

Нобель с высоким содержанием белка

Автор: Александр Воронов, Полина Ячменникова

Награду получили биохимик и разработчики модели ИИ

Шведская королевская академия наук огласила в среду имена очередных нобелевских лауреатов. Награду по химии разделили американские и британские ученые Дэвид Бейкер, Джон Джемпер и Демис Хассабис, получившие ее за компьютерное моделирование структуры белков и модели искусственного интеллекта (ИИ) в этой области. Их исследования пригодятся в медицине, поясняют в Нобелевском комитете,— например, для понимания процессов устойчивости к антибиотикам. Опрошенные “Ъ” эксперты говорят, что исследования лауреатов ужегодились в ходе разработки вакцин во время пандемии коронавируса.

Лауреатами Нобелевской премии по химии стали американский биохимик Дэвид Бейкер и два представителя Google DeepMind (дочерняя компания Google) — Демис Хассабис и Джон Джемпер. 62-летний уроженец Сиэтла господин Бейкер получил докторскую степень в 1989 году в Калифорнийском университете в Беркли, а сейчас трудится профессором Вашингтонского университета в Сиэтле. Американскому ученому удалось создать «совершенно новые виды белков», говорится в пресс-релизе Нобелевского комитета. «Белки обычно состоят из 20 различных аминокислот, которые можно описать как строительные блоки жизни»,— поясняется в коммюнике комитета, где добавляют, что в 2003 году господину Бейкеру удалось с помощью «этих блоков» разработать «новый, ни на кого не похожий белок». В Нобелевском комитете его открытие называют «почти невозможным подвигом».

В свою очередь, 48-летний британский исследователь, гендиректор Google DeepMind Демис Хассабис и его более молодой 39-летний коллега по этой компании из США Джон Джемпер разработали модель искусственного интеллекта для предсказания сложных структур белков. Председатель Нобелевского комитета по химии Хайнер Линке отметил, что с проблемой не могли справиться 50 лет, и «мечта исполнилась».

«Они взломали код структур белков»,— описывают открытия лауреатов в коммюнике комитета. Там поясняют, что с помощью модели ИИ (названной AlphaFold2) ученые смогли предсказать структуру почти всех 200 млн белков, которые они исследовали.

Сама модель ИИ была представлена в 2020 году, и с тех пор ее уже использовали 2 млн человек из 190 стран. В Нобелевском комитете поясняют, что с помощью

AlphaFold2 ученые смогут лучше понять, например, причины устойчивости организмов к антибиотикам и структуру ферментов, разлагающих пластик.

«Белки — это цепочки из аминокислот. То, из каких аминокислот они состоят, определяется геномом или генами,— поясняет заведующий лабораторией структурного анализа и инжиниринга мембранных систем МФТИ Иван Гущин.— Геном человечество научилось за последние 40 лет очень хорошо читать и расшифровывать, но что делать дальше с этим, не до конца было ясно. Потому что каждый ген кодирует какой-то белок, но на его изучение нужны годы». Разработки ученых Джампера и Хассабиса, по словам Ивана Гущина, позволили эффективно предсказывать структуры белков «в 90% ключевых случаев». «Благодаря их разработкам наше представление о живой природе расширилось многократно на молекулярном уровне»,— добавляет он.

Замдиректора Института интеллектуальных кибернетических систем **НИЯУ МИФИ Валентин Климов** рассказывает, что исследования по теме, отмеченной премией, ведутся и в России — например, в **МИФИ** она изучается как хемоинформатика. «Есть большое количество вариаций лекарственных препаратов и их воздействия на человека. Перебирать все белковые последовательности и взаимодействие на них различных ферментов долго — это миллиарды комбинаций. Благодаря разработкам нобелевских лауреатов заведомо неперспективные комбинации отсеиваются за счет ИИ, то есть он сужает пространство для поиска лекарственных препаратов с нужными характеристиками»,— пояснил господин Климов. По его словам, во время пандемии коронавируса «применялись зачатки таких решений, и это позволило придумывать вакцины не за годы, а за месяцы или даже недели».

Заведующий лабораторией структуры и динамики биомолекул МФТИ Валентин Борщевский говорит, что Нобелевские премии по химии раньше присуждали «просто за выяснение структуры какого-нибудь важного белка». «Но оказалось, что можно довольно удачно применять подходы ИИ для того, чтобы и без экспериментов устанавливать структуру этих белков»,— пояснил он.

При этом ученый подчеркивает, что обычно Нобелевские премии выдают за научные открытия с солидной задержкой, а в данном случае «прошло буквально несколько лет». «Скорость обоснована тем, что сразу всем стало понятно — это очень полезный инструмент»,— полагает господин Борщевский. При этом он добавляет, что исследования лауреатов имеют отношение больше к биологии, чем к химии.

Вручение Нобелевских премий пройдет 10 декабря — в годовщину смерти ее основателя Альфреда Нобеля. Лауреаты премии по химии получат золотые медали и дипломы, а также разделят призовой фонд 11 млн крон (около \$1,1 млн). Прошлогоднюю премию по химии разделили ученые Мартин Карплюс,

Майкл Левит и Ари Уоршел, получившие ее за «развитие многомасштабных моделей комплексных химических систем». Их наработки пригодились, например, в детальном изучении процесса фотосинтеза у растений или в очистке выхлопных газов.

Источник: газета Коммерсант, № 186, 10 октября 2024 года, стр.5

<https://www.kommersant.ru/doc/7214958>