

**Симпозиум "Биоинформатика и компьютерное конструирование лекарств 2020":
Конкурс молодых ученых
Вопросы и комментарии Ефремова Р.Г. / ответы докладчиков (авторский стиль сохранен)**

Савосина П.И.

Ефремов Р.Г.:

Одно и то же лекарственное соединение, зарегистрированное к применению в разных странах, может иметь отличающиеся характеристики в соответствующих БД этих стран. Как поступать в таком случае при внесении соединения в предлагаемую Вами БД?

Савосина П.И.:

1. В одной БД для препарата доступны только сведения о его медицинском назначении, а в другой БД доступна более подробная информация, которая включает в себя и механизм действия и терапевтические и нежелательные мишени. В данном случае в создаваемую БД вносится более подробная информация, чтобы максимально охарактеризовать лекарственное вещество.
2. Если в разных странах лекарственное соединение применяется для терапии разных заболеваний и, соответственно, в БД этих стран содержатся отличающиеся сведения о медицинских назначениях, то в этом случае все доступные сведения объединяются и вносятся в создаваемую БД.
3. В случае нахождения противоречий в описании лекарственного препарата при изучении БД разных стран, например: в одной БД сказано, что препарат является ингибитором определенного фермента, в БД другой страны содержатся сведения, согласно которым этот фермент не ингибируется данным лекарственным средством, то подобная информация не из одного источника не заносится в создаваемую БД, однако вносятся остальные сведения, такие как наименование, структурная формула, медицинское назначение и данные по другим мишеням, для которых нет противоречивой информации.

Ефремов Р.Г.:

Помимо информации, взятой из имеющихся БД (предполагается, что записи в них соответствуют неким внутренним критериям отбора), Вы используете данные из ряда других источников (PubMed и пр.). В последних качество и объем информации могут существенно варьировать и, кроме того, отличаться от такового в упомянутых БД. Таким образом, создаваемый ресурс имеет ряд неточностей и может содержать недостоверную информацию. Ваше мнение?

Савосина П.И.:

Одной из задач в процессе создания БД является уменьшение количества неточностей и недостоверных сведений путем ручной проверки информации, которая используется для заполнения. Информация вносится в создаваемую БД только в том случае, если она содержится либо в источнике, контролируемом выдающим разрешение на медицинское применение государственным органом, либо в научной публикации, в которой данные проверяются на оригинальность. В случае, если статья не является первоисточником данных об активности лекарственного средства, и они заимствованы из другой публикации, то проводится проверка этих сведений в указанной референсной статье.