

УДК 615.1+681.3

Современные тенденции развития фармакоинформатики

А. В. Арсеньев, И. С. Гриценко, В. А. Жук, Ю. М. Пенкин
Национальный фармацевтический университет, Харьков, Украина

Резюме

Настоящим сообщением, которое носит декларативный характер, открывается новая рубрика в журнале «Клиническая информатика и Телемедицина», посвященная проблемам фармакоинформатики. Фармакоинформатику можно определить как новое интенсивно развивающееся комплексное научное направление, которое объединяет достижения в области информационных технологий с задачами фармацевтической науки и индустрии лекарственных средств. Круг проблем, изучаемых фармакоинформатикой, в настоящее время недостаточно обусловлен. Однако, с учетом современных тенденций развития фармакоинформатики, в сообщении представлены характеристики задач и методов этого научного направления. Авторы надеются, что материалы, которые будут публиковаться в рамках новой рубрики, будут интересны не только специалистам, занимающимся конкретными вопросами фармакоинформатики, но и работникам практической фармации и медицины.

Ключевые слова: фармация, фармакоинформатика, задачи и методы фармакоинформатики.

Клин. информат. и Телемед.
2006. Т.3. Вып.4. с.91–95

Введение

Фармакоинформатика – новое интенсивно развивающееся комплексное научное направление, которое, прежде всего, объединяет достижения в области информационных технологий с задачами фармацевтической науки и индустрии лекарственных средств.

Как известно, создание лекарств является одной из главных социальных задач любого государства, поскольку обеспечение каждого человека доступными и эффективными лекарственными средствами в достаточном количестве является необходимой компонентой благосостояния современного общества. Трудно не согласиться с авторами монографии [1], что выживание человечества в современном мире (который характеризуется как экологическими проблемами, так и колоссальными стрессовыми воздействиями на человека последствий непредвиденных техногенных аварий и катастроф, стихийных бедствий, периодически вспыхивающих вооруженных конфликтов и террористических актов) без лекарств очень сомнительно. К сожалению, вынуждены болеть люди любого возраста и всех сословий, они не могут обойтись без лекарств ни в мирное время, ни тем более в экстремальных ситуациях. В современных условиях возрастает значение профилактических функций применения лекарственных средств. Лекарственные средства также применяются в косметологии, пищевой промышленности, в сельском хозяйстве и т.д. В связи с этим можно констатировать, что объективные тенденции развития современного общества всячески стимулируют бурное развитие фармацевтической науки и индустрии лекарственных средств.

С другой стороны, главная черта наступившего века – необычайно возросшая мощь информационных и коммуникационных технологий. Информатика, как никакая другая область знаний, характеризуется чрезвычайно высокой степенью динамики развития и имеет всепроникающий характер во все отрасли человеческой деятельности. Естественно, что и теоретическая и практическая современная фармация не может обойтись без интеграции с достижениями в области информационных технологий. Такая интеграция и определила возникновение нового научного направления, которое получило в литературе название фармакоинформатика.

Круг проблем, изучаемых фармакоинформатикой, в настоящее время недостаточно определен. Однако со значительной долей уверенности можно уже сейчас охарактеризовать основные направления дальнейшего развития этой науки.

Основные направления фармакоинформатики

На V-ом национальном съезде фармацевтов Украины (1999 г.) были определены основные составляющие фармацевтической отрасли (рис.1):

- фармацевтическое образование и кадровое обеспечение;
- фармацевтическая наука;

- производство лекарственных средств;
- обеспечение качества лекарственных средств;
- оптовая и розничная реализация лекарственных средств;
- единое информационное поле фармации.

В дальнейшем на VI-ом национальном съезде фармацевтов Украины, который был проведен 28–30 сентября 2005 года в г. Харькове на базе Национального фармацевтического университета, были сформулированы практические задачи развития этих шести составляющих в рамках принятой на съезде «Концепции развития фармацевтической отрасли Украины» [2]. Очевидно, что при характеристике основных направлений фармакоинформатики следует придерживаться такого же ранжирования, поскольку задачи фармакоинформатики, прежде всего, и определяются практическими задачами развития фармацевтической отрасли.

1. Фармацевтическое образование и кадровое обеспечение

Задачи фармакоинформатики в данном направлении должны включать в себя следующие вопросы:

- создание современных систем информационной поддержки процесса

фармацевтического образования, обеспечение его перехода на модульно-рейтинговую систему в соответствии с Болонской Декларацией, а также процесса дальнейшего развития институтов последипломного образования;

- развитие теоретических и практических, методологических и организационных аспектов внедрения дистанционных технологий фармацевтического образования; создание оригинальных авторских электронных учебников и дистанционных курсов по специальным фармацевтическим дисциплинам, виртуальных практикумов;
- развитие методов компьютерного тестирования, методов анализа результатов тестов, современных средств баз данных и знаний в фармацевтическом образовании;
- создание информационной системы оценки, мониторинга и контроля качества фармацевтического образования.

2. Фармацевтическая наука

Как характерные для данного направления следует выделить такие задачи фармакоинформатики:

- создание современных систем информационного обеспечения для развития всех направлений фармацевтической науки [3]: фармакологии, фармакогнозии, фармакокинетики, фармакодинамики, фармакоэкономики и т.д.;

- разработка оригинальных компьютерных технологий на всех этапах создания и внедрения новых лекарств [1]: создание фармакологически активных веществ; фармакологических и фармацевтических исследований их свойств; доклинического и клинического изучения фармакологических препаратов;
- развитие методов биоинформатики и геной инженерии для создания новых лекарственных средств;
- комплексные исследования информационных свойств воды и водных растворов, прежде всего, как основы лекарственных средств.

3. Производство лекарственных средств

Основными задачами фармакоинформатики для этого направления являются:

- развитие современных подходов к внедрению информационных систем на фармацевтических предприятиях в соответствии с требованиями GMP и ISO, новых технологических и программных средств функционирования информационных систем предприятий [4];
- развитие статистических методов управления качеством фармацевтических предприятий на всех этапах производства лекарственных средств, включая вопросы моделирования экономической деятельности предприятий, валидации и контроля технологических процессов;
- стандартизация информационных систем фармацевтической отрасли, в том числе используемого программного обеспечения.

4. Обеспечение качества лекарственных средств

Для данного направления можно выделить такие задачи фармакоинформатики:

- разработка современных информационных систем управления качеством для всего цикла оборота лекарственных средств в соответствии с требованиями GLP, GCP, GMP, GDP, GPP [4];
- создание и внедрение информационных технологий, обеспечивающих проведение внешнего мониторинга контроля качества производства лекарственных средств в режиме «реального времени»;
- разработка информационных ресурсов поддержки действующей национальной «Программы борьбы с производством и распространением



Рис. 1. Компоненты фармацевтической отрасли.

фальсифицированных лекарственных средств на 2003–2008 годы».

5. Оптовая и розничная реализация лекарственных средств

В этом направлении основными задачами фармакоинформатики являются:

- создание программных ресурсов информационной системы поддержки деятельности национальных фармпредприятий на основе единого справочника товаров, услуг, поставщиков, продаж и цен с ежедневно обновляющейся справочной информацией;
- реализация принципов функционирования информационно-программных систем для аптечных предприятий, интегрирующих бухгалтерский учет товара; работы с ЭККА и штрих-декодером; работы в специализированной информационной системе для хранения и обновления справочной информации, регистрации, классификации лекарственных средств; работу с программами для ценового анализа и формирования заказа; ведения баз данных постоянных клиентов и т.д.;
- внедрение в аптечную практику компьютерных экспертных систем фармацевтической опеки и предупреждения использования несовместимых лекарственных средств;
- обеспечение информационной поддержки рекламной деятельности реализации лекарственных средств в соответствии с требованиями и рекомендациями ЕС; развитие принципов и программных ресурсов Internet-рекламы лекарственных средств;
- развитие принципов и технологий электронной коммерции в фармацевтической отрасли.

6. Единое информационное поле

Главной задачей фармакоинформатики для данного направления следует считать создание и поддержку информационных ресурсов фармацевтической отрасли в рамках единой национальной компьютерной сети МОЗ Украины с целью обеспечения производителей фармацевтической продукции, оптово-посреднических предприятий, аптечных заведений, медицинских и фармацевтических, научно-педагогических работников, потребителей объективной, оперативной, полной, обоснованной, до-

казательной и доступной информацией, направленной на качественное медицинское обслуживание населения. Национальная информационная сеть будет создана в процессе реализации «Национальной программы информатизации охраны здоровья Украины» [5]. Информационные ресурсы национальной фармации должны обеспечить:

- создание и функционирование электронных библиотек высших учебных заведений фармацевтического и медицинского профилей;
- создание централизованных специализированных информационных баз данных;
- доступ и возможность использования электронных версий периодических изданий фармацевтической отрасли;
- создание и обновление веб-сайтов областных/городских госадминистраций в разделе «Охрана здоровья».

Методы фармакоинформатики

В предыдущем разделе были представлены задачи фармакоинформатики, которые определяют и характеризуют предмет этого научного направления. Методы, с помощью которых решаются поставленные задачи, условно можно

разделить на следующие группы (рис.2): методы классической информатики, методы компьютерного моделирования, методы математического программирования, методы программирования, статистические методы и методы создания экспертных систем.

1. Методы классической информатики

Как известно, информатика – это научное направление, изучающее свойства информации и способы ее представления, накопления, автоматической обработки и передачи. Современными тенденциями информатики является создание информационных моделей различных коммуникаций и специальных информационных систем. К методам классической информатики в настоящее время относят [6]:

- методы классификации и кодирования информации;
- методы активного накопления (преобразования) информации, включая методы ее сжатия;
- методы распознавания образов;
- методы обработки информации в реальном масштабе времени;
- методы регламентации доступа внешних пользователей к информационным базам данных;
- методы защиты информации при передаче по открытым каналам связи.

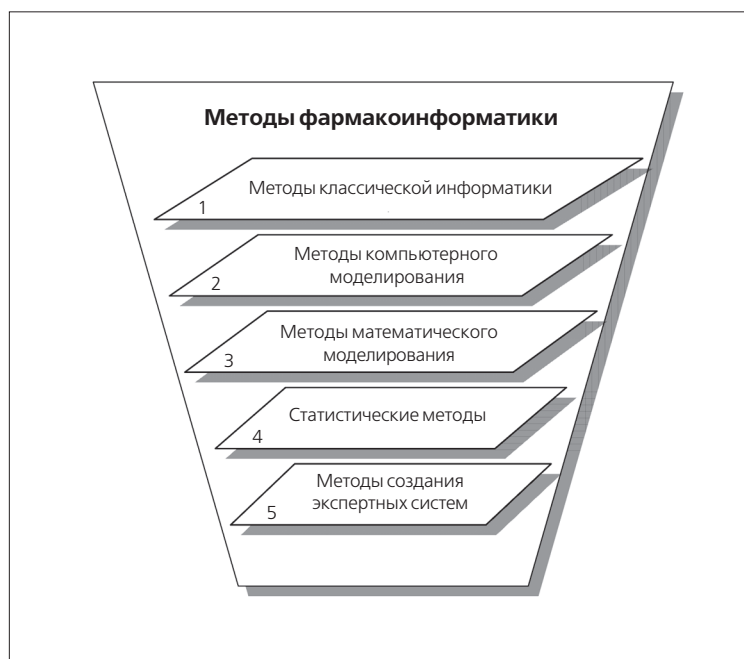


Рис. 2. Комплекс методов фармакоинформатики.

Понятно, что применение перечисленных методов в задачах фармакоинформатики требует учета специфики фармацевтической отрасли: действующих стандартов, установленных правовых требований и т.д.

2. Методы компьютерного моделирования

Среди существующих методов компьютерного моделирования следует выделить [7]:

- компьютерную графику;
- компьютерное конструирование с применением молекулярного дизайна новых лекарств с заданными свойствами;
- компьютерное проектирование автоматизированных систем управления технологических процессов предприятий;
- компьютерную реализацию эксперимента.

3. Методы математического программирования

Математическое программирование – раздел математики, посвященный теории и методам нахождения оптимального решения [8]. Конкретизация условий по целевой функции и ограничениям на допустимое множество решений определяют разделение подходов математического программирования на методы программирования: линейного, нелинейного, дискретного, параметрического, стохастического, динамического и методы многокритериальной оптимизации.

4. Статистические методы

Статистические методы включают [9]:

- методы описательной статистики, используемые для выявления центральных тенденций процессов;
- многомерные статистические методы, позволяющие проводить классификацию объектов (дискриминантный анализ), выявлять однородные группы (кластерный), проводить прогнозирование (регрессионный), контролировать качество производственных процессов (индустриальная статистика) и т.д.;
- методы анализа случайных процессов (метод цепей Маркова, спектральный анализ и др.).

5. Методы создания экспертных систем

Экспертные системы оперируют со знаниями в определенной предметной области с целью выработки рекомендаций или решения проблемы. Исходя из базовых функций экспертных систем, методы, которые применяются для их создания, можно разделить таким образом [10]:

- методы приобретения системой знаний;
- методы представления знаний в системе;
- методы управления процессом поиска решения;
- методы обоснования (разъяснения) принятого решения.

Очевидно, этот набор методов должен быть дополнен методами разработки инструментальных средств для экспертных систем, т.е. методами создания оболочек экспертных систем на основе языков программирования высокого уровня.

Одним из современных направлений развития экспертных систем является использование технологий искусственного интеллекта, среди которых наибольшее распространение получили технологии нейронных сетей. В связи с этим методы нейроинформатики также должны быть определены и как методы, используемые фармакоинформатикой.

Заключение

Настоящее сообщение открывает в медицинском междисциплинарном научно-методическом журнале «Клиническая информатика и Телемедицина» рубрику «Фармакоинформатика». Авторы сделали попытку дать определение фармакоинформатики, как нового развивающегося научного направления, представили характеристику задач и методов этой науки. Мы надеемся, что материалы, которые будут публиковаться в рамках новой рубрики, будут интересны не только специалистам, занимающимся конкретными вопросами фармакоинформатики, но и работникам практической фармации и медицины. От имени редколлегии журнала приглашаем всех заинтересованных лиц к сотрудничеству и надеемся, что наши совместные усилия позволят в ближайшем будущем сформировать национальную научную школу специалистов в области фармакоинформатики.

Литература

1. От субстанции к лекарству / Безуглый П. А., Болотов В. В., Гриценко И. С. и др.; Под ред. Черных В. П.. – Харьков: Изд-во НФаУ: Золотые страницы, 2005. – 1244 с.
2. Концепція розвитку фармацевтичної галузі України/ VI національний з'їзд фармацевтів України. – Харків, 2005. – 24 с.
3. Фармацевтична енциклопедія / Голова ред. ради та автор передмови Черних В. П.. – К.: «Моріон», 2005. – 848 с.: ил. 16 с.
4. Надлежащая производственная практика лекарственных средств / Под ред. Ляпунова Н. А., Загоря В. А., Георгиевского В. П., Безуглой Е.П.. – К.: МОРИОН, 1999. – 896 с.
5. Концепція державної політики інформатизації охорони здоров'я України / Клиническая информатика и Телемедицина – 2004 – №1. – С. VII–X.
6. Информатика. Базовый курс. 2-е издание / Под ред.. Симоновича С. В.. – СПб.: Питер, 2005. – 640 с.: ил.
7. Математика. Большой энциклопедический словарь / Гл. ред. Прохоров Ю. В.. – М., 1998.
8. Введение в исследование операций. 7-е изд. / Таха Хемди А: – М.: Издательский дом «Вильямс», 2005.
9. Статистика в науке и бизнесе. Лапач С. Н., Чубенко А. В., Бабич П. Н.. – К.: МОРИОН, 2002. – 640 с.
10. Разработка экспертных систем. Средства CLIPS. / Частиков А. П., Гаврилова Т. А., Белов Д. Л.. – СПб.: БХВ-Петербург, 2003. – 608 с.: ил.

Modern trends in pharmacoinformatics

A. V. Arsenyev, I. S. Grytsenko, V. A. Zhuk, Ju. M. Penkin
National Pharmaceutical University,
Kharkiv, Ukraine

Abstract

This information of a declarative type opens a new rubric in the «Clinical Informatics and Telemedicine» journal and is dedicated to the problems of pharmaceutical information theory.

Pharmacoinformatics can be defined as a new rapidly developing complex scientific trend combining the achievements in the field of information technologies with the tasks of pharmaceutical science and medical product industry. The scope of questions studied by pharmacoinformatics is not quite defined nowadays. However, taking into account modern trends in pharmacoinformatics, the article presents the characteristics of tasks and methods of this scientific trend. The authors believe that the materials which are going to be published in this rubric will be of interest not only for the specialists dealing with certain questions

of pharmacoinformatics, but also for those involved in practical pharmacy and medicine.

Keywords: pharmaceutical science, pharmacoinformatics, tasks and methods of pharmacoinformatics.

Сучасні тенденції розвитку фармакоінформатики

*О. В. Арсен'єв, І. С. Гриценко,
В. А. Жук, Ю. М. Пенкін*

*Національний фармацевтичний
університет, Харків, Україна*

Резюме

Цим повідомленням, яке носить декларативний характер, відкривається нова рубрика в журналі «Клінічна інформатика і Телемедицина», присвячена проблемам фармакоінформатики.

Фармакоінформатику можна визначити як новий комплексний науковий напрям, який об'єднує досягнення в області інформаційних технологій із задачами фармацевтичної науки і індустрії лікарських засобів, що інтенсивно розвивається. Круг проблем, вивчаються фармакоінформатикою, в даний час недостатньо обумовлений. Проте, з урахуванням сучасних тенденцій розвитку фармакоінформатики, в повідомленні представлені характеристики задач і методів цього наукового напрямку. Автори сподіваються, що матеріали, які публікуватимуться в рамках нової рубрики, будуть цікаві не тільки фахівцям, що займаються конкретними питаннями фармакоінформатики, але і працівникам практичної фармації і медицини.

Ключові слова: фармація, фармакоінформатика, задачі і методи фармакоінформатики.

Переписка

д.физ.-мат.н., профессор **Ю. М. Пенкін**
кафедра информационных технологий
Национальный фармацевтический
университет
ул.Пушкинская 53, Харьков
61002, Украина
тел.: (057) 771 81 52
эл.почта: kit@ukrfa.kharkov.ua