

Streszczenie pracy doktorskiej

***Eksploracja baz danych w poszukiwaniu nowych reguł
projektowania leków***

Autor: mgr Jacek Bogocz

Promotor: prof. dr hab. inż. Jarosław Polański

Przemysł farmaceutyczny jest jednym z najbardziej dochodowych na świecie. Obecnie boryka się z licznymi problemami i pomimo wykorzystania najnowszych technologii nie zaobserwowano wyraźnego wzrostu, który zaowocowałby wdrożeniem nowych, lepszych i bardziej innowacyjnych farmaceutyków.

Celem niniejszej pracy była eksploracja i analiza baz danych pod kątem określenia trendów w badaniach R&D przemysłu farmaceutycznego oraz zaproponowaniu strategii pozwalających ułatwić proces poszukiwania i konstrukcji nowych leków. W ramach pracy przedstawiono synergię pomiędzy metodami badawczymi z kilku dziedzin naukowych takich jak: chemia, informatyka, ekonomia oraz farmacja. W ten sposób podjęto próbę wytłumaczenia roli i wpływu rynku na fragonomikę leków w przemyśle farmaceutycznym. Wykorzystane parametry chemiczne i ekonomiczne poddano analizie statystycznej. Porównanie uniwersytetu (nauka) oraz firmy farmaceutycznej (R&D) pozwala na odnalezienie szeregu analogii. Stosowanie do tego przeprowadzono analizę porównawczą trendów i zmian występujących zarówno w nauce jak i przemyśle farmaceutycznym. Zbadano i scharakteryzowano zebrane związki pod względem fizykochemicznym, zaproponowano nowy parametr wiek leków charakteryzujący efektywność projektowania. Dodatkowe wykorzystanie metod fragmentacji molekuł pozwoliło zrozumieć topologię oraz jej wpływ na aktywność badanej populacji leków.

Zaobserwowano wiele ciekawych zależności i trendów m.in. zmian jakie zaszły w projektowaniu farmaceutyków na przestrzeni ostatnich lat. Przeprowadzone badania rzuciły nowe spojrzenie na znane procedury projektowania struktur potencjalnych bioefektorów.