

Наука на будущее



В XX веке на разработку нового лекарства уходили десятилетия. Сегодня с помощью самых современных технологий этот длительный и трудоемкий процесс удалось значительно сократить. Именно этим занимается молодой ученый Объединенного института проблем информатики Национальной академии наук и по совместительству ученый секретарь Совета молодых ученых НАН Беларуси Анна Карпенко. Разработанная ее командой методика создания потенциального лекарства от коронавируса вошла в топ-10 лучших результатов ученых

Академии наук за 2020 год. Корреспондент «Р» узнала подробности.

Анна Карпенко: «Компьютерное моделирование помогает ученым создавать препараты для лечения болезней, до недавнего времени считавшихся трудноизлечимыми или неизлечимыми вовсе».

«Здорово заниматься вещами, которые могут помочь человечеству»

2020-й подтвердил: нет ничего важнее здоровья. Львиная доля лучших инноваций года касалась медицинской и фармацевтической сфер. На первых строчках научного рейтинга — разработки в области поиска лекарства и вакцины от коронавирусной инфекции. Команда Анны Карпенко предложила свой подход к решению проблемы, приняла участие в европейском конкурсе по компьютерному моделированию лекарств против коронавируса JEDI-COVID Grand Challenge. Из 150 команд только одна команда из Беларуси смогла оказаться в составе финалистов.

Анна рассказала о том, как компьютерное моделирование помогает создавать препараты для лечения болезней, еще недавно считавшихся трудноизлечимыми или неизлечимыми вовсе:

— По оценкам экспертов, инвестиции на создание одного лекарства достигают двух миллиардов долларов. Эти траты окажутся бесполезными, если лекарство не пройдет клинические испытания и не получит допуск на рынок. Компьютерное моделирование помогает фармкомпаниям отказаться от скрининга «бесперспективных» веществ и изучать только эффективные соединения, тем самым сэкономить десятки миллионов долларов.

Эксперименты проводятся *in Silico*, то есть в компьютере. Анна Карпенко пояснила:

— Сейчас разработка лекарств «спустилась» на молекулярный уровень и базируется на таком понятии, как молекулярная мишень. Это конкретная молекула в организме, биохимическая функция которой тесно связана с возникновением и/или развитием определенной патологии. Воздействие на нее молекулой препарата дает терапевтический эффект. Практически у каждого заболевания существует своя молекулярная мишень и даже несколько. Проанализировав сотни миллионов химических соединений, компьютер способен найти те из них, которые могут уничтожить или заблокировать конкретную мишень. Компьютерное моделирование помогает осуществлять, по сути, те же процессы, которые проходят в реальном эксперименте в пробирке. Только позволяет делать это значительно быстрее и

дешевле... Пандемия показала значимость компьютерного моделирования лекарств, когда нужны быстрые и эффективные решения.

На факультете радиофизики и компьютерных технологий БГУ Анна училась на кафедре интеллектуальных систем. Затем была практика в ОИПИ в лаборатории распознавания и синтеза речи и знакомство с таким популярным направлением работы института, как биоинформатика, в частности, драг-дизайн. То есть направленное конструирование новых лекарственных препаратов с использованием методов компьютерного моделирования. Молодой ученый занимается этим уже более двух лет:

— Мне это направление показалось очень интересным. Это актуальная тематика, применяется во всех ведущих фармацевтических компаниях мира... Помимо научного аспекта, в нашей работе есть социальная составляющая. Это здорово — заниматься вещами, которые могут помочь человечеству.

Компьютерные технологии против рака

Ученые находятся в постоянном поиске путей повышения эффективности лекарств. И помогают им в этом компьютеры. Точнее, суперкомпьютеры, способные выполнять квадриллионы операций в секунду. Сейчас команда работает дистанционно. У каждого сотрудника есть удаленный доступ, который позволяет прямо из дома связаться с Национальным суперкомпьютерным центром и произвести нужные расчеты. Анна Карпенко уверена, что самые невероятные и гениальные открытия рождаются на стыке наук:

— Наши исследования лежат в междисциплинарной плоскости, поэтому в команду входят физики, математики, биологи, химики и программисты. Научные руководители нашей группы также трудятся в разных научных областях. Александр Андрианов — доктор химических наук, а Александр Тузиков — доктор физико-математических наук.

Молодые ученые дружны не только на работе, но и за стенами института. Любят устраивать совместные поездки, участвуют в квизах и квестах... Собеседница признается, что это большая удача, когда коллеги — твои друзья. Это повышает продуктивность деятельности.

Несмотря на медийность коронавирусной тематики, одно из ключевых направлений работы Анны Карпенко — поиск универсального лекарства от рака. Проблема стоит остро. Судите сами: по данным ВОЗ, онкология занимает второе место в мире среди причин смертности. До сих пор многие виды рака вообще не поддаются лечению.

— Онкологической тематикой мы занимаемся около двух лет. Сейчас ищем химические соединения, способные подавить развитие хронического миелолейкоза (ХМЛ). Это злокачественное заболевание крови. Мы завершили первый этап. Идентифицировали ряд соединений и продолжаем работу по поиску еще более эффективных соединений для лечения ХМЛ. В перспективе нам бы хотелось найти соединение, обладающее широким спектром онкологического действия в отношении любых видов рака, — поделилась Анна.

От собеседницы узнаю о ее работе с теломеразой. Со школьного курса биологии мы знаем, что этот фермент поддерживает способность клеток к делению. Теоретически, если научиться управлять активностью теломеразы, например, запускать ее в клетках изношенных или поврежденных органов, можно добиться омоложения всего организма. Пока это что-то из области фантастики, но деятельность по изучению способов регуляции активности теломеразы ведется во всем мире.

— Главной особенностью раковых клеток является способность к бесконечному делению, благодаря чему эти клетки не стареют. Ответственной за такое свойство Инна Горбатенко. Наука на будущее

раковых клеток является теломераза, активность которой обнаружена в 90 процентах раковых клеток. Блокируя активность данного фермента, можно было бы остановить бесконтрольное деление клеток опухоли. Основной проблемой, тормозящей разработку лекарств, действующих на теломеразу, является отсутствие экспериментальных данных о ее трехмерной структуре. Это не позволяет опытным путем исследовать механизм влияния того или иного соединения на нее. В компьютерном эксперименте нам удалось на основе структуры нескольких фрагментов воссоздать трехмерную структуру целого фермента, — рассказала Анна Карпенко.

Параллельно ученые работают над созданием препаратов для борьбы с ВИЧ. В этом направлении они активно используют искусственный интеллект (ИИ). Анна уверена, что за ИИ будущее.

Апгрейд для лекарств

Нередко к команде ученых обращаются лаборатории и научные центры Саудовской Аравии, Китая и других стран, чтобы проверить эффективность разрабатываемых ими соединений методом компьютерного моделирования. И ребята охотно помогают. Не исключено, что такие коллаборации ускорят поиск новых лекарств. Говоря о планах на будущее, собеседница не скрывает желаний усовершенствовать методы анализа:

— Хотелось бы сделать такой программный пакет, который будет доступен любому пользователю, будь то состоявшийся ученый или студент. Пока мы имеем дело с большим объемом ПО, которое нуждается в доработках и оптимизации для применения. Повысить точность, снизить процент ошибки... Особенно много работаем над этими задачами последние восемь месяцев. Наша основная цель — выход на рынок и выпуск лекарства.

Напоследок разговор заходит о критиках. Нет-нет, да найдется тот, кто отнесется к деятельности наших ученых с некой долей скепсиса. Анна Карпенко связывает такие настроения с банальной неосведомленностью:

— Мы много работаем над тем, чтобы сделать науку открытой, в том числе с помощью публикаций в СМИ. В доступной форме рассказываем людям о своих разработках. Не просто о планах, а о конкретных реализованных проектах. А всех скептиков я бы хотела пригласить на Фестиваль науки, который традиционно проходит в сентябре. Там выставляются лучшие разработки белорусских ученых. После посещения выставки никаких вопросов к нашей науке у скептиков не останется.