КОМПЬЮТЕРНЫЙ ПОИСК ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ ДЛЯ ТЕРАПИИ ИНФЕКЦИИ SARS-COV-2: ИЛЛЮЗИИ И РЕАЛЬНОСТЬ

**В.В. Поройков, Д.С. Дружиловский, П.В. Погодин, Л.А. Столбов,
С.М.Иванов, П.И. Савосина, Н.С. Ионов, Н.Ю. Бизюкова,
А.В. Веселовский, Д.А. Филимонов**

Лаборатория структурно-функционального конструирования лекарств,
ФГБНУ «НИИ биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича»,
119121, Россия, Москва, Погодинская улица, д. 10, стр. 8.

DOI: 10.19163/MedChemRussia2021-2021-164

e-mail: vladimir.poroikov@ibmc.msk.ru

В настоящее время во всем мире проводятся интенсивные исследования, направленные на поиск фармакологических веществ для терапии COVID-19. Поиск в Google Scholar по запросу «COVID-19 AND (in silico OR virtual) AND screening» дает свыше 52 тысяч из более 3 миллионов документов, ассоциированных с COVID-19. Для анализа литературы с целью извлечения полезной информации широко применяются методы текстомики [1]. Поиск новых антикоронавирусных соединений проводится *in silico* с применением основанных на структуре мишени (молекулярное моделирование) или структуре лигандов методов (QSAR), а также подходов сетевой фармакологии [2]. С целью ускорения введения в медицинскую практику новых антивирусных соединений широко применяется репозиционирование лекарств [3]. Объем виртуальных библиотек химических структур для скрининга превысил 1 миллиард за счет охвата так называемых «синтезируемых соединений» [4]. Для отбора перспективных структур применяют комбинацию оценок по структурному сходству, методов машинного обучения и молекулярного моделирования [2, 4]. Независимое тестирование свободно доступных в сети Интернет вычислительных ресурсов приводит к выводу об ограниченности их возможностей [5]. Тем не менее, применение компьютерных методов позволяет существенно расширить многообразие анализируемого химико-биологического пространства и сократить временные и финансовые издержки, связанные с поиском новых антикоронавирусных соединений. Анализ опубликованных в литературе материалов дает возможность оценить в какой мере достигнутые результаты соответствуют ожиданиям, и сформулировать рекомендации для повышения эффективности ответных действий на возможные биогенные угрозы в будущем.

Исследование выполнено при поддержке РФФИ (грант № 20-04-60285).

Литература

- [1] N.Yu. Biziukova, O.A. Tarasova, A.V. Rudik, et al., Autom. Doc. Math. Linguist., 2020, 54, 306–315.
- [2] E. Muratov, R. Amaro, C. Andrade, et al., Chem. Soc. Rev. 2021. Accepted for publication.
- [3] P.I. Savosina, D.S. Druzhilovskiy, V.V. Poroikov, Pharm. Chem. J. 2020, 54, 989-996.
- [4] D.S. Druzhilovskiy, L.A. Stolbov, P.I. Savosina, et al., Supercomp. Front. Innov. 2020, 7, 57-76.
- [5] N. Iонов, P. Pogodin, V. Poroikov, Biomedical Chemistry: Research and Methods. 2020, 3, e00140.