

Моисеенко И.А.¹, Попель К.Г.², Попель Г.А.^{1,2}, Коваленко А.А.²

¹Республиканский научно-практический центр «Кардиология», Минск, Беларусь

²Белорусский государственный медицинский университет, Минск, Беларусь

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СПЕКТРА БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ МЕТОПРОЛОЛА ТАРТРАТА КАК ПОТЕНЦИАЛЬНОГО ЛЕКАРСТВЕННОГО СРЕДСТВА ДЛЯ СНИЖЕНИЯ РИСКА РАЗВИТИЯ СИНДРОМА ЦЕРЕБРАЛЬНОЙ ГИПЕРПЕРФУЗИИ ПОСЛЕ КАРОТИДНОЙ РЕВАСКУЛЯРИЗАЦИИ

Maiseyenko I.¹, Popel K.², Popel H.^{1,2}, Kavalenka A.²

¹Republican Scientific and Practical Centre "Cardiology", Minsk, Belarus

²Belarusian State Medical University, Minsk, Belarus

AI-BASED ANALYSIS OF THE BIOLOGICAL ACTIVITY OF METOPROLOL TARTRATE AS A POTENTIAL DRUG FOR REDUCING THE RISK OF CEREBRAL HYPERPERFUSION SYNDROME AFTER CAROTID ARTERY REVASCLARIZATION

Введение. Реперфузионное повреждение головного мозга после каротидной реваскуляризации остается одной из актуальных проблем современной сосудистой хирургии. Актуальность применения метопролола тартрата для снижения риска реперфузионного повреждения головного мозга обусловлена наличием у препарата доказанных в доклинических исследованиях нейропротективных свойств.

Цель. Провести анализ спектра биологической активности метопролола тартрата с использованием алгоритмов искусственного интеллекта и методов хемоинформатики.

Материалы и методы. Для анализа отобран метопролола тартрат (UNII W5S57Y3A5L – (2R,S)-1-[4-(2-Methoxyethyl)phenoxy]-3-(propan-2-ylamino)propan-2-ol (2R,3R)-2,3-dihydroxybutanedioate (2:1)). Прогнозирование биологических эффектов выполнялось в системе компьютерной оценки биологической активности химических соединений с использованием алгоритмов машинного обучения. В результате были получены значения вероятности проявления активности (P_a) и вероятности ее отсутствия (P_i). Кроме того, выполнялось прогнозирование профилей экспрессии генов, индуцируемых химическим соединением, исходя из структурных характеристик. Результаты представлялись в виде списка генов с указанием направления изменения их экспрессии в патологическом процессе C0035126 «Reperfusion Injury» и вероятности данного эффекта с указанием уровня значимости и скорректированного его значения с поправкой на множественность сравнения.

Результаты. Биологические эффекты метопролола тартрата: Membrane integrity agonist ($P_a=0,937$, $P_i=0,004$), Beta-adrenergic receptor kinase inhibitor ($P_a=0,911$, $P_i=0,004$),

G-protein-coupled receptor kinase inhibitor ($P_a=0,911$, $P_i=0,004$), Chymosin inhibitor ($P_a=0,838$, $P_i=0,013$), Saccharopepsin inhibitor ($P_a=0,838$, $P_i=0,013$), 5 Hydroxytryptamine release stimulant ($P_a=0,823$, $P_i=0,012$), Antiadrenergic ($P_a=0,814$, $P_i=0,004$), Adrenaline antagonist ($P_a=0,812$, $P_i=0,004$), Vasodilator, coronary ($P_a=0,793$, $P_i=0,005$), Vasodilator, peripheral ($P_a=0,773$, $P_i=0,005$), Vasodilator ($P_a=0,772$, $P_i=0,005$), Antianginal ($P_a=0,765$, $P_i=0,005$), Choline-phosphate cytidyltransferase inhibitor ($P_a=0,756$, $P_i=0,004$), Beta adrenoreceptor antagonist ($P_a=0,714$, $P_i=0,001$), Antihypertensive ($P_a=0,705$, $P_i=0,005$), Antiarrhythmic ($P_a=0,686$, $P_i=0,005$), Lipid metabolism regulator ($P_a=0,674$, $P_i=0,013$), Phosphatidate phosphatase inhibitor ($P_a=0,648$, $P_i=0,009$), Sodium channel blocker ($P_a=0,636$, $P_i=0,004$), 1-Alkylglycerophosphocholine O-acetyltransferase inhibitor ($P_a=0,638$, $P_i=0,007$), Skeletal muscle relaxant ($P_a=0,583$, $P_i=0,006$), Beta 3 adrenoreceptor antagonist ($P_a=0,566$, $P_i=0,002$), Antiglaucomic ($P_a=0,542$, $P_i=0,005$). При анализе лекарственно-индуцированных изменений транскрипционной активности обнаружено повышение экспрессии ABCB1; ABCG5; ADCYAP1; ADIPOQ; ADRB2; AKT1S1; ALOX12; ANG; AOC3; APAF1; BAD; BAG1; BAX; BDNF; BECN1; BID; BIRC5; BMP6; BSG; BTG2; C3AR1; C5; C5AR1; CASP1; CASP6; CASP9; CAT; CAV1; CCL5; CCNB1; CCNE1; CCNG1; CD2AP; CD40; CD55; CDC42; CDKN1B; CFH; CSPG4; CTSB; CXCL1; CXCL10; CXCL8; CXCR3; EDN1; EDNRB; EGR1; EIF2A; EP300; EPHA2; ERCC1; FGF2; FOS; FOSL1; FOSL2; GAST; GLUD1; GNAI2; GPX1; GRIA1; GRIK2; GSR; HGF; HMGB1; HMOX1; HSPA1B; HSPA5; HSPA8; HSPB1; ICAM1; IFNG; IL10; IL12A; IL1A; IL1B; IL6; IL6ST; IRF1; ITGA5; KCNJ8; KEAP1; LEP; LIG3; MAPK8; MAPK8IP3; MET; NES; OGA; OPRM1; PARP1; PECAM1; PIK3R1; PKLR; POLB; PPP3CA; PTAFR; PTGS2; PTK2; RELA; SELL; SERPINE2; SIRT7; SLC2A3; SLC9A1; SLK; SLPI; SOCS1; SOCS3; SOCS4; SOD2; STAT2; STAT5B; TBXAS1; TERT; TFAM; TICAM1; TNFRSF1A; TP53; TRPM7; TXN; TXN2; TXNRD1; TXNRD2; VCAM1; VEGFC; VIM; XDH; XRCC1 ($OШ = 2,365$, $p = 4,69 \times 10^{-14}$, $p_{adj} = 3,63 \times 10^{-11}$) и снижение экспрессии ABCB1; ACE; ADGRL1; ADM; ADORA2A; AIF1; ALOX5; APAF1; AQP4; ARG1; ATP6; ATP8; BAD; BAG1; BAG3; BAX; BECN1; BID; BIRC5; BMP6; BMPR2; C3; C5; CASP1; CASP3; CASP6; CASP9; CAST; CAT; CCL11; CCL2; CCL3; CCNB1; CCNE1; CCNG1; CD36; CD40; CD44; CD59; CDC42; CDKN1B; CFH; CTSB; CXCL6; CXCL8; CYBA; EDN1; EDN2; EDNRB; EFNA5; EIF2A; EIF2S1; ENO2; EPHA2; ERCC1; ETS1; FGF2; FOS; FOSL1; G6PD; GAST; GNAI3; GPX1; GRIN2A; GSR; HGF; HIF1A; HMGB1; HMOX1; HSPA1A; HSPA1B; HSPA5; HSPA8; HSPB1; ICAM1; IFNG; IL10; IL13; IL1A; IL1B; IL6; IL6ST; IRF1; ITGA5; ITGB3; KCNJ8; KEAP1; LEP; MAP2; MAPK9; MMP3; MMP9; MUC1; MYD88; NES; NOS2; PDE5A; PIK3R1; PKLR; PLAU; POLB; PPARA; PPP3CA; PRSS1; PTGES; PTGS2; PTK2; PTK2B; SCFD1; SELE; SLC2A1; SLC2A3; SLK; SOCS1; SOCS4; SOD1; STAT1; STC1; STC2; SULT1E1; TERT; TFAM; TGFB2; TJP1; TLR2; TLR3; TLR4; TM6SF2; TNF; TNFRSF1A; TXNRD1; VCAM1; VEGFD; XRCC1 ($OШ=1,987$, $p = 6,61 \times 10^{-10}$, $p_{adj} = 9,47 \times 10^{-8}$).

Заключение. С учетом полученных результатов интеллектуального компьютерного анализа биологической активности метопролола тартрат может быть использован для профилактики и лечения реперфузионного повреждения головного мозга у пациентов после реваскуляризации сонных артерий.

МЕЖДУНАРОДНЫЙ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

КАРДИОЛОГИЯ

в Беларуси

2026, том 18, № 1. Приложение

Cardiology in Belarus

International Scientific Journal

2026 Volume 18 Number 1 Supplement



Густав Климт
Девы (1913)

**Материалы IX Съезда кардиологов,
кардиохирургов, рентгеноэндоваскулярных хирургов
и аритмологов Республики Беларусь**

Минск, 9–10 апреля 2026 года

ISSN 2072-912X (print)
ISSN 2414-2131 (online)



ПИ
ПРОФЕССИОНАЛЬНЫЕ
ИЗДАНИЯ