

В.Б. Сулимов: Правильно ли я понимаю, что указанная внизу слайда статья содержит сайты приводимых Вами баз данных?

П.И. Савосина: Указанная на втором слайде ссылка на публикацию содержит количество всемирно одобренных лекарственных средств, которые были идентифицированы авторами для их исследований. Также в дополнительных материалах к данной публикации приведены наименование, номер CAS, показания к применению изучаемых авторами лекарственных средств.

В.Б. Сулимов: По каким характеристикам возможен поиск лекарства в Вашей базе? Возможен ли поиск по идентификационному номеру из базы данных ZINC? Например, по номеру, приводимому в библиотеке DrugBank FDA базы ZINC?

П.И. Савосина: В базе данных возможен поиск лекарственных средств по их международному непатентованному наименованию; по наименованию, UniProt идентификаторам, коду гена, названию организма мишеней, с которыми препараты взаимодействуют; по медицинским назначениям; по дате одобрения и регулирующему органу, которым первым выдано разрешение на медицинское применение; по наименованию класса и кодам Mesh, ChEBI, National Drug File - Reference Terminology, если таковые были присвоены лекарственным средствам. Поиск по идентификационному номеру из базы данных ZINC поиск в базе данных не осуществляется.

В.Б. Сулимов: В вашей базе собраны только уникальные химические соединения (если они торгуются под разными названиями)? Сколько уникальных всего? 4. Есть ли возможность автоматически выделить все противовирусные или все противораковые и т.п.?

П.И. Савосина: В базе данных собраны как уникальные химические соединения (вне зависимости от количества торговых наименований), так и их комбинации, а в некоторых случаях только комбинации препаратов, если их отдельное применение не предусмотрено. Всего в базе данных 4065 уникальных соединений.

В.Б. Сулимов: Я не понял во второй Дискуссии Ваш ответ Осолодкину. Вы отвечаете "Сведения о показаниях для медицинского применения фармакологической субстанции содержатся в поле «Pharmacotherapeutic application» в виде подробного описания с указанием конкретного заболевания." А затем Вы говорите: " На данный момент группировка препаратов по заболеваниям не реализован". Так можно провести поиск в Вашей базе и выделить все противовирусные препараты? Есть ли в Вашей базе данных сведения о том, ковалентный это ингибитор или нет, а может быть это не ингибитор а активатор?

П.И. Савосина: Поисковый алгоритм БД представляет возможность пользователю отбирать по ключевым словам и выражениям записи с интересующим видом активности. Если, для примера, ввести в поле поиска значения «Cancer» или «Antiviral», будут отобраны все соответствующие записи, в полях которых встречается данные значения.

Поле «Pharmacotherapeutic application» содержит текстовое описание каждого соединения, в которое включены сведения о механизме действия и терапевтических назначениях препарата. С помощью поля «Search:», которое расположено в правом углу над таблицей на веб-страничке базы данных, можно осуществить поиск ключевых слов по всем полям одновременно. Однако, специальной фильтрации препаратов по механизму действия или группировки в данный момент в базе данных нет.

В настоящее время в БД представлены сведения о том, является ли соединение ингибитором, активатором, агонистом, антагонистом, модулятором или субстратом для мишени. Сведения о ковалентности пока не представлены.

В.Б. Сулимов: Если на страничке Вашей базы не приведен PDB ID, то значит белок-мишень не представлен в PDB или лигандов (лекарство) не представлено в PDB.

П.И. Савосина: Если PDB ID отсутствует, то значит, что лиганд не представлен в PDB.

В.Б. Сулимов: Что такое UniProt ID?

П.И. Савосина: UniProt ID –уникальный идентификатор для записи аминокислотной последовательности в БД UniProt. В созданной базе данных UniProt ID представлено под

названием accessions. В ближайшем будущем все текстовые идентификаторы будут снабжены соответствующими ссылками на БД Uniprot.

В.Б. Сулимов: Почему среди оценок PASS не приведена растворимость в воде? Или она все-таки включена в Вашу базу - возможность с помощью PASS предсказать растворимость в воде - сколько массы можно полностью растворить в заданном объеме воды?

П.И. Савосина: При помощи программы PASS осуществляется прогноз спектров биологической активности химических соединений на основе соответствующей обучающей выборки. Прогноз является качественным, т.е. оценивается обладает или не обладает соединение искомым видом биологической активности. Количественный прогноз может быть выполнен иным программным комплексом, разработанным в нашей лаборатории – GUSAR, при, опять же, наличии качественной обучающей выборки из соединений с количественными, экспериментально подтвержденными значениями растворимости, которой мы на настоящий момент, к сожалению, не обладаем.