



CAA科普  
POPULAR SCIENCE WORK

科普新闻

科普知识

科普教育基地 +

科学传播专家团队

首页 - CAA科普 - 科普知识

## 人工智能“自己”定制新蛋白质

日期：2022-09-06 15:20

在过去两年中，机器学习彻底改变了蛋白质结构预测。现在，《科学》杂志上的3篇论文描述了蛋白质设计方面的革命：华盛顿大学医学院生物学家的研究表明，机器学习可比以前更准确、更快速地创建蛋白质分子。科学家们希望这一进步将带来更多新的疫苗、疗法、碳捕获工具和可持续生物材料。

论文资深作者、华盛顿大学医学院生物化学教授、2021年生命科学突破奖获得者大卫·贝克表示，蛋白质是整个生物学的基础，但迄今在每种植物、动物和微生物中发现的蛋白质，远不到所有可能蛋白质的百分之一。有了这些新的软件工具，研究人员应该能够找到解决医学、能源和技术方面长期挑战的方案。

为了超越自然界中发现的蛋白质，贝克团队成员将蛋白质设计的挑战分解为3个部分，并为每个部分使用新的软件解决方案。

首先，必须生成新的蛋白质形状。在《科学》杂志上稍早发表的论文中，该团队设计人工智能（AI）通过两种方式生成新的蛋白质形状：第一种称为“幻觉”，类似于基于简单提示就能产生输出的工具；第二种称为“修复”，类似于现代搜索栏中的自动完成功能。

其次，为加快这一过程，团队设计了一种生成氨基酸序列的新算法。15日发表的论文描述了这个名为ProteinMPNN的工具，运行时间约为1秒，比以前最好的软件快200多倍。它不但结果优于以前的工具，还不需要专家定制即可运行。

第三，该团队使用“深度思维”公司开发的“阿尔法折叠”来独立评估他们提出的氨基酸序列是否可能折叠成预期的形状。

研究人员表示，预测蛋白质结构的软件是解决方案的一部分，但它本身无法提出任何新的东西。ProteinMPNN之于蛋白质设计，就像“阿尔法折叠”之于蛋白质结构预测。

在另一篇论文中，贝克实验室的一个团队证实，新机器学习工具的组合能可靠地生成在实验室中起作用的新蛋白质。

研究发现，新制造的蛋白质更有可能按预期折叠，因此可使用这一方法创建非常复杂的蛋白质组装体。“这是蛋白质设计中机器学习的开端。”贝克说。

来源：科技日报

地址: 北京中关村东路95号 邮编: 100190 电话: 010-82544542 传真: 010-62522248

2022中国自动化大会 2021中国自动化大会 中国机器人大赛暨RoboCup机器人世界杯中国赛