



Meghívó



A Neumann János Számítógép-tudományi Társaság Informatikatörténeti Fóruma (NJSZT iTF) és az Óbudai Egyetem (ÓE) tisztelettel meghívja Önt az iTF Nagy Számítástechnikai Műhelyek sorozatának következő rendezvényére, melynek témája

A gyógyszerkutatás alátámasztása számítástechnikával és mesterséges intelligenciával

Történeti áttekintés

Dátum: **2024. június 14.** (péntek)

Helyszín: **Óbudai Egyetem** (Budapest III. Bécsi út 96/B) **F09 terem**

Levezető elnök: **Darvas Ferenc**

A program:

13:30 - 14:00	Érkezés, regisztráció, kötetlen beszélgetés	
14:00 - 14:10	Tick József:	Köszöntő
14:10 - 15:00	Darvas Ferenc:	A számítástechnika alkalmazása a hazai gyógyszerkutatásban - közel negyven év áttekintése
15:00 - 15:50	Dormán György:	Információ-robbanás a gyógyszerkémiaiában az elmúlt 40 évben: Kombinatorikus kémiától a kémiai genomikán át az áramlásos szintézisig (videófelvétlről)
15:50 - 16:10	Szünet	
16:10 - 17:00	Keserű György Miklós, Ferenczy György:	Mesterséges intelligencia a gyógyszerkutatásban (videófelvétlről)
17:00 - 17:30	Beszélgetés	

Minden érdeklődőt szívesen látunk. [Részvételi szándékát kérjük, hogy itt jelezze.](#) Korábbi rendezvényeink anyagai megtalálhatók az itf.njszt.hu-n, az iTF események alatt.

Budapest, 2024. május 13.

az NJSZT iTF vezetősége

Az előadások kivonata

1./ A számítástechnika alkalmazása a hazai gyógyszerkutatásban - közel negyven év áttekintése Darvas Ferenc^{1,2}

¹ ThalesNano Zrt, Budapest

² AgroThetis, Inc., Stuart, FL, USA

A hazai gyógyszerkutatást közel 40 éve segíti a számítástechnika. A kvantumkémia és a kvantitatív hatás-szerkezet vizsgálatok alkalmazásával a magyar kutatók a 70-es években nemzetközileg jegyzett pozíciót értek el. Elsőként alkalmazták a logikai alapú mesterséges intelligencia PROLOG nyelvét gyógyszerkutatásra, a hazai fejlesztésű MI szoftvereket világszerte több tucat gyógyszerkutatói kezdték használni. A szoftverek hozzájárultak a 90-es évek elején megjelenő kombinatorikus kémia megvalósításához is. A 2000-es évek elején az automatizált szintézis élvonalába kerülő áramlások kémia születésénél szintén magyar kutatók bábáskodtak. Az ekkoriban kialakított számítástechnikai és kémiai megoldásokat manapság 70+ ország kutatói használják (1000+ publikáció szerint). Az utóbbi hónapokban megjelent konténerméretű gyógyszeripari gyártósorok pedig alighanem forradalmasítani fogják a gyógyszergyártást – remélhetőleg hazai részvétellel. Az áramlások kémia az elmúlt 10 évben jelentős szerepet játszott a nanorészecskék szintézisében és az úrkémia megvalósításában is.

2./ Információ-robbanás a gyógyszerkémiaiában az elmúlt 40 évben: Kombinatorikus kémiától a kémiai genomikán át az áramlások szintéziséig

Dormán György¹

¹ TargetEx Kft, Dunakeszi

Kombinatorikus kémia alapjait a 90-es években fektették le első sorban a gyógyszerfejlesztés molekulaigényt kielégítendő. Lényegében a szerkezeti diverzitást hordozó építőkövek összes lehetséges kombinációjával ún. vegyületkönyvtárakat hoznak létre. A virtuálisan legenerált könyvtárakból a gyógyszerkémiai paraméterekre és diverzitásra történő előszűréssel ill. a szintetizálhatóság modellezésével egy kisebb alkönyvtárat generálunk, amit ténylegesen előállítunk. Mindezek a lépések komoly informatikai kihívást jelentenek, és az új megközelítés valójában egy paradigma váltáshoz vezetett a gyógyszerkutatás korai fázisában.

A 2000-es évek elején a kémiai genomika új megközelítést jelentett a gyógyszerkutatásban. Itt első lépésben a kismolekulák sejtekkel való kölcsönhatását vizsgálják, majd ezt követően azonosítják az aktív vegyületek fehérje célpontjait, ami a szerkezet alapú gyógyszertervezést teszi lehetővé. Ez új in silico módszerek kifejlesztését igényelte, és végső soron elvezetett a hálózat farmakológia koncepcióhoz is.

Ezzel párhuzamosan az áramlások kémia megjelenése újabb lényeges informatikai fejlesztéseket igényelt. Ez nemcsak a mikroreaktorok tervezéséhez járult hozzá, hanem a szintézis paraméterek optimalizálásának korábban sohasem tapasztalt, gyors megvalósítását tette lehetővé algoritmusok és reakciómodellek segítségével. Ennek felhasználásával az áramlások kémia lehetővé tette szelektív szintézisek kifejlesztését, amelyek a zöld kémia kritériumainak is megfelelnek.

3./ Mesterséges intelligencia a gyógyszerkutatásban

Keserű György Miklós¹, Ferenczy György¹

¹ HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont, Budapest

Az MI módszerei régóta jelen vannak a gyógyszerkutatásban, így a 80-as évektől szakértői rendszerek, növekvő méretű adatbázisok, adatbányászás, valamint neurális hálózatok támogatják elsősorban a preklinikai kutatást. Az adatok mennyiségének és minőségének javulásával az MI növekvő szerepet kap a gyógyszer célpont azonosításban, a kémiai kiindulópont keresésben és az optimalásban. Az előadás példákat mutat az MI módszerek korai alkalmazásaira, áttekinti az MI-hez kapcsolódó módszerek előnyeit és korlátait, valamint tárgyalja a gyógyszerkutatásra eddig gyakorolt hatását és perspektíváját.