

ПОРОЙКОВ В.В., ГЛОРИОЗОВА Т.А., ЛАГУНИН А.А., ФИЛИМОНОВ Д.А.

ИБМХ РАМН, Москва, Россия

ПРИМЕНЕНИЕ КОМПЬЮТЕРНЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ РЕПОЗИЦИОНИРОВАНИЯ ЛЕКАРСТВ

Цель: Исследование возможностей применения компьютерного прогнозирования спектров биологической активности лекарственных соединений с использованием программы PASS для выявления новых перспективных областей их применения в медицинской практике.

Материалы и методы: Компьютерная программа PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances, <http://pharmaexpert.ru/passonline/>) прогнозирует более 4000 видов биологической активности со средней точностью 95% (скользящий контроль с исключением по одному) на основе анализа обучающей выборки, содержащей более 260000 биологически активных веществ. База данных по субстанциям лекарственных препаратов, разрешенных к медицинскому применению в России, содержащая около 1000 структурных формул веществ, их наименования, информацию о биологической активности. Выборка лекарственных соединений, используемых в клинике по двум и более показаниям.

Результаты: Средняя точность прогноза известных видов биологической активности для субстанций лекарственных препаратов, разрешенных к медицинскому применению в России, составляет свыше 95%. Анализ результатов прогноза биологической для выборки лекарственных соединений, используемых в клинике по двум и более показаниям, показывает, что подавляющее большинство новых применений лекарственных препаратов можно было бы идентифицировать на основе компьютерного прогноза. Результаты компьютерного прогноза новых областей применения двух известных лекарственных препаратов подтверждены последующим доклиническим тестированием специфической активности.

Выводы: Компьютерный прогноз спектра биологической активности лекарственных соединений с использованием программы PASS позволяет существенно сузить направления их дальнейшего биологического тестирования с целью расширения медицинских показаний известных лекарственных препаратов (репозиционирования лекарств).

Работа выполнена при частичной поддержке ГК 02.740.11.0306.