

ОБРАЩЕНИЕ РЕДАКТОРОВ ВЫПУСКА

Дорогие коллеги!

Тематический выпуск журнала «Биомедицинская химия» содержит работы, представленные на XXX Симпозиуме «Биоинформатика и компьютерное конструирование лекарств» (XXX Symposium on Bioinformatics and Computer-Aided Drug Discovery, BCADD-2024). Эти ежегодные симпозиумы проводятся по инициативе академика А.И. Арчакова Институтом биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича начиная с 1995 года; а с 2021 года они стали международными и проходят в онлайн формате.

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.

XXX Симпозиум «Биоинформатика и компьютерное конструирование лекарств» проводился онлайн с 16 по 18 сентября 2024 в рамках мероприятий, посвящённых 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 имени академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова (ГНЦ ИБХ РАН).

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

Рассмотренная на Симпозиуме проблематика соответствует двум приоритетным направлениям Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации, утверждённой 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 счёт 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 объёмов данных, технологий машинного обучения и искусственного интеллекта».

Основным лейтмотивом Симпозиума стало обсуждение новых «вызовов» и возможностей в создании инновационных лекарственных препаратов *in silico* с применением методов био- и хемоинформатики. Анализ массивов больших биомедицинских данных, развитие подходов машинного обучения и искусственного интеллекта, а также расширение возможностей расчётных оценок 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 даёт возможность анализировать получаемые исследователями большие данные, извлекать из них релевантную информацию, генерировать новые знания в этой мультидисциплинарной области. Постоянная обработка больших массивов биомедицинских данных *in silico*, идентификация целевых молекулярных

мишеней позволяют выявлять зависимости «структура-свойство», строить и валидировать прогностические модели, осуществлять рациональный молекулярный дизайн соединений-лидеров. На этом основании предоставляются обоснованные рекомендации для специалистов различного профиля в разработке и оптимизации, тестировании и применении лекарств.

Для участия в XXX Симпозиуме зарегистрировалось 478 человек из 50 стран мира, представляющих университеты и колледжи (62%), научно-исследовательские институты (22%), высокотехнологичные 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, необходимых для создания лекарств, предоставляя прекрасную возможность принять участие в международном обмене идеями, текущими стратегиями, концепциями и передовым опытом, сотрудничестве и кооперации, предлагая широкие перспективы и обогащённый новыми знаниями опыт.

Программа мероприятия включала 6 научных сессий и заседания, посвящённые открытию и завершению Симпозиума, а также постерную сессию (<http://www.way2drug.com/dr/bcadd2024/program.php>). 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 учёных (41 заявка), и 72 электронных постера (74 заявки). В числе докладчиков были как известные учёные, активно работающие в области компьютерного конструирования лекарств, так и молодые специалисты, аспиранты и студенты из Армении, Австралии, Белоруссии, Бразилии, Германии, Грузии, Израиля, Индии, Индонезии, Ирландии, Китая, Мексики, Нигерии, Перу, России, Соединённых 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 получены ответы и представлены комментарии. В рамках Симпозиума проведён конкурс докладов молодых учёных: 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 были награждены почетными дипломами.

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>).

В тематический выпуск журнала свои работы представили как зрелые исследователи, работающие в данной области не один десяток лет, так и молодые учёные, делающие первые шаги в науке.

Таким образом, содержание тематического выпуска журнала широко охватывает современное состояние исследований в области биоинформатики и компьютерного конструирования лекарств — от разработки различных методов дизайна лекарств *in silico* до их применения с целью приоритизации молекулярных мишеней, поиска и оптимизации действующих на них лигандов, исследования молекулярных механизмов взаимодействия лигандов с мишенями. Сегодня биоинформатика перестаёт быть всего лишь «поставщиком» математических методов и компьютерных программ для анализа данных. Это — мультидисциплинарная область науки, интегрирующая разнородные химические, биологические и медицинские данные с целью извлечения из них полезной информации и генерации новых знаний, на основе которых могут быть созданы новые более безопасные и эффективные лекарственные препараты.

Приглашённые редакторы, сопредседатели Симпозиума

профессор **В.В. Поройков**

профессор **Р.Г. Ефремов**