

AI“造肽大师”问世，高效定制理想抗菌肽

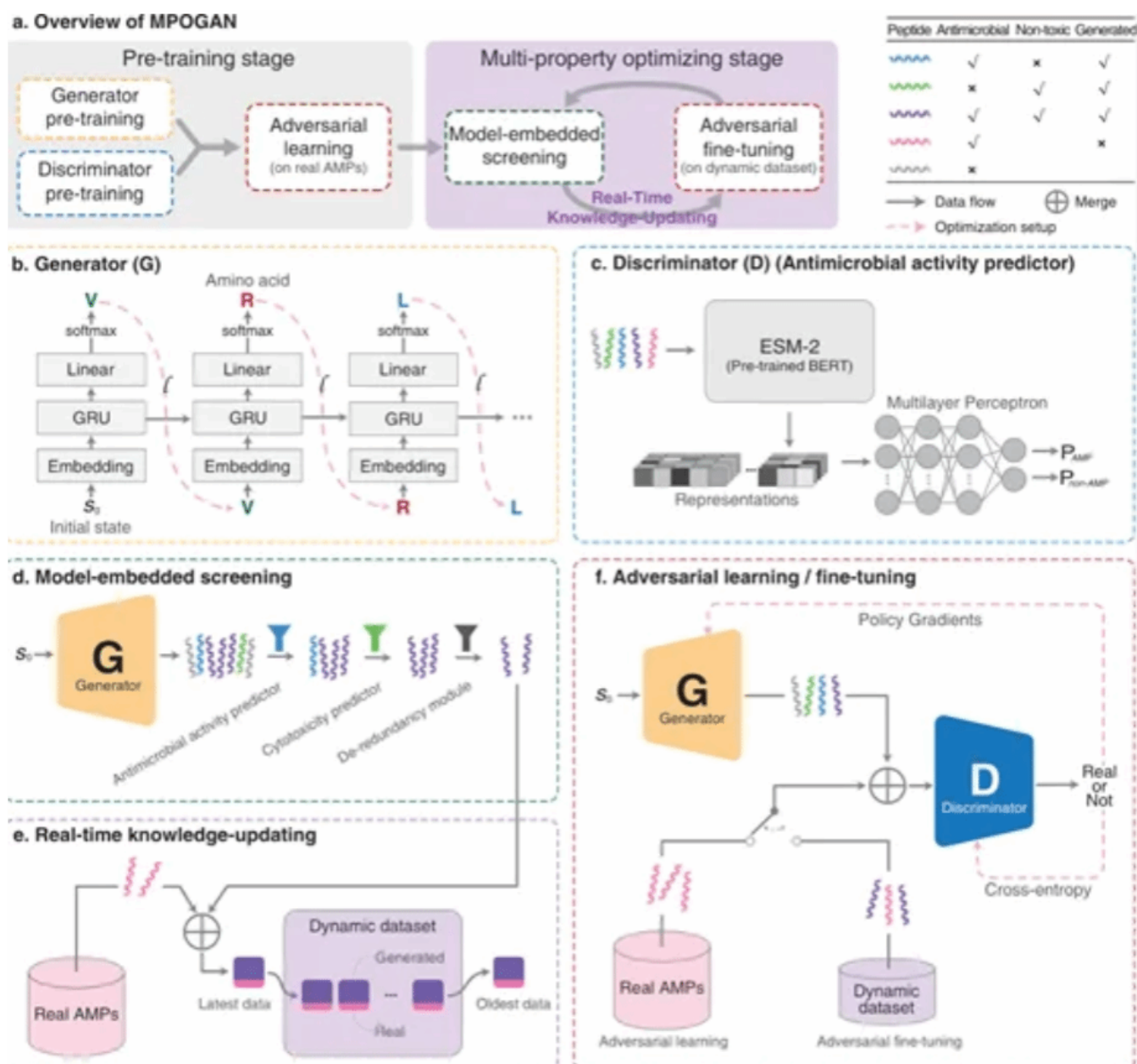
作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/36722.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！

AI“造肽大师”问世，高效定制理想抗菌肽。近日，西北工业大学计算机学院科学智能交叉研究中心研究成果发表于《先进科学》期刊。该论文提出了面向抗菌肽多属性同步优化的生成对抗网络（MPOGAN），通过设计嵌入式和串联式的属性评估器，筛选生成模型生成的高质量肽序列，并提出实时知识更新（RTKU）策略，动态更新训练数据集，从而迭代学习肽序列与多种治疗属性之间的关系，使生成模型逐渐具备生成具有多种优良属抗菌肽的能力。

抗菌肽（AMP）是一类具有抗菌活性的小分子多肽药物，由于其广谱抗菌特性且不易诱导细菌产生耐药性，逐渐成为应对全球细菌耐药性问题的研究方向。然而，抗菌肽从头设计领域目前仍面临诸多挑战。实验室合成抗菌肽的过程耗时且成本高昂；且抗菌肽不同属性之间可能存在冲突，使得现有计算方法难以同时优化多种目标特性（如抗菌活性、低毒性和序列多样性等）。



总体框架图。西北工业大学供图

实验结果表明，MPOGAN在生成满足多种目标属性（高抗菌活性、低毒性和序列多样性）的抗菌肽方面优于现有方法。通过与该校生命学院合作，研究团队合成了10条候选抗菌肽，并进行了体外测试，结果显示其中9条AMP表现出较高的抗菌活性和低细胞毒性，其中2条肽展现出强效、广谱抗菌活性和更低的细胞毒性。进一步的抗耐药菌实验、膜破裂电镜实验和分子动力学模拟结果表明，最具潜力的1条肽（MPOP-03）具有良好的安全性和选择性，并对多种耐药菌株表现出显著的抗菌活性。

上述结果表明，MPOGAN为多属性优良抗菌肽的从头设计提供了一种高效的人工智能工具，大幅提升了生物实验验证成功率。（来源：中国科学报 李媛）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1002/advs.202503443>

作者：彭佳杰等 来源：《先进科学》

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