

КОМПЬЮТЕРНАЯ СИСТЕМА АНАЛИЗА И ПРОГНОЗИРОВАНИЯ СВОЙСТВ АНТИБИОТИКОВ ПО ИХ СТРУКТУРЕ

Чистякова Т.Б.,^a Макарук Р.В.,^a Мусаев Э.Э.^a, Белахов В.В.^b

^aФГБОУ ВО «СПбГТИ(ТУ)», 190013, Российская Федерация,
Санкт-Петербург, Московский проспект, 26,
e-mail: chistb@mail.ru

^bТехнион - Израильский институт технологии, 3200008, Израиль, Хайфа

Патогенные микроорганизмы, вызывающие различные заболевания, становятся всё более устойчивыми к действию лекарственных препаратов. В связи с этим актуальными задачами являются: 1) поиск новых высокоэффективных лекарственных средств; 2) химическая модификация известных препаратов с целью получения на их основе производных с улучшенными химиотерапевтическими свойствами.

Современная медицина применяет информационные технологии, что привело к совершенствованию моделей прогнозирования свойств синтезируемых препаратов, накоплению медицинских баз данных и повышению их доступности. Используя эту информацию, а также опыт разработчиков системы в синтезе и модификации антимикотиков, нами разработана компьютерная система анализа и прогнозирования свойств антибиотиков по их структуре.

Целью разработанной системы является прогноз свойств антибиотиков. На основе молекулярной структуры противогрибкового антибиотика разработанная компьютерная система прогнозирует медико-биологические и биофармацевтические свойства впервые синтезируемого или модифицируемого известного антимикотика.

Разработанная система использует открытые государственные источники физико-химических и медико-биологических данных о лекарственных препаратах. Полученная из этих баз данных информация приводится к двум используемым в системе форматам, которые подаются на вход нейронным сетям и базе правил. Первый формат - это молекулярные дескрипторы. Второй формат представляет химическую структуру антибиотика в нотации SMILES.

Тестирование разработанной компьютерной системы прогнозирования параметров антибиотиков по их химической структуре на примере тетраенового макролидного антибиотика нистатина, широко используемого в медицинской практике для лечения многих клинических форм кандидозов, показало состоятельность такого подхода и возможность его использования для прогнозирования медико-биологических и биофармацевтических свойств не только полиеновых макролидных антибиотиков и их производных, а также антимикотиков других классов.