

Премия “Noli Nocere” присуждена работе сотрудников ИБМХ

Поройков В.В., Дмитриев А.В., Дружиловский Д.С., Иванов С.М., Лагунин А.А., Погодин П.В., Рудик А.В., Савосина П.И., Тарасова О.А., Филимонов Д.А. Оценка безопасности фармакологически активных веществ *in silico* с применением методов машинного обучения: Обзор. Безопасность и риск фармакотерапии, 2023, 11(4), 372-389. [DOI: 10.30895/2312-7821-2023-11-4-372-389](https://doi.org/10.30895/2312-7821-2023-11-4-372-389).

РЕЗЮМЕ

Актуальность. В настоящее время в исследованиях и разработках новых лекарственных препаратов повсеместно используются методы машинного обучения (ML). Применение этих методов особенно актуально для оценки безопасности фармакологических веществ на ранних стадиях исследований, что существенно снижает риски получения отрицательных результатов в дальнейшем.

Цель. Обзор основных информационных и прогностических ресурсов, которые могут быть использованы для оценки безопасности фармакологических веществ с применением методов *in silico*.

Обсуждение. Использование новых методов ML позволяет на основе анализа зависимостей «структура–активность» оценивать наиболее вероятные молекулярные мишени, с которыми может взаимодействовать конкретное соединение, потенциальные фармакотерапевтические и побочные эффекты, острую и специфическую токсичность, метаболизм и другие фармакодинамические, фармакокинетические и токсикологические характеристики изучаемых веществ. Получение этой информации дает возможность определить приоритетные направления экспериментального тестирования биологической активности на ранних стадиях исследований и отобрать соединения с низкой вероятностью проявления побочных и токсических эффектов. В настоящем обзоре рассмотрены свободно доступные в Интернет информационные и прогностические ресурсы, которые позволяют оценивать безопасность соединения на основе его структурной формулы с применением подходов ML. Особое внимание уделено отечественным компьютерным разработкам, представленным на платформе [Way2Drug](https://way2drug.ru).

Выводы. Современные методы компьютерной оценки свойств фармакологических веществ на основе анализа зависимостей «структура–активность» методами ML обеспечивают получение информации о различных характеристиках безопасности фармакологических веществ и позволяют отбирать наиболее перспективные «кандидаты» для углубленных доклинических и клинических исследований.