

IV. Компьютерные технологии

PHYTO4HEALTH – база данных фитокомпонентов фармакопейных лекарственных растений России

Институт биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича (Москва)

Химические соединения природного происхождения (ПС) характеризуются высоким структурным разнообразием и широким набором видов биологической активности. Поэтому ПС представляют собой перспективный источник для поиска новых фармакологических веществ. Длительный опыт традиционного применения лекарственных растений России (ЛРР) открывает перспективы поиска и разработки новых лекарственных препаратов. Для определения приоритетных направлений исследования ПС широко используется компьютерный подход, основанный на анализе зависимостей «структура–активность». Однако до недавнего времени оценка *in silico* фармакологического потенциала фитокомпонентов российских лекарственных растений была затруднена из-за отсутствия информационного массива, содержащего имеющиеся сведения о фитокомпонентах ЛРР.

Целью нашей работы является сбор и агрегация данных о химической структуре, физико-химических параметрах и результатах лабораторной оценки взаимодействия с молекулярными мишенями человека для фитокомпонентов ЛРР, включенных в Государственную фармакопею Российской Федерации (ГФ РФ) XIV издания.

В результате анализа текстов тематических научных публикаций и сведений, представленных в крупных химических репозиториях (ChEMBL, PubChem) и специализированных свободно доступных базах данных ПС, удалось идентифицировать 3 178 химических соединений, представленных в фитохимическом составе 268 видов растений, входящих в ГФ РФ. Общее количество ассоциаций «растение – часть растения – фитокомпонент» составило 9 489. Информация о химических соединениях была дополнена результатами лабораторного тестирования их взаимодействия с 802 молекулярными мишенями человека. Общее количество таких записей превысило 13 000. Кроме того, сведения в базе данных были обогащены результатами *in silico* оценки биологической активности, полученными с применением компьютерной про-

граммы PASS Refined 2022. Количество уникальных видов биологической активности, которое прогнозирует данная программа – 1954, а общее количество записей о биологических активностях, предсказанных при пороге $P_a > 0.5$ в базе данных, превысило 135 000.

Для представления собранных данных широкому кругу пользователей был разработан веб-ресурс Phyto4Health. Веб-интерфейс данного ресурса позволяет производить поиск с помощью нескольких типов поисковых процедур, включая поиск по выбранным категориям, включая названия химических соединений, растений, молекулярных мишеней и наименования видов биологической активности, предсказанных PASS (рис. 1).

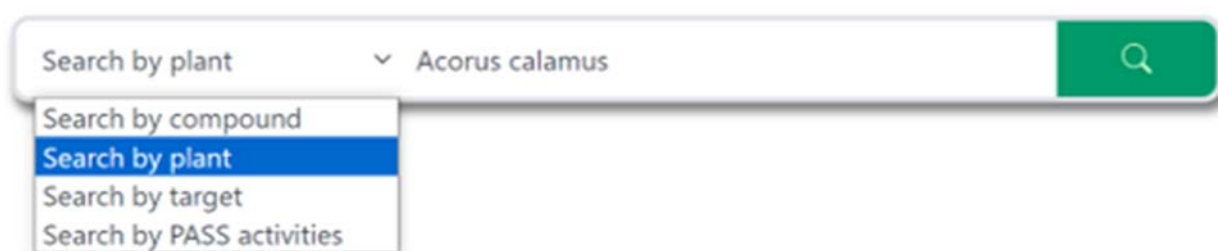


Рисунок 1 – Интерфейс «Простого поиска».

Расширенный поиск позволяет ограничить диапазон значений физико-химических свойств и сформировать результат по ранее описанным категориям. Поиск по сходству химических структур позволяет выполнять оценки сходства между соединением пользователя и соединениями базы данных (рис. 2).

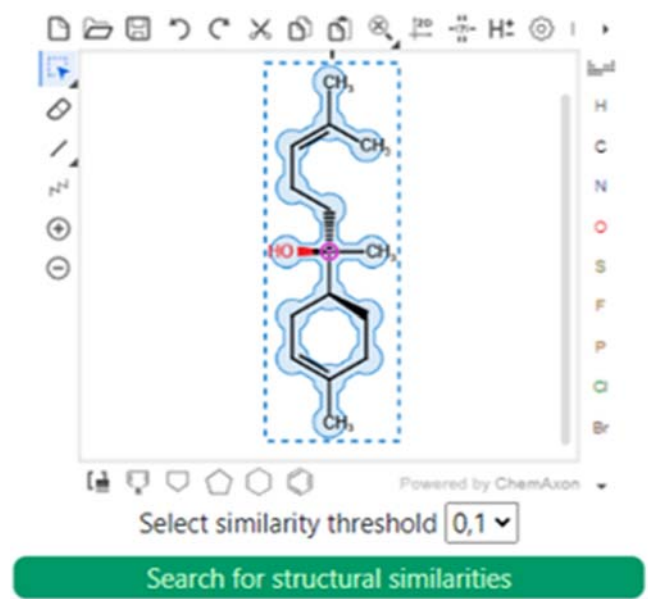


Рисунок 2 – Интерфейс для ввода информации о структурной формуле химического соединения в качестве запроса.

База данных свободно доступна в Интернет: <https://www.way2drug.com/p4h/>.

Руководители работы – член-корр. РАН, проф., д.б.н. В.В. Поройков, к.ф-м.н. Д.А. Филимонов.

Исполнители – Н.С. Ионов, к.б.н. Д.С. Дружиловский.

Публикации:

1. Ionov, N., Druzhilovskiy, D., Filimonov, D., Poroikov, V. Phyto4Health: Database of Phytocomponents from Russian Pharmacopoeia Plants //Journal of Chemical Information and Modeling. – 2023. – Т. 63. – №. 7. – С. 1847-1851.
2. Ионов Н.С., Филимонов Д.А., Дружиловский Д.С., Поройков В.В. Свидетельство о государственной регистрации базы данных Phyto4Health № 2023622658. Москва: Федеральная служба по интеллектуальной собственности, 14.07.2023 г.