет находить аномалии и выявлять ранние паттерны заболеваний. Исследование, проведённое на базе РНИМУ им. Н.И. Пирогова, на данных 84 335 пациентов показало: стандартные показатели общего анализа крови способны выявлять гиперурикемию на начальных стадиях – без необходимости измерения уровня мочевой кислоты напрямую [2]. Такой подход даёт основание внедрять скрининговые программы на практике.

Для сравнения рассмотрим ключевые характеристики современных автоматизированных систем на основе модульных станций.

#### 1. Анализаторы физико-химических характеристик

Современные модули, включая UC-1800 в системе URIT US-2000, применяют передовые технологии выявления. Технология реального времени считывания тест-полосок и 5-волновая CIS-детекция обеспечивают анализ по 14 параметрам, включая альбумин-креатининовое соотношение для раннего скрининга заболеваний почек [7]. Производительность таких модулей достигает 480 тестов в час в автономном режиме [5].

#### 2. Анализаторы осадка мочи

Это наиболее динамично развивающийся сегмент. Сравнение поколений техники представлено в таблице 1. Современные ИИ-анализаторы, такие как UD-1320, обеспечивают количественную оценку 38 и более параметров с высокой воспроизводимостью [5].

**Таблица 1**

**Сравнение традиционной микроскопии и ИИ-анализаторов**

<b>Характеристика</b>	<b>Традиционная микроскопия</b>	<b>Современные ИИ-анализаторы</b>
Метод	Визуальная оценка лаборантом	Цифровая микроскопия + глубокое обучение
Объем анализа	Несколько полей зрения	Весь анализируемый объем образца
Идентификация	Субъективная, зависит от опыта	Автоматическое распознавание 38+ параметров
Бактериурия	Полуколичественная	Количественная оценка
Воспроизводимость	Низкая – средняя	Высокая, стандартизированная

### 3. Интегрированные модульные системы

Устройства типа URIT US-2000 – это пик развития рабочих станций, объединяющих модули химии и микроскопии в единую гибкую систему. Подстраиваясь под специфику задач лаборатории, такие комплексы работают с производительностью до 800 тестов в час по химии и 400 – по осадку, функционируя в онлайн-режиме [5].

Внедрение ИИ кардинально меняет подход к диагностике. Контроль количества бактерий в мочевом осадке с помощью нейросетевых моделей даёт возможность уже через несколько минут оценить эффективность антибиотикотерапии у пациентов с инфекциями мочевыводящих путей, минуя ожидание результатов традиционного посева – на это уходит от двух до трёх дней.

Посев остаётся эталоном, но его чувствительность снижена при выявлении медленнорастущих микроорганизмов. ПЦР точнее, однако ограничен предопределённым списком патогенов. Метагеномика же работает без таких ограничений. По данным исследования [4], она выявила 62 уропатогена – против 19 при ПЦР и 13 при посеве. При этом 98% образцов продемонстрировали наличие нескольких патогенных штаммов – такой уровень полимикробности открывает перспективы для диагностики сложных инфекций.

Традиционная микроскопия продолжает оставаться полезной в сложных случаях. Когда алгоритмы сталкиваются с нестандартными структурами или артефактами, врач-лаборант проводит визуальный анализ под световым микроскопом. Цифровые изображения загружаются в информационную систему, где специалист оценивает их удалённо, а также использует для дообучения нейросети – так формируется замкнутый цикл повышения качества диагностики.

### **Заключение и выводы**

Автоматизация общего анализа мочи с применением искусственного интеллекта и технологий обработки больших данных открывает новые возможности в лабораторной диагностике. Сравнительные исследования демонстрируют, что современные интеллектуальные платформы значительно превосходят традиционные методики по таким параметрам, как скорость обработки, точность, стабильность результатов и информативность при постановке диагноза. Благодаря им удастся не только снизить нагрузку на персонал за счёт устранения рутинных операций, но и получить количественную оценку показателей, ранее доступную лишь после длительных микробиологических исследований.

Централизация лабораторных процессов на базе модульных станций с ИИ, подключённых к лабораторным информационным системам, обеспечивает единообразие

диагностики, снижает издержки на проведение анализов и повышает их надёжность. Хотя врач-лаборант сохраняет ключевую роль в сложных клинических ситуациях, технологии ИИ уже выступают основным инструментом первичного скрининга и выполнения повседневных тестов. В перспективе развитие направлено на объединение данных протеомики и метагеномики [3, 4], что позволит перейти от стандартной диагностики к персонализированному прогнозированию заболеваний и определению тактики терапии на ранних стадиях.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Кировская областная клиническая больница повышает качество лабораторной диагностики за счет автоматизации. Кировская областная клиническая больница: Киров, 2024. – URL: <https://kokbkirov.ru/2024/08/29/кировская-областная-клиническая-бол-б/> (дата обращения: 24.02.2026).
2. Прогностическая модель для выявления гиперурикемии по данным диспансеризации на основе машинного обучения. Библиотека врача: URL: <https://lib.medvestnik.ru/articles/prognosticheskaya-model-dlya-vyuavleniya-giperurikemii-po-dannym-dispanserizacii-na-osnove-mashinnogo-obucheniya.html> (дата обращения: 24.02.2026).
3. Факты и легенды о мультиомиксных технологиях. Биомолекула: URL: <https://biomolecula.ru/articles/fakty-i-legendy-o-multiomiksnykh-tekhnologiiakh> (дата обращения: 25.02.2026).
4. Burnham A.R., Patel S.S., J. D. Relman [et al.] Advantage of precision metagenomics for urinary tract infection diagnostics // *Frontiers in Cellular and Infection Microbiology*. – 2023. – Vol. 13. – Article 1221289. – DOI: 10.3389/fcimb.2023.1221289/full
5. GUILIN URIT ELECTRONIC GROUP CO., LTD. URIT US-2000. URIT: URL: <http://www.urit.com/rn/cpijfa/info.aspx?itemid=211&lcid=25> (дата обращения: 26.02.2026).
6. Ozelle: Устройство для анализа крови с искусственным интеллектом. Ozelle Medical: URL: <https://ozellemed.com/ru/прибор-для-анализа-крови-ai-революциони/> (дата обращения: 27.02.2026).
7. URIT Medical Electronic UC-1800 - General Information and Specifications. EasyManua.ls, 2024. – URL: <https://www.easymanua.ls/urit-medical-electronic/uc-1800/manual?p=9> (дата обращения: 25.02.2026).

### *Сведения об авторах статьи:*

1. **Гиззатуллина Камила Ильдаровна** магистрант 1 курса кафедры биомедицинской инженерии ФГБОУ ВО Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, ул. Карла Маркса 12, к. 5, e-mail: [kamila03082@gmail.com](mailto:kamila03082@gmail.com).
2. **Лакман Ирина Александровна** к.т.н., доцент кафедры биомедицинской инженерии ФГБОУ ВО Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, ул. Карла Маркса 12, к. 5, e-mail: [Lackmania@mail.ru](mailto:Lackmania@mail.ru).
3. **Усманова Диана Ирековна** студентка 4 курса педиатрического факультета ФГБОУ ВО Башкирский государственный медицинский университет Минздрава России, г. Уфа, ул. Ленина 3, e-mail: [dianausmanova00@mail.ru](mailto:dianausmanova00@mail.ru).

УДК 612.13 + 004.921

Гольцев М.В., Мансуров В.А.

### КАСАТЕЛЬНОЕ НАПРЯЖЕНИЕ НА СТЕНКЕ СОСУДИСТОЙ БИФУРКАЦИИ

*Белорусский государственный медицинский университет, г. Минск*

В данной работе рассматривается численное моделирование для исследования процессов течения и развитие касательного напряжения на стенке в бифуркации отрезка общей сонной артерии и прогноза возникновения атеросклеротических бляшек с помощью численного моделирования.

**Ключевые слова:** касательное напряжение, бифуркации сонной артерии, вихреобразование, вязкая жидкость

Goltsev M. V., Mansurov V. A.

### TANGENTIAL STRESS ON THE VASCULAR BIFURCATION WALL

*Belarusian State Medical University, Minsk*

In this paper, numerical modeling is considered to study the processes of flow and the development of tangential stress on the wall in the bifurcation of the segment of the common carotid artery and to predict the occurrence of atherosclerotic plaques using numerical modeling.

**Keywords:** tangential stress, carotid artery bifurcation, vortex formation, viscous fluid

Касательное напряжение ( $\tau$  - вектор) на поверхности сосудистой стенки возникает вследствие взаимодействия движущейся жидкости (крови) с поверхностью сосуда. Оно определяется как:

$$\tau = \mu \frac{\partial v}{\partial u}$$

где  $\mu$  — динамическая вязкость крови,  $\frac{\partial v}{\partial u}$  — градиент скорости вдоль оси  $u$ , перпендикулярной направлению движения крови. Патологические проблемы начинаются там, где поток крови становится завихренным, замедленным или прерывистым (например, в местах разветвления артерий).

1. Атеросклероз. Это самая прямая связь. В местах, где касательное напряжение низкое или изменчивое (осцилляторное): эндотелий начинает пропускать внутрь стенки липиды (холестерин) и усиливается прилипание лейкоцитов к стенкам. В результате в этих зонах (бифуркации сонных артерий, дуга аорты) чаще всего формируются атеросклеротические бляшки.

2. Аневризмы. Высокое касательное напряжение может повреждать структурные белки стенки сосуда (коллаген и эластин). В результате стенка истончается и начинает выпячиваться под давлением. Внутри самой аневризмы возникают зоны застоя (низкое напряжение), что способствует образованию тромбов.

Касательные напряжения на стенках сосудистых бифуркаций существенно зависят от двух параметров продольного градиента скорости и градиента скорости, вызванного

вихревым течением и могут оказывать влияние на развитие патологий сердечно-сосудистой системы, таких как атеросклероз и аневризмы [1].

Тщательная оценка и моделирование гемодинамических процессов позволяют лучше понимать механизмы развития заболеваний и разрабатывать эффективные методы профилактики и лечения.

Знание закономерностей анатомии и морфометрических характеристик бифуркации общей сонной артерии в зависимости от конституциональных особенностей черепа позволяет прогнозировать возникновение атеросклеротических бляшек в этих сосудах у людей с разной формой черепа

Причины: при разветвлении сосудов возникает сложная геометрия кровотока, что способствует возникновению локальных завихрений: 1.Разделение основного потока: Часть крови движется прямо вперед, часть отклоняется в боковые ветви, создавая зоны торможения и ускорения, 2. геометрическое сужение и расширение просвета, при этом в месте ветвления образуется зона изменения поперечного сечения, способствующая формированию областей повышенного давления и замедленного движения жидкости, 3: резкое изменение направления потока создает условия для формирования вторичных токов и круговых движений частиц жидкости.

При этом образующиеся вихри приводят к следующим эффектам:

- Повышение неоднородности поля скоростей.
- Увеличение градиентов скорости вблизи стенок сосудов, особенно в зонах, прилегающих к областям разветвлений.
- Возрастание сил трения и нагрузок на эндотелий, что увеличивает риск повреждения клеток внутренней оболочки артерии.
- Форма и размер сосудистого просвета оказывают значительное влияние на распределение касательных напряжений. Например, в местах сужения сосудов или вблизи точек бифуркаций, где поток разделяется на две ветви, формируются зоны повышенного касательного напряжения. Это связано с изменением профиля скорости и возникновением турбулентных зон.

Целью настоящей работы является численное моделирование для исследования процессов течения и развитие касательного напряжения на стенке в бифуркации отрезка общей сонной артерии и прогноза возникновения атеросклеротических бляшек с помощью численного моделирования.

Моделирование. На основе измерений угла бифуркации общей сонной артерии и диаметры общей, внутренней и наружной сонной артерий на 15 половинках препаратов головы и шеи взрослого человека из коллекции кафедры нормальной анатомии. зависимости от формы черепа взрослого человека были построены 3 численных геометрических модели с различными углами (рис 1). Для сравнения результатов были выбраны отрезки одинаковой длины, но с разными углами бифуркаций

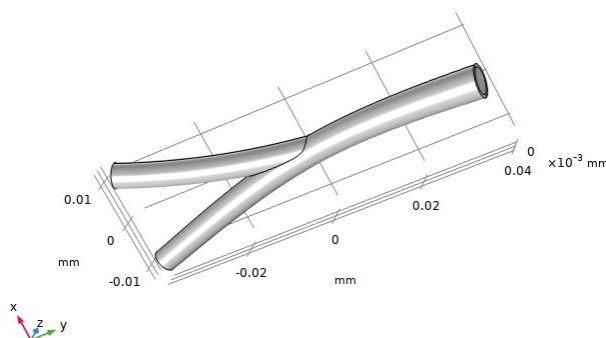


Рисунок 1. численная геометрическая модель

Численным конечно-разностным методом было интегрировано уравнение движения жидкости в указанных геометрических моделях. описываемое уравнением Навье-Стокса методом конечных элементов. В векторной форме для несжимаемой жидкости уравнения выглядят так:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = \mathbf{F} - \frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu}{\rho} \Delta \mathbf{v}$$

К этому добавляется уравнение неразрывности (для несжимаемой жидкости)

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

Здесь  $\mathbf{v}$  — вектор скорости жидкости в точке,  $\nabla$  — оператор набла (градиент),  $\times$  — операция векторного произведения.

Начальные и граничные условия. Известно, что средние скорости течения на входе толстого дочернего сосуда находятся в диапазоне  $10,7 \div 18,5$  см/с (среднее значение – 15 см/с), на входе тонкого дочернего сосуда –  $12 \div 19,5$  см/с (среднее значение – 16 см/с). На стенке сосуда условия прилипания, окончание отрезков сосудов – неподвижны [2].

Результаты моделирования показаны на ниже следующих рисунках. Видно, что Линии тока искривляются при прохождении места соединения артерий (рисунок 3). Это искривление порождает радиальное течение (рисунок 4). В совокупности эти процессы порождает вихревое течение, приводит перемещению максимума градиента скорости в зависимости от угла бифуркации (рисунок 2).

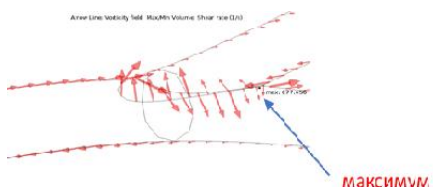


Рисунок 2. Поле вихревых векторов и максимум градиента скорости



Рисунок 3. Линии тока

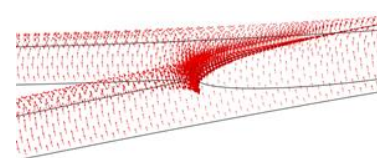


Рисунок 4. Векторы скорости радиального течения

Для сравнения средней завихренности  $\bar{\Omega}$  для данных бифуркаций использовалась интегральная оценка [3]

$$\bar{\Omega} = \iint_S \vec{\omega} dS/S$$

Здесь  $S$  - площадь сечения бифуркации в месте соединения дочерних артерий,  $\omega$  - вихревой вектор. Средняя завихренность имеет тенденцию к увеличению при увеличении угла  $\alpha$ .

В заключении укажем, что чем больше угол бифуркации тем больше неоднородность поля скоростей течения, что приводит к увеличению градиентов скорости вблизи стенок сосудов, особенно в зонах, прилегающих к областям разветвлений. В результате возрастания сил трения и нагрузок растянут касательные напряжения на стенках сосудистых бифуркаций, что увеличивает риск повреждения клеток внутренней оболочки артерии. Это повышает вероятность возникновения атеросклеротических явлений в бифуркации.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Al-Momani T., Bani-Hanib S., Smadi O., Azghoul S., Kiswani L., Assarsour M. The influence of internal carotid artery off-plane angle on the hemodynamics of blood flow in the carotid artery / T. Al-Momani et al. // Jordan Journal of Mechanical and Industrial Engineering. — 2019. — Vol. 13, № 3. — Pp. 141–148. — ISSN 1995-6665.

2. Humphrey J.D. Mechanics of the arterial wall: review and directions / J.D. Humphrey // *Critical Reviews in Biomedical Engineering*. — 1995. — Vol. 23. — Pp. 1–162.
3. Wild N.C., Bulusu K.V., Plesniak M.W. Vortical structures promote atheroprotective wall shear stress distributions in a carotid artery bifurcation model / N.C. Wild, K.V. Bulusu, M.W. Plesniak // *Bioengineering*. — 2023. — Vol. 10, № 9. — Art. no. 1036. — DOI: 10.3390/bioengineering10091036.

УДК 615.1:582.284

Горбацевич Г.И., Суббот К.В., Суббот А.В., Ганник Д.С., Комлач И.А.  
**СТАТИСТИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ НОРМАТИВНЫХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ  
КАЧЕСТВА ПЛОДОВЫХ ТЕЛ *GANODERMA APPLANATUM***

<sup>1</sup>*Белорусский государственный медицинский университет, г. Минск*

Трутовик плоский является перспективным источником биологически активных веществ, однако до настоящего времени не имеет фармакопейной регламентации. Целью работы являлось статистическое обоснование нормативных показателей качества плодовых тел данного вида как нового грибного сырья. Исследованы 20 партий, собранных на территории Беларуси и России в 2023–2025 гг. Статистическую обработку проводили с использованием параметрических и непараметрических методов в зависимости от характера распределения данных. Установлены обоснованные нормативные пределы показателей доброкачественности: сумма фенольных соединений – не менее 1,5 мг/г; экстрактивные вещества – не менее 35,0 %; потеря в массе при высушивании – не более 11,0 %; общая зола – не более 4,0 %; зола, нерастворимая в кислоте – не более 2,0 %. Предложенный подход формирует научную основу для разработки фармакопейной статьи и промышленной стандартизации *G. applanatum*.

**Ключевые слова:** *Ganoderma applanatum*, стандартизация, грибное сырье

Harbatsevich H.I., Subbot K.V., Subbot A.V., Gannik D.S., Komlach I.A.  
**STATISTICAL SUBSTANTIATION OF QUALITY SPECIFICATIONS FOR THE  
FRUITING BODIES OF *GANODERMA APPLANATUM***

*Belarusian State Medical University, Minsk*

*Ganoderma applanatum* is a promising source of biologically active compounds; however, it is not currently included in any pharmacopoeia and lacks official quality specifications. The aim of this study was to provide a statistical substantiation of quality standards for the fruiting bodies of this species as a novel medicinal fungal raw material. Twenty batches collected in Belarus and Russia during 2023–2025 were analyzed. Statistical processing was performed using parametric and nonparametric methods depending on the data distribution pattern. Scientifically justified acceptance criteria were established as follows: total phenolic content – not less than 1.5 mg/g; extractive value – not less than 35.0%; loss on drying – not more than 11.0%; total ash – not more than 4.0%; acid-insoluble ash – not more than 2.0%. The proposed approach provides a scientific basis for the development of a pharmacopoeial monograph and industrial standardization of *G. applanatum*.

**Keywords:** *Ganoderma applanatum*, standardization, fungal raw material.

Трутовик плоский (*Ganoderma applanatum*) – широко распространенный в средней полосе трутовый гриб, имеющий многовековую историю традиционного использования. Многочисленные исследования показали, что трутовик плоский содержит уникальные биоактивные компоненты, включающие фенольные соединения, полисахариды и тритерпены, которые обуславливают его фармакологическое действие: противоопухолевое, противовоспалительное, гипогликемическое, гиполипидемическое, иммунорегулирующее и гепатопротекторное [5].

В отличие от широко изученного и культивируемого *G. lucidum*, близкородственный *G. applanatum* до настоящего времени не включен в фармакопеи и не имеет официальных нормативных документов, регламентирующих его качество как лекарственного сырья.

Отсутствие фармакопейной статьи создает ряд существенных проблем, препятствующих внедрению этого перспективного гриба в медицину и промышленное производство. Разработка и внедрение стандартизированных показателей открывает перспективы для промышленной заготовки *G. applanatum* и создания на его основе импортозамещающих фитопрепаратов и биологически активных добавок. Это особенно актуально в контексте растущего интереса к лекарственным грибам как источнику природных иммуномодуляторов, гепатопротекторов и антиоксидантов [5].

### **Цель работы**

Целью настоящей работы являлось статистическое обоснование нормативных показателей качества плодовых тел *G. applanatum* как нового сырья грибного происхождения. В качестве критических показателей были выбраны: потеря массы при высушивании (ПМВ), общая зола (ОЗ) и зола, нерастворимая в хлористоводородной кислоте (ЗНХК), выход экстрактивных веществ (ЭВ) и сумма фенольных соединений (СФ). Эти критерии в совокупности обеспечивают объективную оценку качества данного вида сырья.

### **Материал и методы**

Для определения нормативных показателей доброкачественности исследовали 20 партий *G. applanatum*. Сбор образцов проводился с марта по декабрь в течение 2023–2025 гг. на территории Беларуси (Минская, Гродненская, Витебская обл.) и России (Ленинградская обл., республики Алтай, Карелия и Байкал). Каждая партия представляла собой среднюю пробу из фрагментов не менее 10 плодовых тел.

Определение потери в массе при высушивании проводили гравиметрическим методом: навеску сырья массой 1,00 г помещали в предварительно высушенный и взвешенный бюкс и выдерживали в сушильном шкафу при температуре  $(105 \pm 2)^\circ\text{C}$  до достижения постоянной массы [2, 3].

Для установления содержания общей золы навеску массой 1,00 г предварительно измельченного сырья переносили в фарфоровый тигель, высушивали при  $100\text{--}105^\circ\text{C}$  в течение 1 ч, после чего прокаливали до постоянной массы в муфельной печи при  $(600 \pm 25)^\circ\text{C}$  [2, 3].

Для определения доли золы, не растворимой в хлористоводородной кислоте, использовали остаток после сжигания навески сырья. В тигель последовательно вносили 15 мл воды и 10 мл раствора хлористоводородной кислоты, после чего смесь нагревали до кипения под часовым стеклом и кипятили 10 мин. Далее раствор охлаждали и фильтровали через обеззоленный фильтр, тщательно промывая осадок горячей водой до нейтральной

реакции фильтрата. Фильтр с осадком высушивали и прокаливали в муфельной печи до постоянной массы [1, 2].

Для определения экстрактивных веществ использовали метод мацерации: 1,0 г измельченного сырья экстрагировали 50,0 мл 70% этанола в течение трех суток, периодически встряхивая. После фильтрования отбирали аликвоту объемом 10,0 мл, которую выпаривали на водяной бане, и полученный сухой остаток доводили до постоянной массы при температуре 100–105 °С [2, 3].

Содержание суммы фенольных соединений в пересчете на галловую кислоту устанавливали фотометрическим методом с использованием реактива Фолина-Чокальтеу [6]: для анализа отбирали 1,00 мл фильтрата, полученного на стадии определения экстрактивных веществ, переносили в мерную колбу на 25,0 мл, добавляли 10 мл воды, 1,00 мл реактива Фолина-Чокальтеу и 4,00 мл 10% раствора натрия карбоната, доводили объём водой до метки и выдерживали смесь в темноте в течение 1 ч, после чего измеряли оптическую плотность при 725 нм, параллельно проводя реакцию с серией калибровочных растворов галловой кислоты (1–500 мкг/мл).

Определение содержания экстрактивных веществ, фенольных соединений, общей золы и золы, нерастворимой в хлористоводородной кислоте, выполняли с пересчётом на сухое сырьё.

Установление количественных критериев доброкачественности основывалось на статистическом подходе [2, 3]. Расчет предельных значений показателей с низкой или умеренной вариабельностью при нормальном распределении данных проводили с использованием метода референтных интервалов, в то время как для асимметричных распределений и высокой вариабельности данных использовали устойчивый к выбросам непараметрический процентильный метод. Статистическую обработку результатов эксперимента проводили в программе IBM SPSS Statistics 27, для выявления выбросов использовали тест Диксона [2].

### **Результаты и обсуждение**

В исследовании показателей доброкачественности плодовых тел *G. applanatum* ( $n = 20$ ) установлена различная степень вариабельности анализируемых параметров. Статистические характеристики по показателям качества представлены в табл. 1, а диаграммы распределения данных – на рис. 1

Таблица 1

Описательные статистические характеристики числовых показателей  
 доброкачественности сырья *G. applanatum* (n=20)

	СФ	ЭВ	ПМВ	ОЗ	ЗНХК
$\bar{x}$	4,44	67,79	9,80	2,55	0,59
Me	3,96	68,35	9,47	2,52	0,35
$\sigma$	1,56	19,97	0,82	0,75	0,63
CV, %	35,08	29,46	8,41	29,33	107,38
Эксцесс	-0,21	1,05	-1,48	-1,16	-0,81
Асимметрия распределения	0,27	-0,27	0,01	-0,22	0,82
Критерий Шапиро- Уилка, W	0,94	0,96	0,88	0,92	0,84
Уровень значимости, p	0,21	0,64	0,02	0,09	0,00
P5/95	–	–	10,87	–	1,77
$X + z_{0.95} \cdot S$ / $X - z_{0.95} \cdot S$	1,88	34,94	–	3,78	–

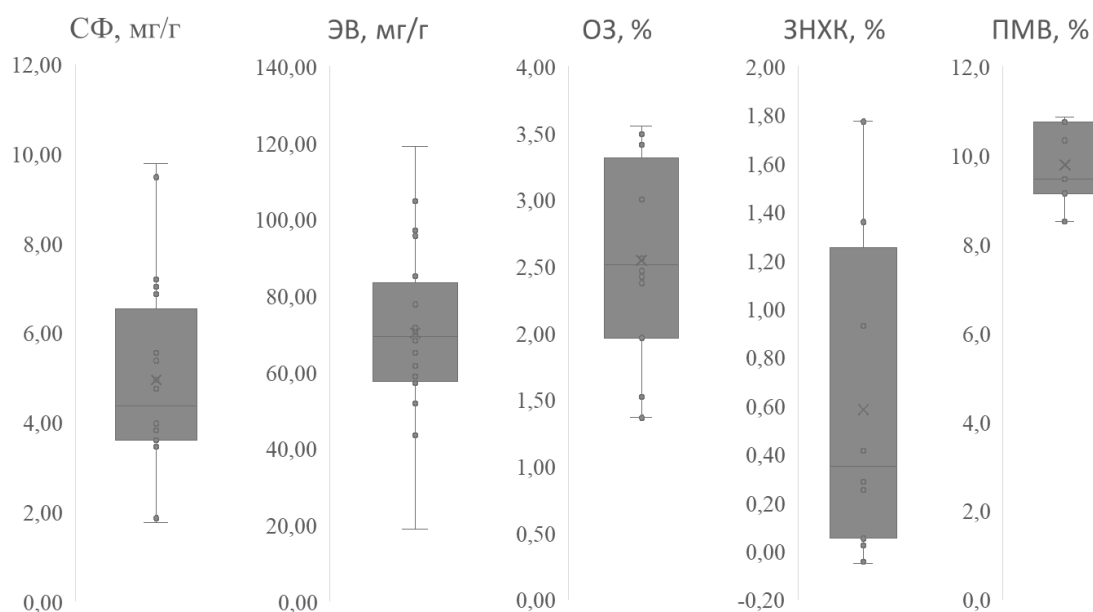


Рисунок 1. Распределение значений основных аналитических показателей качества сырья *G. Applanatum*.

Среднее значение СФ составило 4,44 мг/г, при коэффициенте вариации 35,08 %, что свидетельствует о выраженной изменчивости показателя. Аналогичная тенденция отмечена для ЭВ ( $\bar{x} = 67,79$  %;  $CV = 29,46$  %) и ОЗ ( $\bar{x} = 2,55$ %;  $CV = 29,33$  %). При этом показатели ПМВ характеризовались наименьшей вариабельностью ( $\bar{x} = 9,80$  %;  $CV = 8,41$  %). Наибольшая изменчивость выявлена для содержания золы, нерастворимой в хлороводородной кислоте (ЗНХК) ( $CV = 107,38$ %), что отражает существенное влияние факторов заготовки и условий произрастания сырья.

Высокая асимметрия (0,82) и отрицательные значения эксцесса у большинства показателей указывают на сглаженность распределений без выраженных пиков.

Проверка нормальности распределения по критерию Шапиро-Уилка показала соответствие нормальному закону Гаусса для СФ, ЭВ и ОЗ ( $p > 0,05$ ), тогда как для ПМВ ( $p = 0,02$ ) и ЗНХК ( $p < 0,01$ ) распределение статистически отличалось от нормального, что необходимо учтено при выборе метода установления предельного показателя (табл. 1).

#### **Заключение и выводы**

На основании статистического анализа экспериментальных данных с учетом статистического и технологического запаса установлены следующие нормативные показатели доброкачественности плодовых тел *G. applanatum*: СФ – не менее 1,5 мг/г; ЭВ – не менее 35,0 %, ПМВ – не более 11,0 %, ОЗ – не более 4,0 %, ЗНХК – не более 2,0 %.

Предложенный в работе подход обеспечивает стандартизованную оценку качества и единство требований к плодовым телам *G. applanatum*.

#### **ЛИТЕРАТУРА**

1. Горбацевич, Г. И. Обоснование условий заготовки и переработки *Fomes fomentarius* – источника нового класса природных антиоксидантов / Г. И. Горбацевич // XXV Международный Съезд ФИТОФАРМ 2024 : сборник тезисов, Санкт-Петербург, 07–09 октября 2024 года. – Санкт-Петербург: Санкт-Петербургский государственный химико-фармацевтический университет, 2024. – С. 46-47.
2. Государственная фармакопея Республики Беларусь: в 2 т.: введ. в действие с 1 янв. 2013 г. приказом М-ва здравоохранения Респ. Беларусь от 25.04.2012 г. № 453. – Т. 1: Общие методы контроля качества лекарственных средств / М-во здравоохранения Респ. Беларусь, Центр экспертиз и испытаний в здравоохранении; [под общ. ред. А. А. Шерякова]. – Молодечно: Победа, 2012. – 1220 с.
3. Государственная фармакопея Российской Федерации: XIV издание / Институт стандартизации и контроля лекарственных средств ФГУ «НЦЭСМП» м-ва здравоохранения Российской Федерации. – М.: ФЭМБ, 2018.
4. ICH Q6A. Specifications: test procedures and acceptance criteria for new drug substances and new drug products: chemical substances: scientific guideline / International Council for

Harmonisation of Technical Requirements for Pharmaceuticals for Human Use. – URL: <https://www.ich.org/page/quality-guidelines> (дата обращения: 15.11.2025).

5. PengWu, Bioactivities and industrial standardization status of *Ganoderma lucidum*: A comprehensive review / PengWu [et al.] // Heliyon 10, 2024.

6. Singleton, V. L. Analysis of total phenols and other oxidation substrates and antioxidants by means of Folin-Ciocalteu reagent / V.L. Singleton, R. Orthofer, R.M. Lamuela-Raventós // Methods Enzymol. – Vol. 299. – 1999. –P. 152–78.

УДК 615.15:004.1 (574)

Жанбырбаева А.А., Баймбетова Д.А., Абдрахманова А.Б., Шертаева К.Д., Умурзахова Г.Ж.

**СОВЕРШЕНСТВОВАНИЮ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫХ ИНФОРМАЦИОННЫХ СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬЮ РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН**

*Южно-Казахстанская медицинская академия, г.Шымкент*

В современных условиях динамичного развития технологий и цифровизации всех сфер экономики особую актуальность приобретает совершенствование информационных систем управления фармацевтической деятельностью Республики Казахстан. Исходя из этого, исследование и совершенствование информационных систем в управлении фармацевтической деятельностью, а именно разработка интеллектуальной модели информационной системы управления, является актуальной научно-практической задачей, направленной на развитие цифровой инфраструктуры фармации, повышение прозрачности процессов и конкурентоспособности фармацевтических организаций РК.

**Ключевые слова:** информационные системы, фармацевтическая деятельность, цифровизация фармации, фармацевтический менеджмент, цифровые технологии в здравоохранении.

Zhanbyrbaeva A.A., D.A. Baymbetova D.A., Abdrakhmanova A.B.,  
Shertaeva K.D., Umurzakhova G.Zh.

**IMPROVEMENT OF INTELLECTUAL INFORMATION SYSTEMS OF PHARMACEUTICAL ACTIVITY MANAGEMENT OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN**

*South Kazakhstan Medical Academy, Shymkent*

In the current conditions of dynamic development of technologies and digitalization of all spheres of the economy, the improvement of information systems for managing pharmaceutical activities of the Republic of Kazakhstan is of particular relevance. Based on this, the study and improvement of information systems in the management of pharmaceutical activities, namely the development of an intelligent model of the management information system, is an urgent scientific and practical task aimed at developing the digital infrastructure of pharmacy, increasing the transparency of processes and competitiveness of pharmaceutical organizations of the Republic of Kazakhstan.

**Key words:** information systems, pharmaceutical activities, digitalization of pharmacy, pharmaceutical management, digital technologies in healthcare.

Информационные технологии существенно повышают эффективность, безопасность и прозрачность деятельности фармацевтических компаний. Результаты научных исследований подтверждают, что уровень развития индустрии информационных технологий и их использования в современном обществе является важнейшим фактором, определяющим конкурентоспособность страны. Это утверждение имеет прямое отношение ко всем сферам деятельности человека, включая здравоохранение и фармацевтическую отрасль [1,2].

В соответствии с Посланием Главы государства Касым-Жомарта Токаева народу Казахстана «Казахстан в эпоху искусственного интеллекта: актуальные задачи и их решения через цифровую трансформацию» главная стратегическая цель страны - это

«стремительное развитие искусственного интеллекта, которое уже влияет на мировоззрение и поведение людей, особенно молодежи... Иной альтернативы нет, поскольку данный процесс кардинально меняет миропорядок и образ жизни всего человечества. Мы должны быть готовы к этому. Нужно действовать решительно, промедление чревато самыми тяжелыми последствиями. Поэтому мною поставлена стратегическая по своей важности задача превращения Казахстана в течение трех лет в полноценную цифровую страну» [1]. В условиях реализации государственной программы «Цифровой Казахстан» и стратегических инициатив по развитию цифрового здравоохранения возникает необходимость в создании интегрированных информационных систем, объединяющих все этапы фармацевтической деятельности — от производства до отпуска препаратов населению. Исходя из этого, совершенствование информационных систем в управлении фармацевтической деятельностью является актуальной научно-практической задачей, направленной на развитие цифровой инфраструктуры фармации, повышение прозрачности процессов и конкурентоспособности фармацевтических организаций [3]. Контент анализ показал, что цифровизация мирового фармацевтического сектора способствует повышению эффективности использования лекарственных средств, снижению потерь и повышению качества закупочных и логистических процессов. Также активно разрабатываются образовательные ресурсы и программы, направленные на формирование цифровых компетенций фармацевтов, необходимых для быстрого развития информационных технологий в фармации [4,5]. Исследование отвечает приоритетному направлению в области инновации и трансформации медицины, а также концепции развития здравоохранения Республики Казахстан до 2026 года. Настоящие исследования повысят конкурентоспособность отечественных фармацевтических организаций и ИТ-сектора в международной среде. Практическая применимость результатов — возможность внедрения разработанной модели в фармацевтических организациях, что также открывает путь к коммерциализации ИТ-продуктов [6]. Научно-технический эффект исследования выражается в создании апробированной модели ИС и методических рекомендаций для её внедрения в фармацевтические организации. Экономический эффект ожидается за счёт сокращения операционных издержек и повышения эффективности управления фармацевтической деятельностью. Социальный эффект заключается в улучшении доступности и качества фармацевтических услуг, повышении доверия к системе лекарственного обеспечения [7].

### **Цель исследования**

Целью исследования является анализ текущего состояния цифровизации фармацевтической отрасли РК и разработка научно обоснованных подходов к совершенствованию интеллектуальных информационных систем управления фармацевтической деятельностью.

### **Материал и методы исследования**

Для решения поставленных задач применялись современные научные методы исследования: контент-анализ нормативных актов; SWOT-анализ существующих цифровых решений; сравнительный и корреляционный анализ данных; методы маркетингового анализа с применением баз данных IMS Health и прогнозирования; анкетирование и экспертные оценки для определения готовности участников к внедрению интеллектуальных информационных систем. Обработка информации, проведение математико-экономических расчетов и вывод полученных результатов в графическом виде будет проводиться с применением искусственного интеллекта. Аналитические отчёты и прототипы цифровых решений, будут оформлены как результаты интеллектуальной деятельности, защищённые авторским правом и, при необходимости, регистрацией в соответствии с законодательством Республики Казахстан.

### **Результаты и обсуждение**

Полученные результаты исследования, модели и рекомендации могут:

1. Быть использованы при разработке и внедрении современных цифровых решений в фармацевтических и образовательных организациях.
2. Способствовать повышению эффективности, прозрачности и надёжности управления фармацевтическими процессами.
3. Использоваться при реализации государственной стратегии «Цифровой Казахстан» и создании национальной системы цифрового здравоохранения.

### **Заключение и выводы**

1. В результате контент-анализа было выявлено, что проблеме использования информационных технологий в фармацевтической отрасли в РК и за рубежом уделяется большое внимание. Однако комплексных исследований по данной проблеме не проводилось.

2. Методом анкетирования специалистов фармацевтов будет изучена проблема неудовлетворенных информационных потребностей. На основе методов наблюдения и опроса будет составлена характеристика использования ИИ в фармацевтических организациях РК.

3. Будет создана комплексная, адаптированная к национальным условиям модель информационной системы управления фармацевтической деятельностью, с методикой оценки её эффективности и готовности к внедрению.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Послание Главы государства Касым-Жомарта Токаева народу Казахстана «Казахстан в эпоху искусственного интеллекта: актуальные задачи и их решения через цифровую трансформацию», г.Астана, 8 сентября 2025года. [https://prg.kz/document/?doc\\_id=32373963](https://prg.kz/document/?doc_id=32373963).
2. Министерство здравоохранения Республики Казахстан. "О цифровизации здравоохранения: Приказ Вице-министра здравоохранения РК" // Online.zakon.kz, 2025. [https://prg.kz/document/?doc\\_id=33776534](https://prg.kz/document/?doc_id=33776534).
3. Постановление правительства Республики Казахстан от 17 мая 2022 года №311. Государственная программы «Цифровой Казахстан» <https://adilet.zan.kz/rus/docs/P1700000827>
4. Shertaeva CD, Utegenova GI, Blinova OV, Anarbaeva RM, Serikbaeva AZH, Akhelova SL, Agabek AU, Orynbayeva AD, Jabarkulova SK, Tursubekova BI. Development of an Automated System for Managing the Movement of Pharmaceutical Products in Pharmacies. *Pharmacy Practice* 2024 Jul-Sep;22(3):2915.
5. Zhussupova G, Aiypkhanova A, Zhaldybayeva S, Satmbekova D, Akhayeva T, Kaliyeva S. Evaluation of a national framework for rational use of medicines in Kazakhstan and its role in improving medicine use practices at the organizational and national levels. *BMC Health Serv Res.* 2025 Jan 9;25(1):49. doi:10.1186/s12913-024-12172-9. PMID: 39789630; PMCID: PMC11721059.
6. Zhakipbekov, K., Posylkina, O., Zhumabayev, N., Datkhayev, U., Zhumabayev, N., Almurzaeva, A., & Mukanova, A. (2023). Analysis of the current state of the pharmaceutical market of the Republic of Kazakhstan. *ScienceRise: Pharmaceutical Science*, (2(42), 57–67. <https://doi.org/10.15587/2519-4852.2023.267787>.
7. Kutybayeva, K., Razaque, A., & Rai, H. M. (2025). Enhancing Pharmaceutical Supply Chain Transparency and Security with Blockchain and Big Data Integration. *Procedia Computer Science*, 259, 1511-1522. <https://doi.org/10.1016/j.procs.2025.04.106>.
8. Mohamadi N., Niaki S. T. A., Taher M., Shavandi A. (2024). An application of deep reinforcement learning and vendor-managed inventory in perishable supply chain management. *Eng. Appl. Artif. Intell.* 127, 107403. [10.1016/j.engappai.2023.107403](https://doi.org/10.1016/j.engappai.2023.107403)

УДК 617

Закирьянов И.Ф.

**АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ ФОТОБИОРЕАКТОР С МИКРОВОДОРОСЛЯМИ КАК ЭЛЕМЕНТ БИОРЕГЕНЕРАТИВНОЙ СИСТЕМЫ ЖИЗНЕОБЕСПЕЧЕНИЯ В КОСМОСЕ: МЕДИЦИНСКИЕ ЭФФЕКТЫ И ТРЕБОВАНИЯ К ИТ-КОНТРОЛЮ**

*Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, г. Москва*

Цель данного исследования - изучить технологию биорегенеративных СЖО, провести сравнительный анализ с существующими и перспективными аналогами, определить технологическую и экономическую рентабельность.

**Ключевые слова:** автоматизированный фотобиореактор, биорегенеративные системы жизнеобеспечения (BLSS), реакция Сабатье, СПДУ, *Chlorella vulgaris*.

Zakiryaynov I.F.

**AUTOMATED MICROALGAE PHOTOBIOREACTOR AS AN ELEMENT OF A BIOREGENERATIVE LIFE SUPPORT SYSTEM IN SPACE: MEDICAL EFFECTS AND REQUIREMENTS FOR IT-CONTROL**

*Bauman Moscow State Technical University, Moscow*

The purpose of this research is to explore the technology of bioregenerative LSSs, conduct a comparative analysis with existing and promising analogues, and determine the technological and economic profitability.

**Keywords:** automated microalgae photobioreactor, bioregenerative life support system (BLSS), Sabatier's reaction, Carbon Dioxide Recycling System (CDRS), *Chlorella vulgaris*.

Мировая космическая отрасль активно развивается, и частные компании, а также государства, работают над созданием орбитальных станций и баз на Луне. Для обеспечения длительного пребывания человека в космосе необходимы возобновляемые источники кислорода. На современных станциях кислород добывают электролизом воды, но для долговременных миссий требуются замкнутые системы переработки CO<sub>2</sub> и производства O<sub>2</sub>. Наиболее перспективной технологией являются фотобиореакторы с микроводорослями, использующие фотосинтез.

**Цель работы**

Цель данной работы – исследовать новую технологию биорегенеративных СЖО, провести сравнительный анализ с существующими и перспективными аналогами, определить технологическую и экономическую рентабельность.

**Исследование**

При анализе новой технологии важно учитывать проверенные решения, такие как орбитальные станции МКС и Тяньгун. Они используют электролиз воды для производства кислорода, где часть воды доставляется с Земли, а основная часть получается из конденсата и урины. За один цикл повторно используется 95% воды. Также необходимо очищать атмосферу от углекислого газа для предотвращения отравления. Специальные установки,

такие как CDRA на МКС и «Воздух» на российском сегменте, используют цеолиты и сорбенты для удаления CO<sub>2</sub> [1, 2].

Тут важно отметить, что на китайском Тяньгуне проводились эксперименты по направлению собранного CO<sub>2</sub> в реактор, где после соединения с водородом (полученным из того же электролиза воды) по реакции Сабатье (термокаталитическое гидрирование диоксида углерода при температуре 310-360 °С) получается вода (снова электролиз, цикл замыкается) и метан (выбрасывается в космос, но в перспективе можно использовать в технических аспектах миссий). [1].

По моим расчетам на основе доступных данных, суммарная масса систем генерации кислорода ("Электрон-ВМ" и OGS) и утилизации CO<sub>2</sub> (CDRA/Воздух) на МКС составляет около 1130–1500 кг для ключевых блоков. Производительность — 5–9 кг O<sub>2</sub>/сутки, рассчитано на 6–7 человек при расходе 0,84–1 кг воды/чел/сутки. [2, 3].

Для долгосрочных пилотируемых миссий необходимы системы жизнеобеспечения с замкнутым циклом, которые минимально зависят от поставок с Земли. Важно перерабатывать выдыхаемый CO<sub>2</sub> в кислород. Рассматриваются три метода: реакция Сабатье, Боша и электрохимическое разложение. Реакция Сабатье позволяет перерабатывать до 66% CO<sub>2</sub>, но термокаталитическое гидрирование оказалось эффективнее, так как реакция Боша требует значительных энергозатрат, а электрохимическое разложение — медленно и требует дополнительной реакции Будуара.

Я изучил проекты и экспериментальные установки, использующие реакцию Сабатье, и для анализа взял за основу разработку РКК "Энергия" и НИИхиммаш – СПДУ для космических полетов. Основные характеристики СПДУ: масса – 215 кг, энергопотребление – 0.7-1.1 кВт, переработка CO<sub>2</sub> – 40-60 л/час, производительность по H<sub>2</sub>O – 60 мл/час, производительность по CH<sub>4</sub> – 55 л/час. Габариты блоков: БКДУ – 1405 x 550 x 515 мм, БГДУ – 945 x 425 x 495 мм, ПУ СПДУ – 310 x 300 x 100 мм [4].

В качестве альтернативы подобным техническим подходам я рассматриваю использование биорегенеративной системы жизнеобеспечения, в основе которой могут лежать автоматизированные фотобиореакторы на основе микроводоросли хлореллы (*Chlorella vulgaris*) и фотосинтеза. Принцип работы подобной системы следующий:

1) Подача сырья: кормление водорослей начинается с воздуха, насыщенного углекислым газом (CO<sub>2</sub>), который засасывается в герметичный реактор вместе с водой и питательными солями.

2) Создание условий: для фотосинтеза водорослям нужен свет (обеспечивают энергоэффективные светодиоды) и движение. Система перемешивания предотвращает оседание клеток и равномерно распределяет CO<sub>2</sub>.

3) Фотосинтез: поглощая CO<sub>2</sub> и питательные вещества под действием света, водоросли выделяют кислород (O<sub>2</sub>), который собирается и возвращается в вентиляцию.

4) Умный контроль: датчики непрерывно отслеживают температуру, кислотность (pH), плотность суспензии и уровень газов. При избытке CO<sub>2</sub> или недостатке света автоматика корректирует параметры. Если водорослей становится слишком много, система сливает излишки в контейнер для сбора урожая.

5) Результат: на выходе получаем кислород для дыхания и биомассу хлореллы, которая может использоваться как витаминная добавка или техническое сырье.

Преимущества данной технологии перед СПДУ включают замкнутость системы и более высокий КПД. Углерод из углекислого газа консервируется в клетках водорослей, которые используют его для роста. Это может быть полезно в качестве удобрения или источника питания. В отличие от СПДУ, водоросли для фотосинтеза используют энергию света, что является более эффективным процессом и не требует электролиза воды.

Проанализировав различные разработки фотобиореакторов, сделав предварительные расчеты их рабочих характеристик, я оценил следующие параметры установки для лунной базы на 20 человек: Производительность реактора – 11кг/сут; Объем реактора – 700л; Общий объём системы – 2м<sup>3</sup>; Общая масса – 1500кг; Энергопотребление – 3,2 кВт.

Оценив характеристики СПДУ для аналогичной базы, я составил следующую сравнительную таблицу:

**Таблица 1**

**Сравнение перспективных СОГС (фотобиореактор и СПДУ) для лунной базы (20 человек)**

Параметр	Фотобиореактор (хлорелла)	СПДУ + электролизер
Производительность O <sub>2</sub> , кг/сут	11	10,75
Производительность по пище (биомасса), кг/сут	~10	0
Потребление CO <sub>2</sub> , кг/сут	~15	20
Масса системы, кг	1500	1930
Общий объем, м <sup>3</sup>	2	5,4
Энергопотребление, кВт	3,2	9,6
Побочные продукты	Биомасса (белки, жиры, углеводы)	Метан (может использоваться как топливо)

Потребность в привозных ресурсах	Минимальная (питательные соли, небольшое количество воды)	Вода (~8 кг/сут для достижения полной потребности в O <sub>2</sub> ) и замена катализаторов
Замкнутость цикла	Высокая: CO <sub>2</sub> превращается в кислород и пищу, углерод возвращается в биомассу	Частичная: углерод теряется с метаном, требуется подпитка водой
Сложность и надежность	Биологическая система, саморегулируется, но требует контроля параметров	Техническая система, отработана на МКС, но чувствительна к отказам
Психологический фактор	Положительный (наличие живых зеленых организмов)	Нейтральный

### Заключение и выводы

Исследование показывает, что автоматизированный фотобиореактор с микроводорослями хлореллы — технологически и экономически выгодное решение для долговременных космических миссий. Сравнительный анализ с системой переработки диоксида углерода выявил преимущества фотобиореактора: сопоставимую производительность по кислороду (11 кг/сут против 10,75 кг/сут), меньшие массогабаритные показатели (1500 кг, 2 м<sup>3</sup> против 1930 кг, 5,4 м<sup>3</sup>) и втрое более низкое энергопотребление (3,2 кВт против 9,6 кВт).

Главное преимущество фотобиореактора — способность замыкать цикл по кислороду и углероду. В отличие от системы переработки, где углерод теряется в виде метана, хлорелла утилизирует CO<sub>2</sub>, создавая биомассу для питания. Это снижает зависимость от земных поставок и повышает автономность. Живые организмы также положительно влияют на психологическое состояние экипажа.

Фотобиореактор перспективен для замкнутых систем жизнеобеспечения лунных баз и марсианских экспедиций. Важно развивать системы автоматического контроля параметров культивирования и повышать надежность биологических компонентов в космосе.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Гузенберг А. С., Железняков А. Г., Романов С. Ю. и др. Отработка средств обеспечения газового состава и водообеспечения комплексов систем жизнеобеспечения межпланетных экспедиций на основе систем жизнеобеспечения российского и американского сегментов Международной космической станции // Пилотируемые полёты в космос. – 2022. – № 4 (45). – С. 36–52. –

URL: [http://www.gctc.su/media/files/Periodicheskie\\_izdaniya/ppk\\_2022\\_4\\_total\\_45/3\\_stat.a\\_guzenberg\\_zeleznakov.pdf](http://www.gctc.su/media/files/Periodicheskie_izdaniya/ppk_2022_4_total_45/3_stat.a_guzenberg_zeleznakov.pdf) (дата обращения: 10.03.2026).

2. Гузенберг А. С., Железняков А. Г. Отработка средств обеспечения газового состава и водообеспечения комплексов систем жизнеобеспечения межпланетных экспедиций на основе систем жизнеобеспечения российского и американского сегментов Международной космической станции // Пилотируемые полёты в космос. – 2022. – № 3 (44). –

URL: [https://www.gctc.ru/media/files/Periodicheskie\\_izdaniya/ppk\\_2022\\_3\\_total\\_44/3\\_guzenberg\\_zeleznakov.pdf](https://www.gctc.ru/media/files/Periodicheskie_izdaniya/ppk_2022_3_total_44/3_guzenberg_zeleznakov.pdf) (дата обращения: 10.03.2026).

3. Глебов И. В., Митрюхин А. Д. О функциональной надёжности регенерационных систем жизнеобеспечения пилотируемых космических аппаратов // Инженерный журнал: наука и инновации. – 2020. – № 6. – DOI: 10.18698/2308-6033-2020-6-1987. –

URL: <https://engjournal.bmstu.ru/articles/1987/1987.pdf>.

4. Коган И. Л. Анализ и моделирование систем жизнеобеспечения человека в замкнутых объёмах [Дисс. ... канд. техн. наук]. – М.: МАИ, 2018.

URL: <https://mai.ru/upload/iblock/dca/dissertatsiya-Kogan-red-1803-fin.pdf>  
(дата обращения: 10.03.2026).

УДК 615.031:519.87

Якименко Ю.Ю., Колесникова П.А.

**ПРИМЕНЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ  
ФАРМАКОКИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ РЕЖИМОВ  
ДОЗИРОВАНИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ**

*Донецкий государственный медицинский университет, г. Донецк*

В статье рассмотрены современные методы математического моделирования фармакокинетических процессов, применяемые для оптимизации режимов дозирования. Представлен анализ однокамерной и двухкамерной моделей распределения, а также приведены уравнения, описывающие ключевые параметры: константу элиминации, период полувыведения, объём распределения и площадь под фармакокинетической кривой. Отдельное внимание уделено популяционному моделированию и его роли в прогнозировании концентрации препаратов у пациентов с различными патологиями. Обоснована практическая значимость вычислительных подходов для повышения эффективности и безопасности фармакотерапии.

**Ключевые слова:** фармакокинетика, математическое моделирование, режим дозирования, популяционная фармакокинетика, индивидуализация терапии.

Yakimenko Yu.Yu., Kolesnikova P.A.

**APPLICATION OF MATHEMATICAL MODELING OF PHARMACOKINETIC  
PARAMETERS FOR THE OPTIMIZATION OF DRUG DOSING REGIMENS**

*Donetsk State Medical University, Donetsk*

The article reviews modern methods of mathematical modeling of pharmacokinetic processes used to optimize dosing regimens. The analysis of one-compartment and two-compartment distribution models is presented, along with equations describing key parameters: elimination rate constant, half-life, volume of distribution, and area under the pharmacokinetic curve. Special attention is given to population modeling and its role in predicting drug concentrations in patients with various pathologies. The practical significance of computational approaches for enhancing the efficacy and safety of pharmacotherapy is substantiated.

**Keywords:** pharmacokinetics, mathematical modeling, dosing regimen, population pharmacokinetics, therapy individualization.

Проблема индивидуальной вариабельности ответа на лекарственную терапию остается одной из центральных в современной клинической фармакологии. Применение стандартных дозировок, рассчитанных на "среднего" пациента, зачастую приводит либо к недостаточной эффективности лечения, либо к развитию нежелательных лекарственных реакций. По данным литературы, значительная часть осложнений фармакотерапии связана с неоптимальным выбором режима дозирования, не учитывающим функциональное состояние органов элиминации пациента, его возраст, массу тела и другие индивидуальные характеристики [3, 6].

Математическое моделирование фармакокинетики (ФК) представляет собой эффективный инструмент формализации процессов абсорбции, распределения, метаболизма и экскреции (ADME). Решение систем дифференциальных уравнений, лежащих в основе моделей, позволяет с высокой точностью прогнозировать временной профиль концентрации препарата в плазме крови и тканях [12]. Использование данных

моделей в клинической практике дает возможность перейти от эмпирического подбора доз к научно обоснованному расчету индивидуальных режимов дозирования, обеспечивающих поддержание терапевтической концентрации на протяжении всего курса лечения [2, 9].

### **Цель работы**

Систематизировать современные данные о применении камерных и популяционных математических моделей для расчета ключевых фармакокинетических параметров и оптимизации режимов дозирования лекарственных средств, а также оценить их клиническую значимость для персонализации фармакотерапии.

### **Материал и методы**

Проведен анализ научных публикаций в базах данных PubMed, eLibrary, Cyberleninka за период 2016–2025 гг. Поиск осуществлялся по ключевым словам: «pharmacokinetic modeling», «dosing optimization», «population pharmacokinetics», «compartmental model». Для анализа использовались оригинальные исследования и систематические обзоры, посвященные моделированию фармакокинетики антибактериальных препаратов, анестетиков и других лекарственных средств. В работе систематизирован математический аппарат однокамерной и двухкамерной моделей с описанием клинической интерпретации параметров.

### **Результаты и обсуждение**

Основой математического описания фармакокинетики является концепция камерных моделей, где организм условно разделяется на один или несколько гомогенных компартментов, между которыми происходит обмен веществом по кинетике первого или нулевого порядка.

Однокамерная модель. Данная модель является наиболее простой и применима для препаратов, которые быстро и равномерно распределяются в организме. В этом случае изменение концентрации препарата  $C(t)$  во времени  $t$  после внутривенного болюсного введения описывается моноэкспоненциальным уравнением:

$$C(t) = C_0 \cdot e^{-k_{el}t}$$

где  $C_0$  — начальная концентрация (мг/л),  $k_{el}$  — константа скорости элиминации ( $ч^{-1}$ ).

Ключевым производным параметром является период полувыведения ( $T_{1/2}$ ), который обратно пропорционален  $k_{el}$ :

$$T_{1/2} = \ln 2 / k_{el} \approx 0,693 / k_{el}. T_{1/2} = k_{el}^{-1} \ln 2 \approx 0,693 / k_{el}.$$

Данный показатель используется для определения интервала между введениями и времени достижения равновесной концентрации [3, 8].

Двухкамерная модель. Для большинства лекарственных средств характерно более сложное распределение, включающее фазу быстрого распределения в центральную камеру (кровь, хорошо перфузируемые органы) и медленную фазу перераспределения и элиминации из периферической камеры (ткани). Концентрация в плазме в этом случае описывается суммой двух экспонент:

$$C(t)=A \cdot e^{-\alpha t}+B \cdot e^{-\beta t}, C(t)=A \cdot e^{-\alpha t}+B \cdot e^{-\beta t},$$

где AA и BB — коэффициенты, отражающие вклад фаз распределения и элиминации, а  $\alpha$  и  $\beta$  — гибридные константы скорости, соответствующие этим фазам [7, 10]. Применение двухкамерной модели является обязательным при терапевтическом лекарственном мониторинге аминогликозидов, ванкомицина и ряда цитостатиков, так как позволяет избежать ошибок в расчете доз, связанных с недооценкой тканевого депонирования [7, 8].

Клинически значимые параметры, получаемые в ходе моделирования, представлены в таблице 1.

**Таблица 1.**

**Основные фармакокинетические параметры и их клиническое значение для индивидуализации терапии**

Параметр	Формула расчёта	Клиническое значение
Объём распределения (Vd)	$Vd = \text{Доза} / C_0$	Отражает степень связывания с тканями; используется для расчета нагрузочной дозы
Клиренс (CL)	$CL = k_{el} \times Vd$	Характеризует способность организма элиминировать препарат; определяет скорость достижения равновесия
Период полувыведения (T1/2)	$T_{1/2} = 0,693 / k_{el}$	Определяет время достижения равновесной концентрации и интервал между введениями
Площадь под кривой (AUC)	$AUC = C_0 / k_{el}$	Интегральный показатель экспозиции организма к препарату; используется для оценки биодоступности

Расчет оптимальной дозы основывается на целевых значениях этих параметров. Так, поддерживающая доза ( $D_m$ ), необходимая для поддержания заданной равновесной концентрации ( $C_{ss}$ ), рассчитывается с учетом клиренса и биодоступности (FF):

$$D_m = C_{ss} \times CL \times \tau, D_m = F C_{ss} \times CL \times \tau,$$

где  $\tau$  — интервал дозирования. Для быстрого достижения терапевтического уровня препарата используется нагрузочная доза ( $D_l$ ), зависящая от объема распределения:

$$D_l = C_{ss} \times V_d F [5,9], D_l = F C_{ss} \times V_d [5,9].$$

Особую значимость математическое моделирование приобретает в рамках популяционного подхода (PopPK), который позволяет оценить типичные значения параметров в популяции и их вариабельность, связанную с ковариатами (возраст, вес, функция почек). Исследования показывают, что применение PopPK-моделей (реализованных в программных пакетах NONMEM, Monolix) для коррекции дозирования меропенема у недоношенных новорожденных или лидокаина у взрослых пациентов позволяет значительно повысить вероятность достижения целевых концентраций и снизить риск токсических эффектов [5, 11]. Например, учет ковариат в модели фармакокинетики ванкомицина у пациентов с нарушением функции почек демонстрирует высокую точность предсказания индивидуальных значений клиренса и концентрации по сравнению со стандартными номограммами [7, 8].

Ограничением классических камерных моделей является их относительная упрощенность. Для препаратов с нелинейной фармакокинетикой (например, фенитоин) более адекватной является модель, основанная на уравнении Михаэлиса-Ментен, которая описывает насыщаемые процессы метаболизма [4]. Развитием данного направления является создание физиологически обоснованных фармакокинетических (PBPK) моделей, интегрирующих анатомо-физиологические данные организма и физико-химические свойства препарата, что позволяет экстраполировать данные с взрослых пациентов на педиатрические или гериатрические группы [10, 12].

### **Заключение и выводы**

Математическое моделирование фармакокинетических процессов является фундаментальным инструментом современной клинической фармакологии. Использование однокамерных, двухкамерных и популяционных моделей позволяет формализовать процессы ADME и перейти к персонализированному расчету режимов дозирования. Внедрение данных методов в клиническую практику способствует повышению эффективности терапии и минимизации риска нежелательных реакций, особенно у пациентов с нарушенной функцией органов элиминации. Дальнейшее развитие

направления связано с интеграцией ФК-моделирования, данных фармакогенетики и методов машинного обучения для создания предиктивных систем поддержки принятия врачебных решений.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Петров В. И., Толкачев Б. Е. Количественная клиническая фармакология и пациент-ориентированные технологии здравоохранения: перспективы 2030 // Регуляторные исследования и экспертиза лекарственных средств. 2022. №2. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/kolichestvennaya-klinicheskaya-farmakologiya-i-patsient-orientirovannye-tehnologii-zdravoohraneniya-perspektivy-2030> (дата обращения: 28.02.2026).
2. К. Кунанбай, О. Шабдаров Новые методы в оптимизации фармакотерапии эпилепсии: опыт внедрения байесовского фармакокинетического моделирования // Вестник КазНМУ. 2016. №2. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/novye-metody-v-optimizatsii-farmakoterapii-epilepsii-opyt-vnedreniya-bayesovskogo-farmakokineticheskogo-modelirovaniya> (дата обращения: 28.02.2026).
3. Колбин Алексей Сергеевич, К. С. Радаева Дозирование лекарственных средств в педиатрии: возможные подходы // ВСП. 2023. №4. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/dozirovanie-lekarstvennyh-sredstv-v-pediatrici-vozmozhnye-podhody> (дата обращения: 28.02.2026).
4. Пожарицкая О. Н., Шиков А. Н., Макаров В. Г. ТОКСИКОКИНЕТИКА - МЕТОДОЛОГИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ // Лабораторные животные для научных исследований. 2019. №1. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/toksikokinetika-metodologicheskie-podhody> (дата обращения: 28.02.2026).
5. Бондарева Ирина Борисовна, Зырянов Сергей Кенсаринович, Казанова Александра Михайловна ПОПУЛЯЦИОННАЯ ФАРМАКОКИНЕТИКА МЕРОПЕНЕМА У НЕДОНОШЕННЫХ НОВОРОЖДЕННЫХ // Вестник РАМН. 2021. №5. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/populyatsionnaya-farmakokinetika-meropenema-u-vedonoshennyh-novorozhdennyh> (дата обращения: 28.02.2026).
6. Лазарева Наталья Борисовна, Ших Е. В., Дроздов В. Н., Реброва Е. В. Клинико-фармакологические подходы к оптимизации режима дозирования антибактериальных препаратов в педиатрии // ВСП. 2018. №1. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/kliniko-farmakologicheskie-podhody-k-optimizatsii-rezhima-dozirovaniya-antibakterialnyh-preparatov-v-pediatrici> (дата обращения: 28.02.2026).
7. Раменская Г. В., Шохин И. Е., Лукина М. В., Андрущишина Т. Б., Чукина М. А., Царев И. Л., Варганова О. А., Морозова Т. Е. Параметры фармакокинетики ванкомицина у больных с нарушением функции почек в послеоперационном периоде: сравнение результатов фармакокинетического исследования и математического моделирования // Вестник РГМУ. 2018. №4. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/parametry-farmakokinetiki-vankomitsina-u-bolnyh-s-narusheniem-funksii-pochek-v-posleoperatsionnom-periodе-sravnenie-rezultatov> (дата обращения: 28.02.2026).
8. Раменская Г. В., Шохин И. Е., Лукина М. В., Андрущишина Т. Б., Чукина М. А., Царев И. Л., Варганова О. А., Морозова Т. Е. Математическое моделирование параметров фармакокинетики ванкомицина: возможности и сравнение с результатами

терапевтического лекарственного мониторинга // Биомедицина. 2018. №4. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/matematiceskoe-modelirovanie-parametrov-farmakokinetiki-vankomitsina-vozmozhnosti-i-sravnenie-s-rezultatami-terapevticheskogo> (дата обращения: 28.02.2026).

9. Song X. Modeling of pharmacokinetic/pharmacodynamic parameters in regular intermittent intravenous infusion and translational application of the models in personalized antibiotics dosing. *J Transl Med.* 2025 Jul 19;23(1):806. doi: 10.1186/s12967-025-06832-5. PMID: 40684203; PMCID: PMC12276709.

10. Wu X, Sia JEV, Hai M, Lai X, Li H, Cui C, Liu D. Physiologically Based Pharmacokinetic Model for Older Adults and Its Application in Geriatric Drug Research. *Curr Drug Metab.* 2023;24(3):211-222. doi: 10.2174/1389200224666230509104404. PMID: 37165496.

11. Foong KW, Chaw SH, Lo YL, Loh PS. Population Pharmacokinetics of Intravenous Lidocaine in Adults: A Systematic Review. *Clin Pharmacokinet.* 2024 May;63(5):623-643. doi: 10.1007/s40262-024-01373-4. Epub 2024 May 4. PMID: 38703307.

12. McKenna MT, Weis JA, Quaranta V and Yankeelov TE (2019) Leveraging Mathematical Modeling to Quantify Pharmacokinetic and Pharmacodynamic Pathways: Equivalent Dose Metric. *Front. Physiol.* 10:616. doi: 10.3389/fphys.2019.00616

УДК 53:612.843.311.6:004.43

Копыцкий А.В., Хильманович В.Н., Сацута П.П.

### КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ ОЦЕНКИ ЦВЕТА ТОЧЕЧНОГО ИСТОЧНИКА СВЕТА С ПРОИЗВОЛЬНЫМ СПЕКТРОМ

*Гродненский государственный медицинский университет, г. Гродно*

В статье описывается интерактивное программное решение для определения цвета точечного источника света с произвольным спектром. Вычисление RGB-цвета производится в несколько этапов: получение изображения спектра (либо из файла, либо из наброска зависимости интенсивности от длины волны); преобразование изображения спектра в вектор; применение алгоритма, описанного в [3], для получения итогового цвета в цветовом пространстве XYZ; финальное преобразование цвета в пространство RGB и отображение результата. Решение реализовано на языке программирования R 4.5 с пакетами расширения «plotly», «shiny», «ggplot2». Полученная модель может использоваться как наглядное интерактивное пособие при обучении студентов-медиков медицинской и биологической физике.

**Ключевые слова:** преобразование цвета, цветовое пространство, дальтонизм, язык программирования R, медицинская и биологическая физика.

Kapytski A.V., Khilmanovich V.N., Satsuta P.P.

### A COMPUTER MODEL FOR ASSESSING THE COLOR OF A POINT LIGHT SOURCE WITH AN ARBITRARY SPECTRUM

*Grodno State Medical University, Grodno*

This article describes an interactive software solution for determining the color of a point light source with an arbitrary spectrum. RGB color calculation is performed in several stages: obtaining a spectrum image (either from a file or from a sketch of the intensity-wavelength dependence); converting the spectrum image to a vector; applying the algorithm described in [3] to obtain the final color in the XYZ color space; finally converting the color to RGB space and displaying the result. The solution is implemented in the R 4.5 programming language with the "plotly," "shiny," and "ggplot2" extension packages. The resulting model can be used as a visual interactive aid in teaching medical and biological physics to medical students.

**Keywords:** color transformation, color space, color blindness, R programming language, Medical and Biological Physics.

Одна из тем, изучаемых в курсе медицинской и биологической физики – биофизические основы зрительной рецепции. В ходе рассмотрения данной темы студенты знакомятся с трихроматической теорией цветовосприятия, согласно которой видимый цвет источника определяется не только спектром излучения тела, но и спектрами действия (чувствительностями) 3 типов колбочек («L», «M» и «S») в сетчатке глаза к различным длинам волн. И наглядное интерактивное пособие, демонстрирующее связь цвета со спектрами, будет крайне актуальным.

#### **Цель работы**

Цель работы – создание компьютерной модели оценки цвета точечного источника излучения с произвольным спектром и внедрение данной модели в учебный процесс дисциплины «Медицинская и биологическая физика» в медицинском вузе.

### Материал и методы

Модель реализована в виде программы на языке программирования R 4.5. Используются следующие пакеты расширения: «plotly» – для реализации интерактивного полотна для рисования набросков спектров и их сохранения в виде графических файлов, «shiny» – для реализации интерфейса всего решения (размещения флажков-переключателей, графиков, кнопок), «ggplot2» – для отображения графиков, «openxlsx» – для чтения данных из файлов в формате «xlsx», «stats» – для стандартных и матричных операций. Для вычисления цвета в цветовом пространстве LMS используются следующие уравнения [3]:

$$L = \Delta\lambda \sum_i \bar{l}(\lambda)_i I(\lambda)_i, M = \Delta\lambda \sum_{\lambda_i} \bar{m}(\lambda)_i I(\lambda)_i, S = \Delta\lambda \sum_{\lambda_i} \bar{s}(\lambda)_i I(\lambda)_i, \quad (1)$$

где  $L, M, S$  – координаты итогового цвета в цветовом пространстве LMS,  $\Delta\lambda$  – шаг интегрирования,  $\bar{l}(\lambda)_i, \bar{m}(\lambda)_i, \bar{s}(\lambda)_i$  – удельные спектральные чувствительности на длине волны  $\lambda_i$ ,  $I(\lambda)_i$  – нормированная (в диапазон 0–1) интенсивность излучения источника на этой же длине волны.

После получения координат цвета в LMS-представлении для их отображения на экране монитора выполняется перевод цвета в пространство XYZ, и далее – в RGB через серию матричных операций [2,4]:

$$\begin{bmatrix} X \\ Y \\ Z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.8951 & 0.2664 & -0.1614 \\ -0.7502 & 1.7135 & 0.0367 \\ 0.0389 & -0.0685 & 1.0296 \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} L \\ M \\ S \end{bmatrix}, \quad (2)$$

$$\begin{bmatrix} r \\ g \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3,2405 & -1,5371 & -0,4985 \\ -0,6993 & 1,8760 & 0,0416 \\ 0,0556 & -0,2042 & 1,0572 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} X \\ Y \\ Z \end{bmatrix}, \quad (3)$$

где  $X, Y, Z$  – координаты цвета в пространстве XYZ,  $r, g, b$  – «сырые» координаты цвета в RGB-пространстве.

Для перевода «сырых» координат в стандартные значения  $R, G, B$  используется гамма-коррекция, проводимая по формулам [4]:

$$R = r^{\frac{1}{\gamma}}, G = g^{\frac{1}{\gamma}}, B = b^{\frac{1}{\gamma}}, \quad (4)$$

где показатель  $\gamma$  выбран равным 2,2. Полученные таким образом значения RGB могут быть отображены на цифровом дисплее. Отметим, что матрица перехода от LMS к XYZ не единственная возможная – в нашем случае используется матрица из [4]. Спектры действия L-, M-, S-колбочек взяты из [1].

### Результаты и обсуждение

Нами было разработано программное решение для оценки цвета точечного источника света по его спектру. Внешний вид решения представлен на рисунке 1.

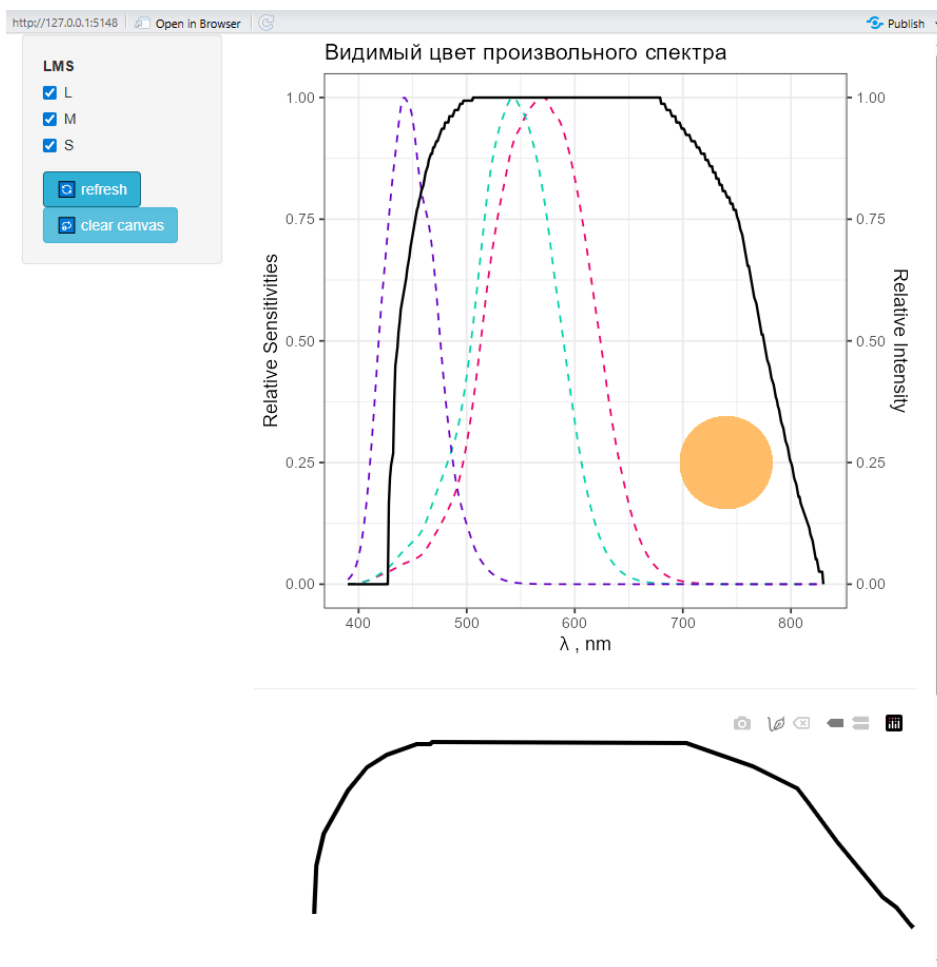


Рисунок 1. Интерфейс решения

Интерфейс реализован при помощи библиотеки «shiny», позволяющей отображать в одном окне графики и интерактивные элементы управления ими. Данная библиотека поддерживает также работу с объектами, реализованными библиотекой «plotly», в частности, с объектом «plot\_ly». Последний используется в нашей программе для создания полотна для рисования.

В интерфейсе присутствуют 3 элемента: блок флажков-переключателей и кнопок управления. В указанном блоке пользователь выбирает какие типы колбочек используются

для построения изображения (по умолчанию, выбраны 3 типа колбочек). Нажатие на кнопку «clear canvas» очищает полотно с наброском спектра источника. Кнопка «refresh» запускает работу модели оценивания цвета по спектру излучения источника. Предполагается, что изображение спектра хранится в файле с названием «drawn\_spectrum.png», если такого файла в рабочей директории программы нет, то пользователю будет предложено нарисовать набросок спектра и сохранить его в указанный каталог. При оценке цвета спектр сначала извлекается из графического файла. При этом предполагается, что интенсивность излучения на данной длине волны (задаваемой отсчётом числа пикселей от левого края изображения) пропорциональна вертикальной позиции крайнего верхнего не белого пикселя для данной длины волны. По окончании расчётов по модельным уравнениям результаты работы выводятся в центральной части окна в виде кривых (L-, M-, S-спектров действия и спектра источника излучения) и круга в правом нижнем квадранте, отображающего вычисленный цвет.

С методической точки зрения, модель, реализованная в программе, помогает решать 2 проблемы. Одна из них – улучшение наглядности при объяснении трихроматической теории формирования цвета и феномена дальтонизма. Вторая – понимание обучающимися понятия «спектра», как зависимости интенсивности излучения от длины волны, и того, как спектр источника (объективная характеристика) влияет на его цвет (субъективную характеристику). Реализованная модель, благодаря простоте языка программирования «R» может быть легко модернизирована: так можно отображать спектры различных источников излучения (например, различных ламп), цвет абсолютно чёрного цвета при заданной температуре. В силу этого, в настоящее время программа используется как наглядное пособие при изучении тем «Законы теплового излучения» и «Основы зрительной рецепции».

### **Заключение и выводы**

1. Программа, реализующая модель вычисления цвета источника излучения по его спектру, обладает доступным интерактивным интерфейсом, позволяющим, использовать её в качестве наглядного пособия по медицинской и биологической физике.

2. Структура программы и простота программирования на «R» позволяют модернизировать полученное решение.

### **ЛИТЕРАТУРА**

1. 2-deg fundamentals based on the Stiles & Burch 10-deg CMFs (adjusted to 2-deg) [Электронный ресурс] // CVRL main. URL: <http://www.cvrl.org/cones.htm> (дата обращения: 09.12.2025).

2. Specification ICC.1:2010 (Profile version 4.3.0.0). Image technology colour management – Architecture, profile format, and data structure : international standard / International Color Consortium. – Foster City (CA), 2010. – P. 103.
3. Viénot F., Le Rohellec J. Colorimetry and Physiology – The LMS Specification // Digital Color. John Wiley & Sons, Ltd, 2012. – P. 15.
4. XYZ to RGB [Электронный ресурс]. URL: [http://www.brucelindbloom.com/index.html?Eqn\\_XYZ\\_to\\_RGB.html](http://www.brucelindbloom.com/index.html?Eqn_XYZ_to_RGB.html) (дата обращения: 09.12.2025).

УДК 615.01:582.943:612.085

Кубор Е.С., Терлецкая В.А., Лукашов Р.И.

**СКРИНИНГ МОЛЕКУЛЯРНЫХ МИШЕНЕЙ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКОГО  
ДЕЙСТВИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ РАСТЕНИЙ РОДА  
LAMIAM С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ IN SILICO**

*Белорусский государственный медицинский университет, г. Минск*

В работе представлен *in silico*-анализ молекулярных мишеней действия биологически активных соединений растений рода *Lamium* – бетаина пипеколиевой кислоты и транс-4-гидроксипипеколиевой кислоты. В качестве трех наиболее энергетически выгодных мишеней для бетаина пипеколиевой кислоты были идентифицированы L-пролин цис-4-гидроксилаза, транс-3-гидрокси-L-пролиндегидратаза и домен ядерного рецептора PPAR-гамма человека, а для транс-4-гидроксипипеколиевой кислоты – сахарная фосфатаза суперсемейства HAD, киназа устойчивости к фософомицину FomA и белок CbbY. Значения энергии связывания для сформированных комплексов находятся в диапазоне -4,2...-6,2 ккал/моль, что соответствует умеренной аффинности. Анализ межмолекулярных контактов выявил преобладание водородных и электростатических взаимодействий исследуемых соединений.

**Ключевые слова:** *Lamium*, биологически активные соединения, молекулярные мишени, молекулярный докинг, энергия связывания.

E. S. Kubor, V. A. Terletsкая, R. I. Lukashou

**SCREENING MOLECULAR TARGETS OF PHARMACOLOGICAL ACTION OF  
BIOLOGICALLY ACTIVE SUBSTANCES FROM LAMIAM PLANTS USING  
IN SILICO METHODS**

*Belarusian State Medical University, Minsk*

This paper presents an *in-silico* analysis of the molecular targets of the biologically active compounds of plants of the genus *Lamium* – betaine pipercolic acid and trans-4-hydroxypipercolic acid. L-proline cis-4-hydroxylase, trans-3-hydroxy-L-proline dehydratase, and the nuclear receptor domain of human PPAR-gamma were identified as the three most energetically favorable targets for betaine pipercolic acid, while for trans-4-hydroxypipercolic acid, the sugar phosphatase of the HAD superfamily, the phosphomycin resistance kinase FomA, and the CbbY protein were identified. Binding energies for the formed complexes range from -4.2 to -6.2 kcal/mol, corresponding to moderate affinity. Analysis of intermolecular contacts revealed a predominance of hydrogen and electrostatic interactions between the studied compounds.

**Key words:** *Lamium*, biologically active compounds, molecular targets, molecular docking, binding energy.

Поиск новых биологически активных соединений растительного происхождения остается одним из приоритетных направлений современной фармацевтической химии и драг-дизайна. Растения рода *Lamium* содержат биологически активные вещества аминокислотной и бетаиновой природы, включая бетаин пипеколиевой кислоты и транс-4-гидроксипипеколиевую кислоту, фармакологический потенциал которых изучен недостаточно. Применение методов скрининга молекулярных мишеней *in silico* дает возможность оценить потенциальные механизмы действия и определить перспективность дальнейших экспериментальных исследований.

### **Цель работы**

Провести скрининг молекулярных мишеней фармакологического действия *in silico* бетаина пипеколиевой кислоты и транс-4-гидроксипипеколиевой кислоты.

### **Материал и методы**

Для проведения исследования использовали программное обеспечение ChemDraw Professional 15.1, а также онлайн-ресурсы PASS Online, SEA Search Server, CB-Dock2 и Protein Data Bank (PDB).

### **Результаты и обсуждения**

На момент проведения исследования в доступных базах данных отсутствуют экспериментально подтвержденные сведения о конкретных биологических мишенях действия бетаина пипеколиевой кислоты, за исключением данных ресурса SEA Search Server. В качестве потенциальной мишени была предложена пролиниминопептидаза PIP\_SERMA из бактерии *Serratia marcescens*. Полученное значение энергии связывания ( $-2,3$  ккал/моль) указывает на низкую степень сродства лиганда к белковой мишени, что свидетельствует о малой термодинамической стабильности формируемого комплекса.

В связи с отсутствием валидированных экспериментальных данных был применен подход *in silico* к выбору белков-мишеней, основанный на анализе структурно и функционально родственных соединений, а также результатах прогнозирования биологической активности и молекулярного докинга. В качестве модельных систем отобраны белки, способные взаимодействовать с полярными низкомолекулярными лигандами и ранее использованные в исследованиях молекулярного докинга аналогичных по строению соединений. Выбранные мишени используются исключительно для оценки потенциальной аффинности, характера межмолекулярных взаимодействий и выявления закономерностей связи «структура-действие».

Результаты молекулярного докинга показали, что бетаин пипеколиевая кислота способна формировать комплексы различной энергетической стабильности с белковыми мишенями, при этом значения энергии связывания находятся в диапазоне от  $-4,4$  до  $-6,2$  ккал/моль. В таблице представлены 10 белков-мишеней с наибольшей аффинностью к исследуемому соединению.

**Таблица 1**

**Молекулярный докинг бетайна пипеколиевой кислоты**

Белок	Код PDB	Энергия связывания, ккал	Наилучший карман	Объем полости (Å <sup>3</sup> )	Ключевые АК
Оксидоредуктаза L-пролин-цис-4-гидроксилаза	4P7X	-6.207	1 из 6	-	TYR32 PHE35 TRP40 VAL57 ARG93 ILE103 HIS106 ASP108
Ядерный рецептор PPAR-гамма	2P4Y	-5,921	3 из 5	1598	PHE226 PRO227 CYS285 GLN286 ARG288 GLU291 LEU333
Транс-3-гидрокси-L-пролиндегидратаза	6R76	-5,715	3 из 5	1550	GLU68 HIS72 ALA73 ASP74 TYR205 PHE346 LEU347
Домен связывания лиганда GluA2	3LSF	-5,703	3 из 6	590	LEU12 GLU13 THR91 ARG96 GLY141 ALA175 ARG203 TYR220
Полноразмерный НТПГ у Escherichia coli	2IOQ	-5,678	3 из 5	1624	LYS238 TRP263 HIS265 ASN266 GLN272 TYR274 LEU352 ARG355
Гликогенсинтаза-3	1I09	-5,509	2 из 5	1424	PHE67 ARG96 ARG180 GLY202 SER203 VAL214
Рецепторная тирозинкиназа	1M17	-5,442	1 из 5	665	LEU694 PHE699 LYS721 GLU738 ILE765 ASP831
Кристаллическая структура	4UAV	-5,412	3 из 5	98	ASP82 ASP84 GLY85 ASP89

СббУ					THR90 GLU91 LYS92
Сывороточный альбумин человека	1A06	-5,408	2 из 6	7417	HIS146 TYR148 PHE206 ARG209 LEU238 VAL241
Комплекс PPARalpha/A L26-29	5HYK	-5,343	1 из 5	3411	MET220 PHE273 HIS274 CYS276 GLN277 THR279 GLU282 THR283

С целью предварительной оценки возможных направлений фармакологического действия транс-4-гидроксипипеколевой кислоты был проведен анализ потенциальных мишеней с помощью методов вычислительного таргетного прогнозирования в PASS Online.

Результаты молекулярного докинга подтвердили способность соединения формировать комплексы с рядом ферментативных и рецепторных белков. Значения энергии связывания находились в диапазоне от -4,8 до -6,1 ккал/моль, что соответствует умеренной аффинности. В таблице представлены 10 белков-мишеней с наиболее выгодными показателями связывания с исследуемым соединением.

**Таблица 2**

**Молекулярный докинг транс-4-гидроксипипеколевой кислоты**

Белок	Код PDB	Энергия связывания, ккал	Наилучший карман	Объем полости (Å <sup>3</sup> )	Ключевые АК
Сахарная фосфатаза, суперсемейство HAD	2HX1	-6,107	2 из 5	2361	SP19 ALA20 PHE21 GLY22 VAL51 THR52 ASN53 ASP54 ASN167
Киназа устойчивости к фосфомицину FomA	3QUO	-6,042	3 из 5	153	VAL-5 ARG-3 GLY-2 HIS0 MET1 ASP4 LEU157 PRO158 VAL160 GLU161 GLY162 ARG163

Кристаллическая структура CbbY	4UAV	-5,943	3 из 5	98	ASP82 GLY85 ASP89 SER198 LYS233	CYS83 VAL88 THR90
Транспортер ASCT1 человека	8J0G	-5,843	3 из 6	276	LEU75 SER78 SER79 PHE80 LEU83	
Комплекс PPARalpha/AL26-29	5HYK	-5,826	1 из 5	3411	ASN219 VAL270 PHE273 SER280 GLU282	MET220 ARG271 GLN277
Бетаинальдегиддегидрогеназа	4A0M	-5,813	4 из 8	2010	LEU106 ILE155 ASN159 MET164 LYS182	ASP110 TRP158 TYR160
Домен связывания лиганда GluA2	3LSF	-5,807	3 из 5	590	ILE11 GLU13 SER14 MET18 THR91 ARG96	TYR61
Карбоангидраза II человека	3HS4	-5,741	1 из 5	349	TRP5 TYR7 ASN62 HIS64 GLN92 VAL121 LEU141	ALA65 GLU106 PHE131
Гликогенсинтазакиназа-3	1I09	-5,732	2 из 5	1424	HE67 ARG180 SER203 VAL214 TYR216	ARG96 GLY202 ALA204

### Заключение и выводы

Для обоих соединений характерен диапазон энергий связывания, соответствующей умеренной аффинности и модулирующему характеру взаимодействия, что указывает на отсутствие выраженной селективной ингибирующей активности и предполагает участие в регуляции метаболических процессов. Умеренные значения энергии и отсутствие

выраженного гидрофобного «якоря» свидетельствует о формировании лиганд-белковых комплексов, не характерных для высокоселективных ингибиторов. Распределенный характер взаимодействий с ферментами метаболического профиля позволяет предположить регуляторный, а не блокирующий механизм действия. По данным *in silico*-прогнозирования для бетаина пипеколиевой кислоты предполагается метаболическая регуляторная активность, участие в поддержании клеточного редокса-баланса и возможное модулирующее влияние на рецепторные сигнальные системы. Для транс-4-гидроксипипеколиевой кислоты прогнозируется метаболическая регуляторная активность и способность проявлять свойства мягкого мультитаргетного модулятора, реализующего влияние через воздействие на ферментативные каскады, процессы клеточного метаболизма и регуляцию сигнальных путей.

Для бетаина пипеколиевой кислоты в активных центрах белков-мишеней преобладают остатки Asp, Glu, Arg, Lys и His, что указывает на доминирование электростатических и водородных взаимодействий и согласуется с высокой полярностью и ионной природы молекулы. Для транс-4-гидроксипипеколиевой кислоты характерно преобладание Asp, Thr, Ser и Glu, отражающее ведущую роль водородных связей при сохранении вклада электростатической стабилизации, наличие гидроксильной группы способствует формированию дополнительной сети водородных связей и расширению спектра взаимодействий.

В целом, преобладание полярных и заряженных аминокислотных остатков подтверждает, что стабилизация комплексов осуществляется преимущественно за счет водородных и электростатических взаимодействий, что соответствует умеренной аффинности и модулирующему типу действия исследуемых соединений.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Lamium Plants [Электронный ресурс] / MDPI — Режим доступа: <https://www.mdpi.com/1420-3049/24/10/1913> — Дата доступа: 06.10.2025
2. Pípecolic Acid [Электронный ресурс] / PubChem — Режим доступа: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Pípecolic-acid> — Дата доступа: 06.10.2025
3. Betaine [Электронный ресурс] / PubChem — Режим доступа: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Betaine> — Дата доступа: 06.10.2025
4. Way2Drug Predictive services [Электронный ресурс] / PASS Online — Режим доступа: <https://way2drug.com/PassOnline/> — Дата доступа: 20.11.2025
5. Similarity ensemble approach services [Электронный ресурс] / SeaSearch — Режим доступа: <https://sea.bkslab.org/> — Дата доступа: 20.11.2025
6. RCSB Protein Data Bank [Электронный ресурс] / RCSB PDB — Режим доступа: <https://www.rcsb.org/> — Дата доступа: 20.11.2025
7. CbDock2 [Электронный ресурс] / CaoLab — Режим доступа: <https://183.56.231.194:8001/cb-dock2/php/blinddock.php> — Дата доступа: 20.11.2025

УДК 004.4:61

Лазукова К.С.<sup>1</sup>, Голденок Е.Е.<sup>1</sup>, Комиссарова В. А.<sup>1,2</sup>, Лукьянова Н.А.<sup>1</sup>, Орехова К.В.<sup>1</sup>

**ПРОТОТИП АЛГОРИТМИЧЕСКОГО ПОМОЩНИКА ОНКОЛОГА ПО  
ВЕРИФИКАЦИИ СТАДИИ И НАЗНАЧЕНИЮ ЛЕЧЕНИЯ ПРИ РАКЕ ЯИЧНИКОВ**

<sup>1</sup>*Красноярский государственный медицинский университет имени профессора  
В.Ф. Войно-Ясенецкого, г. Красноярск*

<sup>2</sup>*Красноярский краевой клинический онкологический диспансер им. А.И. Крыжановского,  
г. Красноярск*

Среди онкологических заболеваний женской половой сферы рак яичников входит в тройку наиболее часто диагностируемых заболеваний. Сложность выбора тактики обусловлена большим объемом информации, которую необходимо учитывать согласно современным рекомендациям: стадию процесса, молекулярно-генетические особенности и персонализированные подходы. Цель исследования — разработка прототипа приложения для автоматизированной верификации стадии рака яичника и формирования рекомендаций по лечению на основе действующих клинических рекомендаций Минздрава РФ. Архитектура приложения модульная и включает блоки ввода пред- и послеоперационных данных, а также модуль формирования плана лечения. Представлены результаты создания десктопного приложения и его первичного тестирования. Оно автоматизирует определение стадии по системам FIGO и TNM, учитывает гистологический тип, маркеры (BRCA1/2, HRD) и вычисляет индекс перитонеального канцероматоза для прогнозирования циторедукции. Разработанный прототип демонстрирует возможность успешной интеграции клинических алгоритмов в программную среду для поддержки врачебных решений.

**Ключевые слова:** рак яичников, система поддержки принятия врачебных решений, клинические рекомендации.

Lazukova K.S.<sup>1</sup>, Goldenok E.E.<sup>1</sup>, Komissarova V.A.<sup>1,2</sup>, Lukyanova N.A.<sup>1</sup>, Orekhova K.V.<sup>1</sup>  
**A PROTOTYPE ALGORITHMIC ASSISTANT FOR ONCOLOGISTS TO VERIFY  
STAGING AND DETERMINE TREATMENT FOR OVARIAN CANCER**

<sup>1</sup>*Prof. V.F. Voino-Yasenetsky Krasnoyarsk State Medical University, Krasnoyarsk*

<sup>2</sup>*Krasnoyarsk Regional Clinical Oncology Dispensary named after A.I. Kryzhanovsky,  
Krasnoyarsk*

Among gynecological cancers, ovarian cancer is among the three most frequently diagnosed malignancies. The complexity of choosing a treatment strategy is due to the large amount of information that must be considered according to modern recommendations: the stage of the disease, molecular genetic features, and personalized approaches. The aim of the study is to develop a prototype application for the automated verification of ovarian cancer stage and the generation of treatment recommendations based on the current clinical guidelines of the Ministry of Health of the Russian Federation. The application architecture is modular and includes input blocks for pre- and postoperative data, as well as a module for generating a treatment plan. The results of creating the desktop application and its initial testing are presented. It automates the determination of the stage according to the FIGO and TNM systems, takes into account the histological type, markers (BRCA1/2, HRD), and calculates the peritoneal cancer index to predict cytoreduction. The developed prototype demonstrates the possibility of successfully integrating clinical algorithms into a software environment to support medical decision-making.

**Keywords:** ovarian cancer, clinical decision support system, clinical guidelines.

Злокачественные новообразования яичников представляют собой актуальную проблему современной онкогинекологии. Рак яичников занимает 6 место по смертности среди опухолей женской репродуктивной системы. Распространённость рака яичников в

2024 году достигла 84,1 на 100 тыс. женского населения, что демонстрирует устойчивый рост по сравнению с предыдущими годами, в 2014 году — 70,4 на 100 тыс. [1, стр.16]. Доля больных раком яичников, состоящих на учёте 5 лет и более, в 2024 году составила 67,1% [1]. Несмотря на положительную динамику выживаемости, данная локализация остаётся прогностически неблагоприятной по сравнению с рядом других опухолей женской репродуктивной системы. На выживаемость влияют стадия процесса, объем хирургического лечения, величины остаточной опухоли и выбор метода лечения на первом этапе.

Современные клинические рекомендации включают большое разнообразие алгоритмов для диагностики и терапии, учитывающих стадии, молекулярно-генетические аспекты и персонализацию лечения. На практике, чтобы выбрать из этого многообразия наиболее подходящую тактику, необходимо обрабатывать большой объем информации и учитывать параметры конкретного пациента [2]. Создание навигатора по подбору терапии и цифровизация клинических рекомендаций позволят ускорить и структурировать выбор тактики лечения, повысить точность, сократить время для проверки карт пациентов отделом контроля качества медицинской помощи. Подобные специализированные платформы уже вводятся по другим нозологиям в системах поддержки принятия врачебных решений [3].

### **Цель исследования**

Цель исследования является разработка прототипа десктопного приложения для автоматизированной верификации стадии рака яичника и формирования рекомендаций по лечению на основе действующих клинических рекомендаций Минздрава РФ [4]. Работа выполняется для онкологического сообщества Красноярского края. Создаваемый вспомогательный инструмент призван оптимизировать стадирование, обеспечить помощь врачу при выборе тактики лечения согласно клиническим рекомендациям и повысить эффективность внутреннего контроля качества.

### **Материал и методы**

Для исследования были использованы клинические рекомендации Минздрава РФ по лечению рака яичников [4], классификация TNM (8-е издание) [5], система стадирования FIGO, а также методика расчёта индекса перитонеального канцероматоза (PCI). Программная реализация клинического навигатора выполнена на языке Python 3.11 с использованием кроссплатформенной библиотеки для создания графических интерфейсов PyQt6 [6]. Выбор данной библиотеки обусловлен её широкими возможностями для построения многооконных приложений с пользовательским интерфейсом и высокой

стабильностью работы в различных операционных средах. Разработка велась в интегрированной среде разработки PyCharm Professional.

### Результаты и обсуждение

До работы над приложением была создана блок-схема по клиническим рекомендациям [4], представляющая алгоритмы определения стадии рака и выбора линии терапии, количество сценариев – 21. Программный прототип помощника онколога выполняет поэтапную обработку полученных непосредственно от врача диагностических данных для последующей верификации стадии и выбора тактики терапии. Первый этап заключается в вводе исходных данных до оперативного вмешательства, таких как половозрастные характеристики, результаты лабораторных и инструментальных исследований, сведения о молекулярном статусе опухоли. Благодаря интерфейсу, включающему стандартизированные поля, минимизируется вероятность пропуска клинических параметров (рис. 1).

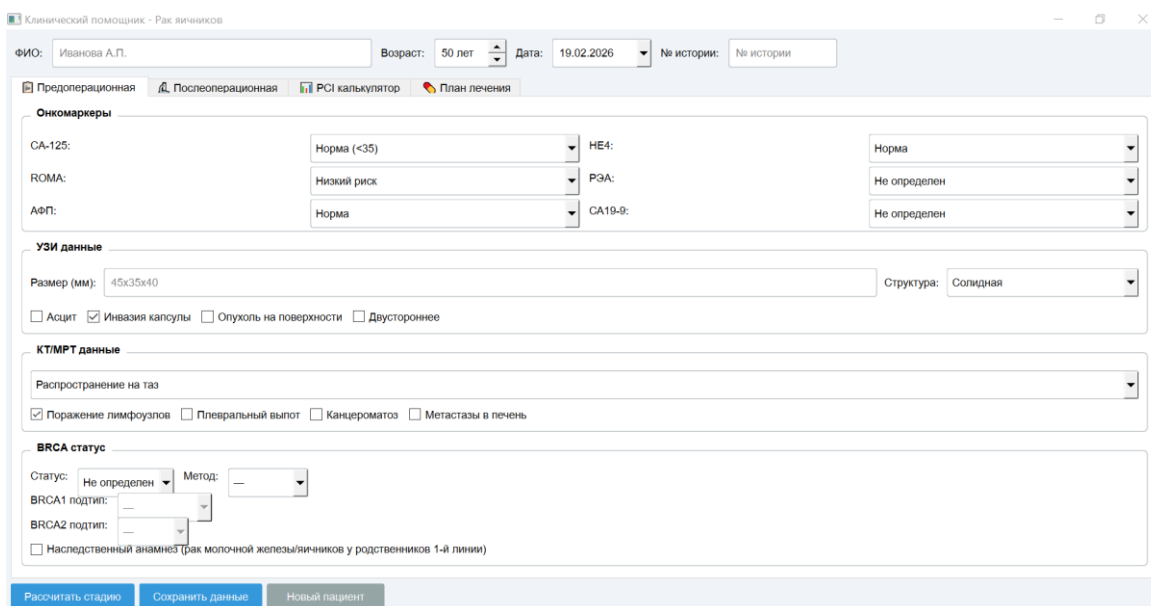


Рисунок 2. Интерфейс модуля предоперационной диагностики

Второй этап предусматривает ввод послеоперационных данных. Врач вносит информацию о проведенной операции и наличии остаточной опухоли, результаты патоморфологического исследования, сведения о распространенности процесса, состоянии лимфатических узлов и дополнительные параметры. Данная информация необходима для уточнения стадии заболевания. Третий этап осуществляет вычисление индекса перитонеального канцероматоза (PCI). Итоговый показатель выводится в результате суммирования оценки поражения 13 анатомических областей по балльной системе и

дополняется клинической интерпретацией результата (рис.2). Заключительный этап осуществляет автоматизированную верификацию стадии рака яичников и формирование оптимальной тактики лечения (рис. 3). Алгоритм объединяет данные предоперационной и послеоперационной диагностики, соотносит их с базой клинических правил и выводит вариант тактики лечения, соответствующей действующим клиническим рекомендациям.

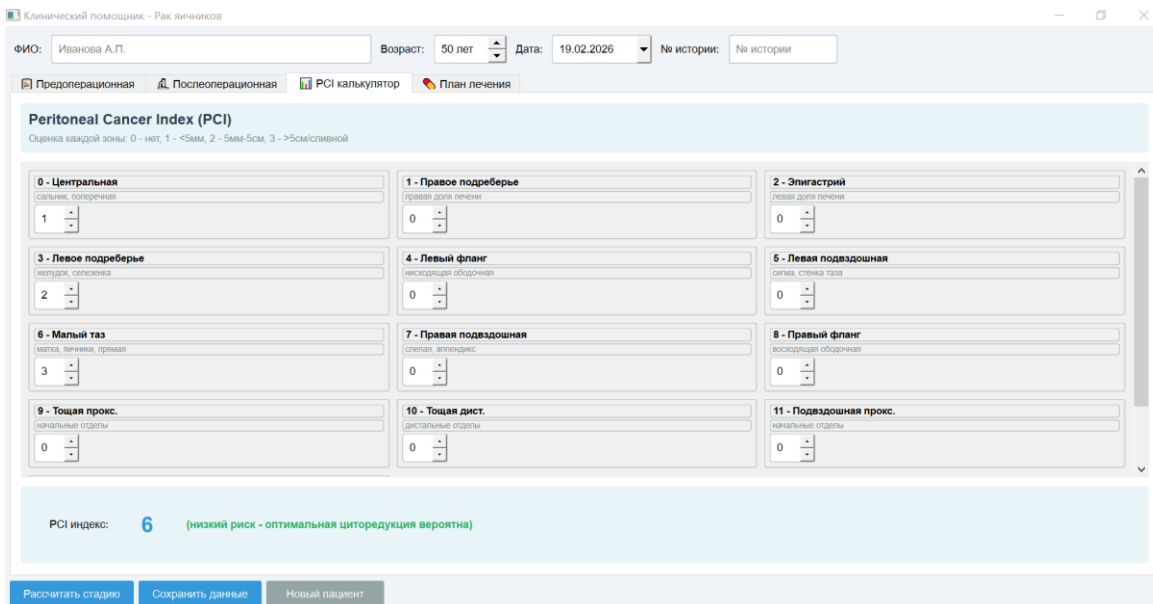


Рисунок 2. Интерфейс калькулятора PCI

Для гарантии корректности работы приложения проводится полное покрытие всех логических ветвей исходной блок-схемы по каждому из 21 сценариев, включая обязательное стресс-тестирование граничных значений числовых показателей.

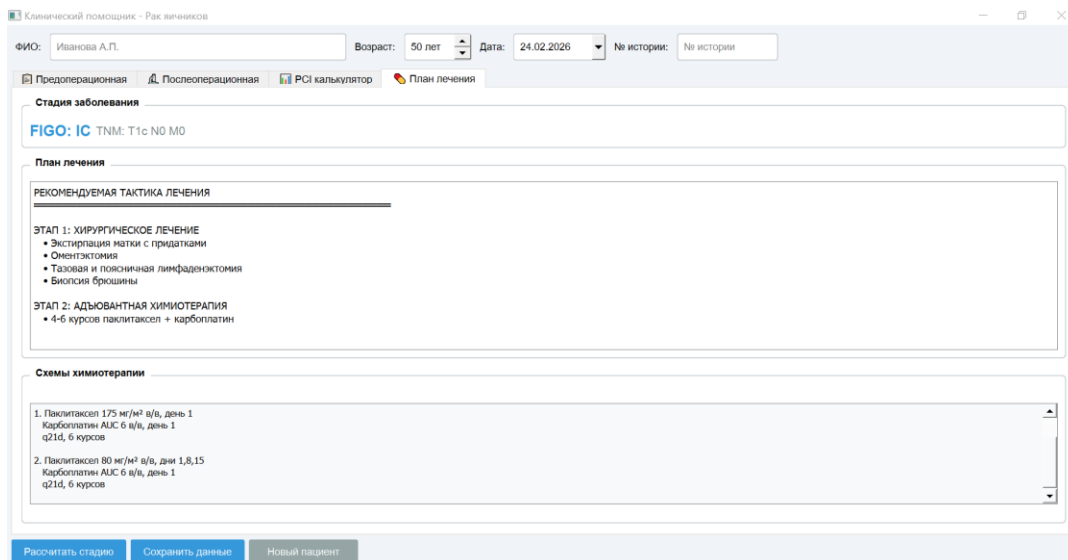


Рисунок 3. Интерфейс вывода результатов верификации стадии и тактики лечения

Итоговым подтверждением качества служит верификационная матрица со 100% совпадением результатов, что математически доказывает полное отсутствие отклонений алгоритма от официального медицинского протокола. Дальнейшее развитие прототипа включает расширение функциональных возможностей и проведение клинической апробации на большем объеме данных с оценкой соответствия автоматически сформированных рекомендаций решениям врачебных комиссий. Планируется совершенствование пользовательского интерфейса с целью повышения удобства работы врача, оптимизации навигации и снижения вероятности ошибок при вводе данных.

### **Заключение и выводы**

Разработано десктопное приложение с интуитивным интерфейсом, которое объединяет ключевые параметры для стадирования и выбора тактики лечения рака яичников. Оно структурирует ввод данных и стандартизирует принятие решений согласно клиническим рекомендациям, минимизируя риск пропуска значимых параметров.

### **ЛИТЕРАТУРА**

1. Состояние онкологической помощи населению России в 2024 году / под ред. А. Д. Каприна, В. В. Старинского, А. О. Шахзадовой. — М. : МНИОИ им. П. А. Герцена — филиал ФГБУ «НМИЦ радиологии» Минздрава России, 2025. — 275 с.
2. Кислов Н. В., Нестеров П. В., Белоногов С. Б. Практические аспекты применения клинических рекомендаций в онкологии // Медицинские технологии. Оценка и выбор. — 2020. — № 2 (40). — С. 43–49.
3. Лебедев Г. С., Фартушный Э. Н., Шадеркин И. А. и др. Создание информационной системы поддержки принятия врачебных решений на основе методов доказательной медицины // Российский журнал телемедицины и электронного здравоохранения. — 2019. — № 1–2. — С. 8–18.
4. Клинические рекомендации. Рак яичников. — М. : Министерство здравоохранения Российской Федерации, 2024. — URL: <https://cr.minzdrav.gov.ru> (дата обращения: 19.02.2026).
5. Павлов К. А., Дубова Е. А., Архипова В. И., Шмаков Р. Г., Пирогова М. М., Лищук С. В. Новая TNM-классификация злокачественных опухолей яичника, маточной трубы и брюшины // Акушерство и гинекология. — 2018. — № 7. — С. 114–119.
6. Горбунов А. В. Разработка приложений на PyQt5 и Qt Designer. — СПб. : БХВ-Петербург, 2021. — 288 с.

### ***Сведения об авторах статьи:***

1. **Лазукова Ксения Сергеевна** – студентка 6 курса специальности 30.05.03 Медицинская кибернетика ФГБОУ ВО КрасГМУ им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России, г. Красноярск, e-mail: [kсени.laz2002@gmail.com](mailto:kсени.laz2002@gmail.com)

2. **Голденок Елена Евгеньевна** – доцент, к.ф.-м.н., доцент кафедры медицинской кибернетики и информатики ФГБОУ ВО КрасГМУ им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России, г. Красноярск, e-mail: egoldenok@gmail.com
3. **Комиссарова Валерия Алексеевна** – заведующий отделом скрининговых программ и профилактики злокачественных новообразований, КГБУЗ «Красноярский краевой клинический онкологический диспансер им. А.И. Крыжановского»; аспирант кафедры онкологии и лучевой терапии с курсом последипломного образования, ФГБОУ ВО КрасГМУ им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России, e-mail: lera21734tkd@gmail.com
4. **Лукьянова Наталья Александровна** – к.ф.-м.н., доцент кафедры медицинской кибернетики и информатики ФГБОУ ВО КрасГМУ им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России, г. Красноярск, e-mail: nalukyanovakrsk@gmail.com
5. **Орехова Кристина Владимировна** – студентка 6 курса специальности 30.05.03 Медицинская кибернетика ФГБОУ ВО КрасГМУ им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России, г. Красноярск, e-mail: kris.orehova02@yandex.ru

УДК 004.94:577.19:547.48:615.281.9

Лахвич Ф.Ф., Чернова М.И.

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ИЗУЧЕНИИ ДОПОЛНИТЕЛЬНОЙ  
БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ НА ПРИМЕРЕ ДИЗАЙНА АЛЬДОНАМИДА  
НА ОСНОВЕ СТРЕПТОЦИДА**

*Белорусский государственный медицинский университет, г. Минск*

Было проведено компьютерное моделирование и молекулярный докинг альдонамидов на основе стрептоцида с биологической мишенью 2WGF, отвечающей за синтез миколовых кислот у микобактерий. Была установлена аффинность к активному центру энзима для альдонамидов всех относительных конфигураций, лидерами оказались альдонамиды стрептоцида с относительной конфигурацией D-гуллозы (-11.56 ккал/моль), D-таллозы (-11.56 ккал/моль), D-аллозы (-11.13 ккал/моль) и D-глюкозы (-11.00 ккал/моль). С помощью расчетных методов было установлено, что модификация стрептоцида путем образования амида альдоновых кислот повышает растворимость вещества в воде.

**Ключевые слова:** глюконамид стрептоцида; зависимость «строение – активность»; молекулярный докинг.

Lakhvich T.T., Charnova M.I.

**COMPUTER MODELING IN THE STUDY OF ADDITIONAL BIOLOGICAL  
ACTIVITY OF ALDONAMIDE-BASED STREPTOCIDE ANALOGUE**

*Belorussian state medical university, Minsk*

Computer modeling and molecular docking of streptocide-based aldonamides with the biological target 2WGF, responsible for the synthesis of mycolic acids in mycobacteria, were conducted. The affinity for the enzyme's active site was determined for aldonamides of all relative configurations. The leaders were streptocide aldonamides with the relative configuration of D-gullose, (-11.56 kkal/mol), D-tallose (-11.56 kkal/mol), D-allose (-11.13 kkal/mol) and D-glucose (-11.00 kkal/mol). Modifying streptocide by forming an amide of aldonic acids was found to increase the substance's solubility in water.

**Keywords:** Molecular Docking; SAR; Streptocide Gluconamide.

В настоящее время методы молекулярного моделирования и докинга становятся все более важными инструментами в разработке новых лекарственных средств. Они позволяют ускорить процесс поиска новых биологически активных молекул, одновременно сокращая финансовые затраты на последующие этапы исследований [1]. Особую значимость компьютерные методы приобретают в контексте поиска новых противомикробных лекарственных средств (ЛС). Во всем мире наблюдается рост резистентности бактерий к существующим ЛС. Довольно остро стоит вопрос резистентности возбудителя туберкулеза *M. tuberculosis* к противотуберкулезным лекарственным препаратам (ПТЛП). По данным Всемирной организации здравоохранения в 2024 году зарегистрировано 390 000 новых случаев туберкулеза с множественной лекарственной устойчивостью (МЛУ-ТБ), который характеризуется устойчивостью к двум самым эффективным ПТЛП - изониазиду и рифампицину. Более половины случаев МЛУ-ТБ приходится на 4 страны: Индия, Китай, Филиппины, Российская Федерация [2]. Поэтому актуальным становится поиск новых классов ПТЛП. Потенциальным кандидатом для исследования антимикобактериальной

активности могут быть производные стрептоцида. Основным механизмом действия стрептоцида основан на ингибировании фермента дигидроптероатсинтазы, отвечающей за синтез фолиевой кислоты. Однако методы молекулярного моделирования и докинга позволяют исследовать возможность воздействия молекул на другие биологические мишени, а также могут спрогнозировать влияние модификации функциональных групп в исходной молекуле на биологический эффект. Уже сейчас известно действие комплекса стрептоцида с металлами на быстрорастущие микобактерии [3]. В нашем исследовании мы изменим стрептоцид путем ацилирования первичной аминогруппы остатками альдоновых кислот. Это позволит модифицировать механизм действия, а также повысить растворимость исходного стрептоцида.

### **Цель работы**

Провести молекулярное моделирование и докинг альдонамидов на основе стрептоцида как веществ с потенциальной противотуберкулезной активностью.

### **Материал и методы**

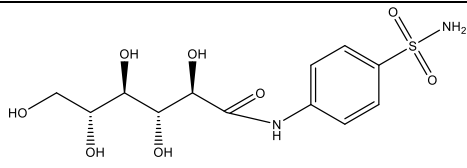
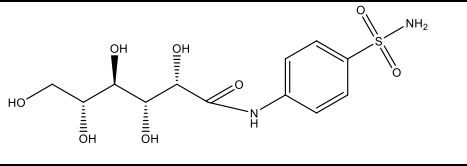
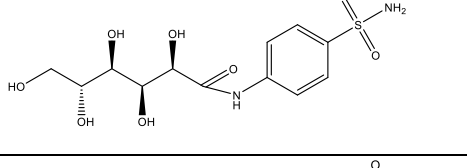
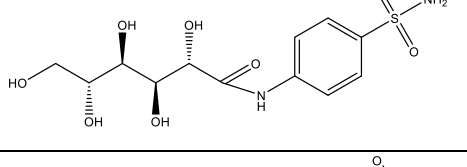
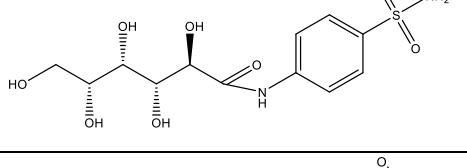
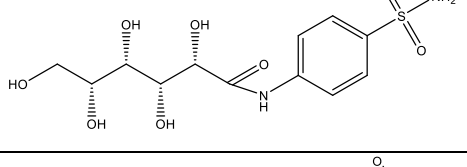
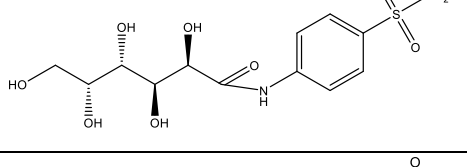
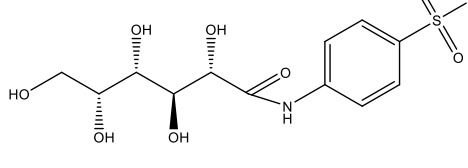
Дизайн структур выполнен с помощью химических программ ChemOffice. Выбор белков-рецепторов проведен из банка данных 3D структур белков и нуклеиновых кислот Protein Data Bank. В качестве белка-рецептора выбраны энзим МТВ-KasA, или Кетоацилсинтаза А (код белка 2WGF, цепь А). Молекулярный докинг *in silico* осуществлен с помощью программы AutoDock4 с использованием полуэмпирического метода расчетов квантовой химии PM6, количество пробегов – 50. Графическое изображение взаимодействия лиганда с рецептором построено с помощью ресурса Proteins Plus [4]. Расчетные физико-химические свойства лиганда получены с помощью онлайн-платформы SwissADME [5].

### **Результаты и обсуждение**

Был проведен молекулярный докинг альдонамидов стрептоцида с активным центром белка-энзима 2WGF. В качестве альдоновых кислот использовались производные D-гексоз. Результаты докинга представлены в таблице 1.

**Таблица 1**

Результаты докинга альдонамидов стрептоцида с активным центром белка 2WGF

Конфигурация альдонамида	Формула	Энергия связывания, ккал/моль
D-all		-11.13
D-alt		-10.48
D-glc		-11.00
D-man		-10.02
D-gul		-11.56
D-ido		-10.32
D-gal		-10.51
D-tal		-11.56

Анализируя данные, приведенные выше, можно сделать вывод, что лиганды со всеми относительными конфигурациями показали аффинность к активному центру белка-

энзима 2WGF. Лидерами среди альдонамидов стрептоцида стали D-gul, D-tal, D-all, D-glc, представляющие собой альдонамиды с относительной конфигурацией D-гуллозы, D-таллозы, D-аллозы и D-глюкозы соответственно. Среди приведенных лигандов наиболее доступным является глюконамид стрептоцида. Способ его получения путем взаимодействия глюконата кальция и стрептоцида описан ранее [6]. Именно глюконамид стрептоцида экономически более целесообразно использовать в дальнейших исследованиях на биологическую активность *in vitro* и *in vivo*.

Мы проанализировали взаимодействия данного лиганда с активным центром белка-энзима 2WGF (рисунок 1).

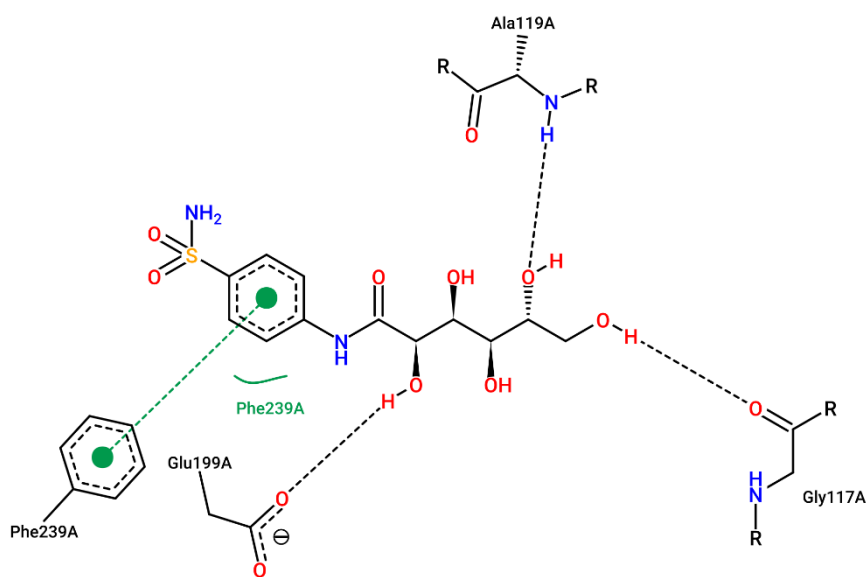


Рисунок 1. Взаимодействие глюконамида с активным центром белка-энзима 2WGF

По данным рисунка 1 можно сделать вывод, что лиганд образует водородные связи за счет гидроксильных групп глюконамида. При этом во взаимодействии участвуют аминокислоты Gly117A, Ala119A, Glu199A. Кроме того, ароматический фрагмент остатка стрептоцида участвует в гидрофобном взаимодействии с аминокислотой Phe239. Таким образом, как остаток замещенной глюконовой кислоты, так и фрагмент стрептоцида участвуют во взаимодействии с активным центром белка-энзима 2WGF.

Введение фрагмента альдонамида позволяет не только изменить механизм взаимодействия, но также повысить растворимость вещества в воде. Так, для стрептоцида растворимость в воде при 25 °C составляет 7.50 мг/мл [7], а для глюконамида стрептоцида расчетная растворимость (согласно онлайн-платформе SwissADME) составляет 524 мг/мл.

### **Заключение и выводы**

На основании приведенных данных были сформулированы следующие выводы:

1. Альдонамиды стрептоцида показали высокую аффинность к активному центру белка-энзима 2WGF, который отвечает за синтез миколовых кислот в клетках микобактерий. Основной вклад в энергию связывания вносят водородные связи, а также гидрофобное взаимодействие. Глюконамид стрептоцида является наиболее экономически доступным из всех относительных конфигураций альдонамидов и будет использован в дальнейших исследованиях на антимикобактериальную активность *in vitro*.

2. Модификация стрептоцида путем добавления остатка альдоновой кислоты позволяет повысить растворимость вещества в воде. Таким образом, возможно получение водорастворимых форм стрептоцида, что значительно расширяет возможности его применения при разработке лекарственных форм. Так же данный метод может быть использован для повышения растворимости и других биологически активных молекул, содержащих первичную или вторичную аминогруппу.

3. Полученные данные будут использованы для формирования фармакофора и дальнейшего поиска противотуберкулезных лекарственных средств.

### **ЛИТЕРАТУРА**

1. Meng, X.Y. Molecular docking: a powerful approach for structure-based drug discovery / X.Y. Meng, H.X. Zhang, M. Mezei [et al.] // *Curr Comput Aided Drug Des.* – 2011. – Vol. 7, №2. – С. 146-157.
2. Global tuberculosis report 2025 // World Health Organization URL: <https://www.who.int/teams/global-programme-on-tuberculosis-and-lung-health/tb-reports/global-tuberculosis-report-2025> (дата обращения: 20.02.2026).
3. Agertt, V.A. Identification of antimicrobial activity among new sulfonamide metal complexes for combating rapidly growing mycobacteria. / V.A. Agertt, P.C. Bonez, G.G. Rossi [et al.] // *Biometals.* – 2016. Vol. 29. № 5. – P. 807–816.
4. Proteins Plus // Zentrum fur Bioinformatik. URL: <https://proteins.plus> (дата обращения: 20.02.2026).
5. SwissADME // Institute of Bioinformatics URL: <https://www.swissadme.ch/index.php> (дата обращения: 20.02.2026).
6. Лахвич Ф.Ф., Дизайн водорастворимого аналога стрептоцида на основе глюконамида и изучение *in silico* его потенциальной противотуберкулезной активности / Ф.Ф. Лахвич, М.И. Чернова, П.Д. Янчук // БГМУ в авангарде медицинской науки и практики: рецензир. ежегод. сб. науч. тр. / М-во здравоохр. Респ. Беларусь, Бел. гос. мед. ун-т; под ред. С. П. Рубниковича, В. М.Ю.Ревтовича. – Минск: ИВЦ Минфина, 2025. – Вып. 15. – С. 154–158.
7. Sulfanilamide // DrugBank URL: <https://go.drugbank.com/drugs/DB00259> (дата обращения: 20.02.2026).

***Сведения об авторах статьи:***

1. **Лахвич Федор Федорович** к.х.н, доцент кафедры общей химии УО «БГМУ», г. Минск, пр-т Дзержинского 83, email: lakhvichtt@gmail.com
2. **Чернова Марина Игоревна** ассистент кафедры общей химии УО «БГМУ», г. Минск, пр-т Дзержинского 83, email: borovamarin@gmail.com

УДК 004.8:615

Гайнуллин И.А., Мередова М.Х.

## ПРИМЕНЕНИЕ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА И ТЕХНОЛОГИЙ БОЛЬШИХ ДАННЫХ В ФАРМАЦЕВТИКЕ И ЗДРАВООХРАНЕНИИ

*Башкирский государственный медицинский университет, г. Уфа*

Высокая стоимость, длительность и риск неудачи при создании лекарств обуславливают необходимость внедрения искусственного интеллекта (ИИ) и Big Data, знаменующих переход к проектируемой фармакологии и персонализированной медицине, что определило цель данной работы – анализ состояния, направлений и проблем интеграции этих технологий в разработку лекарств и здравоохранение, а также оценку перспектив человеко-машинного взаимодействия. На основе систематического обзора научных публикаций и материалов отраслевых саммитов выделены четыре направления трансформации: открытие новых лекарств (платформа MADD: 80% эффективности, сокращение сроков до недель), персонализация медицины, создание экосистем данных (AIR·MS, Jub) и репозиционирование препаратов, при этом идентифицированы основные барьеры – неструктурированность данных, фрагментация IT-систем и недоверие к «черному ящику» алгоритмов. Интеграция ИИ является стратегическим вектором развития отрасли, однако ключевыми условиями прогресса выступают стандартизация данных и внедрение искусственного интеллекта.

**Ключевые слова:** искусственный интеллект, большие данные, фармацевтика, персонализированная медицина, открытие лекарств.

Gainullin I.A., Meredova M.H.

## APPLICATION OF ARTIFICIAL INTELLIGENCE AND BIG DATA TECHNOLOGIES IN PHARMACEUTICALS AND HEALTHCARE

*Bashkir State Medical University, Ufa*

The high cost, duration, and risk of failure in drug development necessitate the introduction of artificial intelligence (AI) and Big Data, marking the transition to engineered pharmacology and personalized medicine, which determined the purpose of this work to analyze the state, directions, and problems of integrating these technologies into drug development and healthcare, as well as to assess the prospects for human-machine interaction. Based on a systematic review of scientific publications and materials from industry summits, four areas of transformation have been identified: discovery of new drugs (MADD platform: 80% effectiveness, reduction of time to weeks), personalization of medicine, creation of data ecosystems (AIR·MS, Jub) and drug repositioning, while identifying the main barriers – unstructured data, fragmentation of IT-systems and distrust of the "black box" of algorithms. AI integration is a strategic vector for the development of the industry, but data standardization and the introduction of artificial intelligence are key conditions for progress.

**Keywords:** artificial intelligence, big data, pharmaceuticals, personalized medicine, drug discovery.

Традиционный процесс создания нового лекарства представляет собой один из наиболее затратных и длительных этапов в современной науке: десятилетие разработки, миллиард долларов инвестиций и 90% вероятности неудачи – такова суровая арифметика фармацевтической индустрии. Однако в последние годы происходит сдвиг с помощью искусственного интеллекта (ИИ) и больших данных (Big Data). Актуальность данного исследования обусловлена переходом от эмпирического поиска молекул к проектируемой

фармакологии и от стандартизированных протоколов терапии к персонализированному подходу в медицине. Использование ИИ и Big Data позволяет быстрее создавать лекарства, ставить верные диагнозы и эффективнее лечить людей [1,2]. Несмотря на высокий потенциал, существуют значительные барьеры – от неготовности данных до недоверия со стороны медицинского сообщества, что требует комплексного анализа сложившейся ситуации.

### **Цель работы**

Целью данной работы является комплексный анализ современного состояния, ключевых направлений и проблем интеграции технологий искусственного интеллекта и больших данных в процессы разработки лекарственных средств (drug discovery) и организацию здравоохранения (precision medicine), а также оценка перспектив развития человеко-машинного взаимодействия в медицинской сфере.

### **Материал и методы**

Материалами для данного аналитического обзора послужили открытые научные публикации и экспертные оценки, охватывающие период 2021–2026 годов. В работе использован метод систематического нарративного обзора (narrative review), включающий поиск, отбор, анализ и синтез информации из рецензируемых научных журналов, авторитетных академических изданий и материалов отраслевых саммитов (CAS 2025) [1-8]. Анализ проводился с целью выделения ключевых тематических кластеров: открытие новых молекул, персонализация медицины, платформенные решения, а также идентификация основных барьеров внедрения.

### **Результаты и обсуждение**

В результате анализа материала были выделены четыре ключевых тематических блока, характеризующих современное состояние внедрения ИИ в фармацевтику и здравоохранение.

1. Трансформация процесса открытия лекарств (Drug Discovery). Поиск молекул-кандидатов («хитов»), способных воздействовать на мишень заболевания, исторически был самым трудоемким этапом разработки лекарств, напоминая бессистемный перебор вариантов. Современные нейросети берут на себя эту функцию, многократно ускоряя анализ и отбор перспективных соединений.

Современные системы, такие как российская мультиагентная платформа MADD (Multi-Agent Drug Discovery, Университет ИТМО), действуют как виртуальные химики. Они не просто генерируют новые молекулы, но и проводят их многоступенчатую проверку

по пяти критическим параметрам: биологическая активность, способность связываться с мишенью, синтетическая доступность, лекарственное подобие и отсутствие токсичности.

Эффективность такого подхода впечатляет: почти 80% предложенных системой MADD вариантов соответствуют жестким критериям, что в разы превосходит показатели зарубежных аналогов. Как отмечают эксперты Института AIRI, инвестиции в ИИ окупаются за счет отсева проигрышных вариантов на ранних этапах: компьютерное моделирование отсеивает бесперспективные направления, предотвращая многолетние исследования и многомиллионные расходы. Благодаря таким технологиям поиск кандидатов против семи тяжелых заболеваний, включая болезнь Альцгеймера и рак легких, сокращается с лет до недель. Дополнительно, исследования Tan G.S.Q. et al. (2025) указывают на важность ИИ в репозиционировании лекарств (drug repurposing) – анализе больших данных для поиска новых показаний для уже существующих и безопасных препаратов.

2. Персонализация медицины (Precision Medicine). Если раньше фарминдустрия делала ставку на универсальные таблетки, то ИИ прокладывает путь к сверхточному подходу, анализируя огромные массивы данных – от геномных последовательностей до образа жизни.

В РФ примером такого движения является соглашение РФПИ, Института системного программирования РАН и Центра им. Гамалеи о создании цифровой платформы для разработки биоспецифичных лекарств против аутоиммунных и орфанных заболеваний. «Персонализированные лекарственные средства требуют совершенно нового подхода к их разработке... и формирования больших информационных генетических баз данных», – подчеркивает Александр Гинцбург. Западные коллеги из журнала *Emerging Topics in Life Sciences* подтверждают, что ИИ трансформирует Precision Medicine, позволяя выделять скрытые паттерны из сложных многомерных данных для более точного подбора терапии, особенно в онкологии.

Naque M.A. et al. (2026) расширяют это понятие, говоря о роли больших языковых моделей (LLM) как «умных ассистентов», способных анализировать историю болезни на естественном языке и подсказывать врачу скрытые закономерности. Национальная академия медицины США (2025) добавляет, что персонализация сегодня – это синтез геномики, данных с носимых устройств и социальных факторов, где ИИ выступает инструментом интеграции.

3. Платформенные решения и экосистемы данных

Для работы ИИ нужно качественные и структурированные данные, что требует создания специализированных платформ.

В США платформа AIR·MS (Artificial Intelligence-Ready Mount Sinai) предоставляет доступ к данным более 12 миллионов пациентов, объединяя электронные карты и метаданные снимков. Еще более амбициозный проект — платформа Jub, описанная в Nature Scientific Reports. Она позволяет создавать «обсерватории данных», связывая разнородные явления. В одном из кейсов исследователи соединили записи о смертности от рака груди в Мексике с данными о загрязнении воздуха за 23 года, выявив возможные корреляции для профилактической медицины.

Создание таких экосистем знаменует переход от простого сбора данных к формированию исследовательских сред. Это позволяет приблизиться к концепции «цифровых двойников» (digital twins) пациента или популяции, что в будущем даст возможность проводить клинические испытания *in silico*.

#### 4. Барьеры и ограничения внедрения

Путь ИИ в медицину сопряжен со значительными трудностями. Главная проблема, по мнению лидеров индустрии на саммитах CAS 2025, – не в алгоритмах, а в данных и организации процессов.

Плохо размеченные и неструктурированные данные сводят на нет любые усилия алгоритмов. Вторая угроза – фрагментация систем или, по выражению представителя компании «Р-Фарм», когда разные IT-решения несовместимы друг с другом. Третий ключевой элемент – доверие. ИИ остается для врачей «черным ящиком».

Российские исследователи (Гретченко и др., 2021; Якушев, 2024) также указывают на неготовность инфраструктуры и правовые пробелы. Обзор НИИ/РМС (2025) подчеркивает, что врач несет ответственность за назначение лечения и должен понимать логику алгоритма. Отсюда – растущий интерес к направлению Explainable AI (XAI) – «объяснимому искусственному интеллекту». Как резюмирует McCarty W. (2024), будущее не за заменой человека машиной, а за их тандемом, где ИИ выступает в роли «когнитивного усилителя», а окончательное решение остается за человеком.

#### **Заключение и выводы**

Проведенный анализ позволяет заключить, что интеграция ИИ и больших данных в здравоохранение и фармацевтику является объективной реальностью и стратегическим вектором развития отрасли. Мы наблюдаем переход от разрозненных экспериментов к созданию комплексных экосистем, способных кардинально ускорить создание лекарств и повысить точность диагностики и лечения.

Несмотря на колоссальный потенциал, дальнейший прогресс невозможен без решения системных проблем: стандартизации и «очистки» данных, преодоления фрагментации ИТ-систем и, что наиболее важно, построения доверия между человеком и алгоритмом. Будущее медицины видится не в тотальной автоматизации, а где ИИ берет на себя рутину и анализ больших данных, высвобождая время и когнитивные ресурсы врача для принятия окончательных, этически выверенных решений. Мы движемся к тому, где лекарства будут создаваться быстрее, стоить дешевле, а лечение станет индивидуальным.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Грегченко А.А., Наумов С.Н., Швец Ю.Ю. Большие данные в отечественном здравоохранении // Научно-аналитический журнал Наука и практика Российского экономического университета им. Г.В. Плеханова. 2021. Том 13, № 3 (43). С. 57-70.
2. Якушев Ю.Ю. Возможности больших данных в фармакоэпидемиологии, проблемы использования, юридическое регулирование // Национальное здравоохранение. 2024. Том 5, № 2.
3. Торшин И., Громова О. Экспертный анализ данных в молекулярной фармакологии. – Litres, 2022. – 687 с.
4. National Academy of Medicine. Generative Artificial Intelligence in Health and Medicine: Opportunities and Responsibilities for Transformative Innovation. — National Academies Press, 2025. – 70 p.
5. Haque M.A. et al. Generative artificial intelligence and large language models in smart healthcare applications: Current status and future perspectives // Computational Biology and Chemistry. – 2026.Vol. 120, Pt 1.
6. Tan G.S.Q. et al. Association Discovery Approach in Healthcare Big Data to Identify Drug Safety and Drug Repurposing Signals // Clinical Pharmacology & Therapeutics. 2025.
7. McCarty W. Steps towards a therapeutic artificial intelligence // Interdisciplinary Science Reviews. 2024. Vol. 49, No. 1. P. 104-149.
8. Lee P., Goldberg C., Kohane I., Bubeck S. The AI revolution in medicine: GPT-4 and beyond. Pearson Education, 2023. 282 p.

УДК 577.323

Краснобаева Л.А.<sup>1,2</sup>, Мизина Е.П.<sup>1</sup>

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ГЕНОМЕ ЧЕЛОВЕКА НА ПРИМЕРЕ ГЕНА БРОНХИАЛЬНОЙ АСТМЫ ADRB2

<sup>1</sup>Сибирский государственный медицинский университет, г. Томск

<sup>2</sup>Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск

В работе предложена биофизическая модель функционирования гена бронхиальной астмы ADRB2, основанная на методах математического моделирования. Полученные численные оценки динамических характеристик локального конформационного возмущения с учетом блочного метода. Результаты демонстрируют принципиальную возможность возбуждения и распространения локального конформационного возмущения вдоль гена ADRB2.

**Ключевые слова:** молекула ДНК, молекулярное моделирование, ген ADRB2.

Krasnobaeva L.A.<sup>1,2</sup>, Mizina E.P.<sup>1</sup>

## MODELING PHYSICAL PROCESSES IN THE HUMAN GENOME USING THE ADRB2 ASTHMA GENE AS A CASE STUDY

<sup>1</sup>Siberian State Medical University, Tomsk

<sup>2</sup>National Research Tomsk State University, Tomsk

This paper proposes a biophysical model of the ADRB2 asthma gene, based on mathematical modeling methods. The obtained numerical estimates of the dynamic characteristics of a local conformational perturbation, taking into account the block method, demonstrate the fundamental possibility of excitation and propagation of a local conformational perturbation along the ADRB2 gene.

**Keywords:** DNA molecule, molecular modeling, ADRB2 gene.

В течение последних десяти лет достигнуты большие успехи в выявлении генов предрасположенности к бронхиальной астме (БА) [1]. Ген ADRB2 [2] является одним из генов с установленным влиянием на течение БА, находящийся в длинном плече 5 хромосомы. Ген ADRB2 был впервые клонирован группой ученых под руководством Брайана Кобилки в 1987 году [3]. Рецепторы ADRB2 есть на мембранах многих клеток гладких мышц, в частности, этот тип рецепторов преобладает на гладких мышцах бронхиол и артериях скелетных мышц. Моделирование физических процессов в геноме человека при таком комплексном заболевании, как бронхиальная астма (БА) проводились в работе [4], но в данных работах последовательность молекулы ДНК гена ADRB2 усреднялась по всей длине, в данной работе с помощью блочного метода [5] в сочетании с методом концентраций [6] проведен сравнительный анализ динамических характеристик гена ADRB2 и межгенных областей (рис.1)

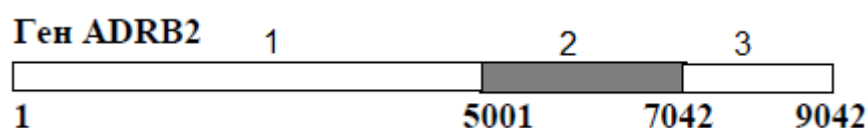


Рисунок 1. Схематическое изображение гена ADRB2. Цифры обозначают номер области

Длина гена ADRB2 9042 пары оснований. Используя блочный метод [5] мы разбили ген на три участка: первый участок с координатами 1..5000 – содержит промотор, второй участок 5001..7042 – ген ADRB2, третий участок 7043..9042 – 3'-фланкирующая область, которая находится за геном ADRB2.

### Материал и методы

Для моделирования внутренней динамики гена ADRB2 используем уравнение синус-Гордон, в котором параметры являются функциями, зависящими от набора концентраций  $C = \{C_A, C_T, C_G, C_C\}$  оснований А, Т, G и С, соответственно.

$$I(C)\varphi_{tt} - K'(C)a^2\varphi_{zz} + V(C)\sin\varphi = 0, \quad (1)$$

где  $\varphi(t)$  – угловое отклонение азотистого основания от положения равновесия,  $I$  – момент инерции оснований,  $K'$  – константа, характеризующая крутильную жесткость сахаро-фосфатной цепочки,  $a$  – расстояние между ближайшими основаниями в ДНК,  $V$  – энергия, необходимая для того, чтобы развернуть основание на  $90^\circ$ .

Концентрационная зависимость функций  $I(C)$ ,  $K'(C)$ ,  $V(C)$  предполагается линейной

$$\begin{aligned} I(C) &= I_A C_A + I_T C_T + I_G C_G + I_C C_C, \\ K'(C) &= K'_A C_A + K'_T C_T + K'_G C_G + K'_C C_C, \\ V(C) &= V_A C_A + V_T C_T + V_G C_G + V_C C_C. \end{aligned} \quad (2)$$

Согласно методу концентраций рассчитаем число оснований (А, Т, G, С) в трех областях гена ADRB2. Результаты расчетов представлены в Таблице 1.

Таблица 1

Число оснований А, Т, G и С в трех участках гена ADRB2

Номер области	Название области	Координаты участков	$N_A$	$N_T$	$N_G$	$N_C$	$N$
1	Промотор	1..5000	1271	2745	1080	1040	6136
2	Ген ADRB2	5001..7042	476	534	502	530	2042
3	3'-фланкирующая	7043..9042	516	600	404	480	2000

Концентрации определим следующим образом:  $C_A = N_A/N$ ,  $C_T = N_T/N$ ,  $C_G = N_G/N$ ,  $C_C = N_C/N$ . Значение концентраций оснований ДНК в каждой области гена ADRB2 представлены в Таблице 2.

**Таблица 2**

**Концентрации оснований  $C_A$ ,  $C_T$ ,  $C_G$  и  $C_C$  оснований А, Т, G и С  
 в трех участках гена ADRB2**

Номер области	Название области	Координаты участков	$C_A$	$C_T$	$C_G$	$C_C$
1	Промотор	1..5000	0,21	0,44	0,18	0,17
2	Ген ADRB2	5001..7042	0,23	0,26	0,25	0,26
3	3'-фланкирующая	7043..9042	0,26	0,3	0,2	0,24

Подставляя значения концентраций из Таблицы 2 в формулы (2), получим численные оценки параметров модели (1). Результаты представлены в Таблице 3.

**Таблица 3**

**Параметры модели (1) для трех областей гена ADRB2**

Номер области	Название области	Координаты участков	$I \times 10^{-44}$ (кг·м <sup>2</sup> )	$K' \times 10^{-18}$ (Н·м)	$V \times 10^{-20}$ (Дж)
1	Промотор	1..5000	5,91	1,87	1,99
2	Ген ADRB2	5001..7042	6,14	1,93	2,18
3	3'-фланкирующая	7043..9042	6,07	1,92	2,11

**Локальное конформационное возмущение.** Односолитонное решение уравнения (1) в виде кинка, которое является математическим образом локального конформационного возмущения в молекуле ДНК [7] имеет вид

$$\varphi_k(z, t) = 4 \arctg\{\exp[(\gamma(C)/d(C))(z - v_k(t) \cdot t - z_{0,1})]\}. \quad (3)$$

Здесь  $v_k(t)$  – скорость локального конформационного возмущения.

Решение в виде (3) играют важную роль в процессах транскрипции, репликации, денатурации, а также в передаче структурных изменений и информации вдоль молекулы ДНК [8,9].

**Размер и энергия локального конформационного возмущения**

Размер локального конформационного возмущения имеет вид

$$d(C) = \sqrt{K'(C)a^2/V(C)}. \quad (4)$$

Энергия покоя локального конформационного возмущения определяется следующим образом:

$$E(C) = 8 \cdot \sqrt{K'(C) \cdot V(C)}. \quad (5)$$

Подставляя параметры из Таблицы 3 в формулы (4) и (5), получим численные оценки размера и энергии покоя локального конформационного возмущения в трех областях гена ADRB2. Результаты представлены в Таблице 4.

**Таблица 4**

**Размер и энергия покоя**

Номер области	Название области	Координаты участков	$d \times 10^{-10}$ (м)	$E$ (ккал/моль)
1	Промотор	1..5000	3,29	222,16
2	Ген ADRB2	5001..7042	3,19	236,22
3	3'-фланкирующая	7043..9042	3,24	231,79

Из Таблицы 4 видно, что промоторной области соответствует наименьшее значение энергии покоя, а области гена ADRB2 максимальное значение энергии. Полученные результаты указывает на то, что процесс транскрипции РНК полимеразы в промоторной области начать легче, чем в других областях гена ADRB2

**Заключение и выводы**

На основе расчетов моментов инерции ДНК, а также жесткости ДНК в торсионном и линейном направлениях, этот конкретный геномный регион был смоделирован биофизически с учетом его физических параметров. В частности, мы обнаружили, что кодирующий регион гена ADRB2 демонстрирует самые высокие значения жесткости в торсионном направлении ( $1,93 \times 10^{-18}$  Дж) и линейной жесткости ( $2,18 \times 10^{-20}$  Н/м) среди всех регуляторных или фланкирующих регионов. Регион гена ADRB2 продемонстрировал минимальный размер локального конформационного возмущения ( $d = 3,19 \times 10^{-10}$  м) по сравнению с соседними фланкирующими регионами и отражает структурную жесткость, необходимую для точной передачи генетической информации.

Энергия покоя локального конформационного возмущения ( $E$ ) достигает максимума в области гена ADRB2 (236,22 ккал/моль), что указывает на более высокий энергетический барьер для локальных деформаций двойной спирали и подтверждает адаптацию физических свойств ДНК к выполнению транскрипционной функции.

Количественный анализ аллелей ADRB2 позволяет проводить биофизическое сравнение нативных и мутантных аллелей. Метод позволяет количественно оценить влияние полиморфизмов, переходя от качественной к количественной оценке того, как они влияют на физические и механические свойства ДНК, и, следовательно, позволяет моделировать влияние мутаций на бронхиальную астму.

Предложенный подход к расчету физических характеристик ДНК может быть использован для многих генов, связанных с многофакторными заболеваниями, что создаст новую область исследований, называемую биофизикой персонального генома.

«Исследования выполнены при поддержке гранта Правительства Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2025-009 от 28.02.2025 г.)».

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Чучалина А. Г. Глобальная стратегия лечения и профилактики бронхиальной астмы. – М.: Изд-во «Атмосфера», 2002. – 160 с.
2. Homo sapiens adrenoreceptor beta 2, surface (ADRB2), RefSeqGene on chromosome 5. [http://www.ncbi.nlm.nih.gov/nuccore/NG\\_016421.1](http://www.ncbi.nlm.nih.gov/nuccore/NG_016421.1)
3. Kobilka B. K., Dixon, R. A., Frielle, T., et al. Cloning of the gene and cDNA for mammalian beta-adrenergic receptor and homology with rhodopsin // *Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS)*. – 1987.
4. Краснобаева Л. А., Волков И. А., Якушевич Л. В. Динамика кинков, активированных в генах ADRB2, NOS1 и IL-5 // *Компьютерные исследования и моделирование*. – 2012. – Т. 4. – № 2 – С. 391–399.
5. Yakushevich L.V., Krasnobaeva L.A. Ideas and methods of nonlinear mathematics and theoretical physics in DNA science: the McLaughlin-Scott equation and its application to study the DNA open state dynamics // *Biophysical Reviews*. – 2021. – V. 13. – P. 315–338. doi: 10.1007/s12551-021-00801-0
6. Yakushevich L.V., Krasnobaeva L.A. A new approach to studies of non-linear dynamics of kinks activated in inhomogeneous polynucleotide chains // *International Journal of Non-Linear Mechanics*. – 2008. – Vol. 43, is. 10. – P. 1074–1081.
7. Yakushevich L.V. *Nonlinear Physics of DNA* – Wiley: Weinheim, 2004. – 190 p.
8. Bleichert F., Botchan M. R., Berger J. M. Mechanisms for initiating cellular DNA replication // *Science*. – 2017. – Vol. 355. – P. 633–656.
9. Sicard F., Destainville N., Manghi M. DNA denaturation bubbles: Free-energy landscape and nucleation closure rates // *The Journal of Chemical Physics*. – 2015. – Vol. 142. – P. 034903.

УДК 616.12-008.46:616.12-008.331.1:004.8

Молдоташев И. К.<sup>1</sup>, Назаров А. К.<sup>2</sup>, Календеров А. К.<sup>1</sup>

## ЭКСПРЕСС ДИАГНОСТИКА ДИАСТОЛИЧЕСКОЙ ДИСФУНКЦИИ ЛЕВОГО ЖЕЛУДОЧКА СЕРДЦА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА В КАРДИОХИРУРГИИ

<sup>1</sup>Университет Адам, г. Бишкек

<sup>2</sup>Кардиохирургическая клиника «Бикард», г. Бишкек

Цель исследования. Оценить диагностическую эффективность экспресс-метода выявления диастолической дисфункции левого желудочка (ДДЛЖ) с использованием искусственного интеллекта (ИИ) у пациентов кардиохирургического профиля. Материал и методы. Обследовано 65 пациентов (35 мужчин и 30 женщин) в возрасте от 30 до 75 лет, госпитализированных в кардиохирургическую клинику «Бикард». Диастолическая функция левого желудочка оценивалась методом доплерэхокардиографии (ДЭХОКГ) и методом спектрального анализа одноканальной ЭКГ (ОЭКГ). В качестве эталона использовались общепринятые ДЭХОКГ критерии. Рассчитывались чувствительность, специфичность, прогностическая значимость положительного и отрицательного результатов. Результаты. ДДЛЖ была выявлена у 43 из 65 пациентов (66,1%). При сравнении спектрального анализа ОЭКГ с ДЭХОКГ чувствительность метода составила 0,81, специфичность — 0,71. Прогностическая значимость положительного результата составила 0,79, отрицательного — 0,81. Заключение. Метод спектрального анализа ОЭКГ демонстрирует высокую диагностическую информативность и может быть рекомендован как доступный экспресс-инструмент предоперационного скрининга и стратификации риска у кардиохирургических пациентов.

**Ключевые слова:** диастолическая дисфункция, левый желудочек, ОЭКГ, спектральный анализ, кардиохирургия, экспресс-диагностика.

Moldotashev I.K.<sup>1</sup>, Nazarov A.K.<sup>2</sup>, Kalenderov A.K.<sup>1</sup>

## RAPID DIAGNOSIS OF DIASTOLIC DYSFUNCTION OF THE LEFT VENTRICLE OF THE HEART USING ARTIFICIAL INTELLIGENCE IN CARDIAC SURGERY

<sup>1</sup>ADAM University, Bishkek

<sup>2</sup>Kyrgyz State Technical University named after I.Razzakov, Bishkek

Objective. To evaluate diagnostic performance of an artificial intelligence-based rapid method for detection of left ventricular diastolic dysfunction in cardiac surgery patients. Material and methods. Sixty-five patients (35 men, 30 women) aged 30–75 years admitted to a cardiac surgery clinic were examined. Diastolic function was assessed using Doppler echocardiography and spectral analysis of single-lead electrocardiography. Echocardiographic criteria served as reference. Sensitivity, specificity, positive predictive value, and negative predictive value were calculated. Results. Left ventricular diastolic dysfunction was detected in 43 of 65 patients (66.1%). Sensitivity of the ECG spectral method was 0.81 and specificity 0.71. Positive predictive value was 0.79 and negative predictive value was 0.81. Conclusion. Spectral analysis of single-lead electrocardiography demonstrates good diagnostic performance and may be used as a rapid tool for preoperative screening and risk stratification in cardiac surgery patients.

**Keywords:** diastolic dysfunction, left ventricle, single-lead ECG, spectral analysis, cardiac surgery, rapid diagnosis, artificial intelligence.

Хроническая сердечная недостаточность (ХСН) является исходом большинства сердечно-сосудистых заболеваний. Её распространённость увеличивается с возрастом и достигает более 10% у лиц старше 70 лет, при этом ведущими причинами остаются ишемическая болезнь сердца и артериальная гипертензия [5]. По данным Framingham Heart

Study, смертность в течение 5 лет после постановки диагноза ХСН достигает 67% [12]. В рамках концепции сердечно-сосудистого континуума развитие ХСН начинается с бессимптомных структурно-функциональных нарушений, среди которых ключевую роль играет ДДЛЖ сердца. На ранних стадиях она представляет собой компенсаторную реакцию, однако в дальнейшем приводит к формированию сердечной недостаточности с сохранённой фракцией выброса (СНсФВ), а затем и к систолической дисфункции [13]. Частота ДДЛЖ особенно высока у пациентов пожилого возраста, при артериальной гипертензии, сахарном диабете и хронической болезни почек. Наличие ДДЛЖ ассоциировано с повышением риска смерти, госпитализаций и периоперационных осложнений. Ранняя диагностика ДДЛЖ имеет принципиальное значение, поскольку именно на этой стадии лечебно-профилактические мероприятия наиболее эффективны. В связи с этим актуальной является разработка доступных экспресс-методов диагностики с использованием искусственного интеллекта.

### **Материал и методы**

В исследование включены 65 пациентов кардиохирургической клиники «Бикард» (35 мужчин и 30 женщин) в возрасте от 30 до 75 лет. Всем пациентам проводилась доплерэхокардиография на аппаратах SonoSite MicroMaxx и Belse X2 с оценкой диастолической функции левого желудочка по общепринятым критериям [4]. Одноканальная ЭКГ (ОЭКГ) регистрировалась портативным регистратором DuoЕК 118 (Leri Medical). Диастолическая функция определялась методом спектрального анализа ЭКГ как отношение суммарной мощности гармоник в фазу раннего диастолического наполнения к суммарной мощности гармоник в фазу сокращения предсердий. Спектральный анализ выполнялся с использованием периодограммы и усовершенствованного метода Бартлетта–Уэлча с разбиением временного ряда на перекрывающиеся сегменты и последующим усреднением спектральных оценок [1].

### **Результаты**

ДДЛЖ была выявлена у 43 из 65 пациентов (66,1%). При сравнении результатов спектрального анализа ОЭКГ с данными ДЭХОКГ чувствительность метода составила 0,81, специфичность — 0,71. Прогностическая значимость положительного результата (ПЗПР) достигла 0,79, отрицательного (ПЗОР) — 0,81, что свидетельствует о высокой диагностической информативности предложенного метода.

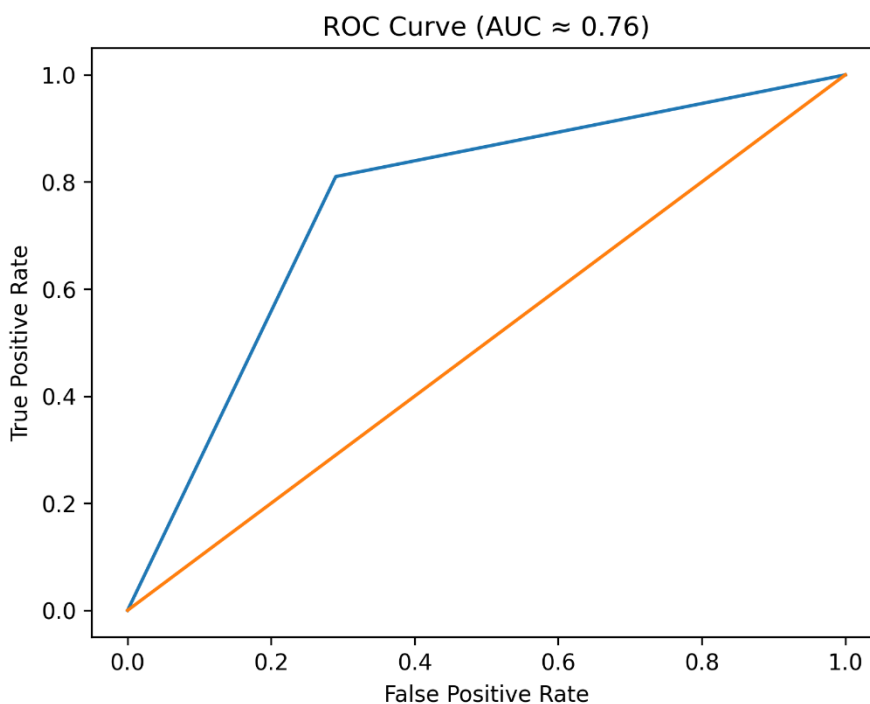


Рисунок 1. ROC-кривая диагностической эффективности метода спектрального анализа ОЭКГ для выявления ДДЛЖ (AUC  $\approx$  0,76). Площадь под ROC-кривой (AUC) составила 0,76, что свидетельствует о хорошей дискриминационной способности метода.

### Обсуждение

По данным крупных проспективных и ретроспективных исследований, различные степени ДДЛЖ выявляются у 50–80 % пациентов, поступающих на операцию с сохранённой или умеренно сниженной фракцией выброса (ФВ) ЛЖ [2]. Среди обследованных нами 65 пациентов кардиохирургической клиники «Бикард» было выявлено 43 человека (66.1%) с ДДЛЖ сердца. Ранние обзоры показали, что повышение конечного диастолического давления ЛЖ и нарушение расслабления миокарда ассоциированы с повышением периоперационной летальности и частотой осложнений после кардиохирургических вмешательств [8]. Позднее это было подтверждено в большом количестве наблюдательных исследований и мета-анализов, где выраженная ДДЛЖ (II–III степень, повышенное давление наполнения по E/e') независимо предсказывала раннюю смертность, синдром низкого сердечного выброса, острую почечную недостаточность, необходимость продлённой ИВЛ и длительное пребывание в ОИТ [3]. Таким образом, ДДЛЖ в кардиохирургии рассматривается не только как фоновой структурно-функциональный фенотип (HFrEF), но и как ключевой модификатор периоперационного риска, требующий целенаправленной диагностики и индивидуализированной тактики анестезиологического и хирурга-кардиологического ведения [4]. Классические исследования показали, что после ИК и кардиopleгии диастолическая функция часто ухудшается, причём степень нарушения связана с используемыми методами

миокардиальной защиты [6]. Даже при удовлетворительной ФВ ЛЖ ДД приводит к: повышению давления наполнения ЛЖ и давления в лёгочной артерии; увеличению давления в ЛП и растяжению его стенки; повышенной чувствительности к тахикардии, гиповолемии или резким изменениям постнагрузки. Это делает пациентов с ДДЛЖ крайне уязвимыми к типичным интраоперационным «стрессам» — быстрым изменениям объёма циркулирующей крови, вазопрессорной поддержке, тахиаритмиям [14]. Систематический обзор и мета-анализ Kaw и соавт. выявил, что выраженная ДДЛЖ (особенно III степень) увеличивает риск послеоперационной смертности более чем в 2 раза, независимо от ФВ ЛЖ и других традиционных факторов риска [3]. В исследовании Melduni и соавт., включившем более 3000 пациентов, было показано, что наличие ДДЛЖ по данным ДЭХОКГ является мощным независимым предиктором фибрилляции предсердий после кардиохирургических вмешательств [7]. Полученные нами результаты позволяют нам рекомендовать наш метод как перспективный экспресс инструмент предоперационного скрининга и стратификации риска в кардиохирургии.

#### **Заключение и выводы**

Для практикующего кардиохирурга и анестезиолога учёт ДДЛЖ и целенаправленная коррекция факторов, её ухудшающих, являются важным резервом улучшения результатов кардиохирургических вмешательств. Метод спектрального анализа ОЭКГ является доступным, быстрым и информативным инструментом диагностики ДДЛЖ и может быть рекомендован для практического применения в кардиохирургии.

#### **ЛИТЕРАТУРА**

1. Марпл-мл. С. Л. Цифровой спектральный анализ и его приложения. — М.: Мир, 1990. — 584 с.
2. Apostolakis E., Baikoussis N. G., Parissis H., Siminelakis S. N., Papadopoulos G. Left ventricular diastolic dysfunction of the cardiac surgery patient: a review in the literature // *Journal of Cardiothoracic Surgery*. — 2009. — Vol. 4. — P. 67.
3. Kaw R., Hernandez A. V., Pasupuleti V., et al. Effect of diastolic dysfunction on postoperative outcomes after cardiovascular surgery: a systematic review and meta-analysis // *Journal of Thoracic and Cardiovascular Surgery*. — 2016. — Vol. 152, № 4. — P. 1142–1153.
4. Kyle B., Adams P., Simmonds M., et al. Consensus-defined diastolic dysfunction and cardiac surgery outcomes // *Journal of Clinical Medicine*. — 2021. — Vol. 10, № 21. — P. 5198.
5. McDonagh T. A., Metra M., Adamo M., et al. 2021 ESC guidelines for the diagnosis and treatment of acute and chronic heart failure // *European Heart Journal*. — 2021. — Vol. 42, № 36. — P. 3599–3726.
6. Melduni R. M., Suri R. M., Seward J. B., et al. Diastolic dysfunction in patients undergoing cardiac surgery: pathophysiology, incidence, and prognostic implications // *Journal of the American College of Cardiology*. — 2011. — Vol. 58, № 3. — P. 412–421.

7. Melduni R. M., et al. Diastolic dysfunction and postoperative atrial fibrillation in patients undergoing coronary revascularization surgery // *Journal of the American College of Cardiology*. — 2011. — Vol. 58. — P. 953–961.
8. Metkus T. S., Suarez-Pierre A., Crawford T. C., et al. Diastolic dysfunction is common and predicts outcome after cardiac surgery // *Journal of Cardiothoracic and Vascular Anesthesia*. — 2018. — Vol. 32, № 3. — P. 1163–1172.
9. Mitchell C., Rankin P. S., Blauwet L. A., et al. Guidelines for performing a comprehensive transthoracic echocardiographic examination in adults // *Journal of the American Society of Echocardiography*. — 2019. — Vol. 32, № 1. — P. 1–64.
10. Nagueh S. F., Appleton C. P., Gillebert T. C., et al. Recommendations for the evaluation of left ventricular diastolic function by echocardiography // *Journal of the American Society of Echocardiography*. — 2009. — Vol. 22. — P. 107–133.
11. Torabi S., et al. Impact of preoperative diastolic dysfunction on short-term outcomes following cardiac surgery // *Journal of Cardiac Surgery*. — 2025. — Vol. 40, № 2. — P. 442.
12. Tsao C. W., Lyass A., Enserro D., et al. Temporal trends in the incidence of and mortality associated with heart failure with preserved and reduced ejection fraction // *JACC: Heart Failure*. — 2018. — Vol. 6. — P. 678–685.
13. Wan S.-H., Vogel M. W., Chen H. H. Pre-clinical diastolic dysfunction // *Journal of the American College of Cardiology*. — 2014. — Vol. 63, № 5. — P. 407–416.
14. Youn Y. N., Chang B. C., Hong Y. S., et al. Effect of diastolic dysfunction on early outcomes during off-pump coronary artery bypass surgery // *Annals of Thoracic Surgery*. — 2012. — Vol. 93, № 6. — P. 1910–1917.

УДК 504.5:628.5(575.2)

Мураталиева В.Ж.<sup>1</sup>, Тельтаева А.К.<sup>2</sup>, Бейшенбекова У.А.<sup>1</sup>

## ЦИФРОВОЙ МОНИТОРИНГ КАЧЕСТВА ВОЗДУХА: АНАЛИЗ ПОКАЗАТЕЛЕЙ СМОГА И ИХ ВЛИЯНИЯ НА ЗДОРОВЬЕ ЖИТЕЛЕЙ БИШКЕКА

<sup>1</sup>Университет АДАМ, г. Бишкек

<sup>2</sup>Кыргызский государственный технический университет им. И.Раззакова, г. Бишкек

В работе представлен анализ динамики качества атмосферного воздуха в Бишкеке на основе ежедневных наблюдений данных с онлайн платформы IQAir за период с октября 2024 по октябрь 2025 года. Рассмотрены концентрации загрязняющих веществ: мелкодисперсных частиц PM<sub>2.5</sub>, PM<sub>10</sub> и диоксида азота NO<sub>2</sub>, а также общего индекса качества воздуха (AQI). Полученные значения сопоставлены с действующими рекомендациями Всемирной организации здравоохранения. Результаты анализа указывают на устойчивое превышение рекомендуемых нормативов по ряду показателей, при этом наиболее выраженные отклонения фиксируются в отопительный период.

**Ключевые слова:** загрязнение воздуха, PM<sub>2.5</sub>, PM<sub>10</sub>, NO<sub>2</sub>, AQI, ВОЗ, IQAir, здоровье.

Muratalieva V. Zh.<sup>1</sup>, Teltaeva A.K.<sup>2</sup>, Beishenbekova U.A.<sup>1</sup>

## DIGITAL AIR QUALITY MONITORING: ANALYSIS OF SMOG INDICATORS AND THEIR IMPACT ON THE HEALTH OF BISHKEK RESIDENTS

<sup>1</sup>ADAM University, Bishkek

<sup>2</sup>Kyrgyz State Technical University named after I.Razzakov, Bishkek

The paper presents an analysis of the dynamics of atmospheric air quality in Bishkek based on daily observations of data from the IQAir online platform for the period from October 2024 to October 2025. Concentrations of pollutants are considered: fine particles PM<sub>2.5</sub>, PM<sub>10</sub> and nitrogen dioxide NO<sub>2</sub>, as well as the general air quality index (AQI). The values obtained are compared with the current recommendations of the World Health Organization. The results of the analysis indicate a steady excess of recommended standards in a number of indicators, with the most pronounced deviations recorded during the heating period.

**Keywords:** air pollution, PM<sub>2.5</sub>, PM<sub>10</sub>, NO<sub>2</sub>, AQI, WHO, IQAir, health.

Загрязнение атмосферного воздуха признано одной из ключевых экологических проблем XXI века, оказывающее воздействие на здоровье человека [1-3,7]. Город Бишкек (Кыргызстан) в последнее время в зимние периоды регулярно попадает в рейтинги городов с самым высоким уровнем загрязнения воздуха в мире. Географическое положение города в Чуйской долине, окруженной горами, способствует застою воздуха и накоплению загрязняющих веществ, усугубляя проблему температурными инверсиями. Основными источниками загрязнения являются сжигание угля для отопления в частном секторе, которые разрослись в последнее время вокруг Бишкека, выбросы автотранспорта, ТЭЦ Бишкек [7].

### Цель работы

Целью данной статьи является комплексный анализ качества атмосферного воздуха в Бишкеке на основе данных цифрового мониторинга за годовой период (октябрь 2024 – октябрь 2025 гг.). Для исследования использовались открытые данные онлайн платформы

IQAir [5]. В рамках исследования проанализированы концентрации ключевых загрязнителей: PM<sub>2.5</sub> - концентрация мелкодисперсных частиц диаметром до 2.5 мкм; PM<sub>10</sub> - концентрация частиц диаметром до 10 мкм; NO<sub>2</sub> - концентрация диоксида азота, общий индекс качества воздуха AQI и проведено сравнение с рекомендациями ВОЗ [1].

Мелкодисперсные частицы PM<sub>2.5</sub> и PM<sub>10</sub> являются одними из наиболее опасных загрязнителей атмосферного воздуха. Их воздействие связано с поражением дыхательной системы и повышенным риском развития хронических заболеваний [1,6]. Особую опасность представляют частицы PM<sub>2.5</sub>, способные проникать в глубокие отделы лёгких и вовлекаться в системное кровообращение. Это обуславливает их связь не только с респираторными, но и с сердечно-сосудистыми и другими системными нарушениями. Частицы PM<sub>10</sub> также способствуют развитию респираторных заболеваний и аллергических реакций. Диоксид азота (NO<sub>2</sub>), основной источник которого – сгорание ископаемого топлива, особенно в автомобильных двигателях, является сильным раздражителем дыхательных путей и способствует образованию озона и кислотных дождей. Длительное воздействие диоксида азота (NO<sub>2</sub>) рассматривается как один из факторов риска развития бронхиальной астмы и снижения функциональных показателей дыхательной системы [2,3].

### **Материал и методы**

В качестве информационной базы использовались открытые данные цифровых платформ мониторинга качества воздуха – IQAir [5], обеспечивающие доступ к показателям в режиме реального времени. Применение таких источников позволяет анализировать динамику концентраций загрязняющих веществ и выявлять устойчивые тенденции их изменения. Дополнительно были привлечены аналитические материалы международных организаций, в частности отчёт IQAir [5], а также оценка качества воздуха в Кыргызской Республике, представленная Всемирным банком [7]. Методика исследования основывалась на сравнительном анализе: фактические значения концентраций загрязняющих веществ сопоставлялись с рекомендованными 24-часовыми нормативами Всемирной организации здравоохранения. Наряду с этим проводилась интерпретация выявленных отклонений с учётом данных международных и национальных исследований, что позволило оценить степень выраженности проблемы в региональном контексте.

### **Результаты и обсуждение**

Анализ годового массива данных показал, что концентрации основных загрязняющих веществ в Бишкеке в ряде случаев превышают рекомендованные значения Всемирной организации здравоохранения. Наблюдается резкое ухудшение качества воздуха в отопительный сезон, приблизительно с октября по март и относительное

улучшение в неотапительный период с апреля по сентябрь. Однако, как показывают данные, даже в летние месяцы уровни PM<sub>2.5</sub> и NO<sub>2</sub> часто превышают рекомендованные ВОЗ значения.

На рис. 1 показаны ежедневные концентрации PM<sub>2.5</sub> (линия с маркерами) в Бишкеке на протяжении всего отопительного сезона в сравнении с суточной нормой ВОЗ равной 15 мкг/м<sup>3</sup> (пунктирная линия). На графике видно, что фактический уровень загрязнений практически всегда превышает допустимую норму, так же фиксируются многократные скачки до 290 мкг/м<sup>3</sup>, что превышает норму почти в 20 раз.

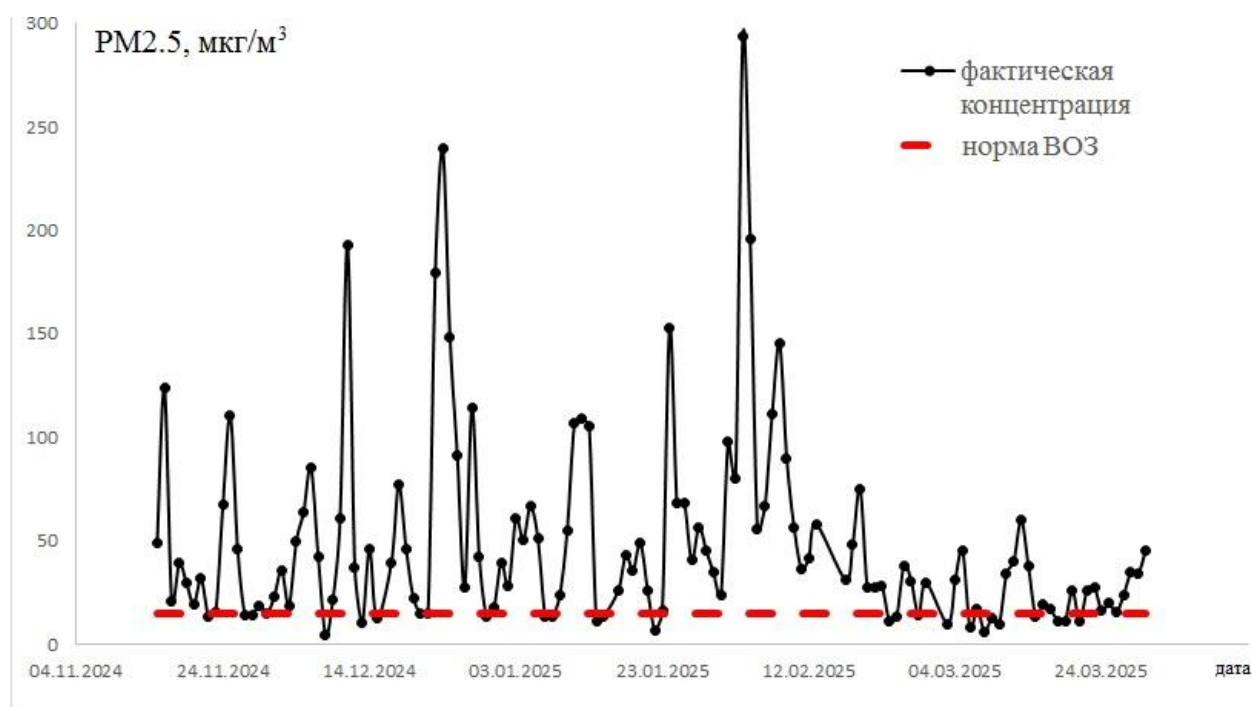


Рисунок 1. Динамика PM<sub>2.5</sub> в Бишкеке и нормы ВОЗ в отопительный период

На рисунке 2 представлены среднемесячные значения четырех ключевых показателей качества воздуха (AQI, PM<sub>2.5</sub>, PM<sub>10</sub>, NO<sub>2</sub>). График показывает резкое ухудшение качества воздуха в Бишкеке в период октябрь-март и значительное улучшение в с апреля по сентябрь. Пиковые значения всех загрязнителей приходятся на зимний период.

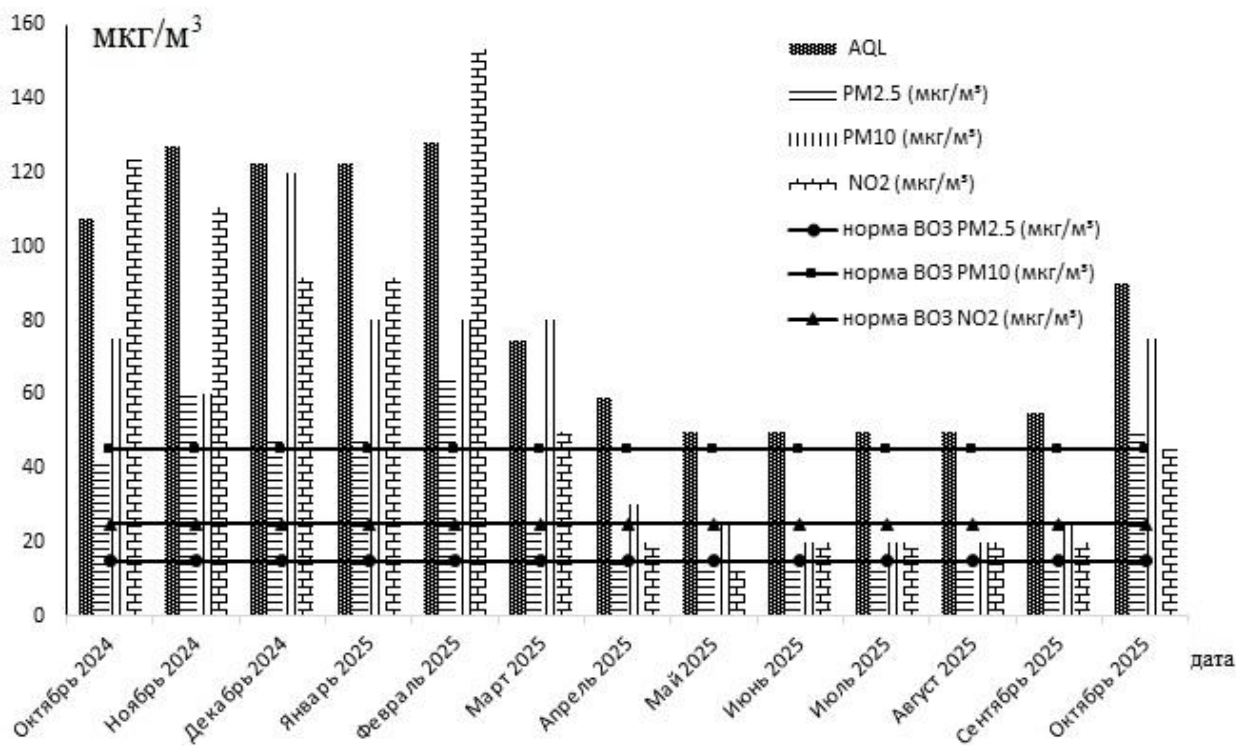


Рисунок 2. Усредненные диапазоны показателей качества воздуха в Бишкеке по месяцам.

Норма ВОЗ для PM2.5 составляет 15 мкг/м³. График показывает, что среднемесячные значения PM2.5 превышают эту норму на протяжении всего года. В период с ноября по март месяцы превышение является критическим. Например, в декабре 2024 и январе 2025 средний уровень PM2.5 достигает порядка 40-50 мкг/м³, что превышает в 2.5-3.3 раза нормы ВОЗ. В феврале 2025 года этот показатель составлял около 60 мкг/м³, наблюдается примерно четырёхкратное превышение нормы ВОЗ. В теплые месяцы (май-август) средний уровень PM2.5 составляет около 10-15 мкг/м³ и находится в пределах нормы ВОЗ (рис.2).

Норма ВОЗ для PM10 составляет 45 мкг/м³. График (рис.2) показывает, что в период с ноября по март, среднемесячные значения PM10 значительно превышают эту норму, в частности в октябре 2024 года по январь 2025 года средний уровень PM10 составляет около 60-70 мкг/м³, что в 1.3-1.5 раза выше нормы ВОЗ. В октябре 2025 года также наблюдается превышение нормы достигая 75 мкг/м³. В теплые месяцы (апрель – сентябрь) PM10 понижается и находится в пределах нормы ВОЗ.

Норма ВОЗ для NO2 составляет 25 мкг/м³. На графике (рис.2) видно, что в месяцы ноябрь-март среднемесячные значения NO2 тоже значительно превышают установленную норму. Максимальное среднемесячное значение NO2 наблюдается в феврале 2025 года,

достигая до  $153 \text{ мкг/м}^3$ , что в 6 раз превышает норму ВОЗ. В летний период  $\text{NO}_2$  снижается и находится в пределах нормы или незначительно выше.

Индекс качества воздуха AQI показывает данные по всем загрязнителям и представляет общую картину: 0–50 – хороший воздух – в пределах нормы; 51–100 – умеренное загрязнение, представляет незначительную опасность для здоровья; 101–150 – вредный воздух, опасен для здоровья людей и особенно для чувствительных групп; 201–300 – очень вредный воздух, серьёзное влияние на здоровье всех жителей; 301+ – опасное загрязнение, угрозы для здоровья, которые могут быть смертельными при длительном воздействии [4,5].

Анализ данных показывает, что в Бишкеке в зимние месяцы индекс качества воздуха AQI стабильно держится на уровне 110-128, что соответствует категории "вредный воздух". В летние месяцы AQI снижается до уровня 50-60, что соответствует категориям "умеренный" или "хороший".

Европейские стандарты качества воздуха, хотя и менее строгие, чем рекомендации ВОЗ например, 24-часовой лимит  $\text{PM}_{2.5}$  в ЕС составляет  $25 \text{ мкг/м}^3$ , годовой  $25 \text{ мкг/м}^3$ ; для  $\text{PM}_{10}$   $50 \text{ мкг/м}^3$  24-часовой и  $40 \text{ мкг/м}^3$  годовой [4], также систематически нарушаются в Бишкеке. Например, пиковое значение  $\text{PM}_{2.5}$  равное  $290 \text{ мкг/м}^3$  превысило практически в 11 раз европейский стандарт.

**Заключение.** Проведенный мониторинг подтверждает, что загрязнение атмосферного воздуха в Бишкеке приобрело характер устойчивой техногенной аномалии и сопровождается регулярным превышением рекомендуемых значений ВОЗ по основным загрязнителям  $\text{PM}_{2.5}$ ,  $\text{PM}_{10}$  и  $\text{NO}_2$ . Наиболее неблагоприятная ситуация наблюдается в отопительный период и указывает на влияние сезонных факторов таких как ТЭЦ, угольное отопление.

Максимальные зарегистрированные значения  $\text{PM}_{2.5}$  достигают  $290 \text{ мкг/м}^3$ , что примерно в 20 раз превышает рекомендуемый уровень ВОЗ. В зимний период среднемесячные концентрации превышают норматив в 2,7–4 раза, тогда как для  $\text{NO}_2$  превышение достигает шестикратного уровня. Для  $\text{PM}_{10}$  отклонения менее выражены и составляют 1,3–1,7 раза относительно нормативных значений.

Установленные закономерности позволяют рассматривать загрязнение воздуха как значимый фактор риска для здоровья населения. Практическая значимость исследования заключается в обосновании мер, направленных на снижение выбросов, включая модернизацию систем отопления, развитие транспорта с низким уровнем эмиссий и усиление контроля за качеством атмосферного воздуха.

## ЛИТЕРАТУРА

- 1 Глобальные рекомендации ВОЗ по качеству воздуха: твердые частицы (PM<sub>2.5</sub> и PM<sub>10</sub>), озон, диоксид азота, диоксид серы и монооксид углерода [Электронный ресурс]. – 2025. – URL: <https://iris.who.int/server/api/core/bitstreams/2776fed3-acf3-43a2-b69e-f641e42a7bd8/content> (дата обращения: 01.12.2025).
- 2 Куленбеков Ж. Э., Асанов Б. Д., Султаналиев К. Оценка качества атмосферного воздуха в г. Бишкек, как индикатор устойчивого развития // Вестник Института сейсмологии НАН КР. – 2016. – № 2 (8). – С. 31-38.
- 3 ООН, программа по окружающей среде. Качество воздуха в Бишкеке. Оценка источников выбросов и дорожная карта для содействия управлению качеством воздуха [Электронный ресурс]. – Октябрь 2022. – URL: <https://www.unep.org/ru/resources/report/kachestvo-vozdukha-v-bishkeke> (дата обращения: 01.12.2025).
- 4 Directive (EU) 2024/2881 of the European Parliament and of the Council of 23 October 2024 on ambient air quality and cleaner air for Europe (recast) [Electronic resource] // EUR-Lex: official website. – URL: <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/?uri=CELEX:32024R2881> (date of access: 01.02.2026).
- 5 IQAir. World Air Quality Report [Electronic resource]. – 2023. – URL: <https://www.iqair.com/newsroom/waqr-2023-pr>.
- 6 Pope C. A. III et al. Lung cancer, cardiopulmonary mortality, and long-term exposure to fine particulate air pollution // JAMA: the journal of the American Medical Association. – 2002. – Vol. 287. – No. 9. – P. 1132-1141.
- 7 World Bank. Kyrgyz Republic: Air Quality Assessment [Electronic resource]. – 2023. – URL: <https://documents1.worldbank.org/curated/en/099110123211021470/pdf/P17087000827dd04e09d6a0d01dc0ab3c41.pdf> (date of access: 01.02.2026).

УДК 582.622.1:[004.94:577.2:615.2]

Прокопеня Я.О., Лахвич Ф.Ф., Мушкина О.В.

**РАЗРАБОТКА СКРИПТА МНОЖЕСТВЕННОГО МОЛЕКУЛЯРНОГО ДОКИНГА И ЕГО ВАЛИДАЦИЯ ПРИ СРАВНЕНИИ ЭКСПЕРИМЕНТОВ *IN SILICO* ДЛЯ КОМПОНЕНТОВ ЭКСТРАКТОВ ОЛЬХИ ЧЁРНОЙ И СЕРОЙ**

*Белорусский государственный медицинский университет, г. Минск*

Исследование посвящено оценке алгоритмов, применяемых в современном программном обеспечении для проведения молекулярного докинга лигандов. Опираясь на полученные результаты, нами было принято решение о создании специализированного скрипта на платформе AutoDock Vina, предназначенного для потоковой оценки сродства химических соединений к заданным биомишеням. Тестирование разработанного решения для множественного докинга выявило его надежность и достоверность результатов. Для верификации скрипта было проведено *in silico* моделирование связывания лиганда с ферментом циклооксигеназа-2. Сопоставление вычисленных показателей с контрольными данными, полученными с помощью комбинации UCSF Chimera и AutoDock Vina, показало полную сопоставимость результатов при равных затратах времени на обработку.

**Ключевые слова:** аффинитет, алгоритм, флавоноид, AutoDock.

Prokopenya Y.O., Lakhvich T.T., Mushkina O.V.

**DEVELOPMENT OF A MULTIPLE MOLECULAR DOCKING SCRIPT AND ITS VALIDATION WHEN COMPARING *IN SILICO* EXPERIMENTS FOR COMPONENTS OF BLACK AND GRAY ALDER EXTRACTS.**

*Belarusian State Medical University, Minsk*

The study evaluates the algorithms utilized in contemporary software for molecular ligand docking. Based on the findings, a specialized script was developed using the AutoDock Vina framework, designed for high-throughput assessment of chemical compound affinity toward specified biological targets. Testing of the implemented multiple docking solution demonstrated its reliability and the consistency of the results. To validate the script, an *in silico* modeling of ligand binding with the cyclooxygenase-2 enzyme was performed. Comparison of the calculated metrics with control data obtained through a combination of UCSF Chimera and AutoDock Vina showed full comparability of the results with equal processing time requirements.

**Keywords:** Affinity, algorithm, flavonoid, AutoDock.

В настоящее время методы *in silico* играют критически важную роль в современной вычислительной биологии и разработке новых лекарственных препаратов. Возможность с высокой степенью достоверности прогнозировать способы связывания низкомолекулярных соединений с биологическими мишенями значительно ускорила и оптимизировала процесс рационального дизайна лекарственных средств. Благодаря молекулярному скринингу исследователи получили инструмент для быстрого анализа обширных библиотек химических веществ в поиске потенциально активных молекул.

**Цель работы**

Целью настоящей работы является программная реализация инструмента для автоматизированного скрининга лигандов для отбора высокоаффинных соединений к конкретным белкам, а также *in silico* валидация созданной утилиты путём сравнительного анализа результатов взаимодействия кверцетина с активным центром циклооксигеназы-2.

## Материал и методы

Кристаллическая структура циклооксигеназы-2 была импортирована из банка данных трёхмерных структур Protein Data Bank (идентификатор 1CX2). Создание 2D и 3D структур исследуемого лиганда осуществлялась с использованием пакета программного обеспечения ChemOffice. Подготовка мишени и лиганда проводилась в AutoDock Tools. В качестве референтного метода прогнозирования молекулярного связывания лиганда и мишени применялась комбинация UCSF Chimera и AutoDock Vina. Для ускорения и автоматизации вычислений нами был разработан пользовательский код на Python, интегрирующий функционал AutoDock Vina [2, 3]. Анализ и графическое представление финальных комплексов, сгенерированных скриптом, выполнялись с привлечением веб-инструмента Protein-Ligand Interaction Profiler, а результаты стандартного комплекса визуализировались непосредственно в интерфейсе UCSF Chimera. Порядок выполнения исследования:

### 1) Подготовка протеина

- С помощью AutoDock Tools структура белка была очищена от кристаллизационной воды и нативных лигандов. Добавлены полярные атомы водорода и рассчитаны частичные заряды молекулы.
- Параметры расчетной сетки (центр и объем области докинга) определяли через функционал Grid.

### 2) Подготовка лиганда

- Проводили стандартную процедуру подготовки соединения через функционал `prepare ligand`

### 3) Формирование config-файла для проведения докинга.

### 4) Открытие разработанной программы для автоматизированного докинга заданной библиотеки данных.

## Результаты и их обсуждение

Программное обеспечение, которое позволяет быстро и эффективно проводить молекулярный докинг большого набора данных остается одним из наиболее эффективных инструментов компьютерного поиска новых лекарственных средств, поскольку позволяют надежно предсказывать характер взаимодействия лиганда с целевым белком при наличии данных о пространственной структуре обоих участников.

AutoDock 4 широко применяется для исследований *in silico*, однако отличается высокой вычислительной затратностью. В сравнении с ним AutoDock Vina демонстрирует более высокую скорость, что делает его предпочтительным для виртуального скрининга, а

также лучшую точность: 78% результатов имеют RMSD менее 2 Å против 49% у AutoDock 4 [2,3].

В связи с этим в данной работе использовалась утилита на базе AutoDock Vina, поскольку AutoDock 4 не поддерживает конфигурационные файлы, упрощающие процесс докинга. В качестве мишени была выбрана циклооксигеназа-2, а в роли лиганда – флавоноид кверцетин, выделенный из экстрактов ольхи серой и чёрной, ранее изученных как потенциальные ингибиторы данного фермента [1].

В таблице 1 представлен конфиг-файл для исполнения в скрипте на основе AutoDock Vina.

**Таблица 1**

**Конфиг-файл для докинга**

```
receptor=1CX2clear.pdbqt – подготовленный белок
center_x=20.00
center_y=3.10 – центр решетки (Grid) для белка
center_z=20.00
size_x=30
size_y=30 – размер решетки (Grid) для белка
size_z=30
num_modes=15 – количество пробегов
exhaustiveness=8 – исчерпаемость (подвижность атомов)
energy_range=3 – макс. разница в энергии между наилучшим и наихудшим режимом
связывания
```

В таблицах 2 и 3 представлены результаты молекулярных докингов с помощью разработанного скрипта и связки AutoDock Vina с USCF Chimera. Небольшие различия в энергиях связывания можно объяснить погрешностью скоринг-функции алгоритма подсчета в AutoDock Vina.

**Таблица 2**

**Результаты докинга кверцетина с ЦОГ-2 с использованием разработанного скрипта**

Кластер №	Энергия связывания (ккал/моль)	Координаты связывания (x, y, z)
1	-9.6	(24.072, 1.375, 34.740)
2	-8.0	(24.269, 2.085, 35.013)
3	-7.9	(23.437, 0.974, 34.767)
4	-7.7	(22.619, 0.885, 33.242)
5	-7.3	(28.357, -8.838, 31.151)

**Таблица 3**

**Результаты докинга кверцетина с ЦОГ-2 с использованием USCF Chimera +Autodock Vina**

Номер опыта	Минимальная Есвяз., ккал/моль	Среднеквадратичное отклонение (нижняя граница)	Среднеквадратичное отклонение (верхняя граница)
1	-9.6	0.000	0.000
2	-8.1	1.414	6.655
3	-7.9	1.123	6.482
4	-7.8	2.282	6.798
5	-7.2	1.473	7.061

Для оценки корректности работы разработанного скрипта было выполнено сравнение пространственной топологии полученных комплексов (рисунки 1, 2). В результате анализа установлено, что лиганд располагается в одном и том же связывающем кармане, демонстрирует близкую пространственную конформацию и формируют комплексы с идентичным аминокислотным окружением.

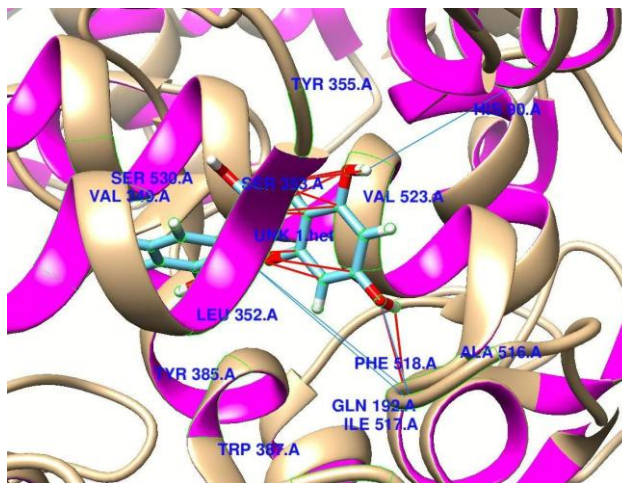


Рисунок 1. Комплекс протеин-лиганд AutoDock Vina + UCSF Chimera

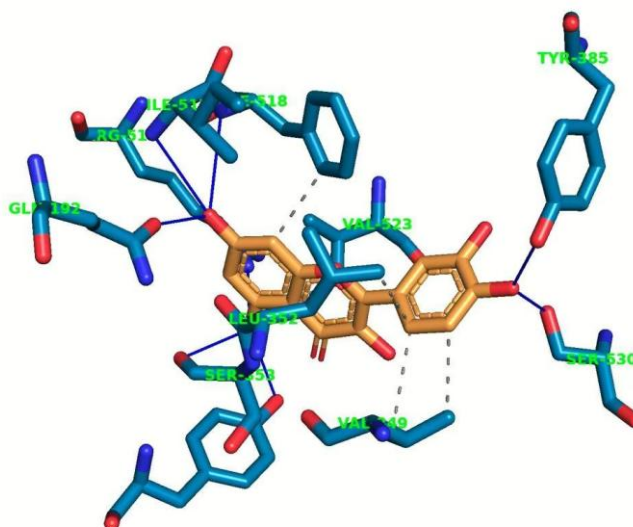


Рисунок 2. Комплекс протеин-лиганд разработанный скрипт + PLIP

### Заключение и выводы

Разработанный алгоритм показал высокие показатели эффективности и надёжности при оценке взаимодействия лигандов с белками-мишенями. Сопоставление результатов, полученных с использованием данной программы, с данными, полученными при работе в среде UCSF Chimera совместно с AutoDock Vina при *in silico* исследовании аффинности ряда соединений к циклооксигеназе-2, подтвердило сопоставимую точность и повышенную вычислительную производительность разработанной утилиты.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Лахвич, Ф. Ф. Изучение аффинности *in silico* компонентов листьев ольхи черной и серой к целевым биологическим мишеням в рамках рационального drug-дизайна новых противоязвенных и противовоспалительных средств / Ф. Ф. Лахвич, О. В. Мушкина, Я. О. Прокопья // БГМУ – в авангарде медицинской науки и практики. – 2025. – Вып. 15. – С. 581-587.
2. Eberhardt, J. AutoDock Vina 1.20: New Docking Methods, Expanded Force Field, and Python Bindings. / J.Eberhardt, [et al] // Journal of Chemical Information and Modeling. – 2021 V. 61(8) – P. 3891-3898
3. Trott, O. AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization, and multithreading. / O. Trott, A.Olson // Journal of computational chemistry. – 2010. - V31, 2. – P. 455-461.

УДК 616-006

Ровенский Е.В.<sup>1</sup>, Мирошенко А.С.<sup>1</sup>, Лукьянова Н.А.<sup>1</sup>, Савельева А.С.<sup>2</sup>  
**СЕКМЕНТАЦИЯ МУЛЬТИМОДАЛЬНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ С  
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ LIFEХ И PYTHON ДЛЯ ОЦЕНКИ ОТВЕТА НА  
НЕОАДЬЮВАНТНУЮ ТЕРАПИЮ РАКА МОЛОЧНОЙ ЖЕЛЕЗЫ**

<sup>1</sup>*Красноярский государственный медицинский университет имени профессора  
В.Ф. Войно-Ясенецкого, г. Красноярск*

<sup>2</sup>*Красноярский краевой клинический онкологический диспансер им. А.И. Крыжановского*

Оценка ответа на неоадьювантную терапию рака молочной железы традиционно основывается на одномерных измерениях по критериям RECIST, что недостаточно точно для гетерогенных опухолей. Радиомика позволяет извлекать количественные признаки из медицинских изображений, однако требует надежных методов сегментации областей интереса. Цель работы – сравнить возможности ручной сегментации опухолей в программе LifeX и полуавтоматической на Python для оценки ответа на неоадьювантную терапию рака молочной железы. В исследование включены анонимизированные изображения пациенток с трижды негативным или HER2-положительным раком молочной железы, получавших неоадьювантную терапию. Выполнены МРТ с динамическим контрастированием до и после лечения. Полуавтоматическая сегментация на Python проведена с использованием пороговых методов (Оцу и «среднее + сигма»). Показано, что полуавтоматическая сегментация позволяет выделить опухолевые очаги и посттерапевтические изменения, сопоставимые с результатами ручной разметки в LifeX.

**Ключевые слова:** рак молочной железы, радиомика, сегментация.

Rovensky E.V.<sup>1</sup>, Miroshenko A.S.<sup>1</sup>, Lukyanova N.A.<sup>1</sup>, Savelieva A.S.<sup>2</sup>  
**SEGMENTATION OF MULTIMODAL IMAGES USING LIFEХ AND PYTHON FOR  
ASSESSING RESPONSE TO NEOADJUVANT THERAPY IN BREAST CANCER**

<sup>1</sup>*Prof. V.F. Voino-Yasenetsky Krasnoyarsk State Medical University, Krasnoyarsk*

<sup>2</sup>*A.I. Kryzhanovsky Krasnoyarsk Regional Clinical Oncology Dispensary, Krasnoyarsk*

Assessment of response to neoadjuvant therapy in breast cancer traditionally relies on unidimensional measurements according to RECIST criteria, which lacks precision for heterogeneous tumors. Radiomics enables the extraction of quantitative features from medical images but requires robust methods for segmenting regions of interest. The aim of this work is to compare manual tumor segmentation using LifeX software with semi-automatic segmentation using Python for assessing response to neoadjuvant therapy in breast cancer. The study included anonymized images of patients with triple-negative or HER2-positive breast cancer who received neoadjuvant therapy. Dynamic contrast-enhanced MRI scans were performed before and after treatment. Semi-automatic segmentation in Python was carried out using thresholding methods (Otsu and “mean + sigma”). It was shown that semi-automatic segmentation allows for the delineation of tumor lesions and post-therapeutic changes comparable to those obtained with manual segmentation in LifeX.

**Keywords:** breast cancer, radiomics, segmentation.

Рак молочной железы (PMЖ) остается одной из ведущих причин онкологической смертности среди женщин [1]. По данным Международного агентства по изучению рака, в 2020 г. в мире зарегистрировано около 2,27 млн новых случаев PMЖ, что составляет 11,7% всех злокачественных новообразований [1]. В Российской Федерации в 2024 г. впервые выявлено 84 473 случая PMЖ [2, стр. 12], «грубый» показатель заболеваемости достиг 108,03 на 100 тыс. женского населения [2, стр. 16], а в структуре заболеваемости женщин

опухоли молочной железы составляют 22,4% [2, стр. 10]. Стандартизованный показатель заболеваемости за последнее десятилетие вырос на 14,97% [2, стр.19]. В ряде регионов, включая Красноярский край, темпы прироста превышают среднероссийские [3]. В России в 2024 г распространённость заболевания составила 563,5 на 100 тыс. населения [4, стр. 16].

Современные подходы к терапии поздних стадий РМЖ включают неoadъювантную терапию (НАТ), позволяющую уменьшить объём опухоли, повысить частоту органосохраняющих операций и оценить чувствительность неоплазмы к лекарственным препаратам. Ключевым прогностическим фактором после завершения НАТ является достижение полного патоморфологического ответа. Однако традиционные критерии оценки (RECIST 1.1), основанные на одномерных измерениях, обладают ограниченной точностью, особенно при гетерогенных и нерегулярных опухолях, и не всегда коррелируют с патоморфологическим ответом [1].

В последние годы активно развивается радиомика – количественный анализ медицинских изображений, позволяющий извлекать большой объём признаков, которые могут служить потенциальными биомаркерами ответа на терапию. Критическим этапом радиомического анализа является сегментация областей интереса (ROI, от англ. Region of Interest). Ручная сегментация врачом-рентгенологом остается «золотым стандартом», но она трудоемка и подвержена межэкспертной вариабельности. Автоматические методы на основе пороговой обработки, кластеризации или глубокого обучения могут повысить воспроизводимость и скорость анализа, однако их точность требует тщательной валидации на конкретных клинических данных.

Несмотря на активное развитие систем искусственного интеллекта в медицинской визуализации, большинство существующих решений ориентированы на задачи детекции и классификации опухолей на однократных снимках. Вопрос анализа динамики радиомических признаков до и после лечения остается открытым и практически не реализованным [5]. Отсутствуют готовые инструменты, позволяющие онкологу проследить количественные изменения характеристик опухоли в ответ на терапию на основе мультимодальных данных.

Программа LifeX представляет собой специализированный инструмент для радиомического анализа, позволяющий выполнять полуавтоматическую сегментацию и расчёт признаков в соответствии с международными стандартами IBSI [6]. Однако её возможности для пакетной обработки и интеграции с внешними алгоритмами ограничены. Язык программирования Python с библиотеками для научных вычислений предоставляет гибкую среду для реализации автоматических методов сегментации и последующего

анализа. Сочетание специализированного ПО и гибких скриптовых языков открывает перспективы для создания воспроизводимых конвейеров обработки мультимодальных данных, однако практическая реализация таких подходов в условиях реального клинического материала требует пилотной оценки.

### **Цель работы**

Цель исследования заключается в оценке возможностей мультимодальной сегментации с помощью программы LifeX и автоматизации на Python для оценки ответа на неоадьювантную терапию РМЖ.

### **Материал и методы**

Материалами исследования являются анонимизированные МРТ 19 пациенток старше 18 лет с морфологически верифицированным раком молочной железы трижды негативного или HER2-положительного подтипа, получавших неоадьювантную терапию в Красноярском краевом клиническом онкологическом диспансере им. А.И. Крыжановского. Набор пациенток осуществлялся с мая 2025 года по настоящее время. У каждой пациентки есть МРТ с динамическим контрастированием, выполненные до начала лечения. У двух пациенток уже имеются МРТ изображения после завершения НАТ.

Методы исследования. Сегментация ROI выполнена двумя способами.

Ручная сегментация в программе LifeX (версия 25.06.1). Выделялись области интереса на МРТ до лечения – объемные (3D VOI), соответствующие видимой опухоли; на МРТ после лечения – зоны, соответствующие локализации первичной опухоли для оценки посттерапевтических изменений. Для каждой ROI автоматически рассчитывались: объем (см<sup>3</sup>), количество вокселей, размер вокселя, среднее значение интенсивности, стандартное отклонение, минимальное и максимальное значения интенсивности, координаты центроида.

Полуавтоматическая сегментация на Python (версия 3.11). Использованы библиотеки `pydicom`, `numpy`, `opencv-python`, `matplotlib`, `skimage`. Стартовая область для алгоритмов задавалась вручную. Использованы два пороговых метода. Метод Оцу определяет оптимальный порог бинаризации на основе гистограммы интенсивностей изображения. Метод «среднее + сигма» классифицирует пиксели, интенсивность которых превышает сумму среднего значения и произведения стандартного отклонения на заданный коэффициент. Оба метода не требуют предварительного обучения, что обосновывает их применение в пилотных исследованиях с ограниченным объемом данных.

Сопоставление результатов ручной и автоматической сегментации проводилось визуально и путем сравнения рассчитанных объемов и координат центроидов.

Результаты и обсуждения. В результате сегментации МРТ изображений в программе LifeX для каждой пациентки полученные количественные характеристики ROI сформированы в единую базу данных для последующего анализа и сопоставления с патоморфологическим ответом. Для двух пациенток (обозначим их N1 и N2), у которых на данный момент уже есть изображения до и после НАТ, проведен сравнительный анализ изменений характеристик опухоли. У пациентки N1 выявлено уменьшение объема ROI по МРТ с 4,1 до 0,26 см<sup>3</sup>, а у пациентки N2 по МРТ с 1,4 до 0,15 см<sup>3</sup>, что согласуется с клиническим ответом и соответствует регрессии опухоли и формированию посттерапевтических изменений.

Результаты сегментации опухоли по МРТ (поперечный срез) пациентки N1 показаны на рисунке 1, а для пациентки N2 – на рисунке 2. На рисунках 1(а) и 2(а) розовым цветом в LifeX выделена ROI, соответствующая опухолевому очагу на основе данных рентгенологического описания. С помощью порогового алгоритма Оцу, реализованного в Python, зеленым цветом автоматически выделен опухолевый очаг. На рисунках 1(б) и 2(б) определена область установки маркера, наблюдается полный регресс опухоли, выделенная зона значительно уменьшилась в размерах по сравнению с исходным снимком и характеризуется низкой интенсивностью сигнала для пациентки N1: 117,0 против начального 635,7, для пациентки N2: 108,6 против начального 565,1, что свидетельствует о положительном ответе на проведенное лечение. Координаты центроида опухоли, (x, y, z) мм, сместились, в МРТ пациентки N1: (125,1; 110,7; 27,6) до НАТ, (133,8; 146,4; 19,2) после НАТ; в МРТ пациентки N2: (266,2; 83,9; 35,0) до НАТ, (263,2; 67,6; 36,8) после НАТ, что также косвенно свидетельствует о структурной перестройке тканей.

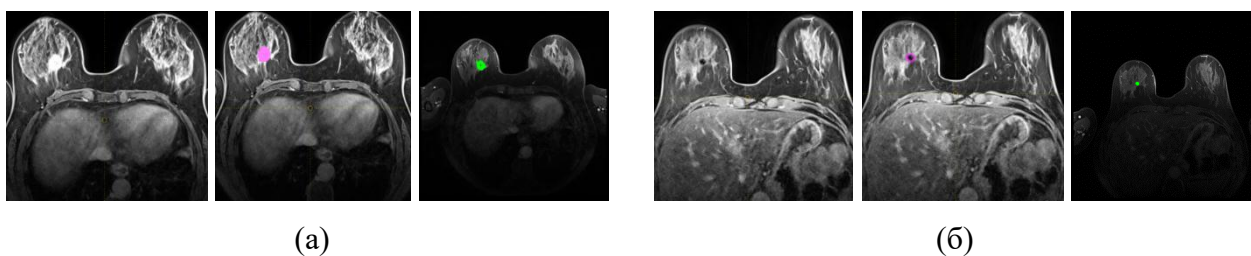


Рисунок 1 – МРТ снимок пациентки N1, (а) – до начала НАТ, (б) – определение метки после НАТ. В каждом блоке три фрагмента: исходное изображение опухоли в левой молочной железе, сегментация в LifeX (розовая область), сегментация в Python (зеленая область)

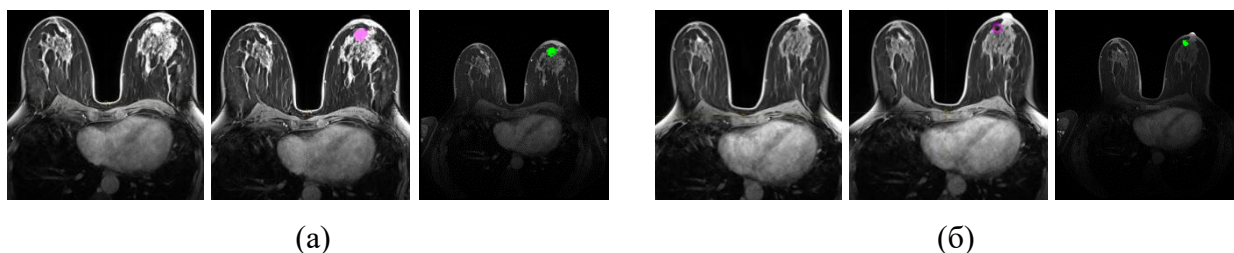


Рисунок 2. МРТ снимок пациентки N2, (а) – до начала НАТ, (б) – определение метки после НАТ. В каждом блоке три фрагмента: исходное изображение опухоли в левой молочной железе, сегментация в LifeX (розовая область), сегментация в Python (зеленая область)

### Заключение и выводы

Несмотря на все преимущества, ручная сегментация имеет ряд критических ограничений: трудоемкость, субъективность и невозможность масштабирования. В ходе работы было показано, что автоматическая сегментация позволяет выделить опухолевые очаги и посттерапевтические изменения, сопоставимые с результатами ручной разметки. В ближайшей перспективе планируется проведение валидации алгоритмов на расширенной выборке клинических случаев; создание рабочего прототипа системы для оценки динамики опухоли, доработка и масштабирование базы радиомических признаков.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Голубева Т.С., Тодуа Н.Г., Белова Е.В. Эпидемиология и диагностика рака молочной железы на современном этапе (обзор литературы) // Вестник медицинского института «РЕАВИЗ». – 2025. – № 1 (118). – С. 54–59.
2. Злокачественные новообразования в России в 2024 году (заболеваемость) / под ред. А.Д. Каприна [и др.] – М.: МНИОИ им. П.А. Герцена – филиал ФГБУ «НМИЦ радиологии» Минздрава России, 2025. – 178 с.
3. Зуков Р.А., Сафонцев И.П., Зюсюкина А.В. и др. Анализ заболеваемости раком молочной железы в Красноярском крае // Опухоли женской репродуктивной системы. – 2023. – Т. 19, № 1. – С. 82–89.
4. Состояние онкологической помощи населению России в 2024 году / под ред. А.Д. Каприна, В.В. Старинского, А.О. Шахзадовой. – М.: МНИОИ им. П.А. Герцена – филиал ФГБУ «НМИЦ радиологии» Минздрава России, 2025. – 275 с.
5. Зуков Р.А., Комиссарова В.А., Сафонцев И.П., Евминенко С.А. Искусственный интеллект в диагностике рака молочной железы: опыт региона // Врач и информационные технологии. – 2024. – № 4. – С. 72–84. doi: 10.25881/18110193\_2024\_4\_72.
6. Nioche C., Orhac F., Boughdad S. et al. LIFEEx: a freeware for radiomic feature calculation in multimodality imaging to accelerate advances in the characterization of tumor heterogeneity // Cancer Research. – 2018. – Vol. 78, No. 16. – P. 4786–4789.

***Сведения об авторах статьи:***

1. **Ровенский Егор Викторович** – студент 6 курса специальности 30.05.03 Медицинская кибернетика ФГБОУ ВО КрасГМУ им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России, г. Красноярск, e-mail: egor.rovenskij@yandex.ru
2. **Мирошенко Анастасия Сергеевна** – студентка 6 курса специальности 30.05.03 Медицинская кибернетика ФГБОУ ВО КрасГМУ им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России, г. Красноярск, e-mail: min\_lucu\_3@mail.ru
3. **Лукьянова Наталья Александровна** – к.ф.-м.н., доцент кафедры медицинской кибернетики и информатики ФГБОУ ВО КрасГМУ им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России, г. Красноярск, e-mail: nalukyjanovakrsk@gmail.com
4. **Савельева Анастасия Сергеевна** – к.м.н., ассистент кафедры лучевой терапии, врач-рентгенолог КГБУЗ «Красноярский краевой клинический онкологический диспансер им. А.И. Крыжановского», e-mail: as\_saveleva@mail.ru

УДК 004:61-057.875

Рябушко Л. В., Гольцев М. В., Белая О.Н.

**ЦИФРОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ КАК ОДИН ИЗ ФАКТОРОВ ПРАКТИКО-ОРИЕНТИРОВАННОГО ОБУЧЕНИЯ СТУДЕНТОВ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ МЕДИЦИНСКИХ ЗАВЕДЕНИЙ**

*Белорусский государственный медицинский университет, г. Минск*

В данной работе показано, что использование цифровых технологий в образовательном процессе дает новое направление и импульс в практико-ориентированном обучении студентов медиков, формируя профессиональные компетенции при изучении академической дисциплины «Медицинская и биологическая физика».

**Ключевые слова:** электронное обучение, практико-ориентированные задания.

Rabushka L.V., Goltsev M.V., Belaya O.N.

**DIGITAL TECHNOLOGIES AS A FACTOR IN PRACTICE-ORIENTED TRAINING OF STUDENTS OF HIGHER MEDICAL EDUCATIONAL INSTITUTIONS**

*Belarusian State Medical University, Minsk*

The paper shows that the use of digital technologies in the educational process opens up a new direction and gives impetus to the practice-oriented training of medical students, forming professional competencies in the study of the academic discipline "Medical and Biological Physics."

**Key words:** e-learning, practice-oriented tasks.

В современной системе медицинского высшего образования цифровые технологии выступают фундаментальным ресурсом для формирования практических навыков у студентов. Цифровые технологии активно интегрируются в высшее образование посредством модели смешанного обучения, цифровых образовательных сред и практик онлайн обучения [1]. Эти подходы, хотя и различаются, взаимосвязаны и отражают тенденцию цифровизации в образовании, которая повышает качество практической подготовки студентов [2]. Более того, цифровые образовательные технологии способствуют существенному изменению роли как преподавателя, так и студента в практико-ориентированном обучении.

Современную медицину трудно представить себе без уникального диагностического и лечебного оборудования. Врач-профессионал должен понимать физические законы, лежащие в основе физиологических процессов, а также он должен глубоко разбираться и в прикладной биофизике. Это необходимо для грамотной эксплуатации сложного медицинского оборудования и точной интерпретации результатов высокотехнологичной диагностики и терапии.

Курс «Медицинской и биологической физики» для медиков включает в себя основы биофизики, методы решения медицинских задач с помощью законов физики, физические методы терапии и диагностики, принципы устройства используемой диагностической и лечебной аппаратуры. Поэтому и цель учебной дисциплины «Медицинская и

биологическая физика» направлена на освоение студентами базиса профессиональных компетенций, позволяющих использовать актуальные физические методы в диагностике и терапии.

Сочетание традиционных образовательных подходов и цифровых инструментов оптимизирует и выводит на качественно новую ступеньку процесс обучения академической дисциплине «Медицинская и биологическая физика». Более того, цифровые технологии предоставляют уникальные возможности для развития профессиональных компетенций студентов-медиков, выводя на передний план практико-ориентированное обучение.

### **Цель работы**

Цель данного исследования состояла в выявлении эффективности гибридного подхода, сочетающего цифровые и традиционные технологии, в процессе формирования профессиональных навыков у студентов первого курса Белорусского государственного медицинского университета при изучении академической дисциплины «Медицинская и биологическая физика».

### **Материал и методы исследования**

В рамках реализации поставленной цели осуществлялось изучение и обобщение профильной литературы. В данной работе были задействованы многогранные методы: наряду с проверенными временем традиционными образовательными технологиями, для целенаправленного формирования и всесторонней оценки общепрофессиональных компетенций студентов была задействована модульная объектно-ориентированная динамическая учебная среда LMS MOODLE. Проводился тщательный сравнительный анализ, а также педагогический эксперимент на основе опыта работы со студентами первого курса всех факультетов, результаты которого позволили сформулировать обоснованные обобщения и выводы [3].

### **Результаты и обсуждение**

Практический опыт кафедры медицинской и биологической физики убедительно демонстрирует, что внедрение и активное применение в образовательном процессе обширного спектра электронных средств обучения, воплощенных в электронных учебно-методических комплексах (ЭУМК) на платформе LMS MOODLE, закладывает необходимый фундамент для формирования профессионально компетентной личности.

Как показывает практика работы, приобретение профессиональных компетенций при изучении медицинской и биологической физики у будущих медиков осложняется тремя факторами: слабой школьной базой по физике, отсутствием навыков системного обучения и низкой мотивацией изучения данной дисциплины. Студенты часто проявляют

пассивность, так как не видят связи между медицинской и биологической физикой и своей будущей специальностью [4]. Использование платформы LMS MOODLE в учебном процессе решает эту сложную проблему, используя наглядность представления учебного контента, а также способствуя реализации принципов индивидуализации и дифференциации в рамках практико-ориентированной парадигмы обучения. Структура ЭУМК обеспечивает студентам оперативный доступ к таймингу занятий, теоретической базе (списку литературы и презентациям лекций), к лабораторным и практическим занятиям с практико-ориентированными заданиями. В структуре занятия четко разграничены теоретические блоки и практические задания практико-ориентированного характера, при этом структура семинаров и лабораторных работ варьируется в зависимости от их специфики. Оснащение учебного материала анимационными элементами, делает процесс обучения наглядно-образным и более интересным, что, в свою очередь, преобразует восприятие студентов, пробуждая живой интерес к материалу, и способствует более глубокому пониманию сложнейших физических явлений и процессов, лежащих в основе современной медицины. Так, использование мультимедийных средств при изучении темы «Фотодинамическая терапия» наглядно демонстрирует механизм запуска апоптоза под воздействием окислительного стресса. В частности, рассматривается роль пероксида водорода как наиболее стабильной активной формы кислорода (АФК), способной инициировать запрограммированную гибель клетки.

Ключевую роль в повышении мотивации студентов к освоению медицинской и биологической физики, а также в формировании у них понимания ее значения для обретения профессиональных компетенций, играет целесообразное включение в электронный учебно-методический комплекс вопросов, ориентированных на практические аспекты профессии, и практико-ориентированных заданий, непосредственно связанных с решением реальных клинических или исследовательских задач [5]. Целью профессионально ориентированных физических задач является обучение студентов решению проблем, встречающихся в медицинской практике, через содержание, имеющее явную профессиональную направленность.

Примером практико-ориентированного задания, представленного при изучении темы «Биоакустика. Ультразвук и его свойства. Акустические методы исследования и воздействия в медицине», может служить следующая задача: «Известно, что отраженный ультразвуковой импульс от инородного тела в мышечной ткани был зафиксирован через 30 мкс после излучения. Принимая скорость ультразвука в мышце равной 1500 м/с, определите расстояние от датчика до объекта». Для успешного решения этой задачи

студенту необходимо владеть физическими принципами ультразвуковой диагностики и разбираться в различных методах её реализации, в частности, быть знакомым с А-методом. Профессиональная направленность курса медицинской и биологической физики в высших медицинских учебных заведениях может быть успешно реализована путем интеграции решения специально разработанных задач, имеющих прямое отношение к медицинской деятельности.

Мы отмечаем по опыту кафедры, что проведение виртуальных лабораторных работ в цифровой платформе LMS MOODLE существенно повышает результативность в формировании практических навыков у студентов. Современные интерактивные методики дистанционного обучения, опирающиеся на компьютерные технологии и Интернет, расширяют возможности лабораторного практикума по медицинской и биологической физике. Они предоставляют студентам эксклюзивную возможность ознакомления с высокотехнологичными микроскопическими методами физических исследований медико-биологических объектов, в частности, с атомно-силовой микроскопией (АСМ). Использование цифровых технологий в лабораторном практикуме по медицинской и биологической физике позволяет студентам в интерактивном режиме осваивать современные микроскопические методы исследований и учиться визуализировать клетки и их мембраны на наноуровне с помощью атомно-силовой микроскопии. Практическая подготовка студентов подразумевает овладение понятийным аппаратом и расчетными формулами различных микроскопических методов исследования. Студенты должны не только уметь сопоставлять показатели в различных единицах измерения (нанометры, микрометры), но и давать обоснованную и корректную интерпретацию полученным результатам микроскопических исследований медико-биологических объектов. С этой целью учебный процесс по курсам «Медицинская и биологическая физика» и «Биомедицинская физика» дополнен результатами научных исследований преподавателей кафедры, полученных методом атомно-силовой микроскопии. Так, используя результаты научной работы по получению АСМ-изображений активированных тромбоцитов, студенты изучают процесс адгезии тромбоцитов и их последующее распластывание на поверхности слюды. С точки зрения приобретения практических навыков, это позволяет наглядно изучить формирование филоподий и ламеллоподий, а также проанализировать их метрические характеристики на нанометровом уровне. Одно из занятий, направленных на формирование практических навыков у студентов, связано с запрограммированной клеточной смертью – апоптозом. Программа для работы с АСМ-изображениями позволяет студентам детально изучать морфологические изменения клеток при апоптозе и некрозе,

вызванные окислительным стрессом. Метод АСМ обеспечивает детальную визуализацию морфологических маркеров апоптоза, индуцированного окислительным стрессом (сморщивание и фрагментация, образование апоптотических телец). Практические результаты лабораторных работ представляются студентами в виде корректно обработанных и адекватно интерпретированных АСМ-изображений (двумерных или трёхмерных) исследуемых биообъектов, таблиц, гистограмм. Цифровые технологии позволяют использовать результаты научной работы преподавателей кафедры в образовательном процессе и способствуют росту познавательной активности студентов, формированию устойчивой заинтересованности в освоении медицинской и биологической физики, приобретению практических навыков работы с медико-биологическими объектами.

ЭУМК предусматривает контроль учебного процесса студентов с предоставлением обратной связи и выявлением ошибок. Итоговые тесты по разделам, состоящие из множества количественных и качественных задач, ориентированных на будущую профессиональную деятельность медиков, служат инструментом проверки и оценки знаний. Такая профессионально-практическая направленность тестов усиливает интерес студентов к изучению медицинской и биологической физики.

Электронный учебно-методический комплекс также поддерживает самостоятельную подготовку и самоконтроль студентов при освоении нового материала. Самостоятельная работа охватывает как репродуктивные задачи, так и практико-ориентированные задания поискового характера, предлагая студентам оптимальное сочетание методов. Теоретическое обучение чередуется с практическими заданиями, направленными на закрепление знаний и формирование базовых профессиональных навыков. Разработанные кафедрой тесты по "Медицинской и биологической физике" обеспечивают контроль усвоенных профессиональных знаний, необходимых и полезных в будущей профессии студентов-медиков.

Практический опыт работы кафедры показывает, что использование динамической учебной среды MOODLE делает учебный процесс персонализированным, учитывающим уровень подготовки и темп усвоения знаний каждого обучающегося. Опыт свидетельствует, что системы электронного обучения эффективно стимулируют активную познавательную и учебную деятельность студентов-медиков. Это позволяет им не только усвоить практически значимые знания и сформировать базовые профессиональные навыки, но и повысить интерес к изучению медицинской и биологической физики.

### **Заключение и выводы**

Многолетний опыт работы кафедры медицинской и биологической физики Белорусского государственного медицинского университета демонстрирует, что интеграция цифровых технологий в образовательный процесс предают новый импульс и открывает широкие перспективы в практико-ориентированном обучении студентов-медиков.

### **ЛИТЕРАТУРА**

1. Лапшина, И.В. Современные цифровые технологии в сфере практико-ориентированной педагогической деятельности / И.В. Лапшина, А.В. Алексеева, Е.В. Папченко // Гуманитарные и социальные науки. – 2024. – Т. 103. – № 2. – С. 161-167.
2. Исаева, Э.Л. Практико-ориентированные технологии в образовательном процессе в контексте развития цифровизации / Э.Л. Исаева, З.А. Магазиева // Инновационная экономика: информация, аналитика, прогнозы. – 2023. – № 3. – С. 149-153.
3. Рябушко, Л. В. Использование современных образовательных технологий в высшем медицинском учебном заведении / Л.В. Рябушко, М. В. Гольцев, О. Н. Белая, М. В. Гольцева // Перспективы развития высшей школы: материалы XVII Междунар. науч.метод. конф., / редкол.: В. В. Пешко [и др.]. – Гродно : ГГАУ, 2024. — С.46 – 49.
4. Кривцова, И.О. Анализ эффективности профильного изучения физики в медицинском вузе в рамках формирования профессиональных компетенций будущего врача / И.О. Кривцова, А.В. Плетнев, В.В. Бельчинский // Проблемы современного педагогического образования. – 2018. – № 61(1). – С. 106-109.
5. Гольцев, М. В. Цифровые технологии как метод формирования профессиональных компетенций при изучении учебной дисциплины «Медицинская и биологическая физика» / М. В. Гольцев, Л. В. Рябушко, О. Н. Белая // Достижения науки и образовательные практики : материалы IV Респ. науч.-метод. конф. с междунар. участием «Актуальные проблемы современного естествознания», Минск, 10 апр. 2025 г. / редкол.: В. А. Гайсёнок (пред.) [и др.]. – Минск : РИВШ, 2025. – С. 206 - 209.

УДК 617 004.891.2

Сакипова З.Б., Кожанова К.К., Келеке А.С.

## ЦИФРОВИЗАЦИЯ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКОЙ ОТРАСЛИ. ОПЫТ СОЗДАНИЯ AI АГЕНТА-ФАРМАЦЕВТА

*Казахский национальный медицинский университет имени С.Д. Асфендиярова, г. Алматы*

Цифровизация фармацевтической отрасли сегодня рассматривается не просто как внедрение базовых ИТ-систем, а как фундаментальный переход к интеллектуальным информационным технологиям, управляемым данными. В условиях растущего спроса на оперативную медицинскую помощь, создание виртуальных помощников становится критической необходимостью. В настоящей статье представлен экспериментальный опыт создания AI (Artificial Intelligence, искусственный интеллект) агента-фармацевта – инновационного цифрового помощника, интегрированного в экосистему казахстанского маркетплейса аптечных товаров Daribar. Результаты внедрения демонстрируют значительное повышение доступности и качества фармацевтической помощи: автоматизация первичного консультирования повысила лояльность пользователей к цифровой платформе и обеспечила безопасный, научно обоснованный подход к выбору медикаментов для конечного потребителя.

**Ключевые слова:** искусственный интеллект, фармацевтическая помощь, цифровизация здравоохранения, большие языковые модели (LLM).

Sakipova Z.B., Kozhanova K.K., Keleke A.S.

## DIGITALIZATION OF THE PHARMACEUTICAL INDUSTRY. CREATING AN AI PHARMACIST AGENT

*Asfendiyarov Kazakh National Medical University, Almaty*

Digitalization of the pharmaceutical industry is today viewed not simply as the implementation of basic IT systems, but as a fundamental transition to intelligent, data-driven information technologies. With the growing demand for prompt medical care, the creation of virtual assistants is becoming critical. This article presents an experimental attempt in creating an AI (Artificial Intelligence) pharmacist agent as an innovative digital assistant integrated into the ecosystem of a Kazakhstani pharmacy marketplace Daribar. The implementation results demonstrate a significant improvement in the accessibility and quality of pharmaceutical care: automation of the initial consultation has increased user loyalty to the digital platform and ensured a safe, scientifically sound approach to medication selection for the end consumer.

**Keywords:** artificial intelligence, pharmaceutical care, healthcare digitalization, large language models (LLM).

Глобальная фармацевтическая индустрия переживает интенсивную цифровую трансформацию [6]. Переход от традиционных методов распространения лекарств к цифровым платформам (электронной коммерции) и использование технологий искусственного интеллекта стали основными драйверами роста и оптимизации отрасли. В то же время, розничный аптечный сегмент сталкивается со значительными проблемами: пациенты часто испытывают трудности с самостоятельным выбором лекарств, не понимают разницы между фирменными и генерическими препаратами и подвергаются рискам, связанным с несовместимостью назначенных лекарств [7]. В традиционных аптеках эту проблему обычно решают фармацевты, но стремительный рост онлайн-

шопинга создал острую необходимость переноса квалифицированной фармацевтической помощи в цифровую среду [1].

В Республике Казахстан рынок фармацевтической электронной коммерции демонстрирует устойчивый рост [5]. Ярким примером этого местного рынка является Daribar.kz, локальная торговая площадка, объединяющая как небольшие аптеки, так и крупные сети. Платформа предоставляет доступ к более чем 26 000 товаров, предлагая пользователям услуги самовывоза и быстрой доставки [3].

Несмотря на передовые технологии платформы, одной из задач при расширении аудитории сервиса стоит снижение барьера для самостоятельного выбора: пациентам требуется квалифицированная помощь в поиске альтернатив недоступным лекарствам или уточнении инструкций. Поэтому интеграция искусственного интеллекта в виде искусственного интеллекта (AI) агента – фармацевта стала логичным и необходимым шагом в цифровизации платформы. Создание цифрового консультанта призвано решить проблему «брошенных корзин», автоматизировать рутинные запросы и обеспечить пользователям круглосуточный доступ к достоверной медицинской информации.

### **Цель работы**

Целью исследования явилась разработка, внедрение и улучшение производительности AI агента-фармацевта в рамках казахстанской платформы электронной коммерции Daribar. Исследование направлено на создание вспомогательных модулей, способных автоматически проводить консультации с пациентами, тщательно оценивать выбор и сравнение лекарственных препаратов, тем самым максимально повышая доступность и качество фармацевтической помощи для населения.

### **Материал и методы**

В исследовании использовался комплексный подход, включающий методы программной инженерии, машинного обучения и анализа поведения пользователей. ИТ-инфраструктура торговой площадки Daribar.kz и ее мобильного приложения послужили пилотной базой для внедрения агента искусственного интеллекта (AI агента-фармацевта).

AI агент основан на больших языковых моделях (Large Language Models, LLM), адаптированных для медицинской сферы. Для предотвращения «галлюцинаций» использовался метод поисковой дополненной генерации (Retrieval-Augmented Generation, RAG). Базу знаний для модуля RAG представил оцифрованный сборник инструкций по медицинскому применению фармацевтических продуктов, представленных на платформе. AI агент был интегрирован в ядро через программный интерфейс приложения (Application Programming Interface, API), что позволило ему не только решать задачи, но и напрямую

взаимодействовать с функционалом торговой площадки, таким как: связь с модулем геолокации для логистических расчетов и организации доставки; поиск лекарств на основе симптомов; и интеграция с режимом будильника пользователя для автоматического напоминания о приеме лекарств.

### **Результаты и обсуждение**

Внедрение искусственного интеллекта в секторы непосредственно влияющие на качество жизни и здоровье граждан, таких как клиническая фармация, невозможно без строгого соблюдения требований соответствующей нормативно-правовой базы и этики. Правовой вакуум порождает критические риски в вопросах медицинской ответственности, дискриминации и утечки персональных данных. Осознавая эти риски, Республика Казахстан сделала исторический, прорывной шаг, став одним из первых государств в мире, разработавшим и принявшим всеобъемлющее профильное законодательство.

17 ноября 2025 года Президент РК Касым-Жомарт Токаев подписал исторический Закон № 230-VIII «Об искусственном интеллекте», который вступает в полную юридическую силу 18 января 2026 года [4]. Данный законодательный акт, наряду с сопутствующим пакетом поправок в Кодекс об административных правонарушениях, законы о защите персональных данных, информатизации и СМИ, формирует институциональную экосистему легального применения нейросетей.

Концептуально Закон РК фиксирует важнейшую философскую и юридическую парадигму: искусственный интеллект рассматривается исключительно как функциональный инструмент для достижения человеческих целей, а не как автономный субъект права или квази-личность [4]. Это положение имеет прямое, фундаментальное значение для медицинской практики.

Параллельно с развитием государственной нормативно-правовой инфраструктуры в Казахстане стремительно масштабируется частная венчурная IT-экосистема. Безоговорочным драйвером инноваций выступает международный технопарк Astana Hub. В рамках технопарка формируется мощный кластер стартапов направления MedTech, в направлении которого развивается Daribar.kz. На специализированных технологических площадках (таких как AI Week и Digital Bridge) эксперты индустрии обсуждают практические аспекты трансформации здравоохранения с помощью нейросетей, возможности привлечения венчурных инвестиций и стратегии вывода локальных продуктов на глобальные рынки [2].

В рамках описанного направления, разработанный AI-агент продемонстрировал свою способность автоматически решать широкий спектр клинических и

фармацевтических задач. Ключевым достижением стала реализация модуля «Интеллектуальный подбор аналогов».

В отличие от стандартного текстового поиска, агент способен вести контекстный диалог на естественном языке с учетом синтаксических и семантических ошибок. Вся сгенерированная информация сопровождается обязательным предупреждением о том, что консультация не заменяет визит к врачу, что обеспечивает юридическую и этическую безопасность.

Проведенное экспериментальное исследование по созданию и внедрению AI-агента-фармацевта на базе казахстанской платформы Daribar.kz доказывает высокую практическую ценность цифровизации розничного фармацевтического сектора. Переход к интеллектуальным информационным технологиям позволил успешно трансформировать стандартный маркетплейс в полноценную систему фармацевтической опеки.

#### **Заключение и выводы**

Разработанный цифровой помощник успешно справляется с задачами автоматического консультирования, маршрутизации пациентов и персонализированного подбора лекарственных средств из базы, насчитывающей более 26 000 наименований.

Внедрение AI-агента продемонстрировало свою состоятельность не только как инструмента поддержки пациентов в режиме 24/7, но и как эффективного бизнес-решения, способствующего росту конверсии и расширению аудитории платформы. Опыт платформы Daribar может служить референсной моделью для масштабного внедрения искусственного интеллекта в систему электронного здравоохранения и коммерции в Республике Казахстан.

#### **ЛИТЕРАТУРА**

1. Афанасьева Т.Г., Кушнир А.Ю., Морковин В.А., Вешкурцева В.И., Цыганкова А.С., Давидян А.А., Ленкин С.Г. Цифровой маркетинг как элемент продвижения аптечных организаций // Современные проблемы здравоохранения и медицинской статистики. 2025. № 1. С. 1-13.
2. Астана Хаб: цифровой технопарк: официальный сайт // Автономный кластерный фонд «Астана Хаб». 2025. URL: <https://astanahub.com/ru/> (дата обращения: 12.02.2026).
3. Исмагулов, М. Daribar.kz — стартап, который позволяет заказывать товары из аптек с выгодой до 30% // THE TECH. 2024. URL: <https://the-tech.kz/daribar-kz-startap-kotoryj-rozvolyaet-zakazyvat-tovary-iz-aptkek-s-vygoj-do-30/> (дата обращения: 12.02.2026).
4. Об искусственном интеллекте: Закон Республики Казахстан от 17 ноября 2025 года № 230-VIII. // Әділет: информационно-правовая система нормативных правовых актов Республики Казахстан. URL: <https://adilet.zan.kz/rus/docs/Z2500000230> (дата обращения: 12.02.2026).

5. ШТАДА Евразия представила анализ фармрынка и ключевые тренды развития ePharma в регионе // PharmReviews.kz: ежедн. интернет-изд. 2025. 12 дек. URL: <https://pharmreviews.kz/stati/sobytiya/stada-evraziya-predstavila-analiz-farmrynka-i-klyuchevye-trendy-razvitiya-epharma-v-regione> (дата обращения: 12.02.2026).
6. Chalasani S. H., Syed J., Ramesh M., Patil V., Pramod Kumar T. M. Artificial intelligence in the field of pharmacy practice: A literature review. // Exploratory research in clinical and social pharmacy. 2023. № 12. P. 100346. <https://doi.org/10.1016/j.rcsop.2023.100346>
7. Sharma T., Mankoo A. AI-Driven Chatbots and Virtual Assistants in Pharmaceutical Care: A Comprehensive Review // Int. J. of Pharm. Sci.. 2025. Vol 3. Issue 6. P. 4345-4356. <https://doi.org/10.5281/zenodo.15741038>

УДК 547.84

Сафиуллина А.Г.

## ПРОГНОЗИРОВАНИЕ IN SILICO ТОКСИЧНОСТИ И ЛЕЧЕБНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НЕКОТОРЫХ 2-МЕТОКСИ-1,3-ДИГЕТЕРОЦИКЛОАЛКАНОВ

*Уфимский государственный нефтяной технический университет, г. Уфа*

Изучены геометрические, энергетические характеристики соединений замещенных 2-метокси-1,3-дигетероциклоалканов. Проведен сравнительный анализ соединений. Показано применение квантовохимических методов для прогнозирования токсичности и лечебного воздействия.

**Ключевые слова:** квантовохимические расчеты; орбитальные взаимодействия; орбитальный анализ; 1,3-дигетероциклоалканы.

Safiullina A.G.

## IN SILICO PREDICTION OF TOXICITY AND THERAPEUTIC EFFECTS OF SOME 2-METHOXY-1,3-DIHETEROCYCLOALKANES

*Ufa State Petroleum Technical University, Ufa*

The geometric and energetic characteristics of substituted 2-methoxy-1,3-diheterocycloalkanes were studied. A comparative analysis of the compounds was conducted. The application of quantum chemical methods for predicting toxicity and therapeutic effects was demonstrated.

**Keywords:** quantum chemical calculations; orbital interactions; orbital analysis; 1,3-diheterocycloalkanes.

Многие дигетероциклоалканы лежат в основе новых отечественных лекарственных средств, которые применяют для лечения и профилактики различных заболеваний. Биологически активные соединения, обладающие высокой активностью и низкой токсичностью (в том числе на основе диазациклоалканов), являются предметом изучения, конструируются и синтезируются.

### Цель работы

Целью практических и теоретических исследований является поиск биологических мишеней, моделирование «стыковки» молекулы гексагидропиримидина с активным центром белка-рецептора. Например, изучается их взаимодействие с ферментами циклооксигеназами для оценки анальгетического потенциала.

Основные направления *in silico* исследований - предсказание потенциальной активности производных 1,3-дигетероциклов. Они могут проявлять противовоспалительные, антибактериальные, противоопухолевые или антидиабетические свойства. На основе этих параметров можно сделать удаленную оценку фармакокинетики: выведения, токсичности, распределения, всасываемости и метаболизма.

Известно, что сочетание квантовохимических методов с результатами по стабильности молекулы, распределению электронной плотности и реакционной способности с экспериментальными методами оказывается эффективным для разработки

лекарств, моделирования их взаимодействия с белками-мишенями [1]. Поэтому полезно рассматривать такие параметры квантовохимического расчета, как высшая занятая молекулярная орбиталь (homo), низшая незанятая молекулярная орбиталь (lumo), их энергии, другие, в том числе длины связей, дипольные моменты, заряды на гетероатоме [2,3], для объяснения возможной биологической активности 1,3-дигетероциклов. Ведь очевидно, что решающую роль в биологической активности дигетероциклов играют характерные для них стереоэлектронные эффекты.

В контексте антибактериальной активности стереоэлектронность определяет, насколько эффективно молекула свяжется с мишенью и как долго она будет сопротивляться ферментативному гидролизу.

### Материал и методы исследования

В данной работе были изучены замещенные 1,3-дигетероцикланы **(1)-(2)** (рис. 1). Были рассчитаны методами AM1, PM3, STO-3G, 3-21G [4,5] геометрические и энергетические характеристики в принятых единицах измерения [6-12] (в том числе энергии пар атомов: электростатический-стерический и орбитальный вклады, энергии homo ( $E_{homo}$ ) и lumo ( $E_{lumo}$ ), их разница  $\Delta E$ ), дипольные моменты соединений, заряды на атоме кислорода, азота.

### Результаты и их обсуждение

Результаты расчета представлены в таблице 1, где приведено сравнение энергии lumo, homo, дипольного момента, заряда на гетероатоме.

**Таблица 1**

**Энергии homo и lumo, их разница, дипольные моменты, заряды на атоме кислорода, азота замещенных 2- метокси-1,3-дигетероцикланов**

Параметр	(1)	(2)
$E_{homo}$ , эВ	-10.10	-8.40
$E_{lumo}$ , эВ	1.5	1.2
$\Delta E$ , эВ	11.60	9.60
Дипольный момент, D	0	2.2
Заряд, e	-0.55	-0.35

LUMO/HOMO определяет реакционную способность и энергию связывания с белком-мишенью. Дипольный момент влияет на проницаемость через клеточную стенку бактерии. Высокий диполь коррелирует с плохой проницаемостью через мембрану бактерии, но хорошим связыванием с белком. У диоксана  $\Delta E$  велика ( $\sim 11.6$  эВ), что делает его почти прозрачным в УФ-спектре и крайне стабильным растворителем. Уменьшение  $\Delta E$  до 9.6 эВ у (2) означает, что он гораздо легче вступает в окислительно-восстановительные реакции и координацию с металлами. Хотя формальный отрицательный заряд на кислороде в диоксане больше из-за высокой электроотрицательности, этот заряд «зажат» ядром. В (2) заряд на азоте более «доступен». Это делает азотный цикл мощным центром для образования водородных связей в активных центрах ферментов.

В обеих молекулах 2-алкокси группа является «слабым местом» для гидролиза. В организме она может отщепляться, превращая цикл в соответствующий альдегид или кетон, что часто является механизмом активации лекарства (prodrug).

Предотвращает 5,5-дизамещение метаболическое окисление кольца в этой позиции и «выключает» возможность образования двойной связи в цикле, фиксируя конформацию, необходимую для посадки в рецептор.

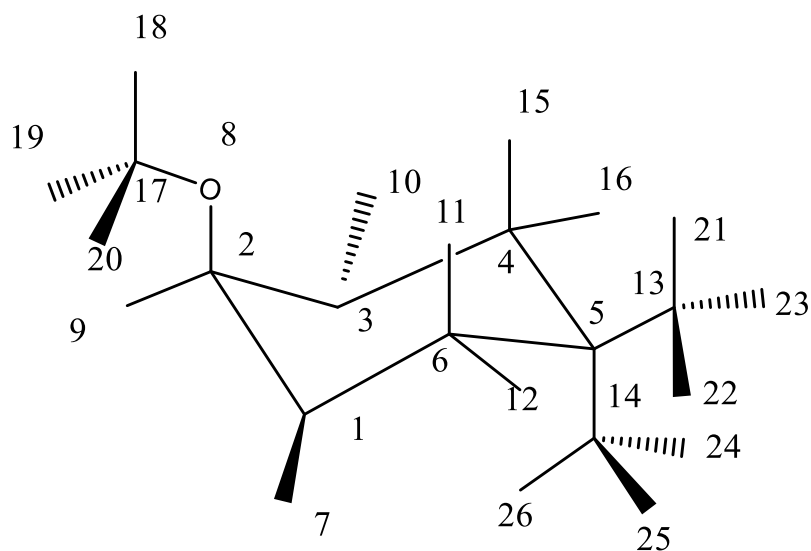


Рисунок 1. Структура соединений (1) и (2). (1) 1,3=O, 13,14=H, 7, 10, 21-26 отсутствуют; (2) 1,3=N, 13,14=H, 21-26 отсутствуют

### Заключение и выводы

Таким образом, ряд 1,3-диоксанов (1) проявляет миорелаксирующую активность, влияя на ионные каналы, где не требуется сильное основное взаимодействие (в отличие от азотистых циклов). Азотсодержащие гетероциклы легче образуют водородные связи с рецепторами центральной нервной системы. Наличие 5,5-дизамещения (например, этильными группами, как в барбитуратах) часто придает им седативные или противосудорожные свойства. Замена азота на кислород снижает общую токсичность, делая препарат более мягким. Если необходима борьба с инфекциями или вирусами, более перспективны гексагидропиримидины (2), а если метаболический корректор или средство с длительным действием и низкой токсичностью - 1,3-диоксаны (1).

### ЛИТЕРАТУРА

1. Анисимова, М. Е. Изменение параметров квантовохимического расчета в ряду 5,5-диметил-, незамещенные, 5,5-ди(хлорметил)замещенные 2-метокси-1,3-дигетероциклоалканы / М. Е. Анисимова, А. Г. Сафиуллина // Экологические проблемы нефтедобычи - 2018: материалы VII Международной конференции с элементами научной школы для молодежи. – Уфа, 2018. – С. 67-68.
2. Сафиуллина, А. Г. К вопросу о конформационном равновесии шестичленных гетероциклов / А. Г. Сафиуллина, М. А. Хусаинов // Студент и научно-технический прогресс: Материалы XXXVI Международной научной студенческой конференции. – Новосибирск, 1998. – С. 6.
3. Сафиуллина, А. Г. Оценка стабильности конформеров замещенных 1,3-диазациклогексанов / А. Г. Сафиуллина // Химические реактивы, реагенты и процессы малотоннажной химии: Тезисы докладов XXV Юбилейной Международной научно-технической конференции, посвященной памяти академика АН РБ, доктора химических наук, профессора Дилюса Лутфулловича Рахманкулова. – Уфа, 2011. – С. 171-172.
4. Сафиуллина, А. Г. Сравнительная оценка орбитальных взаимодействий в 5,5-ди(хлорметил)- и 5,5-ди(фторметил)-замещенных 2-метокси-1,3-диазациклогексанах / А. Г. Сафиуллина, С. Р. Максютов // Материалы 69-й научно-технической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых УГНТУ. Том 2. – Уфа, 2018. – С. 676.
5. Сафиуллина, А. Г. Оценка взаимодействий “через пространство” в 5,5-дихлорметилзамещенном 2-метокси-1,3-диазациклогексане / А. Г. Сафиуллина // Химические реактивы, реагенты и процессы малотоннажной химии: Сборник тезисов XXVII Международной научно-технической конференции. – Иркутск, 2013. – С. 89.
6. Сафиуллина, А. Г. Исследование конформационного состояния и диастереомерного состава 2- и 2,5,5-замещенных 1,3-диоксанов: специальность 02.00.03 "Органическая химия": диссертация на соискание ученой степени кандидата химических наук / Сафиуллина Алина Геннадиевна. – Уфа, 2001. – 177 с.
7. Сафиуллина, А. Г. Взаимодействия “через пространство” в замещенных 2-алкокси-1,3-диоксанах / А. Г. Сафиуллина // Башкирский химический журнал. – 2002. – Т. 9, № 4. – С. 23-25.

8. Сафиуллина, А. Г. Оценка взаимодействий “через пространство” в замещенных 2-метокси-1,3-дiazациклогексанах по приведенному коэффициенту орбитальных взаимодействий / А. Г. Сафиуллина // Химические реактивы, реагенты и процессы малотоннажной химии : Материалы XXX Международной научно-технической конференции, посвященной памяти академика Академии наук Республики Башкортостан Дилюса Лутфуллича Рахманкулова. – Уфа, 2016. – С. 54-55.
9. Сафиуллина, А. Г. Изменение параметров квантовохимического расчета и спектров ЯМР в ряду некоторых 2-этил-2-метокси-1,3-дигетероциклоалканов / А. Г. Сафиуллина, Т. С. Гайсин // Наука. Технология. Производство – 2023: Материалы Всероссийской научно-технической конференции, посвященной 75-летию ООО «Газпром нефтехим Салават». – Салават, 2023. – С. 171-172.
10. Сафиуллина, А. Г. Исследование конформационного состояния и диастереомерного состава 2-замещенных дигетероциклов / А. Г. Сафиуллина // Всероссийская конференция по квантовой и математической химии: сборник тезисов докладов. – Уфа, 2017. – С. 51.
11. Сафиуллина, А. Г. Оценка взаимодействий "через пространство" в замещенных 2-метокси-1,3-дiazациклогексанах / А. Г. Сафиуллина // Башкирский химический журнал. – 2014. – Т. 21, № 2. – С. 15-16.
12. Alfyorov, N. D. Changes in quantum-chemical calculation parameters and NMR spectra in the series of some 1,3-diheterocycloalkanes / N. D. Alfyorov, A. G. Safiullina // Материалы 74-й научно-технической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых УГНТУ. – Уфа, 2023. – С. 336.

УДК 615.849:004.94

Шакирьянова С.Р.

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ БИОФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ТКАНЯХ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ МЕДИЦИНСКИХ ЛАЗЕРОВ

*Башкирский государственный медицинский университет, г. Уфа*

В статье рассмотрены современные подходы к компьютерному моделированию биофизических процессов, возникающих в биологических тканях при воздействии медицинского лазерного излучения. Проанализированы физические механизмы взаимодействия лазерного света с тканями, включая процессы поглощения, рассеяния, теплопереноса и фотомеханических эффектов. Описаны математические модели распространения излучения, методы численного решения уравнений переноса энергии и особенности применения программных симуляционных комплексов. Показано, что моделирование позволяет прогнозировать терапевтические и побочные эффекты лазерных процедур, оптимизировать параметры излучения и повышать безопасность клинического применения лазеров.

**Ключевые слова:** лазерное излучение, биофизическое моделирование, теплоперенос, медицинские лазеры, цифровая симуляция.

Shakiryanova S.R.

## COMPUTER MODELING OF BIOPHYSICAL PROCESSES IN TISSUES UNDER MEDICAL LASER EXPOSURE

*Bashkir State Medical University, Ufa*

The article discusses modern approaches to computer modeling of biophysical processes occurring in biological tissues under medical laser irradiation. Physical mechanisms of laser–tissue interaction are analyzed, including absorption, scattering, heat transfer, and photomechanical effects. Mathematical models of radiation propagation, numerical methods for solving energy transfer equations, and features of simulation software are described. Modeling makes it possible to predict therapeutic and side effects of laser procedures, optimize radiation parameters, and improve clinical safety.

**Keywords:** laser radiation, biophysical modeling, heat transfer, medical lasers, digital simulation.

Медицинские лазеры широко применяются в различных областях медицины благодаря высокой точности воздействия и возможности контроля энергии. Процессы, происходящие в тканях под действием лазерного излучения, представляют собой сложный комплекс оптических, тепловых, механических и биохимических явлений. Экспериментальное изучение таких процессов затруднено техническими ограничениями и этическими требованиями [2].

Компьютерное моделирование позволяет воспроизводить эти процессы на разных уровнях — от молекулярного до органного — и заранее оценивать распределение температуры, глубину проникновения излучения и вероятность повреждения тканей. Это делает его важным инструментом разработки безопасных лечебных технологий.

### **Цель работы**

Проанализировать современные методы компьютерного моделирования биофизических процессов в тканях при воздействии медицинских лазеров и определить их значение для совершенствования клинических технологий.

### **Материал и методы**

Исследование основано на анализе научных публикаций, посвящённых математическому описанию лазерного воздействия на ткани, и сравнении численных подходов. Рассматривались оптические, тепловые, механические и мультифизические модели. Для решения уравнений применяются методы конечных элементов, конечных разностей и статистические алгоритмы [4,7].

### **Результаты и обсуждение**

Проведённый анализ показал, что компьютерное моделирование достаточно точно описывает процессы взаимодействия лазерного излучения с биологическими тканями. При этом наиболее надёжные результаты дают модели, учитывающие сразу несколько факторов, поскольку в реальных условиях воздействие лазера всегда комплексное.

Установлено, что глубина проникновения излучения зависит не только от длины волны, но и от структуры ткани. Например, плотные ткани сильнее рассеивают свет, из-за чего энергия хуже достигает глубоких слоёв. Это важно учитывать при подборе параметров воздействия.

Рассмотрение тепловых моделей показало, что распределение температуры носит нелинейный характер: даже небольшое увеличение мощности может вызвать заметный локальный нагрев. На практике это означает необходимость точного контроля режимов работы лазера.

Также было отмечено, что короткие импульсы способны вызывать механические эффекты, такие как образование микропузырьков. В медицинских технологиях это может использоваться целенаправленно, однако при неправильных настройках повышается риск повреждения тканей.

Сравнение различных подходов показало, что наиболее реалистичную картину дают мультифизические модели, объединяющие несколько типов процессов. Несмотря на большую вычислительную сложность, именно они считаются наиболее перспективными.

Таким образом, результаты анализа подтверждают, что компьютерное моделирование является эффективным инструментом прогнозирования последствий лазерного воздействия и помогает выбирать оптимальные параметры лечения.

### **Оптические процессы**

При попадании лазерного луча на ткань часть энергии отражается, часть рассеивается и часть поглощается. Соотношение этих процессов определяется длиной волны, плотностью энергии и оптическими характеристиками среды. Распространение фотонов описывается уравнением переноса излучения [5].

Одним из наиболее точных способов решения является метод Монте-Карло, в котором движение фотонов моделируется как случайный процесс, что позволяет учитывать неоднородность тканей и получать реалистичные оценки распределения энергии [10].

### **Тепловые эффекты**

Поглощённая энергия преобразуется в тепло и вызывает локальное повышение температуры. Для описания этого процесса применяется биотепловая модель, учитывающая теплопроводность тканей, кровотоков и внутреннее теплообразование. Расчёты позволяют прогнозировать температурные поля при различных режимах воздействия [2].

### **Фотомеханические и фотохимические процессы**

Короткоимпульсные лазеры способны вызывать быстрые механические реакции, включая образование микропузырьков и ударных волн. Для их описания применяются модели гидродинамики и теории упругости. При определённых длинах волн возможны фотохимические реакции, например образование активных форм кислорода [6].

### **Мультифизические модели**

Перспективным направлением являются комплексные модели, объединяющие оптические, тепловые и механические процессы. Такие системы дают более полную картину воздействия лазера на ткань и позволяют анализировать его параметры практически в реальном времени.

### **Практическое значение**

Компьютерные модели применяются на этапах разработки оборудования, в предклинических исследованиях, клинической практике и медицинском образовании. Особое значение имеют персонализированные модели, создаваемые на основе данных конкретного пациента и позволяющие прогнозировать результат лечения.

### **Заключение и выводы**

Компьютерное моделирование является важным инструментом исследования процессов, происходящих в тканях под действием лазерного излучения. Использование математических моделей позволяет прогнозировать распределение энергии и температурные эффекты, повышая безопасность медицинских процедур. Развитие

мультифизических моделей расширяет возможности клинической практики и персонализированной медицины.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Анисимов В. Н. Лазерные технологии в медицине. — М.: Медицина, 2020.
2. Баранов В. Г., Кузнецов А. П. Математические модели биотеплопереноса. — СПб.: Наука, 2019.
3. Башкатов А. Н., Генералов С. В. Оптика биологических тканей. — Саратов: Изд-во СГУ, 2018.
4. Тучин В. В. Лазеры и волоконная оптика в биомедицинских исследованиях. — М.: Физматлит, 2021.
5. Jacques S. Optical properties of biological tissues: a review // *Physics in Medicine and Biology*. 2019. Vol. 64.
6. Niemz M. *Laser-Tissue Interactions*. — Berlin: Springer, 2019.
7. Prahl S. *Light transport in tissue*. — Oregon Medical Laser Center, 2020.
8. Wang L., Wu H. *Biomedical Optics: Principles and Imaging*. — Wiley, 2018.
9. Welch A., van Gemert M. *Optical-Thermal Response of Laser-Irradiated Tissue*. — Springer, 2017.
10. Yaroslavsky A. Monte Carlo modeling of light propagation in tissues // *Journal of Biomedical Optics*. 2022.





первом упоминании его в тексте. Не требуется расшифровки стандартных единиц измерения и символов.

10. Таблицы должны иметь порядковый номер, расположенный в правом верхнем углу, название таблицы. Рекомендуется представлять наглядные, компактные таблицы. Все числа в таблицах должны быть выверены и соответствовать числам в статье.

Образец

**Таблица 1**  
**Сравнение среднего количества медицинских событий у пациентов с внебольничной пневмонией и метаболическим синдромом**

Медицинские события	За 1 год до госпитализации, N=15	Через 1 год после госпитализации и, N=15	P
Обращения в поликлинику	6,1±2,0	8,2±1,6	0,023
Экстренная госпитализация	0,1±0,1	0,1±0,1	>0,05
Плановая госпитализация	0,2±0,1	0,2±0,1	>0,05
Вызовы скорой помощи	0,1±0,1	0,9±0,8	0,001
Всего	6,5±2,2	9,5±2,0	0,015

11. При использовании результатов статистического анализа данных обязательным условием является указанием использованного программного пакета и его версии, названий статистических методов, приведение описательных методов статистики и точных уровней значимости при проверке статистических гипотез. Для основных результатов исследования рекомендуется рассчитывать доверительные интервалы.

12. Единицы измерения физических величин должны представляться в единицах Международной метрической системы единиц-СИ.

13. Рисунки и диаграммы должны представляться отдельными графическими файлами в форматах bmp, jpg, tiff с указанием названия рисунка/диаграммы, его порядковым номером с разрешением не менее 300 dpi. В статье необходимо указывать место положения рисунка/диаграммы.

14. Все статьи, поступающие в редакцию, проходят многоступенчатое рецензирование, систему ANTIPLAGIAT, замечания рецензентов направляются автору без указания имен рецензентов. После получения рецензий и ответов автора редколлегии принимает решение о публикации статьи.

15. Редакция оставляет за собой право отклонить статью без указания причин. Очередность публикаций устанавливается в соответствии с редакционным планом издания журнала.

16. Редакция оставляет за собой право сокращать, редактировать материалы статьи независимо от их объема, включая изменения названия статей, терминов и определений. Небольшие исправления стилистического, номенклатурного или формального характера вносятся в статью без согласования с автором. Если статья перерабатывалась автором в процессе подготовки к публикации, датой поступления считается день поступления окончательного текста.

17. Направление в редакцию статей, которые уже посланы в другие журналы или напечатаны в них, не допускается.

18. Номера выходят по мере накопления статей, планируемая частота выхода – 6 номеров в год.