

---

# 人工智能设计出致密蛋白质外壳

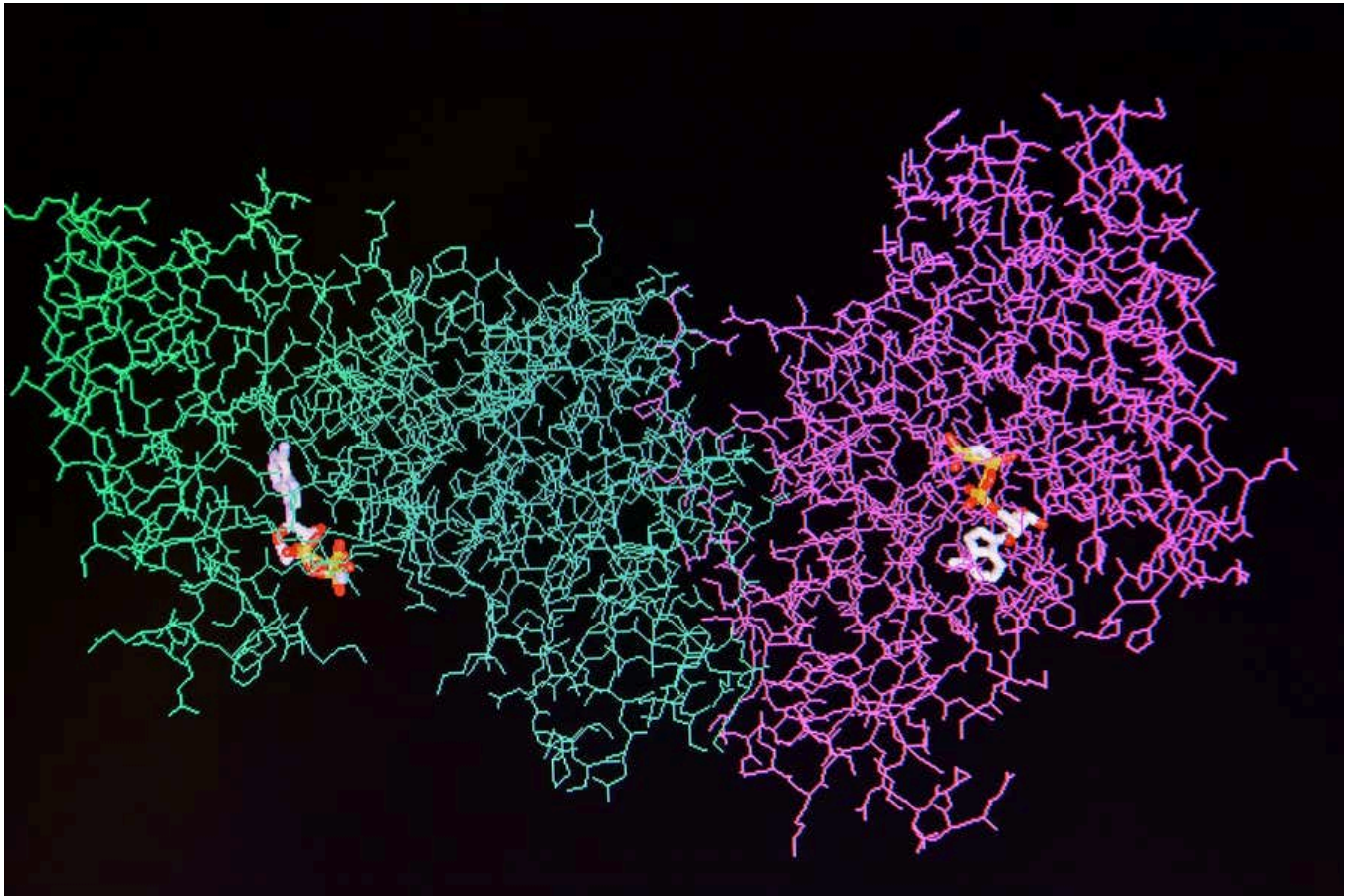
作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/22895.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！*

人工智能设计出致密蛋白质外壳。

4月20日，一项发表于《科学》的研究显示，人工智能可以设计出密度极高的蛋白质外壳，有朝一日能制造更有效的疫苗。



图片来源：Shutterstock/Sergei Drozd

病毒的遗传物质位于蛋白质外壳中。在实验室里制造的类似外壳也被用于疫苗中，只不过它包裹的是在体内引发免疫反应的分子。

---

这些人造外壳的化学和生物特性取决于它们的结构。但无论结构中有多小的缺陷，都会降低其效率，导致不稳定，并在细胞内发生不可预测的反应。美国西雅图华盛顿大学的Isaac Lutz和同事想看看使用人工智能是否可以使这些外壳的设计和制造更加精确。

研究人员首先向人工智能提出了他们希望外壳具有的结构，比如尺寸和孔隙度。人工智能随后使用了强化学习。这与人工智能系统通过尝试不同的动作，然后接收、反馈并重试，来学习下棋等游戏的迭代过程相同。

在这里，人工智能的动作是将名为 螺旋的小蛋白质结构组合、折叠和缠绕成20面的外壳，然后检查得到的设计是否具有人们所需的结构。

在人工智能设计出数十万个外壳后，研究人员在实验室中创造了大约350个外壳。他们用电子显微镜对它们进行检查，发现人工智能制造的外壳比以往任何时候都致密。

Lutz解释说，这是因为它开始于从非常小的构建件。研究人员以前使用更大的蛋白质结构，而这些构建件可以比它们更整齐地组合在一起。

这就像我们以前必须先购买蛋白质乐高积木一样，你能建造的东西受到它们如何组合在一起的限制。而现在我们可以说出想要建造什么，然后人工智能就设计并连接完成这一目标所需的确切的乐高积木。他说。

为了测试高密度如何影响外壳在活细胞中的使用，研究小组在外壳上镶嵌了不同的分子，并将其插入小鼠体内。

值得注意的是，在一项针对触发流感抗体产生的分子实验中，与目前正在临床试验的一些传统候选疫苗相比，人工智能设计的外壳导致免疫反应小幅增加，但在统计上却是显著的。

Lutz表示，这是因为人工智能方法的精确性。每个分子都精准地处于需要其在外壳的位置，外壳的结构足够坚固，可以支撑其中许多分子。

这个团队能做到这一点令人震惊。英国纽卡斯尔大学的Martin Noble说，设计出折叠正确的单个蛋白质需要数十亿年，但将蛋白质折叠得如此完美，使其紧密结合并形成封闭结构，是另一种复杂程度。

密歇根大学的Yang Zhang表示，除了疫苗之外，人工智能设计的蛋白质外壳还可以用于基因治疗，将遗传物质放置于特制的外壳内，让患者的细胞不会对其产生不利反应。(来源：中国科学报王方)

相关论文信息：<https://doi.org/10.1126/science.adf6591>

作者：Isaac Lutz 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](http://www.iikx.com)转发