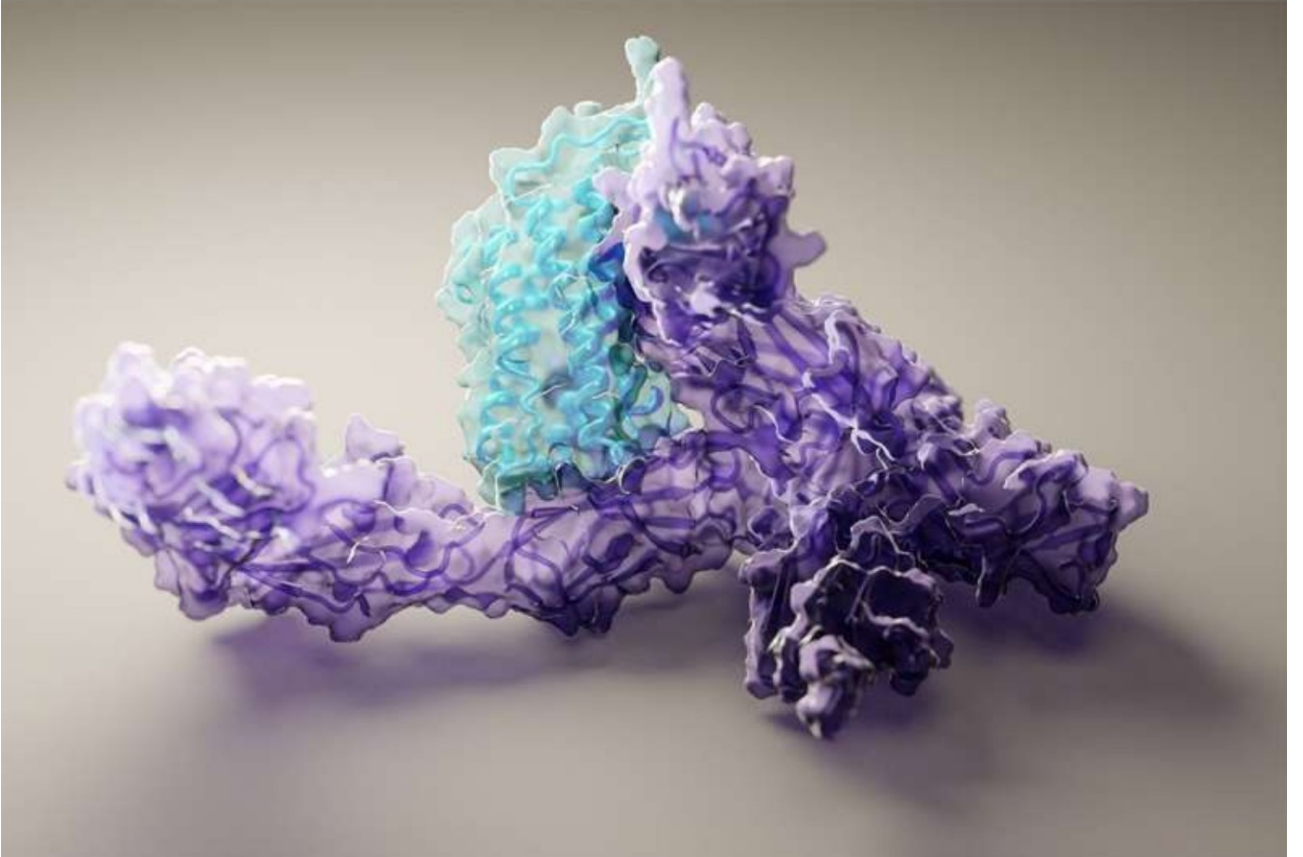


Yeni yapay zeka yazılımı 10 dakikada protein yapılarını hesaplıyor

Washington Üniversitesi Tıp Fakóltesi

Protein tasarım arařtırmacıları, reseptörüne baēlı insan interlökin-12'nin bu 3 boyutlu görüntüsü de dahil olmak üzere yüzlerce yeni protein yapısı oluşturmak için yapay zekayı kullandı.



Reseptörüne baēlı insan interlökin-12'nin 3 boyutlu görüntüsü.

Kredi: Ian Haydon, UW Tıp Protein Tasarımı Enstitüsü

DeepMind, 2020 Critical Assessment of Structure Prediction (CASP14) konferansında bu alanda kayda deēer bir ilerleme sunduēundan, bilim adamları daha önce son derece doēru protein yapısı tahminine eriřmek için aylarca bekliyorlardı. Artık bu bekleyiřleri sona erdi.

Seattle'daki Washington Üniversitesi Tıp Fakültesi'ndeki Protein Tasarımı Enstitüsü'ndeki araştırmacılar, bu önemli görevde DeepMind tarafından elde edilen performansı büyük ölçüde yeniden yarattılar. Bu sonuçlar Science dergisi tarafından 15 Temmuz Perşembe günü çevrimiçi olarak yayınlandı.

DeepMind'den farklı olarak, UW Medicine ekibinin RoseTTAFold olarak adlandırdıkları yöntemi bilim insanları ücretsiz olarak kullanabilir. Dünyanın dört bir yanından bilim adamları artık kendi araştırmalarını hızlandırmak için protein modelleri oluşturmak için bu yöntemi kullanıyor.

Temmuz ayından bu yana program, 140'tan fazla bağımsız araştırma ekibi tarafından GitHub'dan indirildi.

Proteinler, karmaşık mikroskobik şekillere katlanan amino asit dizilerinden oluşur.

Bu benzersiz şekiller sırayla canlı organizmaların içindeki hemen hemen her kimyasal sürece yol açar. Bilim adamları, protein şekillerini daha iyi anlayarak kanser, COVID-19 ve diğer binlerce sağlık bozukluğu için yeni tedavilerin geliştirilmesini hızlandırabilir.

"Protein Tasarımı Enstitüsü'nde, COVID-19 ilaçları ve aşıları tasarlamak ve bunları klinik deneylere başlatmak ve yüksek doğrulukta protein yapısı tahmini için RoseTTAFold'u geliştirmek için yoğun bir yıl geçirdiler.

Washington Üniversitesi Tıp Fakültesi'nde biyokimya profesörü, Howard Hughes Tıp Enstitüsü araştırmacısı ve Enstitü direktörü kıdemli yazar David Baker, Protein Tasarımı gibi bilim camiasının olağanüstü biyolojik sorunları çözmek için halihazırda RoseTTAFold sunucusunu kullanıyor olmasından memnunuz" dedi.

Yeni çalışmada, Baker liderliğindeki bir hesaplamalı biyolog ekibi, RoseTTAFold yazılım aracını geliştirdi. Sınırlı bilgilere dayalı olarak protein yapılarını hızlı ve doğru bir şekilde tahmin etmek için derin öğrenmeyi kullanmakta olan yazılım.

Böyle bir yazılımın yardımı olmadan, sadece bir proteinin yapısını belirlemek için yıllarca laboratuvar çalışması gerekebilirken.

RoseTTAFold ise tek bir oyun bilgisayarında on dakika gibi kısa bir sürede bir protein yapısını güvenilir bir şekilde hesaplayabiliyor.

Ekip, insan genomunda çok az anlaşılmış proteinler de dahil olmak üzere yüzlerce yeni protein yapısını hesaplamak için RoseTTAFold'u kullandı. Ayrıca problemli lipid metabolizması, iltihaplanma bozuklukları ve kanser hücresi büyümesi ile ilişkili proteinler dahil olmak üzere insan sağlığı ile doğrudan ilgili yapılar da ürettiler.

Yazılımcılar RoseTTAFold'un, daha önce gerekli olan zamanın kısa bir bölümünde karmaşık biyolojik düzeneklerin modellerini oluşturmak için kullanılabileceğini gösteriyorlar.

RoseTTAFold, "üç yollu" bir sinir ağıdır, yani aynı anda protein dizilerindeki kalıpları, bir proteinin amino asitlerinin birbirleriyle nasıl etkileşime girdiğini ve bir proteinin olası üç boyutlu yapısını dikkate alır.

Bu mimaride, bir, iki ve üç boyutlu bilgi ileri geri akar, böylece ağın, bir proteinin kimyasal parçaları ve katlanmış yapısı arasındaki ilişki hakkında toplu olarak akıl yürütmesine izin verir.

UW Medicine'deki Baker laboratuvarında projeyi yöneten doktora sonrası araştırmacı Minkyung Baek, "Bu yeni aracın tüm araştırma topluluğuna fayda sağlamaya devam edeceğini umuyoruz" dedi.