

Egy új világ teremtése fehérjékből

(A generatív MI alkalmazása új fehérjék létrehozására)

(Werkstoff der Zukunft. Der Spiegel Nr. 38, 2023. szept. 16, Johann Grolle)

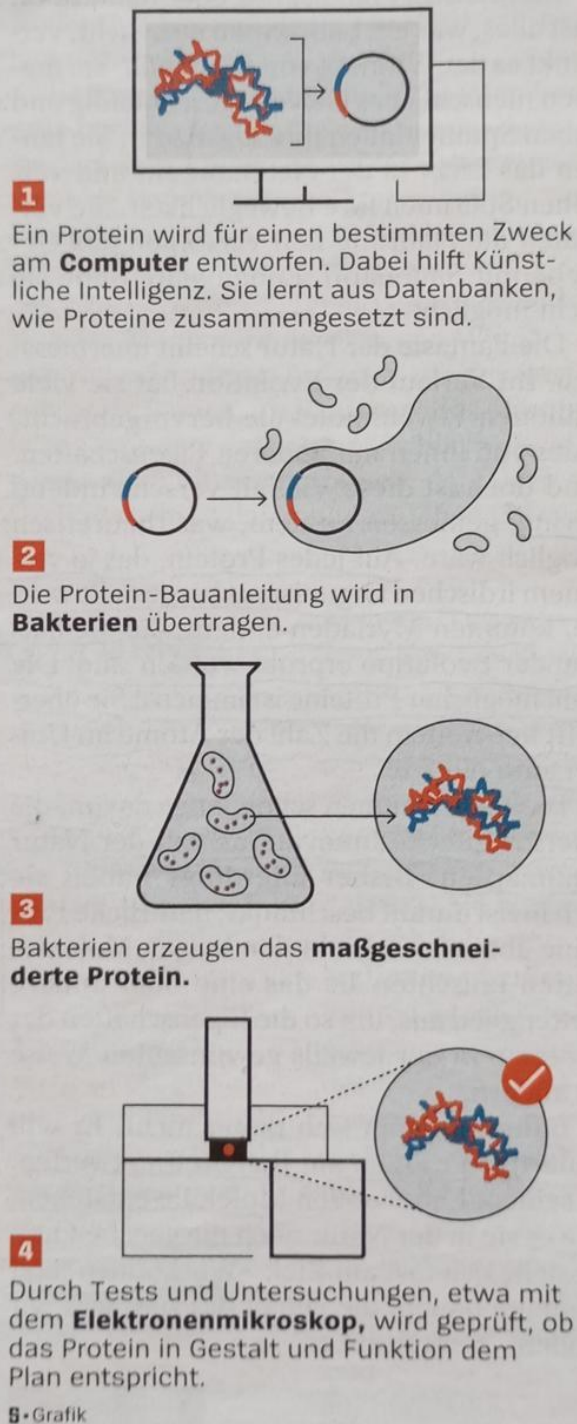
Az egyik munkatárs a szószemnél százezerszer kisebb gépeket épít molekulákból: motorokat, rotorokat, csörlőket, pumpákat. Az eljárás hasonlít a legózáshoz, csak képernyőn folyik: az egérrel rakja össze alapelemekből a szerkezeteket. A számítógéppel megtervezett szerkezetet baktériumok által „gyártatják le”. A konstrukciót a molekulák kötőereje hajtja. Ezt pedig a fény vagy valamilyen organikus üzemanyag táplálja. E parányi eszközök egyik felhasználási módja: a rákellenes gyógyszer eljuttatása közvetlenül az érintett sejtekhez.

A fehérje a jövővarázsolás anyaga. Bár a nyilvánosság szemében a DNS a szupersztár, a kutatók kíváncsiságát a fehérjék változatossága és formagazdagsága jobban vonzza. Az élőlények minden funkcióját proteinek végzik, minden részük azokból épül fel. De mégis, annak a néhány billió proteinnek a száma, amit már kipróbált az evolúció, összehasonlíthatatlanul eltörpül elméletileg lehetséges számuk mellett: **ami sokkal nagyobb, mint ahány atomból az Univerzum áll!** A biológusok álma, hogy megcsapolják a természet e végtelen teremő erejét. Mindaddig azonban csak arra volt lehetőségük, hogy a hosszú molekulaláncokban egyes természetes proteineket kicseréljenek, azok tulajdonságát némileg megváltoztatva. Most már viszont újfajta proteineket is képesek építeni, olyanokat, amik a természetben nem léteznek. Ebben a mesterséges intelligencia segíti őket, amely az adatbankokból megtanulja, hogy hogyan kell felépíteni a fehérjét. A MI képessé teszi a tudósokat, hogy „a proteinek nyelvén beszéljenek”. (Olyan ez, mint amikor a ChatGPT rajzol, verset ír, vagy zenét komponál...)

Tervezik enzimek kifejlesztését, a csak sokára lebomló környezetszennyező anyagok semlegesítését, klímabarát cement előállítását, baktériumokból számítógép létrehozását, a fény energiává alakítását a fotoszintézis mintájára (csak hatékonyabban, mint ahogy azt a növények teszik). Egyes szintetikus fehérjékkel elősegítik a tengeri élőlények mészkövázának a gyorsított növekedését, és így módon vonják ki az atmoszférából a széndioxid-többletet. A legfontosabb felhasználási terület azonban jelenleg a gyógyászat. A covid-járvány idején olyan fehérjét fejlesztettek ki, amelyek megakadályozzák, hogy a vírus megtelepedjen a sejt felszínén. Odáig nem jutottak el, hogy azt gyógyszerként is előállíthassák, de az esetleges későbbi járványok esetén már a gyakorlatban is hasznosítható lesz a felfedezésük.

Lebensbaustein aus dem Rechner

Wie künstliche Eiweiße (Proteine) erzeugt werden



Az élet építőköveinek számítógépes tervezése (hogyan állítják elő a mesterséges fehérjéket):

1. Egy meghatározott célra szolgáló fehérjét számítógépen terveznek meg. Ebben a MI segít, az adatbázisokból megtanulja, hogyan kapcsolódnak össze a fehérjék.
2. A protein építési tervét átviszik a baktériumokra.
3. A baktériumok előállítják a megtervezett proteint.
4. A proteint elektronmikroszkóppal vizsgálják és kísérletekkel tesztelik, képes-e ellátni a tervezett funkciót.

2020-ban a Deep Mind, a Google leányvállalata megalkotta az AlphaFold-ot. Ez egy olyan „fehérjehajtogatós” program, amely minden addiginál (beleértve a seattlei intézet Rosettáját is) összehasonlíthatatlanul nagyobb számú fehérjét tudott meghatározni és precízebben, mint a korábbi programok. A ChatGPT megjelenésével azonban a seattlei intézet visszanyerte vezető szerepét a struktúrabiológiában. A generatív MI nem csak arra alkalmas, hogy megértse a struktúrabiológia logikáját, szabályait. Hanem a fehérjehajtogatás technikáját, „nyelvezetét” is képes elsajátítani, alkalmazni. Ez lehetővé teszi, hogy az

emberi nyelven megfogalmazott feladatokat megoldja; és így adott feladatokra képes új fehérjéket létrehozni. A dolog logikája ugyanaz: mint ahogy a generatív MI kérésünkre egy adott témáról tudományos feldolgozást készít, verseket ír, képeket rajzol, zenét komponál.

Ugyanúgy jár el ekkor is: ha azt kérik tőle, hogy alkosson meg egy meghatározott célra szolgáló fehérjét – , megteszi. Ugyanis ismeri a fehérjekomponálás szabályait.

Na ez aztán a Szép, új világ!

Köln, 2023 december.

Kiss Károly ismertetése