БАЗА ЗНАНИЙ ПО ЦИТОХРОМАМ P450

Пономаренко Е.А., Лисица А.В., Карузина И.И., Гусев С.А.
ГУ НИИ Биомедицинской химии им.В.Н.Ореховича РАМН

Лисица А.В.
Пономаренко Е.А.
Карузина И.И.
Гусев С.А.
ГУ НИИ Биомедицинской химии им.В.Н.Ореховича РАМН

База знаний представляет собой программный комплекс, объединяющий информацию в области структуры и функций белков надсемейства цитохромов P450. Продукт адресован широкому кругу пользователей и предоставляет как специализированный справочный материал, так и основу для проведения самостоятельных научных исследований.

База знаний по цитохромам P450 (http://cpd.ibmh.msk.su) реализована в виде Веб-приложения и совместима с основными типами Веб-браузеров. При разработке использовался специализированный язык разработки скриптов; созданы шлюзы, обеспечивающие совместимость системы с вычислительными методами, которые могут быть реализованы в виде запускаемого приложения.

База знаний по цитохромам P450 включает в себя три информационные категории: данные о номенклатуре ферментов, данные об их структуре и данные о функциональной активности. В подраздел «структура» включаются данные о первичной последовательности кодирующей ДНК, об аминокислотной последовательности белка и трехмерные структуры, полученные методом рентгено-структурного анализа. Функциональный подраздел представлен в виде набора из трех типов взаимосвязей между низкомолекулярным химическим соединением и ферментом: субстрат, индуктор или ингибитор. Вся введенная информация снабжена указанием литературного источника, указанного в виде номера доступа к резюме публикаций в банке данных PubMed.

Также в рамках разработанной системы реализована возможность создания и работы с подвыборокам, включающими в себя только определенные формы цитохромов P450 (например, только формы животного происхождения).

База знаний по цитохромам P450 позволяет применять стандартные методы для обработки информации, такие, как BLAST (позволяет автоматизировать процесс выявления новых форм цитохромов P450 в сиквенируемых геномах) и PASS (программа Prediction of Activity Spectra for Substances, дополняет базу знаний средствами прогнозирования взаимодействия между цитохромами P450 и неизученными химическими соединениями).

Разработанная система объединяет несколько источников данных: для каждой формы белка указаны ссылки на соответствующие записи в глобальных информационных ресурсах, таких, как GenBank и PDB; каждая ферментативная форма привязана к сопутствующей информации, загруженной из специализированных ресурсов различных научных групп: сайта Номенклатурного Комитета, сайта по лигандам цитохромов P450 человека и сайта по номенклатуре аллельных генов;

База знаний по цитохромам P450 является необходимой при проведении работ по прогнозированию токсикологических, фармакокинетических и интерференционных характеристик лекарственных веществ и других ксенобиотиков.