

ЛАГУНИН А.А., ПОРОЙКОВ В.В.

ИБМХ РАМН, Москва, Россия;

## **КОМПЬЮТЕРНЫЙ АНАЛИЗ ПРОФИЛЕЙ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ПРИ СОЗДАНИИ ЛЕКАРСТВ С ПОЛИФАРМАКОЛОГИЧЕСКИМ ДЕЙСТВИЕМ**

**Цель:** Разработка компьютерного подхода для анализа профилей биологической активности химических соединений при создании лекарств с полифармакологическим действием.

**Материалы и методы:** Компьютерная программа PASS (<http://pharmaexpert.ru/passonline/>), прогнозирующая спектры биологической активности химических соединений на основе их структурных формул. Компьютерная программа PharmaExpert, обеспечивающая анализ результатов прогноза PASS на основе базы знаний о взаимосвязях “механизм-эффект” для выявления основных механизмов действия, как для отдельных химических соединений, так и для оценки терапевтических эффектов при их совместном использовании.

**Результаты:** Разработанный подход был применен для поиска дуальных ингибиторов циклоксигеназы-1 и 5-липооксигеназы, дуальных ингибиторов ангиотензин-превращающего фермента и нейтральной эндопептидазы, соединений, действующих на несколько ключевых мишеней, участвующих в патогенезе рака молочной железы. Кроме того, данный подход был использован для отбора перспективных комбинаций лекарственных соединений, обладающих общим терапевтическим эффектом и оценки профилей биологической активности растительных экстрактов.

**Выводы:** Созданный компьютерный подход обеспечивает анализ наиболее вероятных профилей биологической активности химических соединений при создании лекарств с полифармакологическим действием.

Oral presentation at the Symposium “Bioinformatics and Computer-Aided Drug Discovery” in the framework of XVIII Russian National Congress “Man and Drugs”, Moscow, April 11-15, 2011.