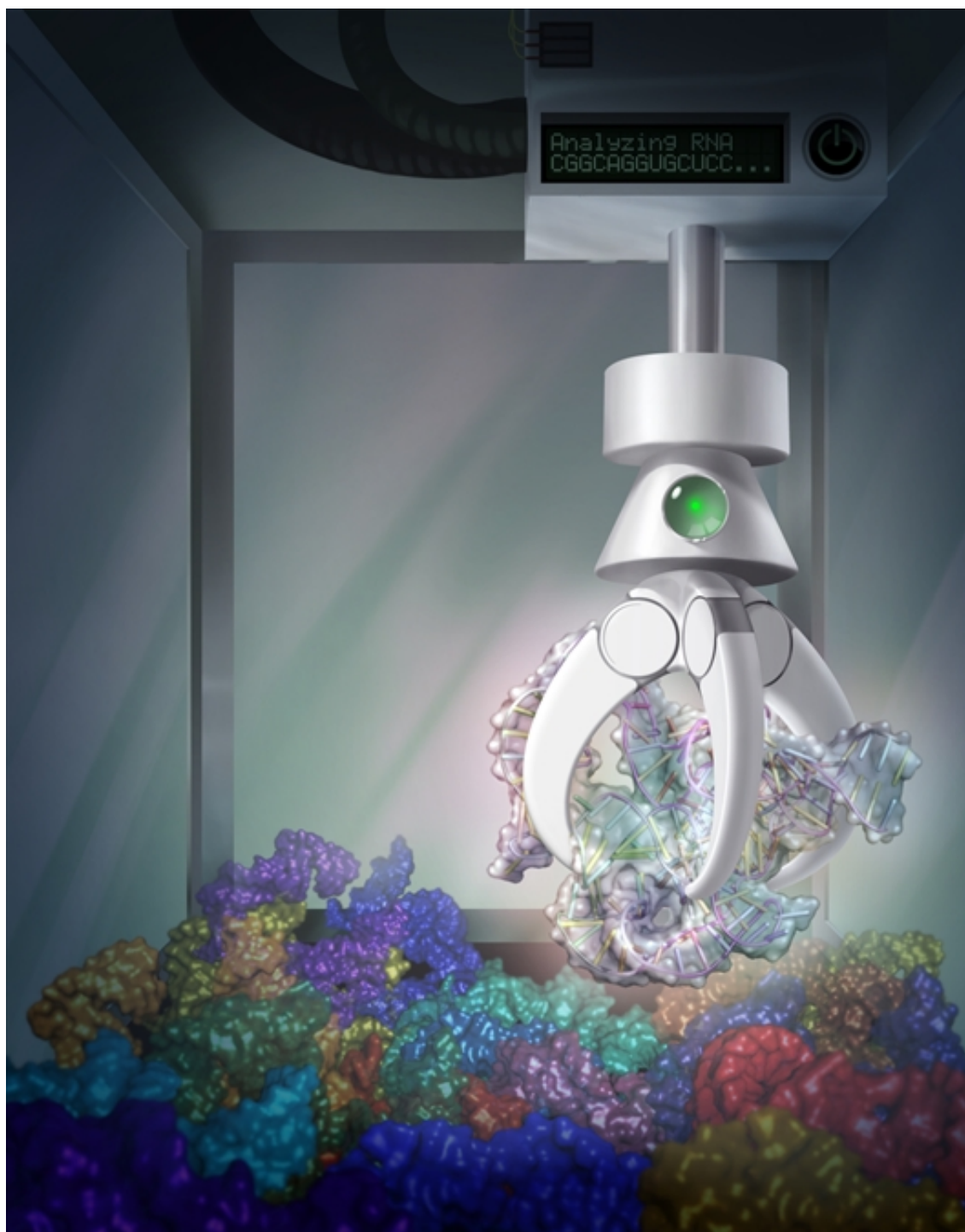

人工智能算法解决结构生物学挑战

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/15454.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

人工智能算法解决结构生物学挑战。



一种新的人工智能算法可以从诸多错误形状中识别出RNA分子的3D形状。
图片来源：斯坦福大学/Camille L.L. Townshend

确定生物分子的三维形状是现代生物学和医学研究中最困难的问题之一。研究人员经常要花费数百万美元来确定分子结构——即使如此成本高昂的努力也经常失败。

近日，美国斯坦福大学博士Stephan Eismann和Raphael Townshend在计算机科学副教授Ron Dror的

指导下，使用新机器学习技术，开发了一种方法，通过计算预测精确分子结构，从而帮助克服这个问题。

最值得注意的是，即使只从少数已知结构中进行学习该人工智能新方法仍然成功，这使得它适用于那些结构最难以通过实验确定的分子类型。

相关论文8月27日刊登于《科学》。连同之前发表在《蛋白质》上的论文，研究人员详细介绍了该技术在RNA分子和多蛋白复合物领域的应用。

结构生物学是研究分子形状的学科，它有一个信条，即结构决定功能。Townshend说，该算法可以预测精确的分子结构，从而科学家可以解释不同分子是如何工作的，应用范围从基础生物学研究到药物设计实践。

蛋白质是执行各种功能的分子机器。为了执行它们的功能，蛋白质经常与其他蛋白质结合。Eismann说。如果你知道一种疾病涉及一对蛋白质，你知道它们在3D中如何相互作用，你可以尝试用药物非常具体地针对这种相互作用。

研究人员表示，机器学习领域最近取得的大多数显著进展都需要大量数据进行训练。这种新方法在很少训练数据的情况下能取得成功，这表明，相关方法可以解决许多数据匮乏的领域中未解决的问题。

一旦你掌握了这种基本技术，你就可以提高对下一步的理解水平，并开始提出下一组问题。Townshend说。（来源：中国科学报唐一尘）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1126/science.abe5650>

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。

作者：Stephan Eismann 来源：《科学》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发