

ГУАП

ПРЕЗЕНТАЦИЯ ПО ТЕМЕ:
Хемоинформатика
по курсу: Информационные технологии в медицине

ВЫПОЛНИЛ

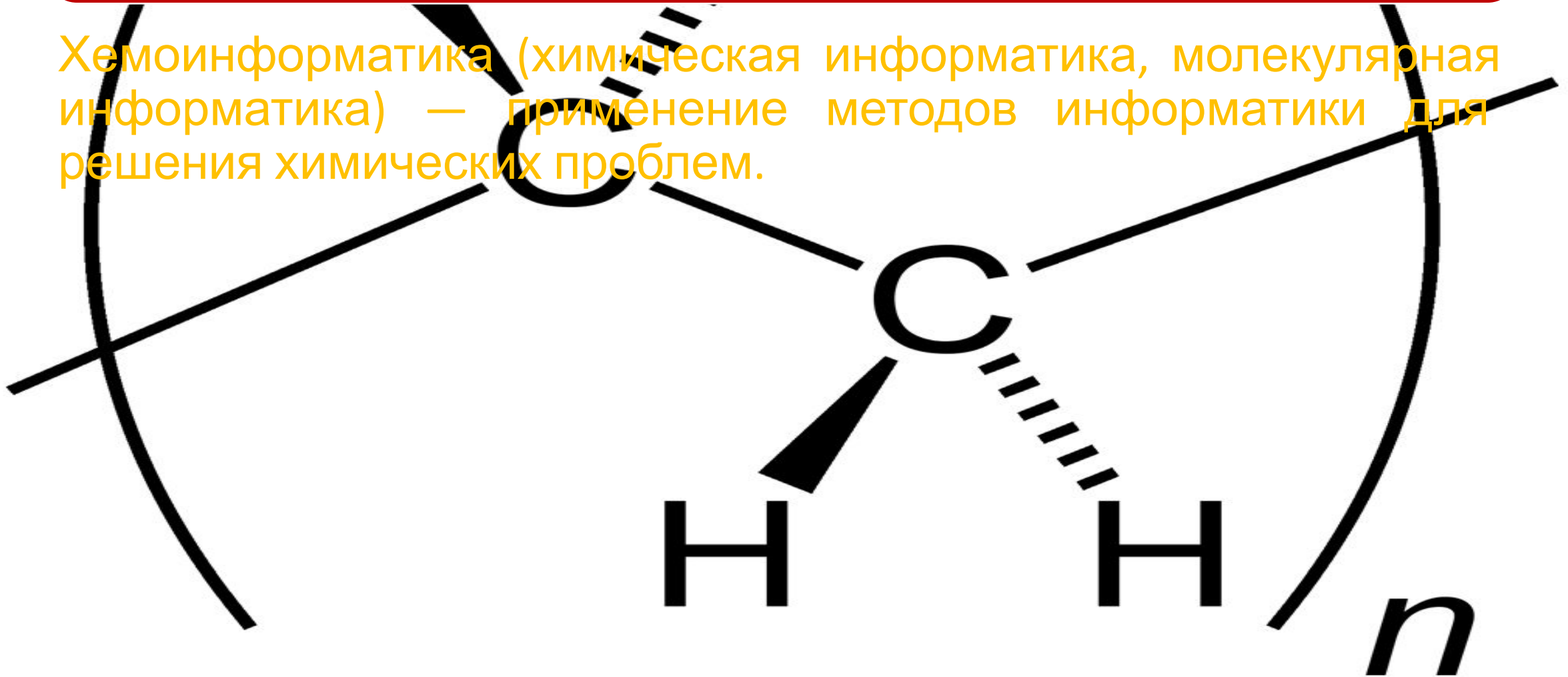
СТУДЕНТ ГР. 23-46

Е.П.Логачёв

Санкт-Петербург 2016

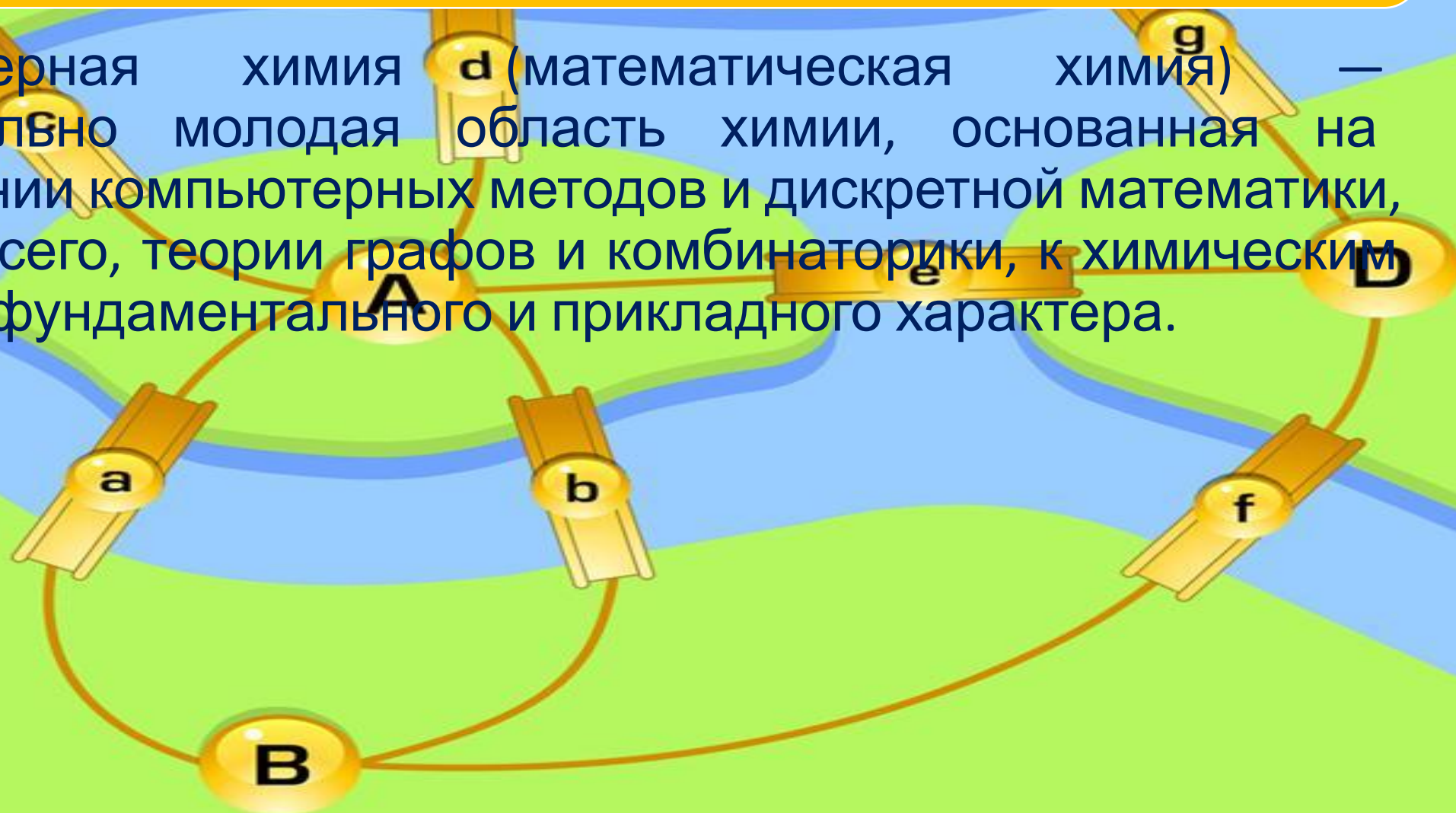
Хемоинформатика

Хемоинформатика (химическая информатика, молекулярная информатика) — применение методов информатики для решения химических проблем.



Компьютерная химия

Компьютерная химия (математическая химия) — сравнительно молодая область химии, основанная на применении компьютерных методов и дискретной математики, прежде всего, теории графов и комбинаторики, к химическим задачам фундаментального и прикладного характера.



История

Хемоинформатика это научная дисциплина, возникшая за последние 40 лет в пограничной области между химией и вычислительной математикой. Было осознано, что во многих областях химии огромный объем информации, накопленный в ходе химических исследований, может быть обработан и проанализирован только с помощью компьютеров. Более того, многие из проблем в химии настолько сложны, что для их решения требуются новые подходы, основанные на применении методов информатики. Исходя из этого, были разработаны методы для построения баз данных по химическим соединениям и реакциям, для прогнозирования физических, химических и биологических свойств соединений и материалов, для поиска новых лекарственных препаратов, анализа спектральной информации, для предсказания хода химических реакций и планирования органического синтеза.

Хемоинформатика и другие науки

Хемоинформатика, наряду с квантовой химией и молекулярным моделированием, является ветвью теоретической химии (theoretical chemistry) и областью вычислительной (компьютерной) химии.

Хемоинформатика тесно связана с биоинформатикой, и между ними нет четкой границы. Биоинформатику можно считать частным случаем хемоинформатики для биологических макромолекул, а хемоинформатику — распространением биоинформатики на небιологические молекулы. Есть ряд областей, например, хемогеномика (chemogenomics), которые в равной степени относятся к биоинформатике и хемоинформатике.

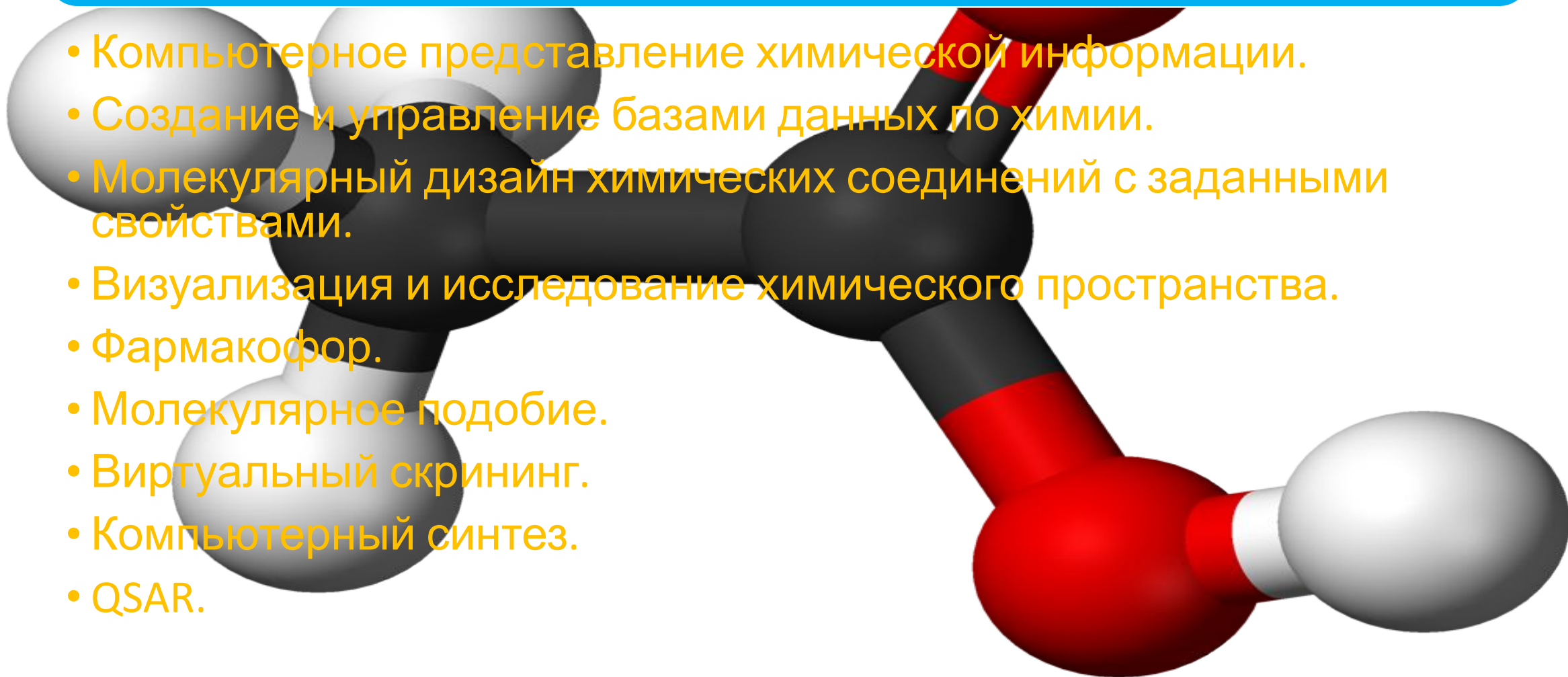
На пересечении хемоинформатики и фармакологии стоит медицинская (фармацевтическая) химия.

На пересечении хемоинформатики и аналитической химии стоит хеометрика (chemometrics).

Математические основы хемоинформатики, связанные с представлением химических соединений в виде молекулярных графов, занимается математическая химия (mathematical chemistry).

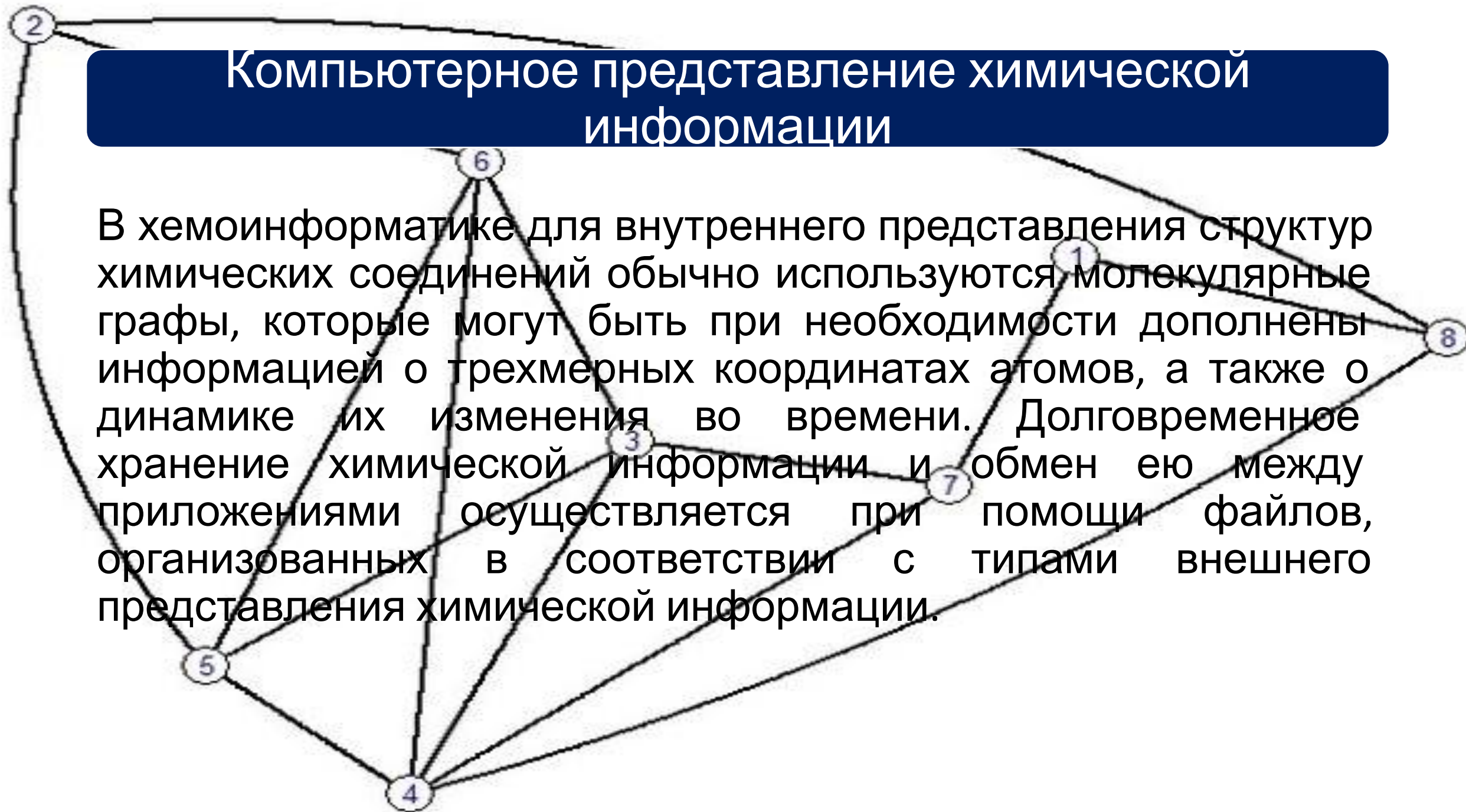
ОСНОВЫ

- Компьютерное представление химической информации.
- Создание и управление базами данных по химии.
- Молекулярный дизайн химических соединений с заданными свойствами.
- Визуализация и исследование химического пространства.
- Фармакофор.
- Молекулярное подобие.
- Виртуальный скрининг.
- Компьютерный синтез.
- QSAR.



Компьютерное представление химической информации

В хемоинформатике для внутреннего представления структур химических соединений обычно используются молекулярные графы, которые могут быть при необходимости дополнены информацией о трехмерных координатах атомов, а также о динамике их изменения во времени. Долговременное хранение химической информации и обмен ею между приложениями осуществляется при помощи файлов, организованных в соответствии с типами внешнего представления химической информации.



SMILES

SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry Specification, англ. спецификация упрощенного представления молекул в строке ввода) — система правил (спецификация) однозначного описания состава и структуры молекулы химического вещества с использованием строки символов ASCII. Название в английском языке является омонимом к слову smiles (улыбки), однако пишется только прописными буквами. В русском языке однозначного аналога не имеет, рекомендуется употребление на языке оригинала. Произносится как «смайлз».

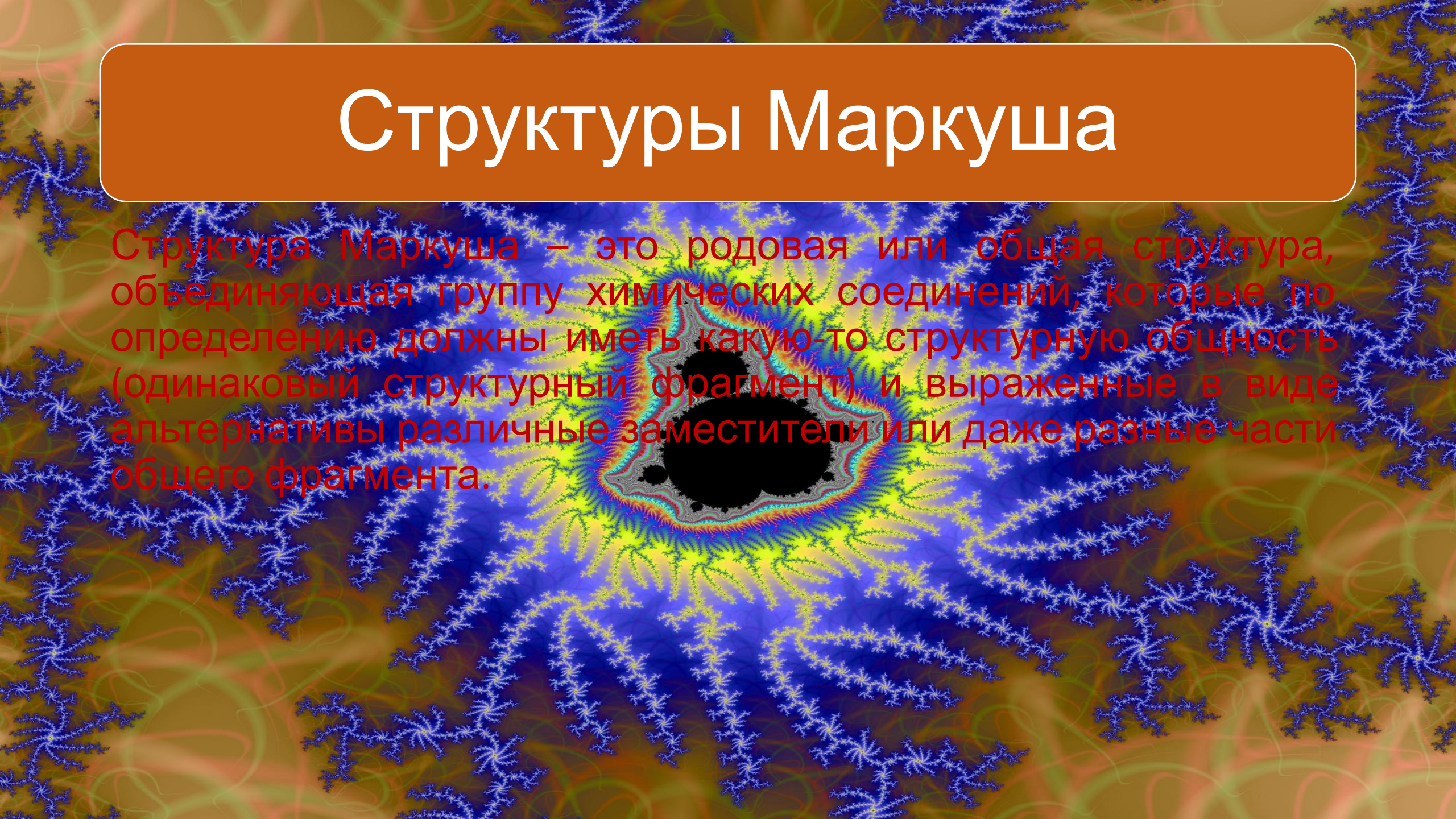
Создание и управление базами данных по ХИМИИ

Особенностью управления базами данных по химии является то, что оно обеспечивает следующие виды поиска, характерные для химической информации:

1. Поиск идентичной химической структуры, контроль за дубликатами
2. Подструктурный поиск
3. Поиск по молекулярному подобию
4. Поиск фармакофора
5. Поиск по структурам Маркуша

Структуры Маркуша

Структура Маркуша – это родовая или общая структура, объединяющая группу химических соединений, которые по определению должны иметь какую-то структурную общность (одинаковый структурный фрагмент) и выраженные в виде альтернативы различные заместители или даже разные части общего фрагмента.



Молекулярное подобие

Понятие молекулярного подобия (или химического подобия, *chemical similarity*) является одной из ключевых концепций хемоинформатики. Оно играет важную роль в современных подходах к прогнозированию свойств химических соединений, дизайну новых соединений с заранее заданными свойствами и, в особенности, при поиске новых лекарственных препаратов путём проведения скрининга больших баз данных по доступным (или потенциально доступным) химическим соединениям. Подобный поиск основан на принципе подобия свойств, сформулированном Johnson и Maggiora: подобные химические соединения обладают подобными свойствами.

Мера молекулярного подобия часто описывается как величина, обратная расстоянию либо равная константе минус расстояние в дескрипторном пространстве.

Программное обеспечение для работы с базами данных химических структур (хранение, поиск)

1. ISIS/Host, ISIS/Base (www.mdli.com)
2. ChemFinder, ChemOffice (www.cambridgesoft.com)
3. JChem (www.chemaxon.com)
4. THOR (www.daylight.com)
5. MOE (www.chemcomp.com)
6. ICM Pro (под mySQL) (www.molsoft.com)
7. CheD (Сергей Трепалин)
8. UNITY (www.tripos.com)
9. OrChem (orchem.sourceforge.net)
10. Bingo (ggasoftware.com/opensource/bingo)
11. Pgchem::tigress (pgfoundry.org/projects/pgchem)



Публичные базы данных, содержащие химическую информацию

1. [PubChem \(pubchem.ncbi.nlm.nih.gov\)](http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov)
2. [ZINC \(zinc.docking.org\)](http://zinc.docking.org)
3. [NCI \(129.43.27.140/ncidb2\)](http://129.43.27.140/ncidb2)
4. [DrugBank \(www.drugbank.ca\)](http://www.drugbank.ca)
5. [BindingDB \(www.bindingdb.org\)](http://www.bindingdb.org)
6. [DUD \(dud.docking.org\)](http://dud.docking.org)
7. [ChemSpider \(www.chemspider.com\)](http://www.chemspider.com)
8. [ChEMBL \(www.ebi.ac.uk\)](http://www.ebi.ac.uk)
9. [ChEBI \(www.ebi.ac.uk\)](http://www.ebi.ac.uk)

Молекулярный дизайн химических соединений с заданными свойствами

Одной из важнейших задач хемоинформатики является молекулярный дизайн химических соединений с заданными свойствами. Под этим понимается направленная генерация структур химических соединений (молекулярных графов), которые, в соответствии с теми или иными моделями, должны обладать одним либо набором заранее заданных свойств. При использовании для этой цели моделей QSAR и QSPR, полученных в результате поиска количественных соотношений структура-свойство, то говорят об "обратном QSAR", "обратном QSPR", либо о решении обратной задачи в проблеме структура-свойство. Эти подходы основаны на использовании генераторов молекулярных графов. При использовании физической модели, описывающей взаимодействие лиганд-белок, говорят о методах дизайна химических структур de novo.

Визуализация и исследование химического пространства

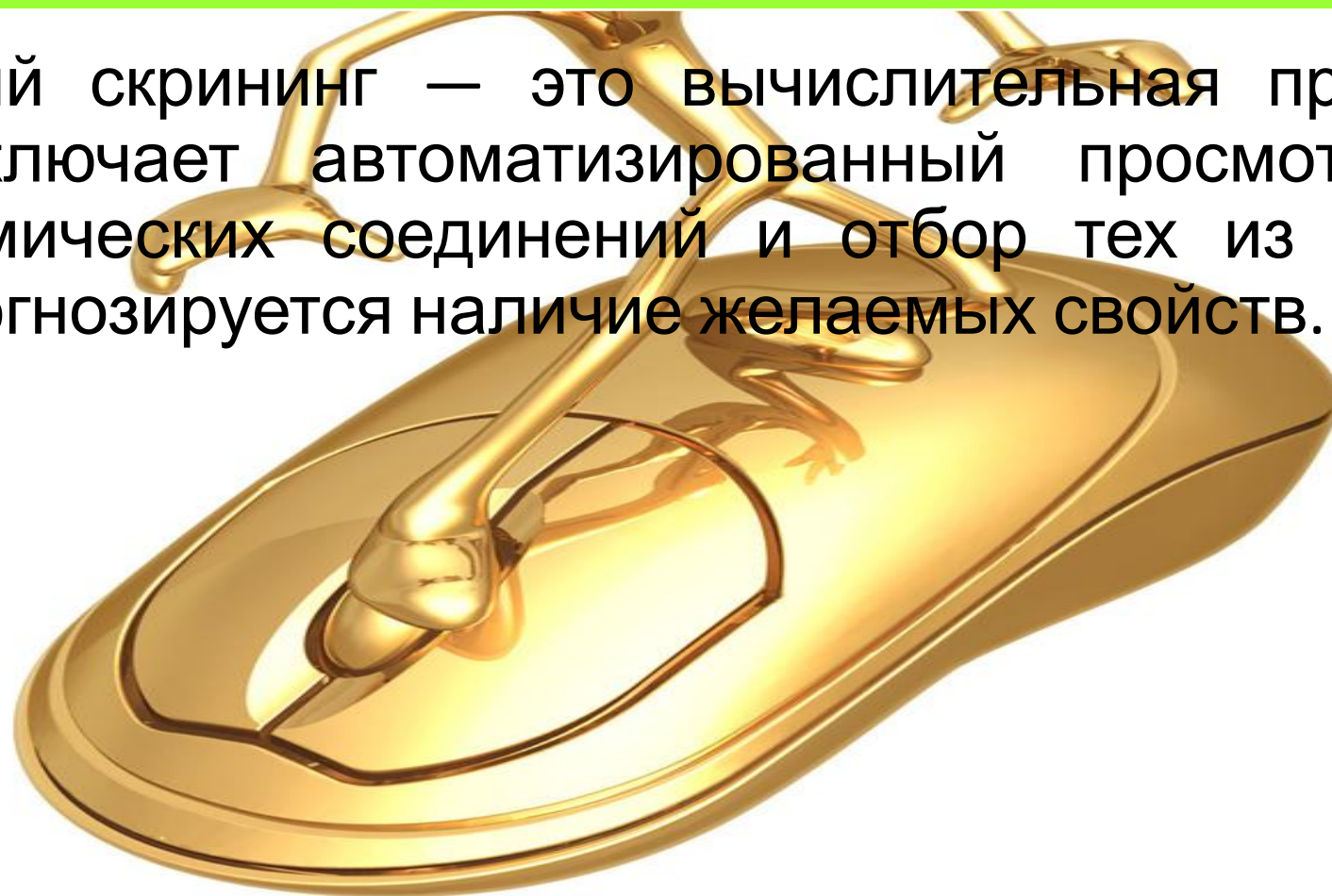
Одной из центральных задач хемоинформатики является визуализация и составление карт химического пространства, навигация и выявление неисследованных зон в нем. Анализ химического пространства обычно бывает основан либо на представлении химических объектов (структур и реакций) в виде векторов дескрипторов фиксированного размера, либо на описании химических объектов при помощи молекулярных графов. В последнем случае для представления химического пространства часто используются деревья молекулярных остовов.

Фармакофор

Фармакофор (от др. греч. *φάρμακον* «лекарство» и *φορός* «несущий») — это набор пространственных и электронных признаков, необходимых для обеспечения оптимальных супрамолекулярных взаимодействий с определённой биологической мишенью, которые могут вызывать (или блокировать) её биологический ответ. Модель фармакофора позволяет объяснить, за счёт чего структурно разнородные лиганды взаимодействуют с одними и теми же сайтами (основной участок) рецепторов.

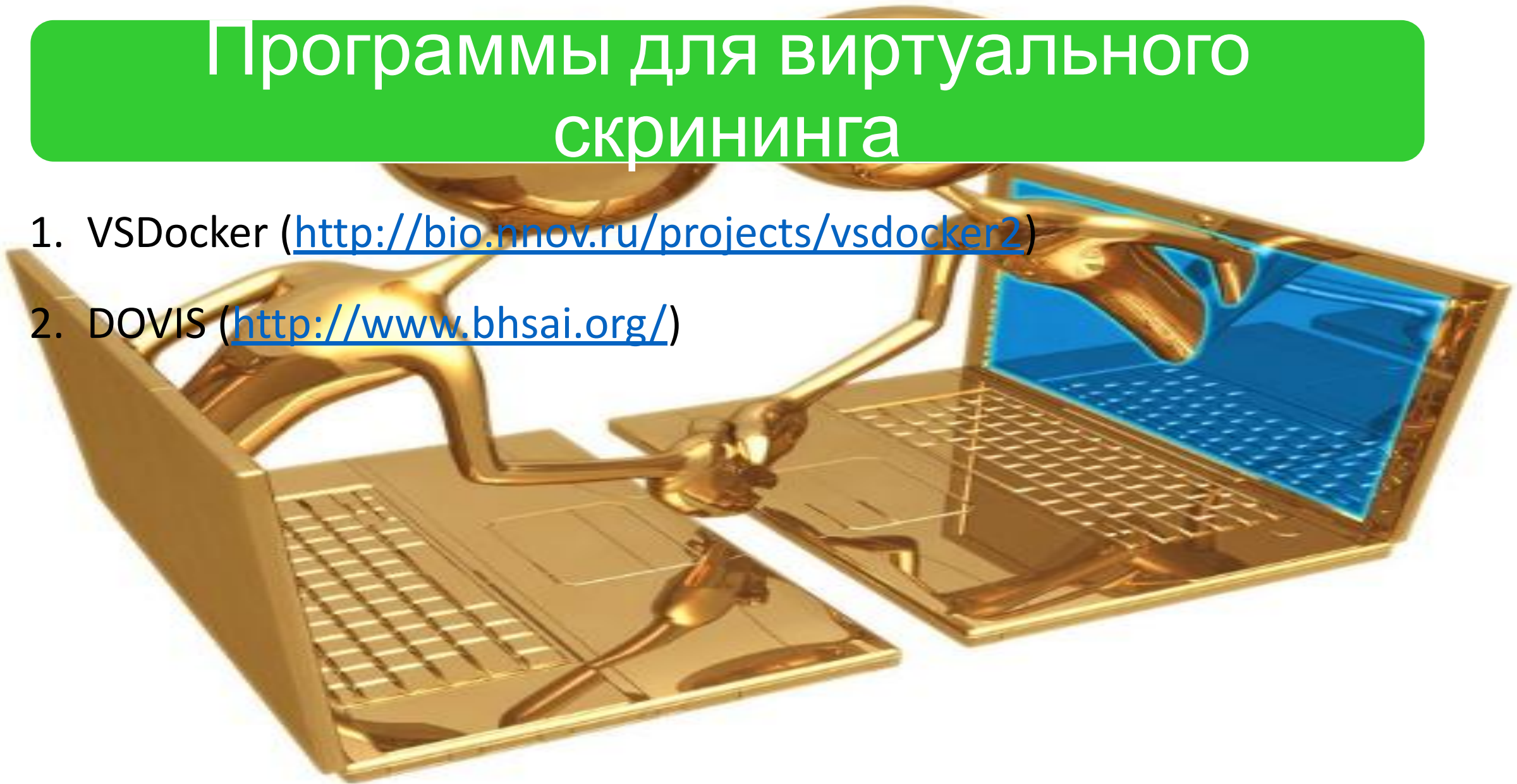
Виртуальный скрининг

Виртуальный скрининг — это вычислительная процедура, которая включает автоматизированный просмотр базы данных химических соединений и отбор тех из них, для которых прогнозируется наличие желаемых свойств.



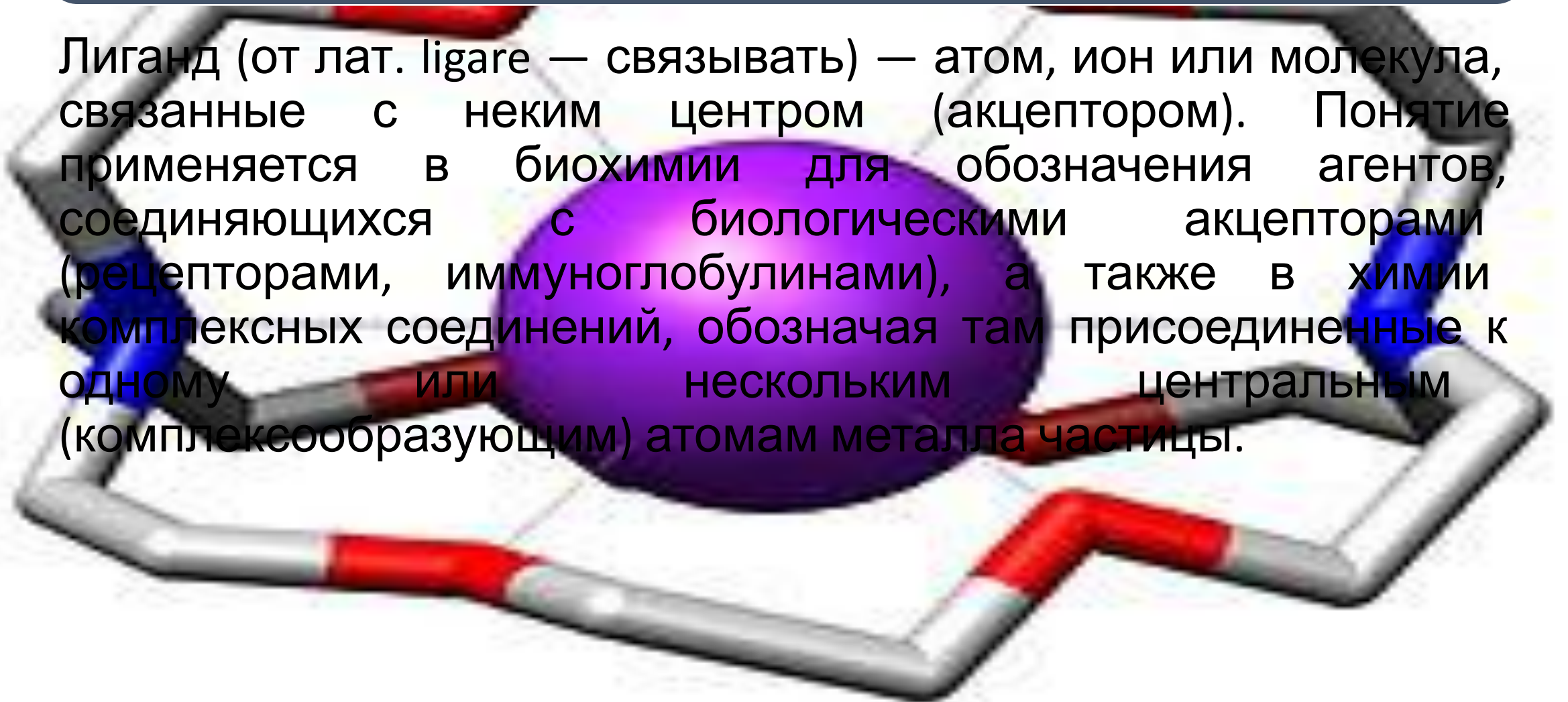
Программы для виртуального скрининга

1. VSDocker (<http://bio.nnov.ru/projects/vsdocker2>)
2. DOVIS (<http://www.bhsai.org/>)



Лиганд

Лиганд (от лат. *ligare* — связывать) — атом, ион или молекула, связанные с неким центром (акцептором). Понятие применяется в биохимии для обозначения агентов, соединяющихся с биологическими акцепторами (рецепторами, иммуноглобулинами), а также в химии комплексных соединений, обозначая там присоединенные к одному или нескольким центральным (комплексообразующим) атомам металла частицы.



Молекулярный докинг

Молекулярный докинг (или молекулярная стыковка) — это метод молекулярного моделирования, который позволяет предсказать наиболее выгодную для образования устойчивого комплекса ориентацию и положение одной молекулы по отношению к другой.



Программы для молекулярного докинга

- FlexX (<http://www.biosolveit.de/FlexX/>)
- Dock (<http://dock.compbio.ucsf.edu>)
- AutoDock (<http://autodock.scripps.edu>)
- AutoDock Vina (<http://vina.scripps.edu>)
- Surflex (<http://www.biopharmics.com>, www.tripos.com)
- Fred (<http://www.eyesopen.com/products/applications/fred.html>)
- Gold (http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/life_sciences/gold/)
- PLANTS (<http://www.tcd.uni-konstanz.de/research/plants.php>)
- 3DPL (<http://www.chemnavigator.com/cnc/products/3dpl.asp>)

- Lead Finder (<http://www.moltech.ru>)
- Molegro Virtual Docker (<http://www.molegro.com>)
- ICM Pro (http://www.molsoft.com/icm_pro.html)
- Q-Pharm (<http://www.q-pharm.com>)
- Ligand fit, Libdock and CDOCKER (<http://accelrys.com/services/training/life-science/StructureBasedDesignDescription.html>)
- DockSearch (<http://www.ibmc.msk.ru>)
- eHiTS (<http://www.simbiosys.ca/ehits/index.html>)
- Glide (<http://www.schrodinger.com/productpage/14/5/>)

AMPA-рецептор

AMPA-рецептор (рецептор α -амино-3-гидрокси-5-метил-4-изоксазолпропионовой кислоты, AMPAR) — ионотропный рецептор глутамата, который передаёт быстрые возбуждающие сигналы в синапсах нервной системы позвоночных. Данные рецепторы также активируются синтетическим аналогом глутамата — аминокислотой AMPA, откуда и получили своё название. AMPA-рецепторы обнаружены практически во всех структурах головного мозга, их считают наиболее распространённым типом рецепторов в нервной системе. Эти рецепторы представляют собой тетрамерные ионные каналы, которые могут состоять из субъединиц четырёх типов. AMPA-рецепторы имеют отношение к развитию некоторых заболеваний центральной нервной системы человека, таких как синдром Мартина — Белл, поэтому их изучению уделяется большое внимание.

NMDA-рецептор

NMDA-рецептор (NMDAR; НМДА-рецептор) — ионотропный рецептор глутамата, селективно связывающий N-метил-D-аспартат (NMDA).

Структурно NMDA-рецептор представляет собой гетеротетрамер двух субъединиц — NR1 и NR2. В неактивированной форме канал рецептора закрыт ионом магния.

Ион магния удаляется при деполяризации постсинаптической мембраны, на которой находится рецептор. Одновременно с этим для функционирования рецептора должен поступить в синаптическую щель глутамат. Такая активация рецептора вызывает открытие ионного канала, селективного к катионам, что ведёт к притоку в клетку Na^+ и, в небольшом объёме, Ca^{+2} , а K^+ покидает клетку. Ионы кальция, вошедшие через канал, активируют протеинкиназу CaMK-II. Происходит её аутофосфорилирование и фосфорилирование ряда белков нейрона-реципиента.

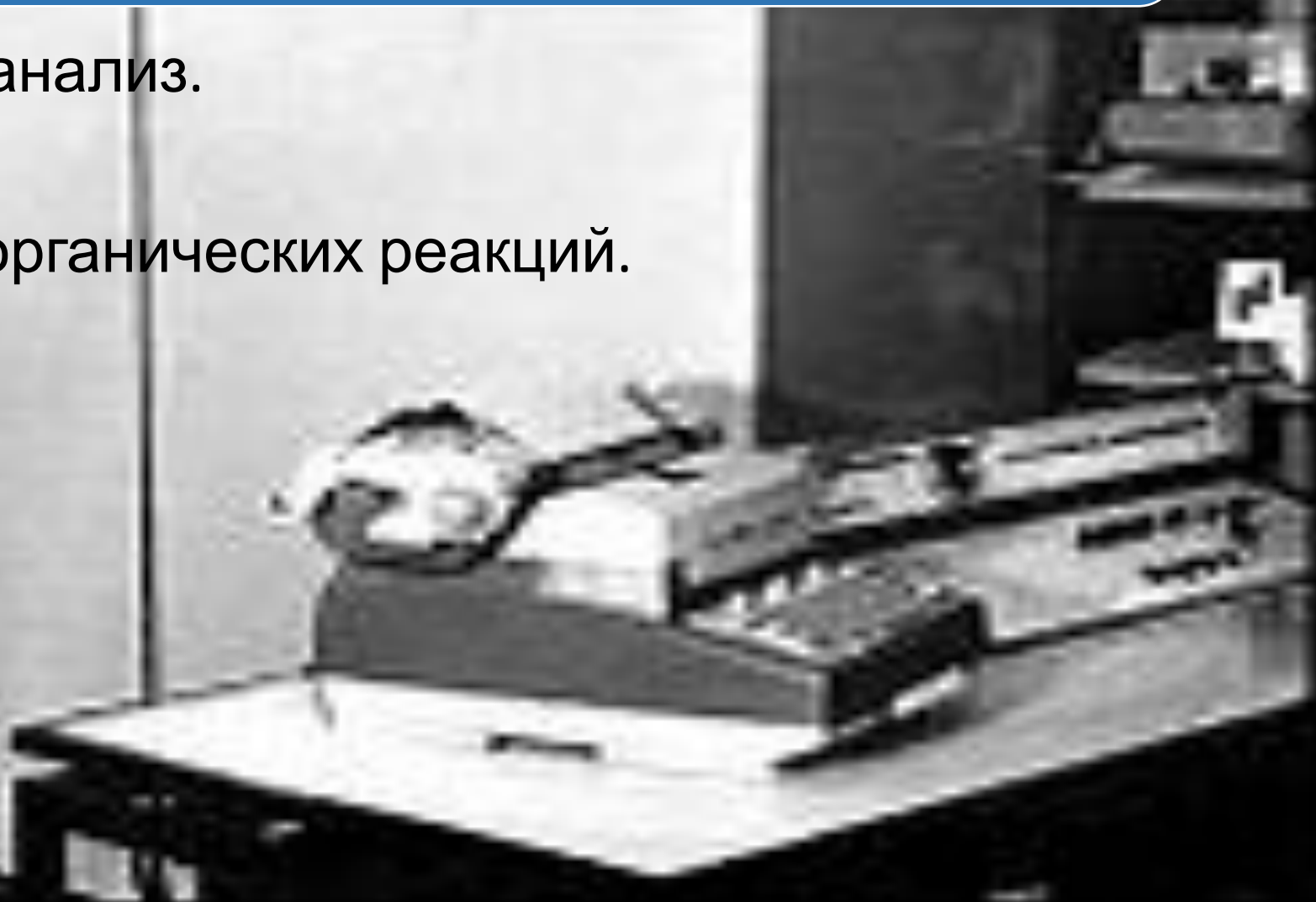
Этот процесс играет ключевую роль в синаптической пластичности, а следовательно и в процессах обучения и памяти. В отличие от других рецепторов, NMDAR одновременно восприимчив к эндогенным лигандам-агонистам и антагонистам и к изменению мембранного потенциала (англ. voltage-dependent).

Компьютерный синтез

Компьютерный синтез (англ. Computer Assisted Synthesis Design) — область хемоинформатики, охватывающая методы, алгоритмы и реализующие их компьютерные программы, оказывающие помощь химику в планировании синтеза органических соединений, прогнозировании результатов и дизайне новых типов органических реакций на основе обобщения данных по известным синтетическим превращениям. В более узком смысле, под компьютерным синтезом понимается проведение с помощью компьютера ретросинтетического анализа с целью выработки оптимальной схемы синтеза заданного химического соединения.

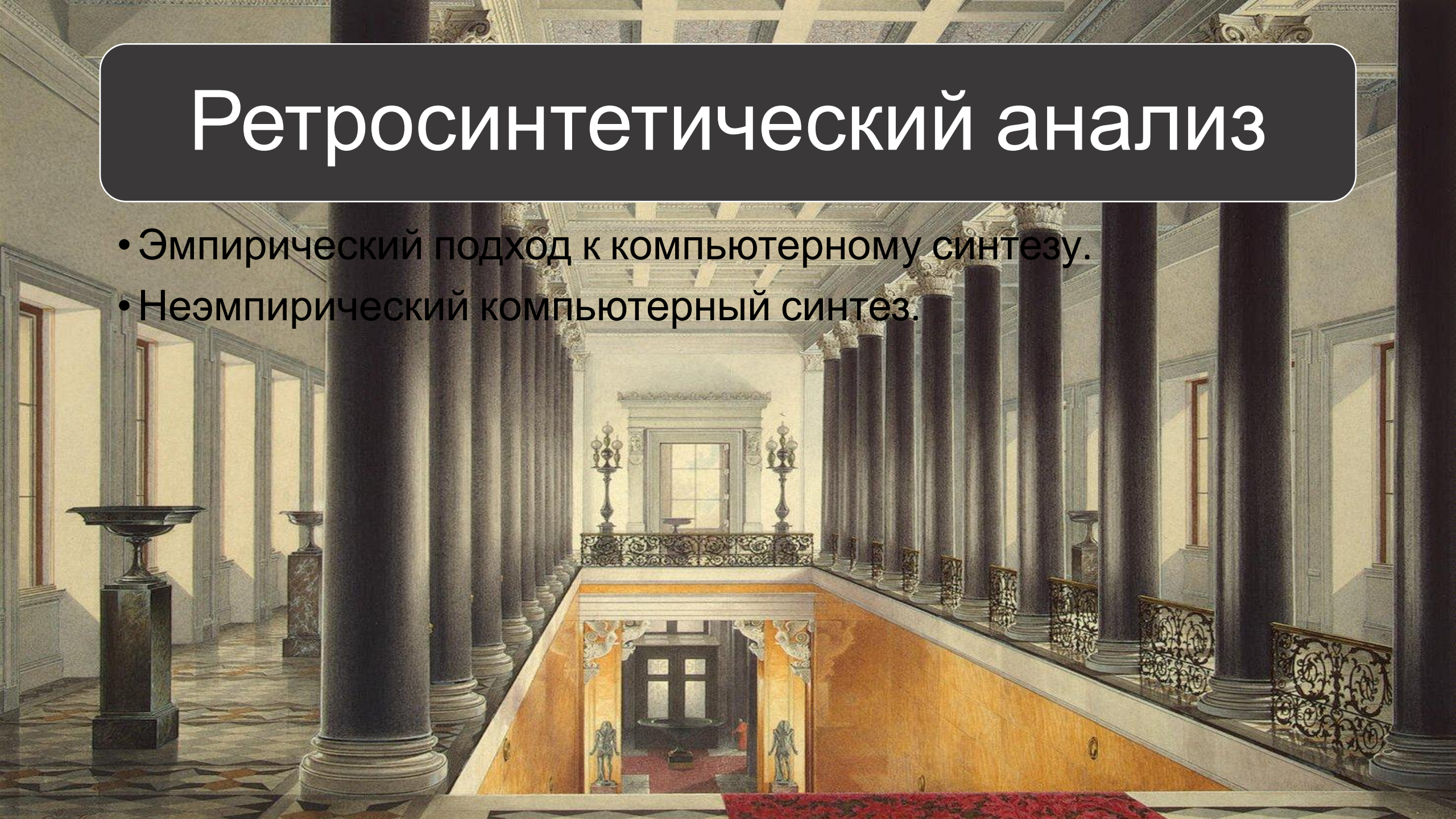
Виды компьютерный синтеза

- Ретросинтетический анализ.
- Синтез "вперед".
- Дизайн новых типов органических реакций.



Ретросинтетический анализ

- Эмпирический подход к компьютерному синтезу.
- Неэмпирический компьютерный синтез.



Компьютерные программы, реализующие неэмпирический подход к компьютерному синтезу

I. EROS (Elaboration of Reactions for Organic Synthesis)

II. TOSCA (Topological Synthesis design by Computer Application)

III. FLAMINCOES (Formal-Logical Approach to Molecular Interconversions)

IV. COMPASS (COMputer-ASSisted organic Synthesis)

Компьютерные программы, реализующие эмпирический подход к компьютерному синтезу

1. [LHASA](#) (Logic and Heuristic Applied to Synthetic Analysis)
2. SECS (Simulation and Evaluation of Chemical Synthesis)
3. REACT (REACTION path synthesis program for the petrochemical industry)
4. [SynGen](#) (SYNthesis GENeration)
5. SYNCHEM (SYNthetic CHEMistry)
6. [WODCA](#) (Workbench for the Organization of Data for Chemical Applications)
7. [OSET](#) (Organic Synthesis Exploration Tool)

Синтез "вперед"

Синтез "вперед" предсказывает результат органических реакций для заданных исходных веществ, реагентов и условий проведения реакций. Предсказания даются на основе подробного рассмотрения механизмов реакций.



Компьютерные программы, реализующие синтез "вперед"

- CAMEO (Computer Assisted Mechanistic Evaluation of Organic reactions)
- ICAR



Дизайн новых типов органических реакций

Компьютерные программы, предназначенные для дизайна новых типов органических реакций путём формального перечисления различных способов перераспределения связей:

- IGOR (Interactive Generation of Organic Reactions)
- SYMBEQ (SYMBolic EQUations)
- ARGENT

QSAR

Поиск количественных соотношений структура-свойство — процедура построения моделей, позволяющих по структурам химических соединений предсказывать их разнообразные свойства. За моделями, позволяющими прогнозировать количественные характеристики биологической активности, исторически закрепилось англоязычное название Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR). Аббревиатура QSAR часто трактуется расширенно для обозначения любых моделей структура-свойство. За моделями, позволяющими прогнозировать физические и физикохимические свойства органических соединений, закрепилось англоязычное название Quantitative Structure-Property Relationship (QSPR). При качественном описании соотношений между структурами химических соединений и их биологической активностью употребляют англоязычный термин Structure-Activity Relationship (SAR).

Моделирование свойств при векторном описании химических соединений

При векторном описании химической структуре ставится в соответствие вектор молекулярных дескрипторов, каждый из которых представляет собой инвариант молекулярного графа.



Молекулярные дескрипторы

Существующие наборы молекулярных дескрипторов могут быть условно разделены на следующие категории:

- Фрагментные дескрипторы существуют в двух основных вариантах — *бинарном и целочисленном*.
- Топологические индексы.
- Физико-химические дескрипторы — это числовые характеристики, получаемые в результате моделирования физико-химических свойств химических соединений, либо величины, имеющие четкую физико-химическую интерпретацию.
- Квантово-химические дескрипторы — это числовые величины, получаемые в результате квантово-химических расчетов.
- Дескрипторы молекулярных полей — это числовые величины, аппроксимирующие значения молекулярных полей путём вычисления энергии взаимодействия пробного атома, помещенного в узел решетки, с текущей молекулой.
- Константы заместителей впервые были введены Л. П. Гамметом в рамках уравнения, получившего его имя, которое связывает константы скорости реакции с константами равновесия для некоторых классов органических реакций.
- Фармакофорные дескрипторы показывают, могут ли простейшие фармакофоры, состоящие из пар или троек фармакофорных центров со специфицированным расстоянием между ними, содержаться внутри анализируемой молекулы.
- Дескрипторы молекулярного подобия указывают на меру сходства (молекулярного подобия) с соединениями из обучающей выборки.



Методы построения моделей структура-свойство

Для решения *регрессионных* задач при векторном описании структур химических соединений чаще всего в хемоинформатике применяются следующие методы математической статистики и машинного обучения:

1. Множественная линейная регрессия
2. Метод частичных наименьших квадратов (Partial Least Squares — PLS)
3. Искусственные нейронные сети
4. Регрессия на опорных векторах
5. Случайный лес
6. Метод k ближайших соседей

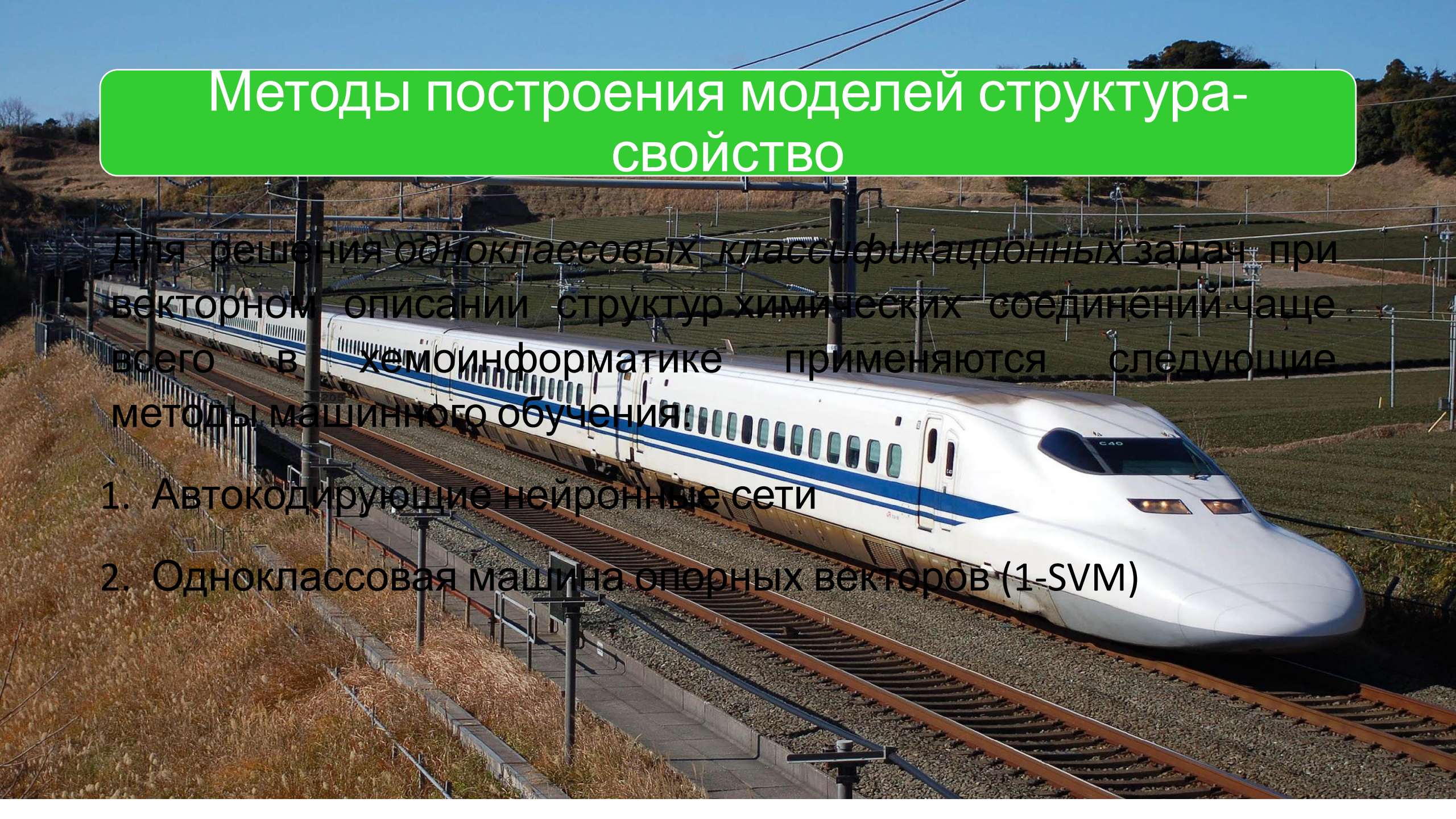
Для решения *двухклассовых* (бинарных) либо *многоклассовых* классификационных задач при векторном описании структур химических соединений чаще всего в хемоинформатике применяются следующие методы математической статистики и машинного обучения:

1. Наивный байесовский классификатор
2. Линейный дискриминантный анализ (Linear Discriminant Analysis — LDA)
3. Искусственные нейронные сети
4. Метод опорных векторов
5. Деревья принятий решений
6. Случайный лес
7. Метод k ближайших соседей

Методы построения моделей структура-свойство

Для решения одноклассовых классификационных задач при векторном описании структур химических соединений чаще всего в хемоинформатике применяются следующие методы машинного обучения:

1. Автокодирующие нейронные сети
2. Одноклассовая машина опорных векторов (1-SVM)



Моделирование свойств при не векторном (графовом) описании химических соединений

Моделирование свойств при не векторном описании химических соединений осуществляется либо при помощи нейронных сетей специальных архитектур, позволяющих работать непосредственно с матрицами смежности молекулярных графов, либо при помощи ядерных (kernel) методов с использованием специальных графовых (либо химических, фармакофорных) ядер.

Матрица смежности графа

Матрица смежности графа G с конечным числом вершин n (пронумерованных числами от 1 до n) — это квадратная матрица A размера n , в которой значение элемента a_{ij} равно числу рёбер из i -й вершины графа в j -ю вершину.

4	1	0	1	0	1	4
1	1	1	7	1	1	1
1	3	1	1	1	3	1
1	1	3	3	3	1	1
1	1	1	1	1	1	1

Метод опорных векторов

Метод опорных векторов (англ. SVM, support vector machine) — набор схожих алгоритмов обучения с учителем, использующихся для задач классификации и регрессионного анализа. Принадлежит к семейству линейных классификаторов, может также рассматриваться как специальный случай регуляризации по Тихонову. Особым свойством метода опорных векторов является непрерывное уменьшение эмпирической ошибки классификации и увеличение зазора, поэтому метод также известен как метод классификатора с максимальным зазором.

Регрессия

Регрессия (лат. regressio — обратное движение, отход) в теории вероятностей и математической статистике — математическое выражение, отражающее зависимость зависимой переменной y от независимых переменных x при условии, что это выражение будет иметь статистическую значимость. В отличие от чисто функциональной зависимости $y=f(x)$, когда каждому значению независимой переменной x соответствует одно определённое значение величины y , при регрессионной связи одному и тому же значению x могут соответствовать в зависимости от случая различные значения величины y .

Случайный лес

- Random forest (с англ. — «случайный лес») — алгоритм машинного обучения, предложенный Лео Брейманом и Аделем Катлер, заключающийся в использовании комитета (ансамбля) решающих деревьев. Алгоритм сочетает в себе две основные идеи: метод бэггинга Бреймана, и метод случайных подпространств, предложенный Tin Kam Ho. Алгоритм применяется для задач классификации, регрессии и кластеризации.

Линейный дискриминантный анализ

Линейный дискриминантный анализ (ЛДА) - это метод поиска линейной комбинации переменных, наилучшим образом разделяющей два или более класса. Линейный дискриминантный анализ сам по себе не является алгоритмом классификации, хотя и работает с информацией о принадлежности объекта к одному из классов. Однако чаще всего результат работы линейного дискриминантного анализа используется, как часть линейного классификатора. Другим возможным применением является понижение размерности входных данных перед применением нелинейных алгоритмов классификации.



Искусственная нейронная сеть

Искусственная нейронная сеть (ИНС) — математическая модель, а также её программное или аппаратное воплощение, построенная по принципу организации и функционирования биологических нейронных сетей — сетей нервных клеток живого организма. Это понятие возникло при изучении процессов, протекающих в мозге, и при попытке смоделировать эти процессы. Первой такой попыткой были нейронные сети У. Маккалока и У. Питтса. После разработки алгоритмов обучения получаемые модели стали использовать в практических целях: в задачах прогнозирования, для распознавания образов, в задачах управления и других.

Примерами служащих для этой цели графовых (либо химических, фармакофорных) ядер являются

Примерами служащих для этой цели графовых (либо химических, фармакофорных) ядер являются:

1. Marginalized graph kernel
2. Optimal assignment kernel
3. Pharmacophore kernel



Метод k ближайших соседей

Метод k ближайших соседей (англ. k-nearest neighbors algorithm, k-NN) — метрический алгоритм для автоматической классификации объектов. Основным принципом метода ближайших соседей является то, что объект присваивается тому классу, который является наиболее распространённым среди соседей данного элемента.

Соседи берутся исходя из множества объектов, классы которых уже известны, и, исходя из ключевого для данного метода значения k высчитывается, какой класс наиболее многочислен среди них. Каждый объект имеет конечное количество атрибутов (размерностей).

Предполагается, что существует определенный набор объектов с уже имеющейся классификацией.

Примеры прогнозирования

Физические свойства индивидуальных низкомолекулярных соединений

1. Температура кипения (T_k)
2. Критическая температура ($T_{кр}$)
3. Вязкость
4. Давление насыщенного пара
5. Плотность
6. Показатель преломления
7. Температура плавления ($T_{пл}$)
8. Шагалы полярности растворителей
9. Индексы удержания в газовой хроматографии
10. Поляризуемость
11. Магнитная восприимчивость
12. Энтальпия сублимации

Физические свойства низкомолекулярных соединений в зависимости от условий

1. Температура кипения углеводородов в зависимости от давления
2. Плотность углеводородов в зависимости от температуры
3. Динамическая вязкость углеводородов в зависимости от температуры

Примеры прогнозирования

Спектроскопические свойства

1. Положение длинноволновой полосы симметричных цианиновых красителей поглощения
2. Химические сдвиги в спектрах ^1H ЯМР
3. Химические сдвиги в спектрах ^{13}C ЯМР
4. Химические сдвиги в спектрах ^{31}P ЯМР

Физическо-химические свойства низкомолекулярных соединений

1. Температура вспышки и температура самовоспламенения
2. Октановые числа углеводородов
3. Константы ионизации (кислотности или основности)

Примеры прогнозирования

Физические свойства, обусловленные межмолекулярными взаимодействиями молекул разного типа

1. Растворимость в воде (LogSw)
2. Коэффициент распределения n -октанол/вода (LogP)
3. Коэффициент распределения низкомолекулярных веществ между водой и мицеллами Pluronic P85
4. Свободная энергия сольватации органических молекул в различных растворителях

Реакционная способность органических соединений

1. Константа скорости кислотного гидролиза сложных эфиров



Примеры прогнозирования

Супрамолекулярные свойства

1. Стабильность комплексов включения органических соединений с бета-циклодекстрином
2. Сродство красителей к целлюлозному волокну
3. Константы устойчивости комплексов ионофоров с ионами металлов

Физические свойства поверхностно-активных веществ (ПАВ)

1. Критическая концентрация мицеллообразования (ККМ)
2. Температура помутнения

Примеры прогнозирования

Физические и физико-химические свойства полимеров

1. Температура стеклования
2. Показатель преломления полимеров
3. Ускорение вулканизации резины
4. Коэффициент проницаемости через полиэтилен низкой плотности

Физические свойства ионных жидкостей

1. Температура плавления



Примеры прогнозирования

Физическо-химические свойства низкомолекулярных соединений

1. Температура вспышки и температура самовоспламенения
2. Октановые числа углеводородов
3. Константы ионизации (кислотности или основности)

Примеры прогнозирования свойств ADMET(absorption, distribution, metabolism, and excretion)

1. Фармакокинетические свойства

1. Проникновение через гематоэнцефалический барьер
2. Скорость проникновения через кожу

2. Метаболизм

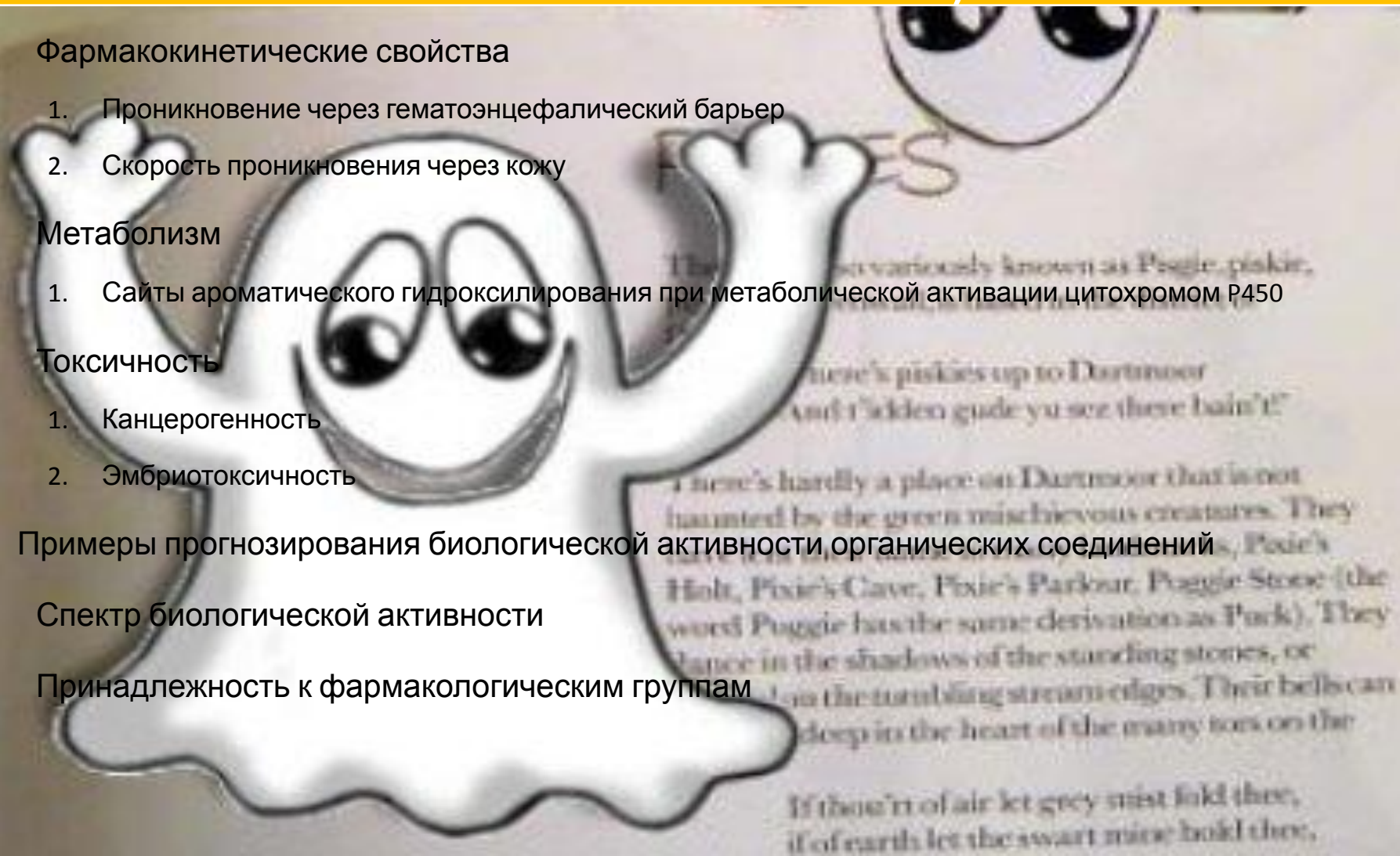
1. Сайты ароматического гидроксилирования при метаболической активации цитохромом P450

3. Токсичность

1. Канцерогенность
2. Эмбриотоксичность

• Примеры прогнозирования биологической активности органических соединений

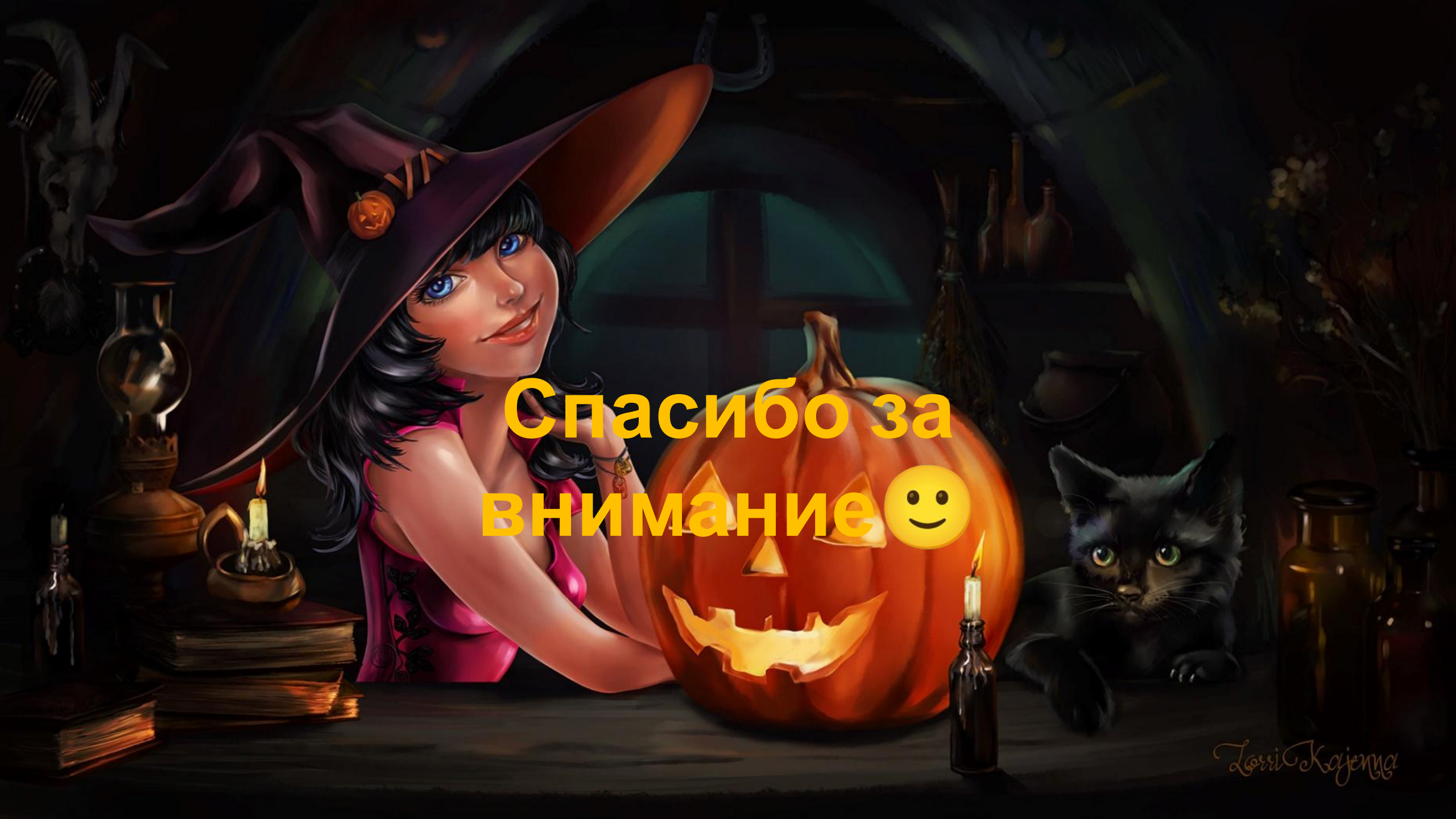
1. Спектр биологической активности
2. Принадлежность к фармакологическим группам



Свободно доступные через Интернет вычислительные ресурсы

Ресурсы, позволяющие строить новые модели структура-свойство:

1. [Online Chemical Modeling \(OCHEM\)](#) — информационный и вычислительный ресурс, позволяющий работать через Web-интерфейс с базой данных по органическим соединениям и их свойствам, пополнять её, осуществлять в ней поиск и формировать выборки, рассчитывать широкий набор молекулярных дескрипторов, строить количественные модели структура-свойство и применять их для прогнозирования свойств новых соединений
2. [Chembench](#) — ресурс, позволяющий строить модели структура-свойство и использовать их для прогнозирования.



Спасибо за
внимание 😊

Terri Kojima