机器学习能发现新型抗生素

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/8411.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！

机器学习能发现新型抗生素。

尽管人们一直担忧抗生素耐药问题，但由于对新分子的鉴定日益困难，实际上发现新抗生素药物的速度相当缓慢。最近，科学家们利用机器学习开发了一种可快速、高效挖掘新型抗生素的方法，相关研究发表在《细胞》上。

麻省理工学院 (MIT) 的合成生物学家James Collins及他的团队，利用已知可抑制大肠杆菌 (E. coli) 生长的化合物，训练深度神经网络以鉴定可能的抗生素分子，该网络再利用上述数据筛查现有化学库中的其他分子，进而计算这些化合物抑制大肠杆菌生长的可能性。

研究人员发现，在他们优先检测的化合物中，近50%都能够在体外一定程度地抑制大肠杆菌增殖。而其中一种化合物较为特别——halicin，它与传统抗生素在结构上大相径庭，并能够以一种临床抗生素中不常见的机制在小鼠体内对抗多种人类病原体，其中包括艰难梭菌和鲍曼不动杆菌。

此前，尽管有大量化学库中的分子可作为筛选新型抗生素的潜在来源，但研究人员缺乏有效的统筹组织方法，从而难以鉴定出可供实验检测的候选化合物。研究人员表示，如果深度神经网络可以被广泛采用，将会为寻找新型、特效抗生素节省时间和资源，同时，有必要进行推广的部分原因是他们缺少经济激励。深度学习可以使我们超越多药耐药性病原体的步伐，进入第二抗生素时代。（来源：中国科学报 张思玮）

相关论文信息：http://dx.doi.org/10.1016/j.cell.2020.01.021

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：James Collins 来源：《细胞》

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转发