

STRESZCZENIE

Projektowanie leków jest złożonym procesem optymalizacyjnym, dla którego wciąż nie opracowano uniwersalnego modelu działania. W przeciwieństwie do sukcesów przemysłu IT, uważa się, że przemysł farmaceutyczny znajduje się obecnie w fazie stagnacji. Podczas wprowadzania nowego leku na rynek, optymalizacji muszą podlegać zarówno właściwości fizyko-chemiczne oraz aktywność projektowanego leku, jak i jego potencjał farmakoekonomiczny.

Celem pracy było przeanalizowanie wybranych strategii oraz parametrów używanych do ewaluacji potencjału leku.

W pierwszym etapie moich badań dokonałam eksploracji baz danych oraz dokumentacji FDA dostępnych online w celu poszukiwania i akwizycji danych związków o pożądanym właściwościach. Kolejną część badań skupiała się na analizie zebranych danych molekularnych. W przeprowadzonych analizach korzystałam z dostępnych narzędzi chemoinformatycznych oraz metod programistycznych. Dzięki temu udało się usprawnić proces przeszukiwania baz danych.

Ważnym etapem moich badań były analizy najlepiej sprzedających się leków na rynku amerykańskim. W ich ramach zdefiniowaliśmy nowy parametr (wiek leku) charakteryzujący ilościowo innowacyjność leków. Analiza wieku leku wykazuje, że obserwuje się efekt starzenie się leków. Ich średni wiek stale rośnie. To z kolei pozwala potwierdzić tezę, że spada produktywność w branży farmaceutycznej.

W przestrzeni Internetu dostępnych jest wiele baz danych gromadzących informacje na temat projektowanych, badanych i zarejestrowanych leków. W zakres pracy wchodziła między innymi ich analiza. Ponieważ wiele z nich gromadzi dane, które uważa się za wielkie (ang. *Big Data*) ich przetworzenie wymagało zaprogramowania specjalnych skryptów, które umożliwiły zarządzanie takimi danymi oraz ich przetworzenie do postaci, które można było poddać analizom statystycznym. W szczególności analizowałam bazy: GPCR, kinazy, FDA approvals oraz Top100 bestselling drugs. Analizy prowadziłam w programie Matlab oraz KNIME Analytics Platform.