

Компьютерное прогнозирование биологической активности лекарственных соединений

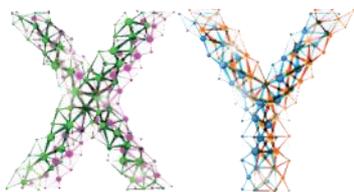
Поройков В.В.

Институт биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича
119121, Москва, Погодинская ул., 10/8

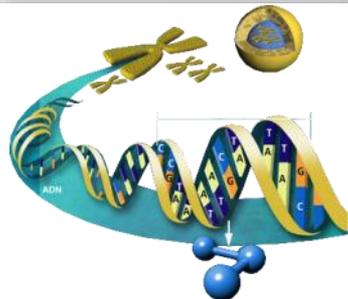
<http://www.way2drug.com>

Мы живем в период накопления больших биомедицинских и химических данных

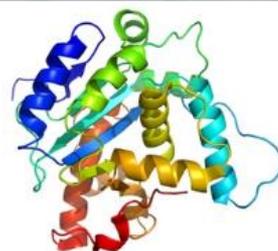
Потенциальные биомаркеры и фармакологические мишени



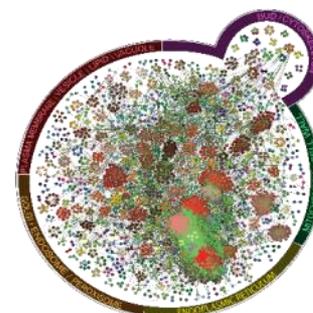
23 хромосомы



≈20-25 тыс. генов



≈2 млн. белков

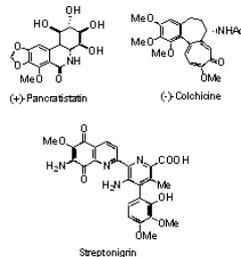


≈650 тыс. ББВ

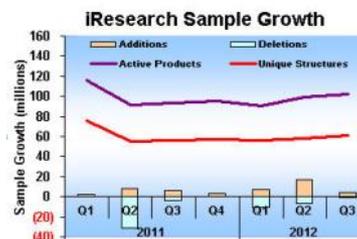
Потенциальные реагенты и фармакологические вещества



≈12-15 тыс.
лекарств



≈1,5 млн биологически
активных соединений



≈60 млн коммерчески
доступных химических
веществ



≈ 166 млрд.
структур
сгенерированных
in silico ²

≈ 10¹²⁰
теоретически
возможных
структур ³

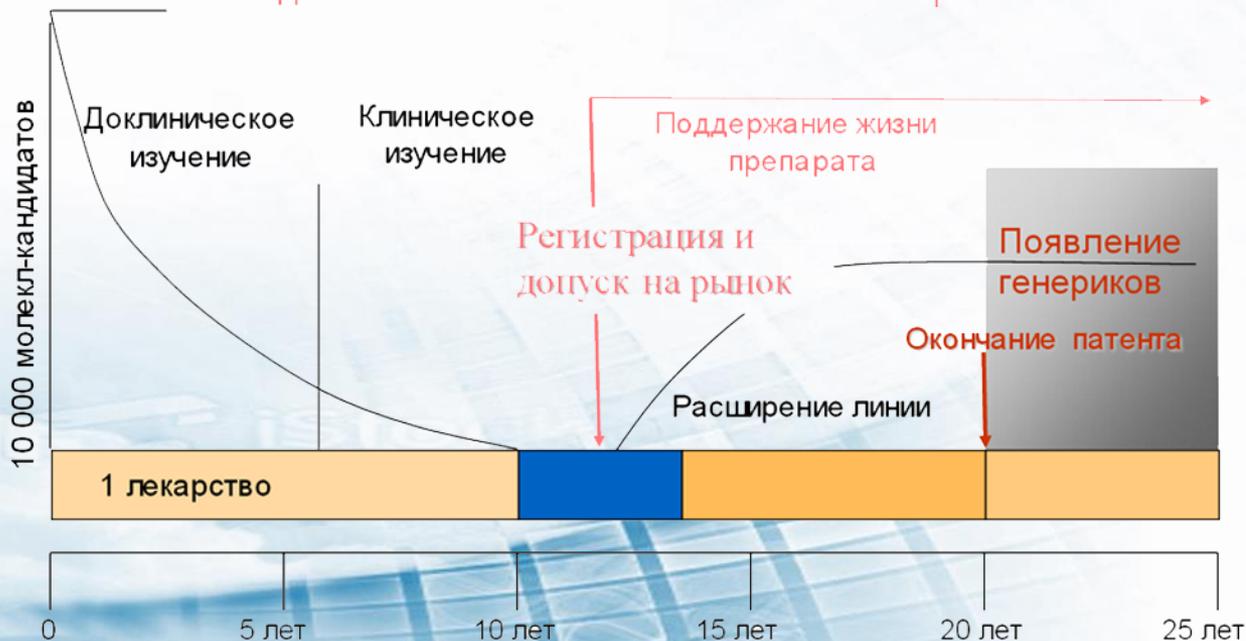
Разработка лекарственного препарата - от молекулы к лекарству

Приблизительная стоимость
получения нового синтетического
или природного лекарственного
препарата готового к клиническому
применению

€1,172 МИЛЛИАРД

в 2012

Исследование + Развитие = Инновация



В 2012 г., в общей сложности
€30 МИЛЛИАРДОВ
было инвестировано в R&D

Изменение парадигмы: от «мишень-центрического» к «мультицелевому»

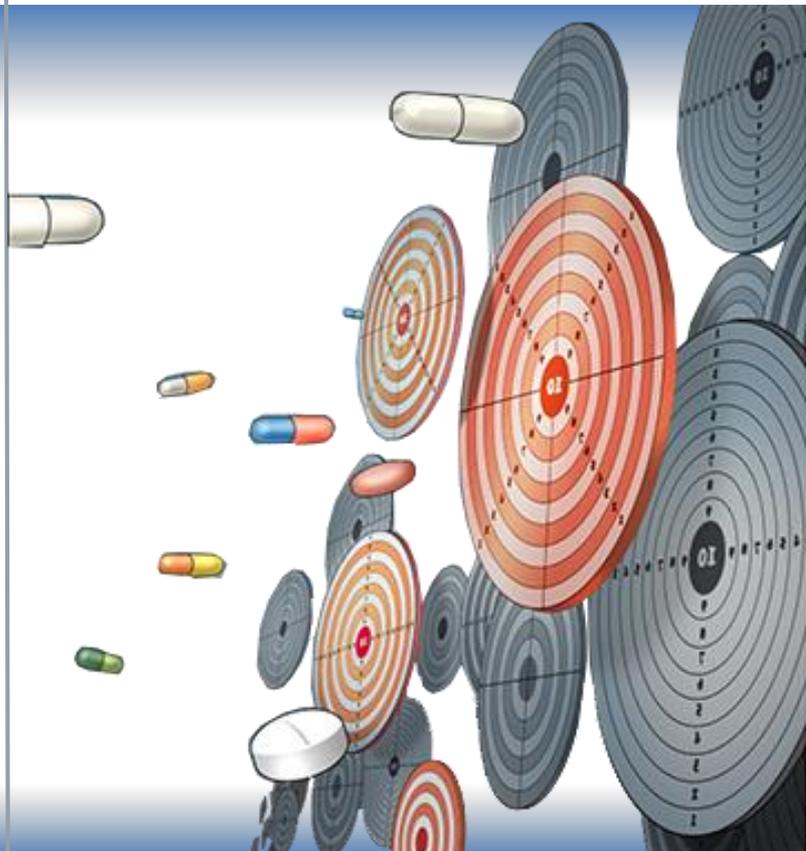
XX век

Болезнь → Мишень → Лекарство



XXI век

Мультицелевые лекарства



Веб-платформа Way2Drug

Way2Drug PREDICTIVE SERVICES
Understanding Chemical-Biological Interactions

Enter login here

.....

LOGIN

[Forgot password?](#) [Sign up](#)

[Home](#) | [About](#) | [Projects](#) | [Solutions](#) | [Partners](#) | [Contacts](#)

Way2Drug
Understanding Chemical-Biological Interactions

DATA

INFORMATION

KNOWLEDGE

Effect, w Solutions | Success Stories | Personal Workspace

Rece 4 News

find useful hints for your projects

Effective Solutions

Diseases–targets–ligands relationships, mechanisms of drug action, drug indications & repurposing, safety & risk assessment.

[Learn More](#)



Success Stories

Examples of use of our computational tools in drug discovery.

[Learn More](#)



Personal Workspace

Storage and retrieval of structures and predictions, networking with the other participants of Way2Drug Community.

[Learn More](#)



Веб-платформа Way2Drug

Предложена концепция локального соответствия, согласно которой биологическая активность лекарственно-подобного органического соединения основана на молекулярном узнавании между определенными атомами лиганда и макромолекулы-мишени.

На основе этой концепции мы разработали систему атом-центричных дескрипторов, включая MNA (Филимонов и др., 1999), QNA (Филимонов и др., 2009), и LMNA (Рудик и др., 2014), и создали с их использованием ряд устойчивых SAR / QSAR / QSPR моделей для прогноза активности/свойств органических соединений.

Веб-сервис PASSonline



Way2Drug PREDICTIVE SERVICES
Understanding Chemical-Biological Interactions

» [Home](#) » [Definition](#) » [Products](#) » [Services](#) » [FAQ](#) » [Contacts](#)

PASS online

Better solutions for your research and development

It is easy to use

[GO for prediction >](#)

Get more information

about **biological potential** of your compounds.

PASS Online predicts over 4000 kinds of biological activity, including pharmacological effects, mechanisms of action, toxic and adverse effects, interaction with metabolic enzymes and transporters, influence on gene expression, etc.

To obtain the predicted biological activity profile for your compound, only structural formula is necessary; thus, prediction is possible even for virtual compounds designed in silico.

News

Recent developments of PASS approach and its applications are published in the Supplement 1 to our paper: D.A. Filimonov, A.A. Lagunin, T.A. Glonozova, A.V. Rudik, D.S. Druzhilovskii, P.V. Pogodin, V.V. Porokov. **Prediction of the Biological Activity Spectra of Organic Compounds Using the PASS Online Web Resource.** ([Link...](#))

Meet with the PASS team at the 20th

Требования к компьютерной программе по оценке спектров биологической активности



Программа PASS: Prediction of Activity Spectra for Substances

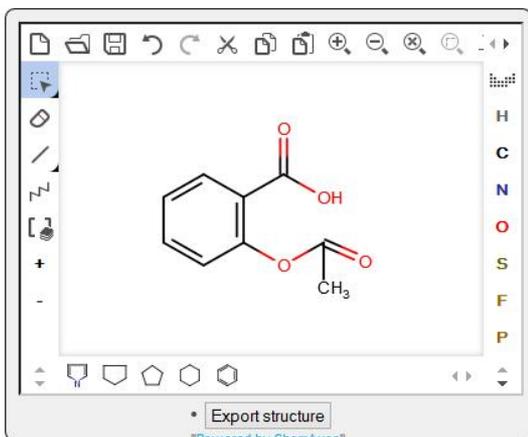
Публикации, базы данных, презентации на симпозиумах и др.

Надежные данные о структуре и активности веществ



Веб-сервис PASSonline

[Predict new compound](#) [View old results](#) [View/change profile](#)
[SMILES](#) [MOL file](#) [Marvin JS](#)



All Pa>Pi Pa>0,3 Pa>0,7

Pa	Pi	Activity
0,955	0,002	Fibrinolytic
0,934	0,002	N-hydroxyarylamine O-acetyltransferase inhibitor
0,934	0,003	Antipyretic
0,930	0,003	Antiseborrheic
0,928	0,003	Prolyl aminopeptidase inhibitor
0,922	0,004	Prostaglandin-E2 9-reductase inhibitor
0,919	0,004	Alkenylglycerophosphocholine hydrolase inhibitor
0,914	0,004	Chlordecone reductase inhibitor
0,911	0,003	Dehydro-L-gulonate decarboxylase inhibitor

Реализован прогноз 4000 видов биологической активности, в том числе фармакологических эффектов, механизмов действия, токсичных и побочных эффектов, взаимодействия с метаболическими ферментами, влияния на экспрессию генов и т.д.

Прогноз основан на анализе взаимосвязей структура-активность для более чем 300000 биологически активных веществ, в том числе лекарств, фармакологических веществ и токсичных соединений.

Мы постоянно работаем над улучшением качества прогноза, обновляя обучающую выборку и внося изменения в расчетные методы.



Веб-сервис GUSARonline

Way2Drug PREDICTIVE SERVICES
Understanding Chemical-Biological Interactions

GUSAR ONLINE
RELIABLE QUANTITATIVE-STRUCTURE ACTIVITY
RELATIONSHIPS FOR YOUR CHEMICAL COMPOUNDS

GUSAR	QSAR METHOD	APPLICABILITY DOMAIN	CONSENSUS	REFERENCES
	Acute Rat Toxicity	Antitargets	Environmental	

APPROACH TO YOUR QSAR MODELLING

GUSAR software was developed to create QSAR/QSPR models on the basis of the appropriate training sets represented as SDfile contained data about chemical structures and endpoint in quantitative terms.

WHY IS THE GUSAR?

GUSAR has been developed according to OECD principals and includes last achievements in the field of QSAR modeling: consensus prediction, applicability domain assessment, internal and external models validation and clearly interpretations of obtaining results.

Get your free trial version of GUSAR [here](#).

Copyright © Way2Drug.com, 2015

SOLUTIONS
FOR YOUR RESEARCH

GUSAR EVENTS

- New service of ecotoxicity prediction was added.
- New article was published: "Lagunin A, et al. QSAR Modelling of Rat Acute Toxicity on the Basis of PASS Prediction. Mol. Informatics, 2011, 30(2-3), 241-250". ([HTML](#), [PDF](#))

OTHER SERVICES

- [PASS Online](#)
- [Protein kinases substrate specificity](#)
- [Carcinogenicity prediction](#)

Веб-сервис GUSARonline

GUSAR online это: консенсусный прогноз, оценка области применимости, внешняя и внутренняя валидация и однозначная интерпретация полученных результатов.

Реализован количественный прогноз биологической активности органических соединений на основе дескрипторов атомных окрестностей

Свободно доступный прогноз значения LD50 токсичности у крыс. Количественный прогноз профилей взаимодействия химических соединений с нежелательными мишенями. Количественный прогноз экотоксичности для химических соединений.

RELIABLE QUANTITATIVE-STRUCTURE ACTIVITY
RELATIONSHIPS FOR YOUR CHEMICAL COMPOUNDS

WWW.PHARMAEXPERT.RU

GUSAR	QSAR METHOD	APPLICABILITY DOMAIN	CONSENSUS	REFERENCES
	Acute Rat Toxicity	Antitargets	Environmental	

APPROACH TO YOUR QSAR MODELLING

GUSAR software was developed to create QSAR/QSPR models on the basis of the appropriate training sets represented as SDfile contained data about chemical structures and endpoint in quantitative terms.

ACUTE RAT TOXICITY PREDICTION

In silico prediction of LD50 values for rats with four types of administration (oral, intravenous, intraperitoneal, subcutaneous, inhalation) by GUSAR software. The training sets were created on the basis of data from SYMYX MDL Toxicity Database. They include the information about ~10000 chemical structures with data on acute rat's toxicity represented on the LD50 values (log10 (mmol/kg)).

CHARACTERISTICS OF QSAR MODELS FOR RAT LD50 VALUES PREDICTIONS

Administration	N train	N test	N models	R2	Q2	R2 test	RMSE test	Coverage, %
Oral	6280	2692	40	0.61	0.57	0.59	0.57	97.5
Intraperitoneal	2480	1065	68	0.66	0.56	0.57	0.57	96.1
Intravenous	920	394	50	0.73	0.66	0.63	0.62	99.2
Subcutaneous	759	325	7	0.69	0.59	0.50	0.69	92.0

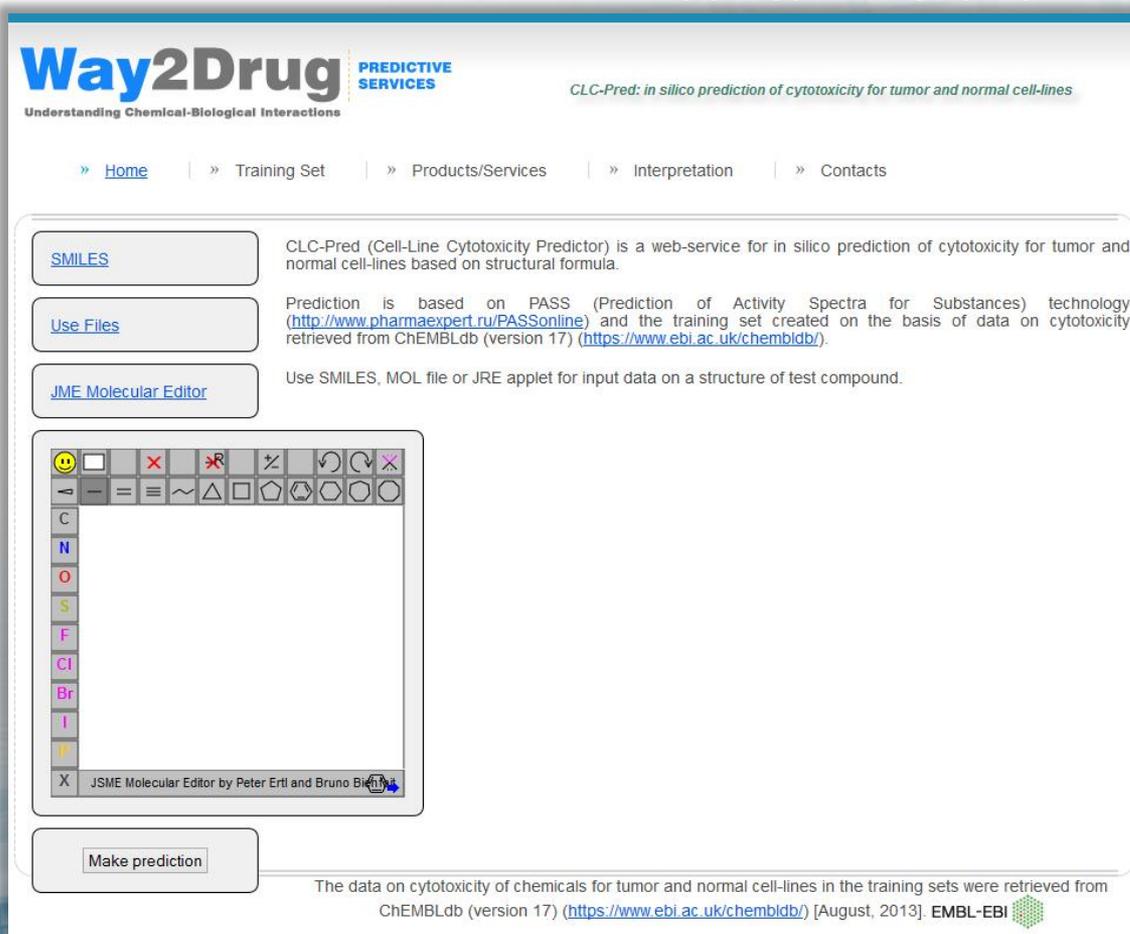
N train - number of compounds in the training set;
 N test - number of compounds in the test set;
 R2 - average R2 of the models calculated for the appropriate training set;
 Q2 - average Q2 of the models calculated for the appropriate training set;
 Coverage - % compounds from the test set in Applicability Domain.

SOLUTIONS
FOR YOUR RESEARCH

DRAW STRUCTURE

Веб-сервис CLC-Pred

Веб-сервис для прогноза *in silico* цитотоксичности для опухолевых и неопухолевых клеточных линий на основе структурной формулы



Way2Drug PREDICTIVE SERVICES
Understanding Chemical-Biological Interactions

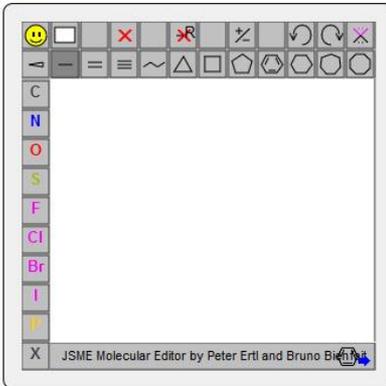
CLC-Pred: *in silico* prediction of cytotoxicity for tumor and normal cell-lines

» [Home](#) | » [Training Set](#) | » [Products/Services](#) | » [Interpretation](#) | » [Contacts](#)

[SMILES](#) CLC-Pred (Cell-Line Cytotoxicity Predictor) is a web-service for *in silico* prediction of cytotoxicity for tumor and normal cell-lines based on structural formula.

[Use Files](#) Prediction is based on PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances) technology (<http://www.pharmaexpert.ru/PASSonline>) and the training set created on the basis of data on cytotoxicity retrieved from ChEMBLdb (version 17) (<https://www.ebi.ac.uk/chembl/db/>).

[JME Molecular Editor](#) Use SMILES, MOL file or JRE applet for input data on a structure of test compound.



[Make prediction](#)

The data on cytotoxicity of chemicals for tumor and normal cell-lines in the training sets were retrieved from ChEMBLdb (version 17) (<https://www.ebi.ac.uk/chembl/db/>) [August, 2013]. EMBL-EBI 

Веб-сервис CLC-pred

Way2Drug PREDICTIVE SERVICES
Understanding Chemical-Biological Interactions

CLC-Pred: *in silico* prediction of cytotoxicity for tumor and normal cell-lines

» Home | » Training Set | » Products/Services | » Interpretation | » Contacts

SMILES
Use Files
JME Molecular Editor

Pa > 0.5 Save *.sdf Save *.csv

Cancer cell line prediction result

Pa	Pi	Cell-line	Cell-line full name	Tissue	Tumor type
0.506	0.150	5637	Epithelial bladder carcinoma cells	Bladder	Carcinoma
0.536	0.166	C8166	Leukemic T-cells	Blood	Leukemia
0.527	0.145	EKVX	Non-small cell lung carcinoma cells	Lung	Carcinoma
0.516	0.125	OVCAR-5	Ovarian adenocarcinoma cells	Ovary	Adenocarcinoma
0.517	0.105	CAKI-1	Kidney carcinoma cells	Kidney	Carcinoma

Non-tumor cell line prediction result

Pa	Pi	Cell-line	Cell-line full name	Tissue
0.683	0.011	HEF	Foreskin fibroblasts	Foreskin
0.770	0.032	NHDF	Fibroblast	Fibroblast
0.802	0.005	FBMC		

The data on cytotoxicity of chemicals for tumor and normal cell-lines in the training sets were retrieved from ChEMBLdb (version 17) (<https://www.ebi.ac.uk/chembl/db/>) [August, 2013]. EMBL-EBI

Веб-сервис для предсказания *in silico* цитотоксичности химических соединений в отношении опухолевых и неопухолевых клеточных линий человека на основе их структурной формулы.

Обучающая выборка полученных из базы данных ChEMBLdb (версия 17) из 76804 структур химических структур, отражающие современный уровень знаний о цитотоксичных химических соединениях по отношению к 48 нормальным и 44 опухолевым клеточным линиям организма человека.

В данном случае спектром биологической активности служит оценка цитотоксичности по отношению к разным клеточным линиям.

Веб-сервис DIGEP-pred



DIGEP-Pred: Prediction of drug-induced changes of gene expression profile

[» Home](#)
[» Training Sets](#)
[» Products/Services](#)
[» Interpretation](#)
[» Contacts](#)

SMILES

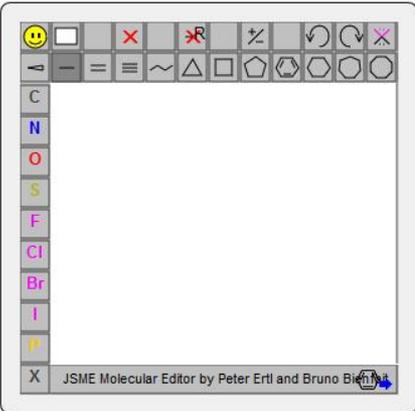
DIGEP-Pred is a web-service for in silico prediction of drug-induced changes of gene expression profiles based on structural formula.

Use Files

Prediction is based on PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances) technology (<http://www.pharmaexpert.ru/PASSonline>) and two training sets created on the basis of data on drug-induced changes of gene expression profiles retrieved from Comparative Toxicogenomics Database (CTD).

Marvin applet

Use SMILES, MOL file or MarvinSketch applet for input data on a structure of test compound.



Make prediction

Curated chemical-gene interactions data in the training sets were retrieved from the Comparative Toxicogenomics Database (CTD), Mount Desert Island Biological Laboratory, Salisbury Cove, Maine.
<http://ctdbase.org/> [October, 2012] 

Lagunin A., Ivanov S., Rudik A., Filimonov D., Poroikov V. DIGEP-Pred: web-service for in silico prediction of drug-induced gene expression profiles based on structural formula. *Bioinformatics*, 2013, 29, 2062-2063. [\[Abstract PDF\]](#)

Веб-сервис DIGEP-pred

PHARMAEXPERT
PREDICTIVE SERVICES

DIGEP-Pred: Prediction of drug-induced changes of gene expression profile

» [Home](#) | » [Training Sets](#) | » [Products/Services](#) | » [Interpretation](#) | » [Contacts](#)

[SMILES](#)

Pa>0.5 ▾

[Save *.sdf](#)

[Save *.csv](#)

[Use Files](#)

[Marvin applet](#)

Prediction by

mRNA based data
 Protein based data

[Make prediction](#)

mRNA based prediction result

Pa	Pi	DownRegulation	Pa	Pi	UpRegulation
0.958	0.004	H1FX	0.950	0.005	VASP
0.934	0.004	CXCL2	0.944	0.004	NQO1
0.924	0.003	E2F5	0.932	0.002	SRSF2
0.912	0.004	TNFRSF10B	0.928	0.003	GCLM
0.890	0.005	KRAS	0.892	0.007	GAS6
0.863	0.009	KLF10	0.864	0.009	SOD3
0.828	0.009	CYP1B1	0.850	0.006	TXNRD2
0.722	0.069	C6ORF48	0.866	0.026	PTGR1
0.676	0.036	ITGB8	0.834	0.007	CASP2

Protein based prediction result

Pa	Pi	DownRegulation	Pa	Pi	UpRegulation
0.929	0.003	MMP2	0.953	0.005	HMOX1
0.928	0.004	CASP8	0.896	0.002	NQO1
0.920	0.003	FLT1	0.792	0.001	GCLM
0.828	0.004	MDM2	0.758	0.006	SMN2
0.805	0.004	KLK3	0.692	0.003	HSPA4
0.749	0.001	TIMP2	0.701	0.041	RARA
0.754	0.011	CTNNB1	0.614	0.066	PLAU
0.634	0.002	MMP14	0.620	0.105	CD86
0.575	0.080	MMP7	0.589	0.134	KRT1

Click to the name of gene to see the relationships of genes with diseases, side effects and biological pathways in Comparative Toxicogenomics Database.

Curated chemical-gene interactions data in the training sets were retrieved from the Comparative Toxicogenomics Database (CTD), Mount Desert Island Biological Laboratory, Salisbury Cove, Maine.

<http://ctdbase.org/> [October, 2012]

Профили экспрессии генов используются для решения различных задач в фармацевтической исследований, таких как репозиционирование лекарств, резистентность, токсичность и между лекарственные взаимодействия.

Обучающая выборка:
мРНК - 952 генов (500 гипер- и 475 гипо-экспрессия).
Белки - 1451 соединений для 129 генов (85 гипер- и 51 гипо-экспрессия).

Результаты прогноза связаны посредством гиперссылок с CTD (Comparative Toxicogenomics Database) с целью их содержательной интерпретации.



Веб-сервис SOMP

Way2Drug PREDICTIVE SERVICES
Understanding Chemical-Biological Interactions

SOMP - Site Of Metabolism Prediction

» [Home](#) | » [Training Sets](#) | » [Products/Services](#) | » [Interpretation](#) | » [Examples](#) | » [Contacts](#)

[SMILES](#) | [Inchi](#) | [Use Files](#) | [JME Molecular Editor](#)

SOMP is a web-service for in silico prediction of site of metabolism (SOM).
Prediction is based on PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances) technology (<http://www.way2drug.com/PASSonline>), LMNA descriptors and applied to predict the SOMs of the 1A2, 2C9, 2C19, 2D6 and 3A4 isoforms of cytochrome P450 and the SOMs of the all isoforms of UGT.
Use SMILES, MOL file or [JME Molecular Editor](#) for input data on a structure of test compound.

JSME Molecular Editor by Peter Ertl and Bruno Bickel

[Make prediction](#)

[JME Editor](#) courtesy of Peter Ertl, Novartis



Веб-сервис SOMP

Way2Drug PREDICTIVE SERVICES
Understanding Chemical-Biological Interactions

SOMP - Site Of Metabolism Prediction

» Home | » Training Sets | » Products/Services | » Interpretation | » Examples | » Contacts

SMILES
Inchi
Use Files
JME Molecular Editor

3A4| 2D6| 2C19| 2C9| 1A2| UGT

Atom number	Rang	DeltaP
4	1	0.306
5	2	0.063
10	3	-0.992
8	4	-0.987
2	5	-0.981
9	6	-0.924
13	7	-0.856
1	8	-0.852
7	9	-0.717
11	10	-0.527
3	11	-0.452
12	12	-0.383
6	13	-0.293

Save *.sdf
Save *.pdf

Make prediction

JME Editor courtesy of Peter Ertl, Novartis

Прогноз сайтов метаболизма осуществляется для пяти цитохромов P450: 1A2, 2D6, 2C9, 2C19, 3A4, а также для УДФ-глюкуронилтрансферазы.

Фермент	Количество субстратов
CYP3A4	960
CYP2D6	588
CYP2C9	446
CYP2C19	388
CYP1A2	573
UGT	592



Веб-сервис SMP

Way2Drug | PREDICTIVE SERVICES
Understanding Chemical-Biological Interactions

SMP: Prediction of substrate/metabolite specificity

» [Home](#) | » [Training Sets](#) | » [Products/Services](#) | » [Interpretation](#) | » [Contacts](#)

[SMILES](#) | [Use Files](#) | [JME Molecular Editor](#)

SMP is a web-service for in silico prediction substrate/metabolite specificity.

Prediction is based on PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances) technology (<http://www.way2drug.com/PASSonline>) and MNA descriptors .

Use SMILES, MOL file or [JME Molecular Editor](#) for input data on a structure of test compound.

[Make prediction](#)

[JME Editor](#) courtesy of Peter Ertl,
Novartis

The creation of web-service was supported by Russian Scientific
Foundation grant **14-15-00449**



Веб-сервис SMP

Way2Drug PREDICTIVE SERVICES

Understanding Chemical-Biological Interactions

SMP: Prediction of substrate/metabolite specificity

» [Home](#) | » [Training Sets](#) | » [Products/Services](#) | » [Interpretation](#) | » [Contacts](#)

SMILES

Use Files

JME Molecular Editor

Pa>Pi

Save *.sdf

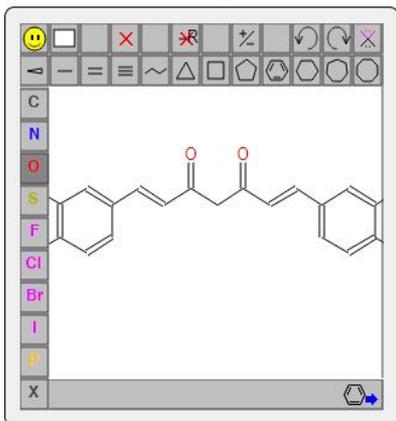
Save *.csv

Substrate based prediction result

Pa	Pi	Enzyme
0.963	0.005	UGT1A9
0.875	0.007	UGT1A8
0.752	0.011	UGT1A1
0.673	0.009	UGT1A10
0.334	0.148	UGT2B7
0.259	0.112	UGT1A7
0.263	0.173	UGT1A6
0.294	0.212	UGT1A3
0.228	0.163	UGT2B15
0.204	0.240	UGT2B10

Metabolite based prediction result

Pa	Pi	Enzyme
0.152	0.069	UGT1A8
0.149	0.069	UGT1A1
0.134	0.063	UGT1A10



Make prediction

JME Editor courtesy of Peter Ertl, Novartis

The creation of web-service was supported by Russian Scientific Foundation grant 14-15-00449

Прогноз осуществлялся для 18 изоформ цитохрома P450:
UGT1A10, UGT1A1, UGT2B7,
UGT1A7, UGT2B15, UGT1A8,
UGT1A4, UGT2B17, UGT2B10,
UGT1A3, UGT1A9, UGT1A6,
UGT2B4, 3A4, 1A2

Выборка по субстратам - 3411 соединения.

Выборка по метаболитам - 2104 соединения.

Анализ фармакологического потенциала природных соединений на основе хемо- и биоинформатики

INDIAN-RUSSIAN JOINT RESEARCH PROJECT
COMPUTER-AIDED STUDY OF HIDDEN POTENTIAL IN TRADITIONAL INDIAN MEDICINE AND ITS PHARMACOLOGICAL VALIDATION

Log In

Natural compounds is
that what you do need.

- × HOME
- × WHO WE ARE
- × ADD/EDIT PHYTOCHEMISTRY
- × MAKE/EDIT MIXTURE
- × ADD/EDIT NEW SUBSTANCE
- × VIEW/EDIT EXISTING ACTIVITY LIST
- × FEEDBACK

Ayurveda

or ayurvedic medicine is a system of traditional medicine native to India and a form of alternative medicine.

Natural compounds are used in folk medicine for thousands of years, now occupying over 30% of the world pharmaceutical market. They have a high chemical diversity in comparison with substances obtained by synthesis, but only a small part of their pharmacological potential is used by medicine. The vast amount of empirical data on the pharmacological properties of natural compounds accumulated in traditional Indian medicine (TIM) Ayurveda.

What is the purpose of this project?

The purpose of this project is to analyze the mechanisms of action and pharmacological effects of individual components and combinations of the 50 medicinal plants used in Ayurveda, based on computer prediction of biological activity spectra of individual compounds using the program **PASS**, and to assess their drug-drug interactions using **PharmaExpert**. The information will be used to identify the hidden potential of traditional Indian medicine, and to validate some computer-aided predictions in biological assays.

SUPPORTED BY:

Department of Science & Technology
Ministry of Science & Technology

E-mail: info@ibmc.msk.ru

© 2011 Project

Природные соединения широко применяются в медицине на протяжении многих тысяч лет и представляют собой крайне важный, хотя часто недооцениваемый источник для разработки новых лекарственных средств

Что входит:

- (1) 50 лекарственных растений;
- (2) 1906 фитохимических компонентов;
- (3) 288 фармакологически активных компонентов.

Критерии отбора

- (1) использование в традиционной индийской медицине Аюрведа;
- (2) проведен фитохимический анализ;
- (3) не изучена плейотропность действия.

Анализ фармакологического потенциала природных соединений на основе хемо- и биоинформатики

INDIAN-RUSSIAN JOINT RESEARCH PROJECT
COMPUTER-AIDED STUDY OF HIDDEN POTENTIAL IN TRADITIONAL INDIAN MEDICINE AND ITS PHARMACOLOGICAL VALIDATION

Natural compounds is the gift of Mother Nature.

- HOME
- WHO WE ARE
- VIEW PHYTOCHEMISTRY**
- VIEW MIXTURE
- VIEW NEW SUBSTANCE
- VIEW EXISTING ACTIVITY LIST
- FEEDBACK
- LINKS

Phytochemistry

- [Ficus religiosa L. \(Moraceae\)](#)
- [Aloe vera \(Xanthorrhoeaceae\)](#)
- [Glycyrrhiza glabra L. \(Fabaceae\)](#)
- [Aegle marmelos \(Rutaceae\)](#)
- [Tinospora cordifolia \(Menispermaceae\)](#)
- [Withania somnifera L. \(Solanaceae\)](#)
- [Azadirachta indica \(Meliaceae\)](#)
- [Valeriana officinalis \(Valerianaceae\)](#)
- [Sida cordifolia \(Malvaceae\)](#)
- [Boerhavia diffusa L. \(Nyctaginaceae\)](#)
- [Curcuma longa \(Zingiberaceae\)](#)
- [Emblca officinalis L. \(Phyllanthaceae\)](#)
- [Hypericum perforatum L. \(Hypericaceae\)](#)
- [Ocimum sanctum \(Labiatae\)](#)
- [Dianthus barbatus L. \(Caryophyllaceae\)](#)

SUPPORTED BY: **Department of Science & Technology**
Ministry of Science & Technology

E-mail: pass@ibmc.msk.ru Way2Drug.com © 2011-2015. Privacy Policy

INDIAN-RUSSIAN JOINT RESEARCH PROJECT
COMPUTER-AIDED STUDY OF HIDDEN POTENTIAL IN TRADITIONAL INDIAN MEDICINE AND ITS PHARMACOLOGICAL VALIDATION

Natural compounds is the gift of Mother Nature.

- HOME
- WHO WE ARE
- VIEW PHYTOCHEMISTRY**
- VIEW MIXTURE
- VIEW NEW SUBSTANCE
- VIEW EXISTING ACTIVITY LIST
- FEEDBACK
- LINKS

Phytochemistry

name	Ficus religiosa L. (Moraceae)
synonyms	Bo tree Bodhi tree Peepul Peepul fig
	F. religiosa is a large deciduous tree up to 35m height, epiphytic when young, and crownwide when mature. Its drooping branches bear coriaceous, stipulate leaves that are dark green in color, 10-18 by 7.5-10 cm, ovate-rotund, narrow upward and the apex produces into a linear-lanceolate tail about half of the main portion of the blade, base broadly cuneate to cordate, margin entire or undulate; secondary veins five to seven on each side of the midvein lateral veins eight pair with

SUPPORTED BY: **Department of Science & Technology**
Ministry of Science & Technology

E-mail: pass@ibmc.msk.ru Way2Drug.com © 2011-2015. Privacy Policy

Больше сервисов – лучше оценка



Разработан для анализа аминокислотных последовательностей, связанных с одним и тем же семейством белков, в целях распознавания сайтов, ответственных за специфичность.



Позволяет пользователям получить SDF файлы, содержащие структуру и дополнительную информацию для своих выборок с использованием встроенных инструментов некоммерческих химических СУБД.

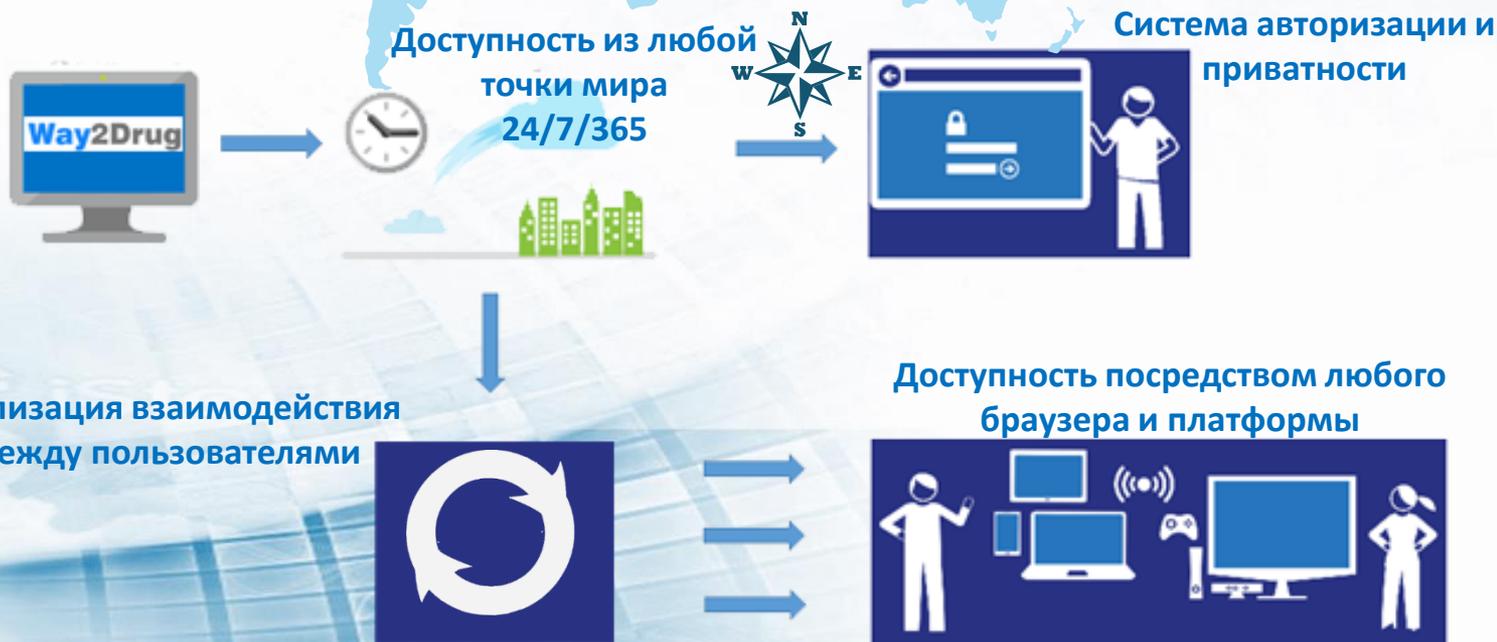
Веб портал Way2Drug доступен всем online

12 388

зарегистрированных
пользователей

91

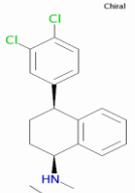
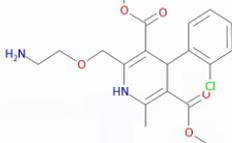
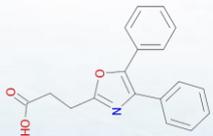
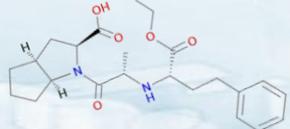
страна мира



Примеры применения (Success story 1)

В 2001 году мы опубликовали результаты прогноза новых эффектов для 8 препаратов из списка **Top200 Drugs** [1].

Какие прогнозы подтвердились?
(информационный поиск, сентябрь 2014 г.)

				Ref.
	Sertraline	Cocaine dependency treatment	+	[2]
	Amlodipine	Antineoplastic enhancer (moderate BCRP/ABCG2 inhibitor)	+	[3]
	Oxaprozin	Interleukin 1 antagonist (Inhibitor of production of Interleukin 1 β)	+	[4]
	Ramipril	Antiarthritic	+	[5]

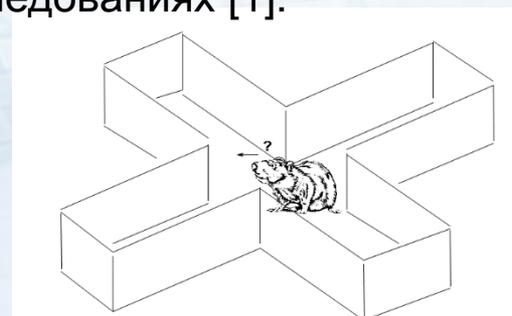
1. Poroikov V. et al. *SAR and QSAR Environ. Res.*, 2001, **12**: 327-344.
2. Mancino M.J. et al. *J. Clin. Psychopharmacol.*, 2014, **34**: 234–239.
3. Takara K. et al. *Mol. Med. Rep.*, 2012, **5**: 603-609.
4. Rainsford K.D. et al. *Inflammopharmacology*, 2002, **10**: 85–239.
5. Shi Q. et al. *Arthritis Res. Ther.*, 2012, **14**: R223.

Примеры применения (Success story 2)

Для антигипертензивных препаратов (ингибиторы АПФ) **PASS** прогнозирует ноотропный эффект:

Name	Pa (Nootropic effect)
Captopril	0,446
Enalapril	0,655
Lisinopril	0,618
Perindopril	0,609
Quinapril	0,651
Ramipril	0,633
Monopril	0,309
Piracetam	0,817
Amlodipin	-
Hydrochlorothiazide	-

Эффект подтвержден в доклинических исследованиях [1]:



Периндоприл в дозе 1 мг/кг, квинаприл и моноприл в дозах 10 мг/кг улучшают показатели патрулирования в крестообразном лабиринте, подобно пирацетаму и меклофеноскату (в дозах 300 и 120 мг/кг, соответственно).

Эффект подтвержден в клинике [2]:

BMJ Open 2013;3:e002881 doi:10.1136/bmjopen-2013-002881

Geriatric medicine

Effects of centrally acting ACE inhibitors on the rate of cognitive decline in dementia

Yang Gao^{1,2}, Rónán O'Caolmh¹, Liam Healy¹, David M Kerins^{3,4}, Joseph Eustace⁵, Gordon Guyatt⁶, David Sammon², D William Molloy^{1,7}

Веб портал Way2Drug – резюме

1. Way2Drug обеспечивает основу для рациональной разработки новых лекарственных субстанций, репозиционирования известных фармпрепаратов и биологически активных молекул, исследования фитокомпонентов лекарственных растений отдельно и в комбинациях, выявления новых соединений-кандидатов для более эффективных и безопасных лекарственных препаратов.
2. Way2Drug.com является общедоступным интернет-порталом и позволяет создавать, хранить и обмениваться информацией о биологической активности органических соединений. На сегодняшний день порталом пользуются 12388 зарегистрированных пользователей из 91 страны; прогнозы были получены для 490 376 молекул.
3. Приведенные методы прогностической оценки спектров биологической активности получили признание как эффективный инструмент в поиске новых биологически активных веществ, что нашло отражение в более чем 300 научных публикациях российских и зарубежных ученых.



Way2Drug | PREDICTIVE
SERVICES
Understanding Chemical-Biological Interactions

Спасибо за внимание!

*Ваши вопросы и предложения, пожалуйста,
направляйте по адресу эл. почты:*

vladimir.poroikov@ibmc.msk.ru

vvp1951@yandex.ru