

ПОГОДИН П.В., ЛАГУНИН А.А., ФИЛИМОНОВ Д.А., ПОРОЙКОВ В.В.

ФГБУ «ИБМХ» РАМН, Москва, Россия;

КОМПЬЮТЕРНАЯ ОЦЕНКА ПРОФИЛЕЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ С КИНАЗАМИ ЧЕЛОВЕКА

Цель: Разработка метода компьютерной оценки профилей взаимодействия фармакологических веществ с киназами человека на основе информации, содержащейся в БД ChEMBL.

Материалы и методы: Компьютерная программа PASS, прогнозирующая спектры биологической активности химических соединений на основе их структурных формул. База данных ChEMBL, содержащая информацию о биологической активности и структуре химических соединений.

Результаты: На основе информации из БД ChEMBL была создана обучающая выборка, содержащая структуры 39885 химических соединений, взаимодействующих с 393 киназами человека. Исследованы различные подходы к использованию данных об активных и неактивных соединениях для обучения программы PASS. Проведена оценка точности прогноза взаимодействия химических соединений с киназами человека.

Выводы: В результате обучения программы PASS показано, что прогноз возможен для 320 из 393 киназ, представленных в обучающей выборке, со средней точностью предсказания около 90% (скользящий контроль с исключением по одному).

Работа выполнена при поддержке гранта Минобрнауки РФ (соглашение № 8274).

Раздел: 11