

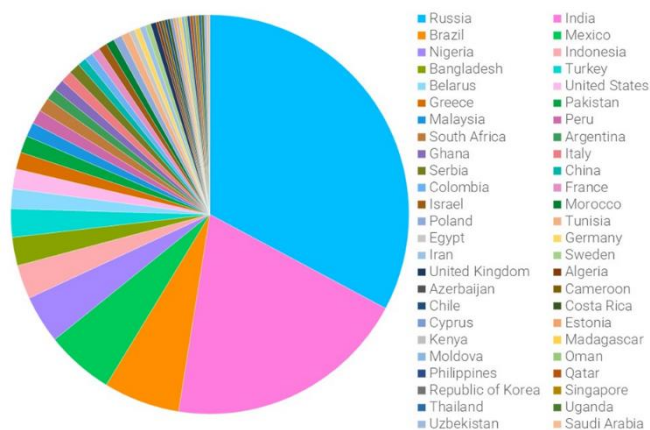
XXXI Международный симпозиум «Биоинформатика и компьютерное конструирование лекарств» (BCADD-2025)

Цель XXXI Симпозиума «Биоинформатика и компьютерное конструирование лекарств» - представление достижений в разработке и практическом применении компьютерных методов поиска и валидации новых мишеней действия лекарств, 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 20 по 22 октября 2025 года. 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 М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова (ИБХ РАН).

Основным лейтмотивом Симпозиума стало обсуждение новых «вызовов» и возможностей в области поиска новых лекарственных препаратов с применением методов *in silico*. Анализ больших биомедицинских данных, развитие подходов машинного обучения и искусственного интеллекта, расширение возможностей оценок *in silico* с применением методов био- и хемоинформатики обеспечили предпосылки для углубления представлений о механизмах патологических процессов в организме человека, 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 позволяет агрегировать постоянно получаемые исследователями данные, извлекать из них релевантную информацию, генерировать новые знания в этой мультидисциплинарной области. Это позволяет эффективно обрабатывать огромные массивы биомедицинских данных *in silico*, идентифицировать перспективные молекулярные мишени, выявлять количественные зависимости «структура-свойство», строить и валидировать прогностические модели, осуществлять рациональный молекулярный дизайн соединений-лидеров, и предоставлять обоснованные рекомендации медицинским химикам, фармакологам, токсикологам, врачам и регистрационным органам по оптимизации разработки, тестирования и применения лекарств.

Для участия в Симпозиуме зарегистрировалось 437 человек из 50 стран мира, представляющих университеты и колледжи (61%), научно-исследовательские институты (35%), высокотехнологические компании (3%), медицинские и регуляторные организации (1%), а также отдельных исследователей, аспирантов и студентов.



Научная программа трехдневных мероприятий, [представленная на веб-сайте Симпозиума](#), включала в себя 6 научных сессий, а также заседания, посвященные открытию и завершению Симпозиума. На открытии Симпозиума с приветственным словом к участникам выступила директор ИБМХ д.б.н. Елена Александровна Пономаренко, а также сопредседатели Симпозиума член-корр. РАН Владимир Василевич Поройков (ИБМХ) и профессор Роман Гербертович Ефремов (ИБХ РАН). На Симпозиуме было представлено 2 пленарных и 18 ключевых лекций, 27 устных доклада (отобраны членами Международного научного комитета на основе рассмотрения 56 тезисов), 15 кратких сообщений в рамках Конкурса молодых ученых (отобраны на основе рассмотрения 51 тезиса), и 78 электронных постеров.

В числе докладчиков были как известные специалисты, в течение многих лет активно работающие в области компьютерного конструирования лекарств, так и молодые ученые, аспиранты и студенты из Аргентины, Бразилии, Великобритании, Греции, Израиля, Индии, Индонезии, Италии, Коста Рики, Мексики, Молдовы, Нигерии, России, Сербии, Соединенных Штатов Америки, Франции, Чили, Южно-Африканской Республики.

Многие научные сообщения вызвали живой интерес у участников Симпозиума: всего было задано около 400 вопросов, на которые в онлайн режиме были получены ответы и представлены комментарии.

В рамках Симпозиума проведен конкурс докладов молодых ученых: на основе рассмотрения 51 заявки 15 докладов отобрано Международным научным комитетом для кратких устных сообщений; девять победителей из Бразилии, Мексики, России и Сербии награждены почетными дипломами.

Диплом первой степени был присужден:

Арсению Моралеву, старшему лаборанту
Института химической биологии и
фундаментальной медицины СО РАН,
Новосибирск, Россия, за доклад «In silico-
guided identification and biological
evaluation of triterpenoid-type p-
glycoprotein inhibitors».



XXXI Symposium on
Bioinformatics and
Computer-Aided Drug
Discovery (BCADD-2025)



IN SILICO-GUIDED IDENTIFICATION AND BIOLOGICAL EVALUATION
OF TRITERPENOID-TYPE P-GLYCOPROTEIN INHIBITORS

A. Moralev¹, O. Salomatina², M. Zenkova¹, A. Markov¹

¹Institute of Chemical Biology and Fundamental Medicine, Novosibirsk, Russia

²N.N. Vorozhtsov Novosibirsk Institute of Organic Chemistry, Novosibirsk, Russia

arseniimoralev@gmail.com

Дипломов второй степени были
удостоены:

Moscow, 2025

Ирина Веретененко, младший научный сотрудник Института биоорганической химии
имени академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова, Москва, Россия, за доклад
«Magnesium binding to TRPV6 ion channel - insights from molecular modeling»;

Luis Angel Gil Ruiz, аспирант ESM-IPN, Mexico, за доклад «Design and synthesis of peptide
inhibitors targeting HER2 as a therapeutic strategy in breast cancer».

Дипломами третьей степени были награждены:

Иван Лазарев, студент Института биоорганической химии имени академиков М.М.
Шемякина и Ю.А. Овчинникова, Москва, Россия, за доклад «Polar patch in the hydrophobic
gate of TRPV1 channel and its functional role»;

Георгий Малахов, старший лаборант Института биомедицинской химии имени В.Н.
Ореховича, Москва, Россия, за доклад «Comparative efficiency of structure-activity
relationship and proteochemometric modelling»;

Luis Felipe Melo, магистрант Universidade Federal da Paraiba, Joao Pessoa, Brazil, за доклад
« AmIActive (AIA): A large-scale QSAR based target fishing and polypharmacology predictive
web tool»;

Nikola Radnović, старший лаборант University of Novi Sad, Novi Sad, Serbia, за доклад «X-
ray crystallographic analysis of 17-pyridin-2-yl estrane derivatives lead-like compounds against
breast and cervical cancer»;

Виталий Фролов, аспирант Химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова,
Москва, Россия, за доклад «DENR-POL Theoretically consistent polarizable empirical charges
for drug-like and biological molecules»;

Георгий Ходос, бакалавр Медико-биологического факультета РНИМУ имени Н.И.
Пирогова, за доклад «TIP - web application for predicting drug-transporter interactions».

Специальными дипломами награждены лучшие постеры, представленные на Симпозиуме:

Đ.D. Janković, M.A. Marinović, S.S. Bekić, E.T. Petri, A.S. Celić, M.P. Savić, J.J. Ajduković «New steroid carbamates: synthesis, *in vitro* biological activity and *in silico* ADMET and docking studies»,

G. Cepinho, B. Scavassa, V.M. de Andrade, M. Heras, K. Conceição «*In silico* studies of the interaction of antimicrobial peptides with proteins from microorganisms by target fishing and docking approaches»,

M.L. Puteri Najihah, H. Pungot, M. Zulkifli, M.H.M. Idris «Antibacterial activities of Meldrum's acid derivatives: *in vitro* and molecular docking studies»;

D.L. López, R.S.R. Hernández, V.R. López «Design of iridoids based on the genipin structure through *in vitro* and *in silico* assays against cervical cancer»,

A. Kovalenko, E. Skorb, S. Shityakov «*In silico* click chemistry-driven design of blood-brain barrier-permeable dopamine D3 receptor ligands»,

A. Sveshnikova, I. Butenko, L. Davydova, N. Kitsilovskaya, K. Gorbunov «7-day-long blood plasma proteome analysis from critically ill patients».

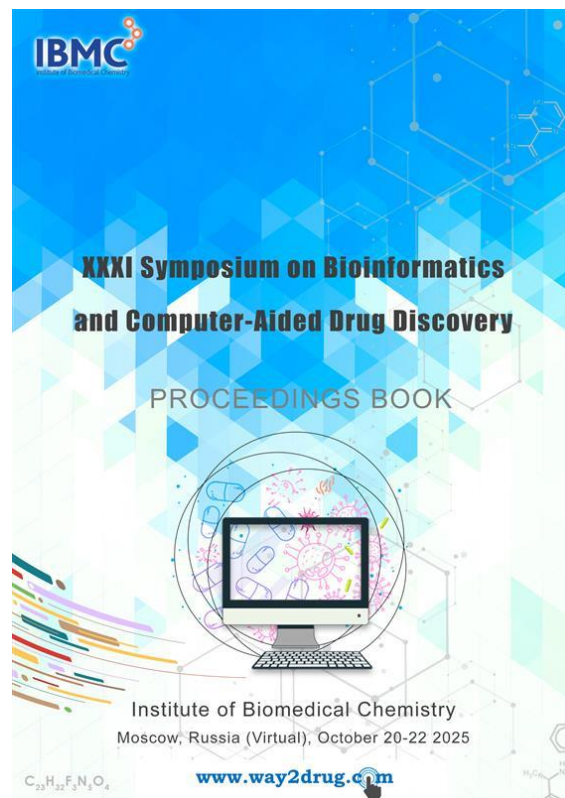
Подготовлен сборник Материалов Симпозиума «Proceedings Book of the XXXI Symposium "Bioinformatics and Computer-Aided Drug Discovery"», Институт биомедицинской химии, М.: 2025. – 136 С.

[DOI: 10.18097/BCADD2025](https://doi.org/10.18097/BCADD2025).

Многие из опубликованных в сборнике тезисов докладов содержат благодарности за финансовую поддержку, включая проекты Министерства науки и высшего образования РФ и Министерства здравоохранения РФ (6 тезисов), а также гранты Российского научного фонда (17 тезисов).

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 «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» и 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».

Большинство презентаций и видео устных выступлений по согласованию с докладчиками размещено в открытом доступе на веб-сайте XXXI Симпозиума (<http://www.way2drug.com/bcadd2025/program.php>)

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

- повышение уровня информационного обмена как внутри научного сообщества, так и между организациями сектора исследований и разработок в области наук о жизни, коммерческого сектора в лице фармацевтических и биотехнологических компаний, высшего профессионального образования, включая молодых ученых и студентов;
- расширение способов и инструментов научного взаимодействия и обмена информацией в области медицины и таких междисциплинарных направлений как биоинформатика, хемоинформатика и системная биология;
- обсуждение стратегии, политики и передового опыта в области разработки и применения компьютерных методов для создания новых лекарств, включая практические применения в смежных областях биомедицины;
- возможность участникам обмениваться информацией о последних достижениях в области хемо- и биоинформатики, системной биологии и медицины, связанным с разработкой и практическим применением компьютерных методов для создания более безопасных и эффективных лекарств, а также в смежных областях биомедицины;
- расширение возможности обмена знаниями и опытом российских и иностранных ученых, профессоров и преподавателей, аспирантов и студентов в рамках конкурса работ молодых ученых.