

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ПОВЕДЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА В ЖИВЫХ СИСТЕМАХ

Гостюшкин В.В., Деменев В.А., Посвалюк Н.Э., Савин С.З.

УРАН Вычислительный центр ДВО РАН, г.Хабаровск

На рубеже тысячелетий произошел подлинный взрыв в исследовании сверхмалых тел, вызвавший научно-методологический парадокс: чем меньше размер объекта, тем большие объемы информации сопутствуют его изучению, тем более сложными моделями описывается его поведение. Так, получаемые при создании нанотехнологий и средств нанодиагностики для медицины сверхбольшие объемы информации и высокая размерность задач требуют разработки новых универсальных математических подходов к их типизации, стандартизации и формализации методов анализа и интерпретации результатов исследований [1,7]. Целью исследований тепловых свойств золотосодержащих наночастиц и процессов нанотермолиза (НТЛ) под воздействием высокочастотных электромагнитных и ультразвуковых полей является определение тепловых свойств золотосодержащих наночастиц, характерный размер которых лежит в интервале 30-150 нм, подвергнутых воздействию высокочастотных электромагнитных и ультразвуковых полей в биологических тканях живых организмов. Коллоидное золото представляет собой раствор сверхмалых частиц золота в деминерализованной воде, несущих одноименный заряд и находящихся в воде во взвешенном состоянии [2]. Методы исследования селективного нагрева золотосодержащих наночастиц под воздействием разнообразных физических полей в биологических тканях живых организмов включают биофизические и иммунологические эксперименты, математическое и виртуальное информационное моделирование, решение задач распознавания образов и вычисления свойств [3,4]. При этом разрабатываются как теоретические, так и методологические подходы к созданию математических моделей, алгоритмического, программного и информационного обеспечения для исследований тепловых свойств коллоидного золота, подвергаемого воздействию высокочастотных электромагнитных и ультразвуковых полей. разработаны оригинальные подходы создания математических методов изучения параметров нанотермического лизиса опухолевых клеток *in vitro* и *in vivo*, индуцированного наночастицами золота в физических полях [5,8,14]. Среди используемых методов математического моделирования процессов термолиза - численные методы, методы математической морфологии, метод конечных разностей во временном поле (FDTD), а также методы решения задач распознавания образов, включая метод опорных векторов, теоретико-игрового (стратегического) информационного моделирования [6,13]. Основные методы моделирования электромагнитных полей, на которых реализуется программное обеспечение проекта: метод конечных элементов и метод конечных разностей [9,11,15]. Оба метода используются в двух вариантах: моделирование гармонических полей на фиксированной частоте и моделирование полей, зависящих от времени.

Оригинальной особенностью исследований является использование наряду с традиционными средствами математического моделирования, математической физики и вычислительной математики методов виртуального информационного моделирования наноструктур. Решение задачи компьютерного моделирования процесса нанотермолиза сводится к этапам компьютерного моделирования электромагнитных полей нанотермолиза клеток и биотканей на основе золотых плазмонно-резонансных наночастиц; вычислительным экспериментам по определению параметров резонансной электромагнитной гипертермии биотканей лабораторных животных на основе технологии золотых наночастиц и определению параметров управляемого нагрева коллоидного раствора золотых плазмонно-резонансных наночастиц (наноболочек, наностержней и т.д.) посредством непрерывного и импульсного воздействия электромагнитных полей [9,12,13]. Далее рассчитывается пространственное распределение температурных полей коллоидного раствора золотых наночастиц и создаются имитационные модели на основе вычислительных моделей и программ разрушения онкологических клеток в биотканях при воздействии температурных полей.

Создаваемая на базе высокопроизводительного вычислительного кластера информационно-распознающая система позволяет использовать принципиально новые возможности, которые предоставляют современные информационные технологии по сбору, накоплению, интерпретации, оперативному управлению большими объемами нанобиологических данных и решения многомерных задач математического моделирования по проблемам нанодиагностики, морфологии, цитологии, гистологии, химиотерапии, радиологии и регенеративной клеточной терапии. Это позволяет осуществлять комплексные исследования, имитационное моделирование в реальном времени и дать строго научный прогноз при принятии обоснованных решений для рационального и эффективного использования нанотехнологий для восстановления нормального функционирования организма.

Список литературы

1. *Ворожцов И.А., Кондратьев А.И., Мазур А.И., Савин С.З.* Методы определения параметров нанотермического лизиса. Хабаровск: Вычислительный центр ДВО РАН, 2010 23 с.
2. *Гусев А.И.* Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. М.: Физматлит, 2005. 410 с.
3. *Кривошеев И.А., Косых Н.Э., Гостюшкин В.В., Савин С.З., Деменев В.А.* Изучение параметров нанотермического лизиса опухолевых клеток, индуцированного наночастицами золота при воздействии физических полей различной природы // Материалы Международного форума по нанотехнологиям, Москва, 5-6 декабря 2008 г. Москва: РоснаноТех, 2008. С.421-422.
4. *Косых Н.Э., Хоменюк А.В.* Информационное пространство метода ВИМ // Проблемы создания виртуальных информационных моделей. Владивосток: Дальнаука. 2006. С. 143-157.
5. *Посвалюк Н.Э., Савин С.З.* Перспективы использования нанозолота в онкологии и неврологии // // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований, №5, 2011. С.107-108.
6. *Савин С.З., Косых Н.Э., Гостюшкин В.В.* Виртуальные информационные технологии в математической морфологии // Вычислительные технологии, т.13. Вестник КазНУ им. Аль-Фараби, Серия математика, механика, информатика, №4 (59) . Совместный выпуск. Часть III. Алматы - Новосибирск: КазНУ им. Аль-Фараби – ИВТ СО РАН, 2008. С.133-139.
7. *Суздаев, И.П.* Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов М. КомКнига, 2006. 590 с.
8. *Changbin Zhang, Demenev V.A., Savin S.Z.* Models of controlled nanothermolysis // Труды международной научно-практической конференции «Суперкомпьютеры: вычислительные и информационные технологии». Хабаровск, 30 июня – 2 июля 2010 г. Хабаровск: изд-во ТОГУ, 2010. С. 492-498.
9. *Hiptmair R.* Finite elements in computational electromagnetism // Acta Numerica. 2002. P. 237–330.
10. *Huang X, Qian W, El-Sayed IH, El-Sayed MA.* The potential use of the enhanced nonlinear properties of gold nanospheres in photothermal cancer therapy // Lasers Surg. Med. 2007. Oct, 39(9). pp. 747-753
11. *Jain PK, Lee KS, El-Sayed IH, El-Sayed MA.* Calculated absorption and scattering properties of gold nanoparticles of different size, shape, and composition: applications in biological imaging and biomedicine // J Phys. Chem. B. 2006. Apr 13,110(14). pp. 7238-7248
12. *Larsson E.M, Alegret J, Kall M, Sutherland D.S.* Sensing characteristics of NIR localized surface plasmon resonances in gold nanorings for application as ultrasensitive biosensors // Nano Lett. 2007. May,7(5). pp.1256-1263.
13. *Lee KS, El-Sayed MA.* Gold and silver nanoparticles in sensing and imaging: sensitivity of plasmon response to size, shape, and metal composition // J Phys. Chem. B. 2006. Oct 5;110(39). pp.19220-25
14. *Kosykh N.E., Gostuyshkin V.V., Savin S.Z., Voroztov I.V.* Designing the systems of computer diagnostics of medical images // Proc. of The First Russia and Pacific Conference on Computer Technology and Applications (RPC 2010). Vladivostok, Russia. 6-9 September, 2010. (e-book) 4 p.
15. *Yee K.S.* Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media // IEEE Trans. Antennas and Propagat. 1966. Vol. 17. P. 585–589.