

ПРЕДСКАЗАНИЕ ДЕГРАДАЦИИ ПОЛИМЕРА В БИОЛОГИЧЕСКИХ СРЕДАХ С ПОМОЩЬЮ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Габдорахманова Е.А. (ИТМО)

Научный руководитель – PhD, ведущий инженер Зун П.С. (ИТМО)

Введение.

Сердечно-сосудистые заболевания - основная причина смерти в мире, с почти 18 млн смертей в год [1]. Стеноз – это сужение артерий, часто вызванное атеросклерозом, которое мешает нормальному кровотоку и может привести к сердечным проблемам. Стентирование является популярной процедурой для лечения стеноза, при которой стенты, являющиеся небольшими сетчатыми трубками, вставляются в узкие участки артерий, чтобы поддерживать их открытыми. Стенты изготавливаются из металлов или биodeградируемых полимеров, таких как поли-L-молочная кислота (ПЛЛА), однако последняя может вызвать поздний тромбоз. Полигидроксиалканаты (ПГА), полимеры природного происхождения, показывают обещающие результаты благодаря своей био- и гемосовместимости, а также способности разлагаться без вредных продуктов.

Основная часть.

Отслеживание динамики биodeградации ПГА важно для медицинских применений, но натурные эксперименты требуют много времени и ресурсов. В качестве альтернативы предлагается использование численных моделей, которые с помощью машинного обучения могут предсказывать поведение полимера на протяжении всего процесса деградации. Это может ускорить разработку и тестирование новых медицинских устройств. С использованием методов Монте-Карло для моделирования начального распределения клеточных масс и алгоритмов машинного обучения для оптимизации параметров, можно разработать математические модели биodeградации полимера. Используемые показатели разложения полимера (среднемолекулярная и средневесовая масса, степень кристаллизации) зависят от условий проведения экспериментов, что исследовано в работах научных центров [2].

Принимая в расчет достаточное количество данных по ПГА, которые были аккумулированы, есть все основания для оптимизма в отношении возможности их использования для тренировки моделей машинного обучения, параллельно с адаптацией уже существующих численных подходов для ПЛЛА [3], что предоставляет надежду на создание эффективных прогнозных моделей биodeградации.

Выводы.

На данном этапе работы успешно сформирован набор данных из значимых свойств и факторов биodeградации для поли(гликолевой кислоты) ПГА и проанализированы модели для поли(L-лактида) ПЛЛА. Предварительный анализ показал перспективность адаптации этих моделей для ПГА, открывая путь для дальнейшего углубленного исследования с применением методов машинного обучения для разработки оптимизированных и точных математических моделей, что будет способствовать улучшению характеристик биodeградируемых стентов и их клинического применения.

Список использованных источников:

1. Сердечно-сосудистые заболевания // Всемирная организация здравоохранения URL: <https://www.who.int/ru/health-topics/cardiovascular-diseases> (дата обращения: 06.02.2024).

2. Tatiana G Volova, Svetlana V Prudnikova, Olga N Vinogradova, Darya A Syrvacheva, Ekaterina I Shishatskaya Microbial degradation of polyhydroxyalkanoates with different chemical compositions and their biodegradability // *Microbial ecology*. - 2017. - №73. - C. 353-367.
3. Andrew Gleadall, Jingzhe Pan, Marc-Anton Krufft An atomic finite element model for biodegradable polymers. Part 2 A model for change in Young's modulus due to polymer chain scission // *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*. - 2015. - №51. - C. 237-247.