

«ФАРМАЦЕВТИКА СОҲАСИНИНГ БУГУНГИ ҲОЛАТИ:
МУАММОЛАР ВА ИСТИҚБОЛЛАР»
ХАЛҚАРО ИЛМИЙ-АМАЛИЙ АНЖУМАНИ

МЕЖДУНАРОДНАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКОЙ ОТРАСЛИ:
ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ»

INTERNATIONAL SCIENTIFIC-PRACTICAL CONFERENCE
ON THE THEME "MODERN PHARMACEUTICS:
ACTUAL PROBLEMS AND PROSPECTS"



2020 yil 13 noyabr

**ЎЗБЕКИСТОН РЕСПУБЛИКАСИ
СОГЛИҚНИ САҚЛАШ ВАЗИРЛИГИ
ТОШКЕНТ ФАРМАЦЕВТИКА ИНСТИТУТИ**

**“ФАРМАЦЕВТИКА СОҲАСИНИНГ БУГУНГИ ҲОЛАТИ:
МУАММОЛАР ВА ИСТИҚБОЛЛАР”
(ХАЛҚАРО ИЛМИЙ-АМАЛИЙ АНЖУМАНИ МАТЕРИАЛЛАРИ)**

(МАТЕРИАЛЫ МЕЖДУНАРОДНОЙ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКОЙ
КОНФЕРЕНЦИИ)
**«СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКОЙ ОТРАСЛИ:
ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ»**

**ABSTRACTS BOOK OF INTERNATIONAL SCIENTIFIC-PRACTICAL
CONFERENCE ON THE THEME "MODERN PHARMACEUTICS:
ACTUAL PROBLEMS AND PROSPECTS"**

ТОШКЕНТ - 2020



ФАРМАЦЕВТИКАДА АХБОРОТ ТЕХНОЛОГИЯЛАРИНИ ИСТИҚБОЛЛАРИ

Ражабов Э.Э., Назруллаев Д.З., Шадманов К.К.

Тошкент фармацевтика институти, Тошкент ш, Ўзбекистон Республикаси
e-mail: elmurod-1009@mail.ru

Долзарблиги: ҳозирги вақтда хемоинформатика фаол ривожланмоқда, бу моддаларнинг кўплаб хусусиятларини, шу жумладан уларнинг реактивлиги, биологик фаоллиги ва бошқаларни тахмин қилиш имконини беради.

Бундай моделларни яратиш вакиллик маълумотларини ва интерфейсларни улар билан ишлашни талаб қилади, шунинг учун махсус маълумотлар базасини яратиш хемоинформатиканинг муҳим вазифасидир. Ҳозирги вақтда кимёвий реакцияларнинг кинетикаси (реакциялар тезлиги, фаоллаштириш энергияси ва бошқалар) ҳақида маълумот берувчи реакцияларнинг кинетик параметрлари билан бир қатор маълумотлар базалари яратилган. Бироқ, кинетик параметрларга эга бўлган бундай маълумотлар базаларининг аксарияти дастурий маълумотларни таҳлил қилиш учун махсус хизматларни (АПИ) тақдим этмайди.

Мақсад: мақолада кимёвий реакция ҳақида маълумотни қайта ишлаш ва таҳлил қилиш учун маълумотлар базалари ва махсус хизматларни ўз ичига олган Ласерталаб ахборот тизими кўриб чиқилади. Маълумотлар базасида реакцияларнинг кинетик параметрлари ва кимёвий реакциялар механизми тўғрисидаги маълумотлар сақланади. Ахборот тизими энг кичик квадратчалар усули ёрдамида реакция параметрлари ўртасидаги муносабатларни излашга имкон беради. Тизим дастурий хизматлари (АПИ) маълумотлар базасидан маълумотларга кириш воситаларини тақдим этади, уларнинг ёрдами билан "структура-мулк" моделлари яратилади. Ушбу ИП ташқи хизматлар билан мулоқот қилиш, улардан кинетик параметрларни олиш ва ўз маълумотлар базасида сақлаш қобилиятига эга.

Усул ва услублар: кимёвий реакцияларни моделлаштириш тадқиқотчилар учун муҳим вазифадир. Моделлаштириш натижалари асосида сиз реакциянинг оптимал режими ва шартларини, унинг оқимида шароитларнинг таъсирини танлашингиз ва реакция маҳсулотларининг чиқишларини ҳисоблашингиз мумкин. Кимёвий реакциянинг энг муҳим хусусияти тезлик. Кўпгина реакциялар қайта тикланиши мумкин, яъни уларнинг маҳсулотлари бошлангич моддалар ҳосил бўлиши билан ўзаро таъсир қилиши мумкин. Бундай ҳолда, К реакциясининг мувозанат Собитининг концепцияси киритилади, бу тўғридан-тўғри ва тесқари реакцияларнинг тезлиги собит орқали ифодаланади. Сантера С++ да ёзилган, Пйтҳон-да ишлайдиган интерфейсларга эга ва термодинамик ҳисоб-китобларни мақсад қилади.

Кимёвий маълумотни сақлаш учун кўплаб маълумотлар базалари ишлаб чиқилган бўлиб, улар маълум хусусиятларга эга бўлган янги моддаларни қидиришда ишлатилади. Ушбу тадқиқотларнинг аксарияти янги дори-дармонларни ишлаб чиқишга қаратилган [4-6], шунингдек спектрал маълумотларни сақлаш.

Таърифланган ЛасертаЛаб ахборот тизими (ис) Жава тилида ишлаб чиқилган. Маълумотлар маълумотлар базасида (ПостгреСҚЛ учун дастур) ёки шунга ўхшаш тузилишга эга файллар (ХМЛ, ЖСОН, ЙМЛ форматлари) да сақланиши мумкин.

ИП-нинг муҳим элементи-"структура-мулк" нинг миқдорий корреляциясини излашга имкон берувчи маълумотларни таҳлил қилиш бирлиги, шунингдек, Моделиса тили билан динамик моделларни яратиш.

Натижалар: тавсия этилган кинетик маълумотлар базаси универсал бўлиб, кимёвий реакция механизмлари ва расмий реакция параметрлари ҳақида маълумотни сақлаш имконини беради. Кимёвий бирикмалар ва реакцияларнинг хусусиятларини сақлашнинг мослашувчан тизими мавжуд.

Кимёвий маълумотлар базасини лойиҳалашда кимёвий бирикмаларни кодлаш муҳим масала ҳисобланади. Ҳозирги вақтда кимёвий бирикмаларни кодлаш учун Чемисал Абстрактс Сервисе реестрига киритилган кимёвий бирикмаларнинг ноёб рақамли идентификатори бўлган САС рақами энг машҳур ҳисобланади. Ушбу идентификатор чизиқлар билан ажратилган учта рақам шаклида ёзилади. Бундан ташқари, кимёда бир нечта модда кодлаш тизимлари қабул қилинди: СМІЛЕС (Симплифиед молекуляр кириш линияси тизими), ИнЧИ (Интернационал Чемисал Идентифиер - халқаро матнли кимёвий идентификатор).

Хулосалар: кимёвий реакцияларнинг кинетикаси маълумотларини сақлаш ва таҳлил қилиш учун ЛАСЕРТАЛАБ ипи кимёвий реакциялар юзага келиши ҳақидаги расмий маълумотларни ва реакция механизми ҳақидаги маълумотларни сақлашга имкон беради. АПИ (Жава тилида) ишлаб чиқилган бўлиб, у кинетик маълумотларни дастурий таҳлил қилиш имконини беради, шу жумладан "структура-мулк" моделларини яратиш. Онлайн режимда энг машҳур кинетик маълумотлар базасидан маълумотларни импорт қилиш имконини берувчи функционалик ишлаб чиқилди.

Адабиётлар:

1. NIST Chemical Kinetics Database. URL: <https://kinet-ics.nist.gov/kinetics/index.jsp> (дата обращения: 13.06.2018).
2. Modelica. URL: <https://www.modelica.org/documents/ModelicaSpec34.pdf> (дата обращения: 13.06.2018).

ИНФОРМАЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ В ФАРМАЦЕВТИКЕ

Расулева М.Р., Алиева Н.М., Халилова Ш.С.

Ташкентский фармацевтический институт, г. Тошкент, Республика Ўзбекистан

Ключевым фактором функционирования информационных технологий (ИТ) в фармацевтике является оперативное принятие эффективных решений. Однако естественное стремление усовершенствовать процессы принятия решений нередко наталкивается с труднопреодолимым препятствием – огромный объем, высокая сложность и разноплановость данных различных информационных систем (ИС). Сделать такую информацию доступной для анализа – одна из наиболее серьезных задач, стоящих сегодня перед профессионалами в области ИТ [1,2]. Современные подходы к решению этой задачи ориентированы на построение «баз данных» (БД) или «хранилища данных» (data warehouse), позволяющих «высвободить» информацию из жестких рамок оперативных систем и лучше осознать проблемы реальной деятельности. БД – это интегрированный накопитель информации, собранной из других систем, на основе которого строятся процессы принятия решений и анализа данных. Общие признаки БД:

- информация в хранилище данных концентрируется вокруг базовых понятий, используемых в деятельности организаций (например, диагностика, планирование учебно-тренировочной нагрузки, рекомендации, контроль за выполнением и пр.);
- «сырые» данные собираются из не интегрированных оперативных и унаследованных приложений, очищаются от ошибок, затем агрегируются и представляются в виде, понятном конечным пользователям;
- на основании откликов пользователей, а также закономерностей, обнаруженных с помощью соответствующих методов, архитектура хранилища данных со временем претерпевает изменения – то есть процесс создания хранилища является итеративным.

База данных – это собрание данных, предназначенное для поддержки принятия управленческих решений и отличающееся предметной ориентированностью, интегрированностью, поддержкой хронологии и неизменяемостью.