

Jerzy W. Grzymała-Busse

Zdzisław S. Hippe

Teresa Mroczek

Eksploracja danych medycznych

Metody sztucznej inteligencji w projektowaniu syntez leków



Jerzy W. Grzymała-Busse

Zdzisław S. Hippe

Teresa Mroczek

Eksploracja danych medycznych

Metody sztucznej inteligencji w projektowaniu syntez leków

RZESZÓW – SZCZECIN 2015



**WYŻSZA SZKOŁA
INFORMATYKI I ZARZĄDZANIA**
z siedzibą w Rzeszowie



NAUKOWE WYDAWNICTWO IVG

Publikacja została dofinansowana ze środków MNiSW na utrzymanie potencjału badawczego Wydziału Informatyki Stosowanej Wyższej Szkoły Informatyki i Zarządzania z siedzibą w Rzeszowie

Tytuł monografii naukowej:

Eksploatacja danych medycznych

Metody sztucznej inteligencji w projektowaniu syntez leków

Redakcja:

Jerzy W. Grzymała-Busse

Zdzisław S. Hippe

Teresa Mroczek

Recenzent naukowy:

Prof. dr hab. Andrzej Parczewski

Komitet Naukowy:

Prof. UG dr hab. Sylwia Pangsy-Kania

Prof. dr hab. Włodzimierz Szpringer

Prof. zw. dr hab. Jerzy Kisielnicki

Prof. UW dr hab. Grzegorz Karasiewicz

Prof. UZ dr hab. Arkadiusz Świadek

Projekt okładki:

Tomek Przewrocki

Korekta językowa, skład oraz druk:

Jacek Storm

Wydawcy:

Wyższa Szkoła Informatyki i Zarządzania z siedzibą w Rzeszowie

ul. Sucharskiego 2, 35-225 Rzeszów

www.wsiz.rzeszow.pl, www.ksiegarnia.wsiz.pl

email: wsiz@wsiz.rzeszow.pl

Naukowe Wydawnictwo IVG

ul. Tarpanowa 38/3, 70-796 Szczecin

www.wydawnictwoivg.pl

e-mail: biuro@wydawnictwoivg.pl

ISBN książka 978-83-64286-33-9 **ISBN** ebook 978-83-64286-34-6

SPIS TREŚCI

PRZEDMOWA.....	3
----------------	---

CZEŚĆ I

Wprowadzenie do zagadnień planowania syntez

ROZDZIAŁ 1

<i>Wprowadzenie</i>	7
---------------------------	---

ROZDZIAŁ 2

<i>Tradycyjne metody projektowania syntez chemicznych</i>	11
---	----

ROZDZIAŁ 3

<i>Przestrzeń rozwiązań w projektowaniu syntez chemicznych</i>	17
--	----

CZEŚĆ II

Wprowadzenie do badań nad projektowaniem nowych leków

ROZDZIAŁ 4

<i>Zarys metodyki badań nad syntezą nowych leków. Bazy informacyjne dla chemii</i>	27
--	----

ROZDZIAŁ 5

<i>Model macierzowy chemii konstytucyjnej. Podstawy koncepcji</i>	35
---	----

ROZDZIAŁ 6

<i>Strategie planowania syntez w chemii organicznej. Wybrane zagadnienia</i>	49
--	----

CZEŚĆ III

Ćwiczenia literaturowe

WPROWADZENIE	65
--------------------	----

ĆWICZENIE_1 Weryfikacja i walidacja reakcji cytralu z acetonem.

<i>Model Ugi'ego-Dugundji'ego (D-U)</i>	67
---	----

ĆWICZENIE_2 Weryfikacja i walidacja reakcji cytralu z acetonem.

<i>Model zdrowego rozsądku (CS)</i>	79
---	----

ĆWICZENIE_3 Weryfikacja i walidacja reakcji cytralu z acetonem.

<i>Model podobieństwa (SM), reakcje w środowisku zasadowym</i>	91
--	----

ĆWICZENIE_4 Weryfikacja i walidacja reakcji metabolitów prostaglandyny PGI₂

<i>Model Ugi'ego-Dugundji'ego (D-U)</i>	97
---	----

ĆWICZENIE_5 Weryfikacja i walidacja reakcji metabolitów prostaglandyny PGI₂

<i>Model zdrowego rozsądku (CS)</i>	109
---	-----

ĆWICZENIE_6 <i>Weryfikacja i walidacja reakcji metabolitów prostaglandyny PGI₂</i> <i>Model podobieństwa (SM), reakcje w środowisku kwaśnym</i>	115
ĆWICZENIE_7 <i>Weryfikacja i walidacja przemian leku VIAGRA w organizmie człowieka</i> <i>Model Ugi'ego-Dugundji'ego (D-U)</i>	119
ĆWICZENIE_8 <i>Weryfikacja i walidacja przemian leku VIAGRA w organizmie człowieka</i> <i>Model zdrowego rozsądku (CS), reakcje w środowisku kwaśnym</i>	133
ZAKOŃCZENIE	137
LITERATURA	141
ZAŁĄCZNIK A	145
ZAŁĄCZNIK B	147
KOLOFON	183
INDEKS	185



Ministerstwo Nauki
i Szkolnictwa Wyższego

**Publikacja została dofinansowana ze środków MNiSW
na utrzymanie potencjału badawczego
Wydziału Informatyki Stosowanej Wyższej Szkoły
Informatyki i Zarządzania z siedzibą w Rzeszowie**



**WYŻSZA SZKOŁA
INFORMATYKI I ZARZĄDZANIA**
z siedzibą w Rzeszowie



**NAUKOWE
WYDAWNICTWO IVG**

ISBN ebook 978-83-64286-34-6