

Дополнительные материалы к статье:

Поройков, В. В. (2020). Компьютерное конструирование лекарств: от поиска новых фармакологических веществ до системной фармакологии. *Биомедицинская химия*, 66(1), 30-41.
DOI: 10.18097/PBMC20206601030

Прогностические веб-ресурсы на платформе Way2Drug

Название, ссылка	Описание веб-сервиса	Адрес в сети Интернет
Acute rat toxicity ¹	Прогноз острой токсичности для крыс при четырех путях введения препарата	http://www.way2drug.com/gusar/acutoxpredict.html
ADVER-Pred ²	Прогноз побочного действия фармакологических веществ на сердечно-сосудистую и гепатобилиарную систему	http://www.way2drug.com/adverpred/
AntiBac-Pred ³	Прогноз антибактериальной активности	http://www.way2drug.com/antibac
AntiHIV-Pred ⁴	Прогноз антиретровирусной активности и эффектов, связанных с коморбидностями ВИЧ-инфекции	http://www.way2drug.com/hiv/
Antitarget prediction ⁵	Прогноз взаимодействия с нежелательными мишенями	http://www.way2drug.com/gusar/antitargets.html
CLC Pred ⁶	Прогноз цитотоксичности в отношении опухолевых и неопухолевых клеточных линий	http://www.way2drug.com/Cell-line/
DDI-Pred ⁷	Прогноз межлекарственного взаимодействия	http://www.way2drug.com/ddi/
DIGEP-Pred ⁸	Прогноз влияния лекарств на генную экспрессию	http://www.way2drug.com/ge/
Ecotoxicity	Количественный прогноз характеристик, связанных с оценкой экотоксичности для	http://www.way2drug.com/gusar/environmental.html

	химических соединений	
KinScreen	Прогноз взаимодействия фармакологических веществ с кинемом человека	http://www.way2drug.com/KinScreen
MetaTox ^{9,10}	Прогноз токсичности с учетом метаболизма	http://way2drug.com/mg2/
MICF	Прогноз противогрибковой активности	http://www.way2drug.com/micF/
PASS Online ^{11,12}	Прогноз свыше 4000 видов биологической активности	http://www.way2drug.com/passonline
PASS Targets ¹³	Прогноз взаимодействия с молекулярными мишенями	http://www.way2drug.com/passtargets/
RA ¹⁴	Прогноз сайтов биотрансформации	http://www.way2drug.com/RA/
Resistance	Прогноз лекарственной устойчивости ВИЧ-1 по нуклеотидной последовательности протеазы и обратной транскриптазы	http://way2drug.com/resistance/
ROSC-Pred ¹⁵	Прогноз органо-специфичной канцерогенности	http://www.way2drug.com/ROSC
SMP ¹⁶	Прогноз специфичности субстратов и метаболитов по отношению к ферментам биотрансформации	http://www.way2drug.com/SMP/
SOMP ¹⁷	Прогноз сайтов метаболизма фармакологических веществ	http://www.way2drug.com/SOMP/
SprOS ¹⁸	Анализ функциональной специфичности аминокислотных последовательностей белков	http://www.way2drug.com/spros/

ЛИТЕРАТУРА

1. Lagunin A., Zakharov A., Filimonov D., Poroikov V. (2011). QSAR modelling of rat acute toxicity on the basis of PASS prediction. *Molecular Informatics*, **30** (2-3), 241–250. <https://doi.org/10.1002/minf.201000151>
2. Ivanov S.M., Lagunin A.A., Rudik A.V., Filimonov D.A., Poroikov V.V. (2018). ADVERPred – web service for prediction of adverse effects of drugs. *Journal of Chemical Information and Modeling*, **58** (1), 8-11. DOI: 10.1021/acs.jcim.7b00568
3. Pogodin P.V., Lagunin A.A., Rudik A.V., Druzhilovskiy D.S., Filimonov D.A., Poroikov V.V. (2019). AntiBac-Pred: A web portal for predicting antibacterial activity of chemical compounds. *Journal of Chemical Information and Modeling*, **59** (11), 4513-4518. DOI: 10.1021/acs.jcim.9b00436
4. Stolbov L., Druzhilovskiy D., Rudik A., Filimonov D., Poroikov V., Nicklaus M. (2020). AntiHIV-Pred: Web-resource for in silico prediction of anti-HIV/AIDS activity. *Bioinformatics*. **36** (3), 978–979. DOI: 10.1093/bioinformatics/btz638
5. Zakharov A.V., Lagunin A.A., Filimonov D.A., Poroikov V.V. (2012). Quantitative prediction of antitarget interaction profiles for chemical compounds. *Chemical Research in Toxicology*, **25** (11), 2378-2385. DOI: 10.1021/tx300247r
6. Lagunin A.A., Dubovskaja V.I., Rudik A.V., Pogodin P.V., Druzhilovskiy D.S., Glorizova T.A., Filimonov D.A., Sastry G.N., Poroikov V.V. (2018). CLC-Pred: a freely available web-service for in silico prediction of human cell line cytotoxicity for drug-like compounds. *PLOS One*, **13** (1), e0191838. DOI: 10.1371/journal.pone.0191838
7. Dmitriev A.V., Filimonov D.A., Rudik A.V., Pogodin P.V., Karasev D.A., Lagunin A.A., Poroikov V.V. (2019) Drug-drug interaction prediction using PASS. *SAR and QSAR in Environmental Research*, **30** (9), 655–664. DOI: 10.1080/1062936X.2019.1653966
8. Lagunin A., Ivanov S., Rudik A., Filimonov D., Poroikov V. (2013). DIGEP-Pred: web-service for in-silico prediction of drug-induced expression profiles based on structural formula. *Bioinformatics*, **29** (16), 2062-2063. doi: 10.1093/bioinformatics/btt322
9. Rudik A.V., Bezhentsev V.M., Dmitriev A.V., Druzhilovskiy D.S., Lagunin A.A., Filimonov D.A., Poroikov V.V. (2017). MetaTox: Web Application for Predicting Structure and Toxicity of Xenobiotics' Metabolites. *Journal of Chemical Information and Modeling*, **57** (4), 638–642. DOI: 10.1021/acs.jcim.6b00662
10. Rudik A., Bezhentsev V., Dmitriev A., Lagunin A., Filimonov D., Poroikov V. (2019). MetaTox - Web application for generation of metabolic pathways and toxicity estimation. *Journal of Bioinformatics and Computational Biology*, **17** (1), 1940001. DOI: 10.1142/S0219720019400018
11. Lagunin A., Stepanchikova A., Filimonov D., Poroikov V. (2000). PASS: prediction of activity spectra for biologically active substances. *Bioinformatics*, **16** (8), 747-748. <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/16.8.747>
12. Filimonov D.A., Lagunin A.A., Glorizova T.A., Rudik A.V., Druzhilovskii D.S., Pogodin P.V., Poroikov V.V. (2014). Prediction of the biological activity spectra of organic compounds using the PASS online web resource. *Chemistry of Heterocyclic Compounds*, **50** (3), 444-457. DOI: 10.1007/s10593-014-1496-1
13. Pogodin P.V., Lagunin A.A., Filimonov D.A., Poroikov V.V. (2015) PASS Targets: ligand-based multi-target computational system based on public data and naïve bayes approach. *SAR and QSAR in Environmental Research*, **26** (10), 783-793. DOI: 10.1080/1062936X.2015.1078407
14. Rudik A.V., Dmitriev A.V., Lagunin A.A., Filimonov D.A., Poroikov V.V. (2016). Prediction of reacting atoms for the major biotransformation reactions of organic xenobiotics. *J. Cheminform.*, **8**, 68. DOI 10.1186/s13321-016-0183-x
15. Lagunin A., Rudik A., Filimonov D., Druzhilovsky D., Poroikov V. (2018). ROSC-Pred: web-service for rodent organ-specific carcinogenicity prediction. *Bioinformatics*, **34** (4), 710–712. DOI: 10.1093/bioinformatics/btx678
16. Rudik A.V., Dmitriev A.V., Lagunin A.A., Filimonov D.A., Poroikov V.V. (2014). Metabolism sites prediction based on xenobiotics structural formulae and PASS prediction algorithm. *Journal of Chemical Information and Modeling*, **54** (2), 498–507. DOI: 10.1021/ci400472j

17. Rudik A., Dmitriev A., Lagunin A., Filimonov D., Poroikov V. (2015). SOMP: web-service for in silico prediction of sites of metabolism for drug-like compounds. *Bioinformatics*, **31** (12), 2046-2048. DOI: 10.1093/bioinformatics/btv087
18. Karasev D.A., Veselovsky A.V., Oparina N.Yu., Filimonov D.A., Sobolev B.N. (2016). Prediction of amino acid positions specific for functional groups in a protein family based on local sequence similarity. *Journal of Molecular Recognition*, **29** (4), 159-169. DOI: 10.1002/jmr.2515