

Кейс «Цифровая фармакология: предсказательное моделирование»

Введение

Ограничения подходов *in vivo* и *in vitro* для определения свойств химических соединений способствовали развитию подходов *in silico*. Предсказательная токсикология, используемая при разработке новых лекарственных препаратов, предназначена для дополнения экспериментальных усилий с целью повышения качества прогнозов токсичности для оценки безопасности молекулы. Одновременно, это отличный способ сокращения временных затрат и этических конфликтов (испытания на животных).

На глобальном рынке разработка нового медицинского препарата занимает в среднем от **10-12 лет** и требует инвестиций от **\$1 млрд.** Экспериментальный поиск соединений, обладающих предпочтительными свойствами – крайне дорогостоящий, цена синтеза и профилирования физико-химических свойств только одной молекулы может достигать до десятков миллионов рублей. Необходимость дополнительного исследования токсикологических свойств (а без этого молекулы-кандидаты в лекарства не будут допущены до клинических испытаний) увеличивает эту сумму **в несколько раз**. Эксперименты используют большое количество лабораторных животных и могут длиться годами.

В методологии предсказательной токсикологии *in silico* преобладают количественные соотношения структура-активность (далее называемые QSAR - Quantitative Structure-Activity Relationship). Традиционные модели QSAR определяют взаимосвязь между химической структурой и активностью по отношению к конкретной биологической мишени или показателям токсичности. Один из популярных форматов представления молекулярной структуры – SMILES (система правил однозначного описания состава и структуры молекулы химического вещества с использованием строки символов ASCII.)

Почему это важно?



Идеальная инновационная молекула должна обладать совокупностью важных свойств: допустимой степенью токсичности, высокой пероральной доступностью, высокой эффективностью по отношению к биологической мишени.

На сегодняшний день химическое пространство оценивается уже в 10^{60} малых молекул. Поиск химических структур, обладающих целевыми показателями, в таком огромном массиве довольно затруднителен. Химикам необходимы новые **методы навигации и фильтрации** химического пространства.

Кроме того, уход из России ряда провайдеров зарубежного специализированного ПО и баз данных в области химии и фармакологии наглядно показал, насколько сильно российское научное сообщество зависит от этих сервисов. Синтелли стремится заполнить этот пробел.

Синтелли – это российская платформа искусственного интеллекта для органической и медицинской химии. Модульная платформа включает:

- Базу данных, содержащую более 96 млн. молекул;
- Набор прогностических моделей на основе глубоких нейронных сетей для расчета физико-химических, токсикологических, биологических и экологических свойств органических соединений;
- Инструменты для визуальной навигации по химическому пространству (анализ кластеров биоактивных соединений);

- Генератор органических соединений с заранее заданными пользователем свойствами;
- Экспериментальный модуль прогнозирования исхода реакций и анализ синтеза искомой молекулы;
- Технологию оптического распознавания молекулярных структур и структур Маркуша (извлечение химических данных из различных неструктурированных печатных источников).

Для получения инвайт-токена (доступа к платформе [Синтелли](#)) – пишите на admin@syntelly.com.