

חוקרים ישראלים פיתחו מערכת בינה מלאכותית לקיצור ייצור תרופות והוזלתן

המערכת שפיתחו ד"ר קירה רדינסקי ושחר הראל מהטכניון משתמשת בידע קיים על מולקולות עם פוטנציאל תרופתי ומציעה אפשרויות לתרופות חדשות. רדינסקי: "היא תקצר את ההמתנה לתרופות"

עידו אפרתי 15.08.2018 07:21

חוקרים בטכניון פיתחו מערכת חכמה לפיתוח תרופות חדשות, שצפויה לדבריהם לקצר ולהוזיל את תהליך יצירתן באופן דרמטי. המערכת עושה שימוש בבינה מלאכותית ולמידה עמוקה (Deep Learning) על מנת לקצר את השלב הראשון בפיתוח תרופה, הכולל סריקה של מספר עצום של מולקולות ואיתור אלו שיש בהן פוטנציאל רפואי. המערכת, שפיתחו ד"ר קירה רדינסקי מהפקולטה למדעי המחשב בטכניון וסטודנט המחקר שחר הראל, עושה שימוש בידע כימי ורפואי קיים על מנת להציע אפשרויות לתרופות חדשות.

הקושי הקיים היום בתהליך פיתוח התרופות נובע מכך שמספר המולקולות שיש להן פוטנציאל לשמש לתרופות הוא עצום: בין 10 בחזקת 23 ל-10 בחזקת 60. לשם השוואה, מספר הכוכבים ביקום הנצפה כולו נאמד בכ-10 בחזקת 22. לאור זאת, נהוג לקצר את תהליך הפיתוח באמצעות צמצום החיפוש הראשוני למולקולות שכבר מאופיינות בתכונות הרצויות. אך גם לאחר סינון זה, מדובר בכמות עצומה של מולקולות כך שעלות הפיתוח עשויה להגיע למיליארדי דולרים, והוא יכול להימשך יותר מעשור. בנוסף, מתוך כעשרת אלפים מולקולות שמתחילות את דרכן במעבדה, רק 250 מגיעות לשלב הניסויים הקליניים, ומאלה רק אחת הופכת בסוף לתרופה שמאושרת ומשווקת.

"אם בעבר התגלו תרופות חדשות במקרה - גילוי הפניצילין הוא הדוגמה המפורסמת ביותר - הרי שכיום התהליך מחושב ומערכתי יותר", הסבירה רדינסקי, "תחילתו בסריקה של מולקולות רבות כדי לבחור מתוכן את אלה שיש להן פוטנציאל רפואי משמעותי".

במחקר מציגים רדינסקי והראל גישה חדשה ליצירת מולקולות בעלות פוטנציאל תרופתי. "נקודת המוצא היא ש'אוצר המלים' של הכימיה האורגנית, הרלוונטית לפיתוח תרופות, פועל בדומה לאוצר המלים של השפה הטבעית", אמרה רדינסקי. החוקרים הזינו לתוך המערכת את ההרכב הכימי של כל התרופות שאושרו מאז 1930 וכן את "השפה הכימית" שמשמשת לייצור תרופות - ועל בסיס זה המערכת מציעה וריאציות רבות לכל תרופה קיימת.

"אותן תרופות קיימות היוו עבור המערכת אב-טיפוס שעל בסיסו היא יצרה וריאציות שונות – תרופות פוטנציאליות חדשות", אמרה רדינסקי. "כדי שהמערכת תהיה יצירתית הכנסנו לה במתכוון 'רעש' היוצר שונות". כך, לדוגמה, הנחו החוקרים את המערכת להציע אלף תרופות חדשות המבוססות על תרופות ישנות. מתוך התרופות שהציעה המערכת, 35 כבר קיימות וזכו בעבר לאישור ה-FDA (מינהל המזון והתרופות האמריקאי).

"למעשה אנחנו מציגים כאן אלגוריתם שמספק את השלב היצירתי בפיתוח התרופה, שלב המצאת המולקולה", אמרה רדינסקי. להערכת החוקרת, "המערכת החדשה תאיץ ותוזיל את פיתוחן של תרופות חדשות ויעילות, וכך תקצר את זמן ההמתנה של החולים לתרופות אלה. יתר על כן, הפיתוח החדש צפוי להוביל לפיתוח תרופות שלא היו נוצרות בפרדיגמה הפרמקולוגית המסורתית".

רדינסקי סבורה שהמערכת לא רק מייעלת את השיטה הקיימת במחקר התרופתי, אלא מהווה פרדיגמה חדשה לפיתוח תרופות ולפרקטיקה המדעית בכלל. "במקום לחפש קשרים ספציפיים על סמך השערות שניסחנו בעצמנו, אנחנו נותנים למחשב למצוא קשרים כאלה ללא הכוונה ועל סמך מדגם עצום", הסבירה. "המחשב אינו חכם יותר מהאדם, אבל הוא מסוגל להתמודד עם כמות עצומה של נתונים ולמצוא קישורים בלתי צפויים. כך הצלחנו, למשל, במחקר קודם שערכנו, למצוא תופעות לוואי בלתי ידועות של תרופות ושל שילובי-תרופות שונים, וכעת גם להציג מנגנון לפיתוח תרופות חדשות. כאמור, יש כאן מדע מסוג חדש לגמרי, שאינו עובד על פי המסלול המדעי המוכר - של השערה מוקדמת הנבדקת בניסוי הפוך - הנתונים הם שקובעים את השערת המחקר".