



29.11.2019

Образовательная программа по вычислительной биологии ускорит разработку новых лекарств

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ) разработал дополнительную профессиональную образовательную программу повышения квалификации в области вычислительной биологии. Заказчиком и технологическим партнером при формировании программы выступило ЗАО «БИОКАД» – одна из крупнейших биотехнологических международных инновационных компаний России, объединившей научно-исследовательские центры мирового уровня, современное фармацевтическое и биотехнологическое производство, доклинические и клинические исследования. Поддержку оказал Фонд инфраструктурных и образовательных программ Группы РОСНАНО. К разработке привлекались также специалисты Санкт-Петербургского государственного университета, Федерального университета «ИТМО», компании JetBrains и Калифорнийского университета в Сан-Диего.

БИОКАД – компания полного цикла создания лекарственных препаратов: от поиска молекулы до массового производства и маркетинговой поддержки. Предприятие специализируется на производстве препаратов для терапии онкологических, аутоиммунных и инфекционных заболеваний, также ведет разработки в области терапии других социально значимых заболеваний. В продуктовый портфель входит около шести десятков лекарственных препаратов, четверть из которых – биологические. Еще более 40 продуктов находятся на разных стадиях разработки.

Штат компании – более 2200 человек, около 40% — научные сотрудники и исследователи. В рамках пилотной апробации образовательной программы успешно повысили квалификацию 25 специалистов БИОКАД, специализирующиеся в области вычислительной биологии и биоинформатики.

Программа имеет три 160-часовых модуля, рассчитанных на разработчиков математических моделей и алгоритмов биоинформатики, разработчиков программного обеспечения и специалистов в области статистических методов и машинного обучения.

Потребность в повышении квалификации сотрудников объяснил директор департамента вычислительной биологии БИОКАД **Павел Яковлев**. По его словам, в области точного органического синтеза есть барьер между вычислительными методами и тем, что реально в лаборатории могут синтезировать. Так, в последние 20 лет появились продвинутое вычислительные методы, позволяющие создавать молекулы, которые обеспечивали бы взаимодействие с конкретными белками. Проблема в том, что создать такие молекулы в промышленных условиях



часто оказывается либо невозможно, либо слишком дорого. «Решать задачу нужно с двух сторон: дизайнить такие молекулы, которые физики смогут синтезировать. И здесь не обойтись без машинного обучения, так как все расчеты основаны на квантовой химии, и даже с использованием квантово-химической симуляции реально обсчитать можно не более десяти молекул в неделю, - пояснил Павел Яковлев - И одновременно, надо научить химиков синтезировать нужные молекулы из тех базовых блоков, которые есть в их распоряжении».

В мире все активнее развивается направление, близкое к математическому моделированию как альтернативе клиническим исследованиям. «Нам важно знать, как препарат распространяется по организму человека и как оказывает на него свой специфический эффект. При клинических исследованиях мы вынуждены опираться на выявленные в результате взятия анализов отдельные показатели, закладывая их в дифференциальные уравнения. Но иногда эти простые модели не могут описать поведение тех или иных препаратов в организме. Их концентрации могут после периода некоторого снижения начать повышаться, и только затем падать вновь: препарат уходит из плазмы крови в клетки организма, а затем возвращается обратно. Это требует разработки совершенно новых моделей», - рассказал Павел Яковлев о задачах, которыми придется заниматься специалистам, повысившим квалификацию.

«Основные наши компетенции, которые мы передаем специалистам BIOCAD, - это алгоритмические основы биоинформатики, создание и сопровождение программных продуктов, сбор и анализ данных, машинное обучение с использованием нейронных сетей», - пояснил руководитель коллектива разработчиков программы, профессор, декан факультета Санкт-Петербургской школы физико-математических и компьютерных наук НИУ ВШЭ **Александр Омельченко**. При этом разработчикам пришлось изучить специфику задач, язык и алгоритмы, с которыми работает компания BIOCAD.

ВШЭ в Санкт-Петербурге договорилась с BIOCAD, что все совместные наработки будут положены в основу корпоративной магистерской программы. Уже в следующем году программа может стать частью образовательного трека для студентов ВШЭ. Не исключено, что в 2021 году появится совместная с BIOCAD магистратура. Компания заинтересована в создании постоянно действующего механизма воспроизводства квалифицированных кадров. «С магистерской программы мы можем забирать к себе в компанию минимум по пять человек в год», - заверил Павел Яковлев.

Сотрудничество BIOCAD, часть производственных мощностей и R&D-подразделения которого расположены в поселке Стрельна Петродворцового района Санкт-Петербурга, с ВШЭ полностью поддержал заместитель директора образовательных проектов и программ Фонда **Станислав Нисимов**, обратив внимание на большие перспективы развития полученных наработок: «Спрос на биомоделирование существенный, в том числе, например, в аграрном секторе. Модули машинного обучения и анализа больших данных обязательно будут востребованы в самых разных секторах, в том числе в нефтедобыче».



Фонд инфраструктурных и образовательных программ создан в 2010 году в соответствии с Федеральным законом № 211-ФЗ «О реорганизации Российской корпорации нанотехнологий». Целью деятельности Фонда является развитие инновационной инфраструктуры в сфере нанотехнологий, включая реализацию уже начатых РОСНАНО образовательных и инфраструктурных программ.

Высшим коллегиальным органом управления Фонда является Наблюдательный совет. Согласно уставу Фонда, к компетенции совета, в частности, относятся вопросы определения приоритетных направлений деятельности Фонда, его стратегии и бюджета. Председателем Правления Фонда, являющегося коллегиальным органом управления, является Председатель Правления ООО «УК «РОСНАНО» **Анатолий Чубайс**, генеральным директором Фонда — **Андрей Свиначенко**.

Подробнее о Фонде – www.fiop.site.