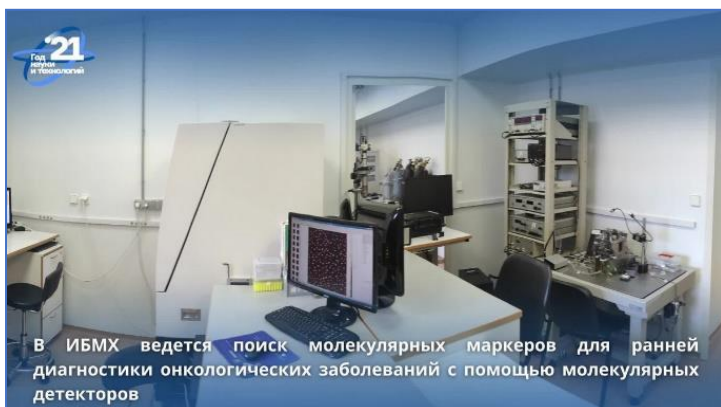
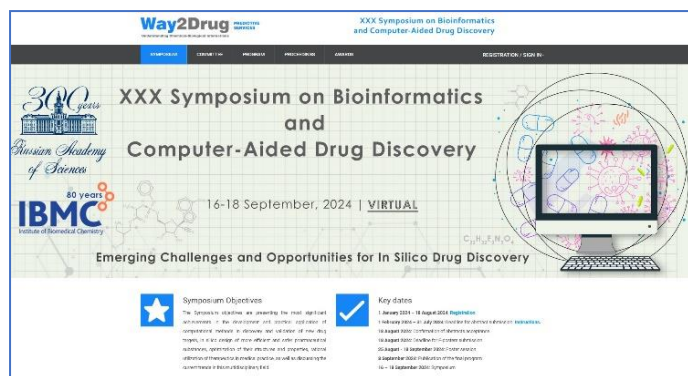


## ОТЧЕТ

### о проведении XXX Международного симпозиума «Биоинформатика и компьютерное конструирование лекарств» (XXX Symposium on Bioinformatics and Computer-Aided Drug Discovery), онлайн, 16-18 сентября 2024 года

Цель XXX Симпозиума «Биоинформатика и компьютерное конструирование лекарств» - представление современных достижений в разработке и практическом применении компьютерных методов поиска и валидации, как новых фармакотерапевтических мишеней, так и действующих на них лекарственных средств: конструирования *in silico* более эффективных и безопасных фармакологических веществ, оптимизации структуры и свойств лекарственных соединений, рациональных подходов к применению терапевтических средств в медицинской практике, а также обсуждение перспектив развития этой мультидисциплинарной области в будущем.

Симпозиум проводился онлайн с 16 по 18 сентября 2024 в рамках мероприятий, посвященных 300-летию Российской академии наук и 80-летию Института биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича. Организаторы Симпозиума - Российская академия наук, Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, Институт биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича (ИБМХ), Институт биоорганической химии РАН им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова (ГНЦ ИБХ РАН).



В ИБМХ ведется поиск молекулярных маркеров для ранней диагностики онкологических заболеваний с помощью молекулярных детекторов

направленного на развитие биомедицинских исследований согласно приоритетам научно-технологического развития Российской Федерации.

Тематика многих представленных на Симпозиуме докладов имела непосредственное отношение к участию ИБМХ в реализации проекта по созданию Научного центра мирового уровня «Цифровой биодизайн и персонализированное здравоохранение» в рамках Национального проекта «Наука»,

Основным лейтмотивом Симпозиума стало обсуждение новых «вызовов» и возможностей в открытии новых лекарственных препаратов с применением методов *in silico* с применением методов био- и хемоинформатики. Анализ массивов больших биомедицинских данных, развитие подходов машинного обучения и искусственного интеллекта, а также расширение возможностей оценок *in silico* служат предпосылками для выявления механизмов возникновения заболевания, идентификации перспективных биомаркеров и фармакологических мишеней.

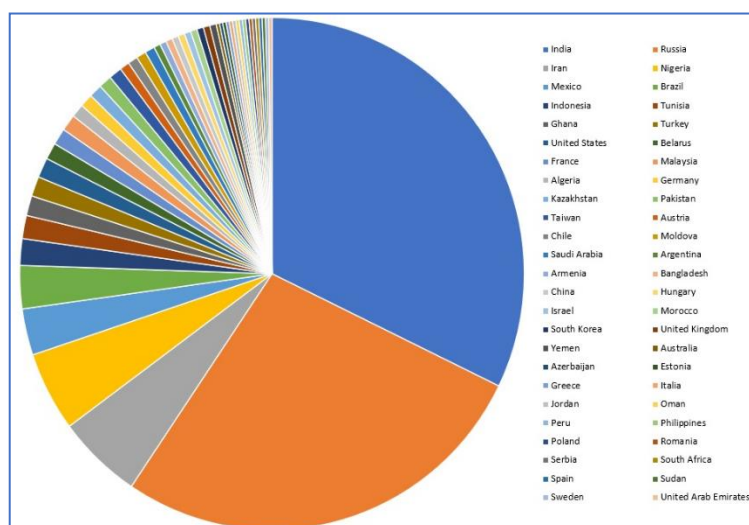
Применение компьютерных методов на всех стадиях фармацевтических исследований и разработок не только экономит трудовые, временные и финансовые ресурсы,

но и дает возможность анализировать получаемые исследователями большие данные, извлекать из них релевантную информацию, генерировать новые знания в мультидисциплинарной области. Постоянная обработка больших массивов биомедицинских данных *in silico*, идентификация целевых молекулярных мишеней позволяют выявлять количе-



ственные зависимости «структура-свойство», строить и валидировать прогностические модели, осуществлять рациональный молекулярный дизайн соединений-лидеров. На этом основании предоставляются возможности обоснованных рекомендаций для специалистов различного профиля в разработке и оптимизации, тестирования и применения лекарств.

Для участия в Симпозиуме зарегистрировалось 478 человек из 50 стран мира, представляющих университеты и колледжи (62%), научно-исследовательские институты (22%), высокотехнологические компании (3%), медицинские и регуляторные организации (3%), а также отдельные исследователи, аспиранты и студенты.



Сегодня как никогда важно быть в курсе меняющихся ландшафтов мира дисциплин в области открытия новых лекарств. Многопрофильная составляющая Симпозиума направлена на объединение докладчиков и участников из разных областей знаний

открытия лекарств, предоставляя прекрасную возможность поучаствовать в международном обмене идеями, текущими стратегиями, концепциями и передовым опытом, сотрудничестве и кооперации, предлагая широкие перспективы и обогащенный новыми знаниями опыт. Программа мероприятия включала 6 научных сессий и заседания, посвященные открытию и завершению Симпозиума, а также постерную сессию (<http://www.way2drug.com/dr/bcadd2024/program.php>).

На открытии Симпозиума с приветственным словом к участникам выступила директор ИБМХ д.б.н. Е.А. Пономаренко, а также сопредседатели Симпозиума член-корреспондент РАН В.В. Поройков (ИБМХ) и профессор Р.Г. Ефремов (ГНЦ ИБХ РАН).

На Симпозиуме было представлено 2 пленарных и 18 ключевых лекций, 24 устных доклада, отобранных Международным научным комитетом из 51-й заявки, а также 18 кратких сообщений в рамках Конкурса молодых ученых (41 заявка), и 72 электронных постера (74 заявки).

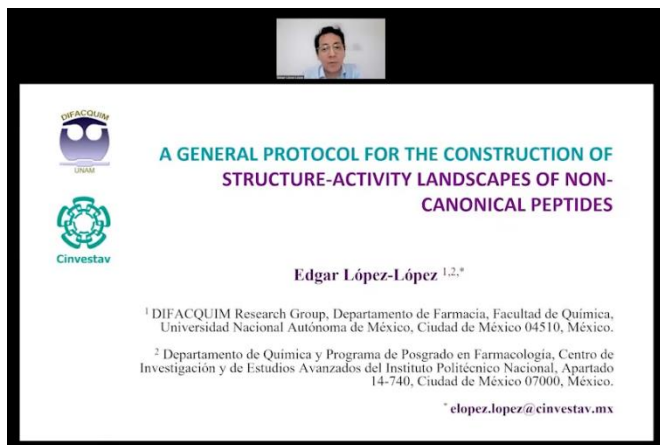
В числе докладчиков были как известные ученые, активно работающие в области компьютерного конструирования лекарств, так и молодые специалисты, аспиранты и студенты из Армении, Австралии, Белоруссии, Германии, Грузии, Израиля, Индии, Индонезии, Ирландии, Китая, Мексики, Нигерии, Перу, России, Соединенных Штатов Америки, Туниса, Турции и Швеции.

Многие научные сообщения вызвали живой интерес у участников Симпозиума: всего было задано свыше 340 вопросов, на которые в онлайн режиме были получены ответы и представлены комментарии.

В рамках Симпозиума проведен конкурс докладов молодых ученых: 18 докладов отобраны Международным научным комитетом при рассмотрении 41 заявки (тезисы доклада и постеры) для кратких устных сообщений. Шесть победителей из России, Мексики, и Индии награждены почетными дипломами.

Диплом первой степени был присужден Полине Савосиной, младшему научному сотруднику Института биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича (Россия) за доклад «World Wide Approved Drugs: From big biomedical data to global small molecule drug database» (Savosina P. et al. *Frontiers in Pharmacology*, 2024, 15:1473279. doi: 10.3389/fphar.2024.1473279).

Monday September 16, 2024	
Chairpersons: Vladimir Poroikov and Roman Efremov	
08:30	Opening of the Symposium
Plenary lecture	
09:00	COMPUTATIONAL DESIGN AND REPURPOSING OF DRUGS FOR CORONAVIRUSES AND DRUG RESISTANT PATHOGENS David Winkler Monash Institute of Pharmaceutical Sciences, Melbourne, Australia (Play)
Oral presentations	
10:00	SUCCESSFUL APPLICATION OF COMPUTING METHODS TO DEVELOPMENT SARS-COV-2 INHIBITORS Vladimir Sulimov Dimonta Ltd., Research Computing Center, Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia (Play)
10:20	PITFALLS OF SARS-COV-2 MAIN PROTEASE COVALENT INHIBITION MODELING WITH THE COMBINED QUANTUM AND MOLECULAR MECHANICS APPROACHES Igor Polyakov Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia (Play)
10:40	MODELLING LETHALITY AND TERATOGENICITY OF ZEBRAFISH (DANIO RERIO) DUE TO $\beta$ -LACTAM ANTIBIOTICS EMPLOYING THE QSTR APPROACH Aniket Nath Jadavpur University, Kolkata, India (Play)
Keynote lectures	
11:00	SIXTY YEARS IN SCIENCE OF PROFESSOR NIKOLAY S. ZEFIROV: FROM ORGANIC SYNTHESIS, CONFORMATIONAL ANALYSIS AND REACTION DESIGN - TO MEDICINAL CHEMISTRY AND CADD Vladimir Palyulin Faculty of Chemistry, Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia



Диплом второй степени присужден Edgar López-López, аспиранту Universidad Nacional Autónoma de México, Mexico за доклад «A general protocol for the construction of structure-activity landscapes of non-canonical peptides».

Дипломами третьей степени были награждены:

- Олег Захаров, студент Российского национального исследовательского медицинского университета имени Н.И. Пирогова за доклад «Prediction of protein secondary structures based on substructural MNA descriptors of molecular fragments»;

- Jesús Israel Espinoza Castañeda, студент Universidad Nacional Autónoma de México, Mexico, за доклад «Automated analysis of structure-multiple property relationships: Impact on SMARTS»;

- Алексей Ерещенко, научный сотрудник Всероссийского научно-исследовательского института автоматизации имени Н.Л. Духова за доклад «Ligand-protein binding site annotation using graph neural networks»;

- Navya Aggarwal, студент Amity Institute of Biotechnology, Amity University Uttar Pradesh, India за доклад «Exploration of natural novel hybrid molecules as RAF-1 kinase antagonists for breast cancer therapeutics».

Специальными дипломами награждены лучшие постеры, представленные на Симпозиуме:

- Ereshchenko A., Evteev S., Vyacheslavov A., Adjugim D., Malyshev A., Ivanenkov Ya. «Ligand-protein binding site annotation using graph neural networks»;

- Espinoza Castañeda J.I., Medina-Franco J.L. «Automated analysis of structure-multiple property relationships: Impact on SMARTS»;

- Savosina P., Druzhilovskiy D., Filimonov D., Poroikov V. «World wide approved drugs: From big biomedical data to global small molecule drug database»;

- Kondrakhin P., Kolpakov F. «Mathematical modeling of epilepsy drug therapy»;

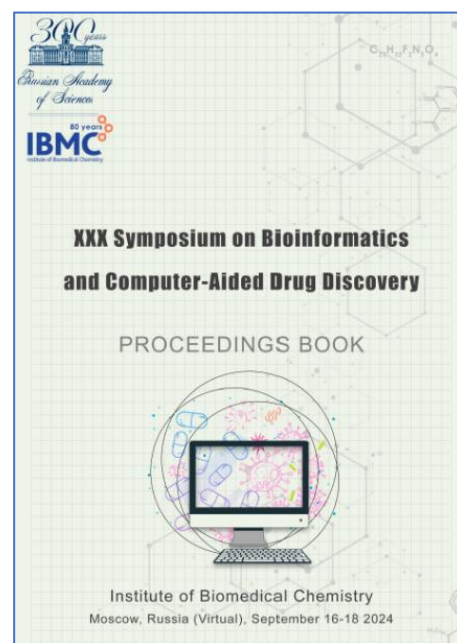
- Fomina A.D., Palyulin V.A., Osolodkin D.I. «Analysis of ensemble docking applicability to diverse homology models of Orthoflavivirus NS1 protein»;

Shkil D.O., Balakin K.V. «Development of predictive models for GLP-1R agonists using patent-derived active compounds and deep learning techniques»;

Almeida V.L., dos Santos O.D.H., Lopes J.C.D. «Large-scale prediction of biological activities with active-IT system»;

López-López E., Robles O., Plisson F., Medina-Franco J.L. «A general protocol for the construction of structure-activity landscapes of non-canonical peptides».

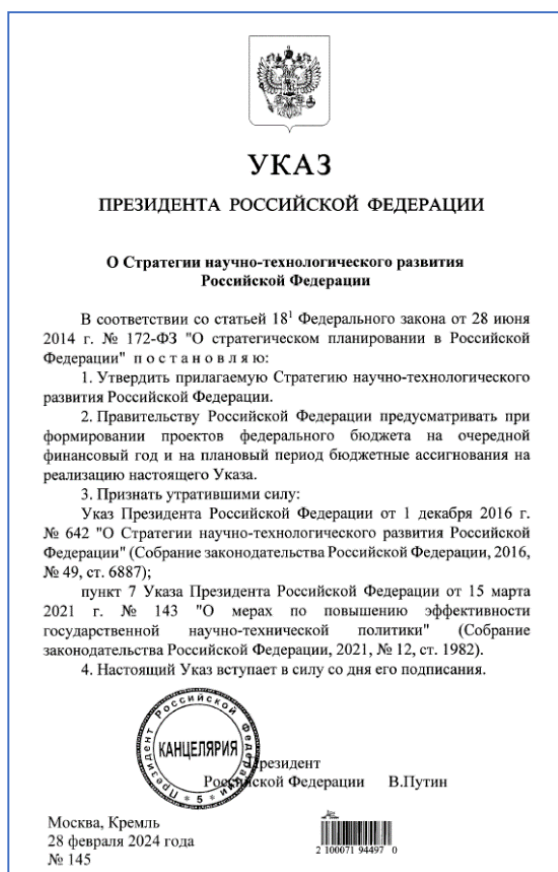
Подготовлен сборник Материалов Симпозиума «Proceedings Book of the XXX Symposium "Bioinformatics and Computer-Aided Drug Discovery"», М.: Институт биомедицинской химии, 2024. – 136 С. (Проходит регистрацию в РИНЦ, ISBN 978-5-900760-20-9, DOI: 10.18097/BCADD2024). Многие из опубликованных в сборнике тезисов докладов содержат благодарности за финансовую поддержку, включая проекты Министерства науки и высшего образования РФ и Министерства здравоохранения РФ (17 тезисов), а также гранты Российского научного фонда (22 тезиса).



Современные подходы к поиску и созданию новых лекарственных препаратов ба-

зируются на мультидисциплинарных исследованиях. Применение технологий *in silico* на всех стадиях разработки существенно снижает временные и финансовые издержки, а также риски получения отрицательных результатов. Это позволяет создавать более безопасные и эффективные лекарственные препараты, и оптимизировать их применение в клинической практике с учетом индивидуальных особенностей пациента.

Рассмотренная на Симпозиуме проблематика соответствует двум приоритетным направлениям Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации, утвержденной Указом Президента РФ № 145 от 28 февраля 2024 года: пункт 21 подпункт «в» «переход к персонализированной, предиктивной и профилактической медицине, высокотехнологичному здравоохранению и



*технологиям здоровьесбережения, в том числе за счет рационального применения лекарственных препаратов (прежде всего антибактериальных) и использования генетических данных и технологий», и подпункт «а» «переход к передовым технологиям проектирования и создания высокотехнологичной продукции, основанным на применении интеллектуальных производственных решений, роботизированных и высокопроизводительных вычислительных систем, новых материалов и химических соединений, результатов обработки больших объемов данных, технологий машинного обучения и искусственного интеллекта».*

Большинство презентаций и видео устных выступлений по согласованию с докладчиками размещено в открытом доступе на веб-сайте XXX Симпозиума (<http://www.way2drug.com/dr/bcadd2024/program.php>). Также доступны соответствующие материалы XXIX Симпозиума «Биоинформатика и компьютерное конструирование лекарств» (<http://www.way2drug.com/dr/bcadd2023/program.php>).

Проведение XXX Симпозиума «Биоинформатика и компьютерное конструирование лекарств» в формате международного мероприятия обеспечивает:

- повышение уровня информационного обмена, как в сфере научного сообщества, так и между учреждениями, организующими исследования и разработки в области наук о жизни, представителями фармацевтических и биотехнологических компаний, а также высшего профессионального образования, включая молодых ученых, аспирантов и студентов;

- расширение инструментов научного взаимодействия и обмена информацией в области биомедицины и передовых междисциплинарных направлений, таких как биоинформатика, хемоинформатика, вычислительная молекулярная биофизика и системная биология;

- обсуждение стратегии, политики и аналитического опыта в разработке и применении компьютерных технологий создания новых лекарств, включая их практическое применение в смежных отраслях медико-биологического знания;

- развитие возможностей обмена знаниями и опытом российских и иностранных ученых, с различными направлениями специализации и уровнем квалификации - профессоров и преподавателей, аспирантов, студентов в рамках конкурса научных работ, представленных на Симпозиуме.