

## Компьютерная оценка спектров биологической активности фармакологических веществ

Каждое фармакологическое вещество может оказывать как терапевтическое, так и нежелательное побочное и токсическое действие, особенно с учетом его биотрансформации в организме человека. Вся совокупность возможных, проявляющихся при определенных условиях, биологических эффектов лекарственно-подобного вещества может быть названа его спектром биологической активности. Компьютерная оценка спектра биологической активности дает возможность осуществить отбор наиболее перспективных молекул для синтеза, определить наиболее перспективные направления для тестирования фармакологического действия конкретных веществ и отсеять потенциально опасные молекулы на ранних стадиях исследований. В докладе будут рассмотрено современное состояние развития методов машинного обучения, применяемых для оценки спектров биологической активности фармакологических веществ *in silico*, и представлен обзор свободно доступных в сети Интернет веб-сервисов (<http://www.way2drug.com/dr/>), обеспечивающих возможность получения такой оценки на основе структурной формулы изучаемого соединения.