



新闻

生命科学 | 医学科学 | 化学科学 | 工程材料 | 信息科学 | 地球科学 | 数理科学 | 管理综合

站内规定 | 手机版

首页 | 新闻 | 博客 | 院士 | 人才 | 会议 | 基金·项目 | 论文 | 视频·直播 | 小柯机器人 | 医学科普

本站搜索

作者: 王敏 聂诗琦 来源: 中国科学报 发布时间: 2024-11-20

选择字号: 小 中 大

科学家设计出一种高效蛋白质口袋生成算法

本报讯 (记者王敏 通讯员聂诗琦) 近日, 中国科学技术大学教授刘淇与美国哈佛大学教授 Marinka Zitnik 课题组合, 设计出一种深度生成算法PocketGen, 用于生成与小分子结合的蛋白质口袋序列和空间结构。相关研究成果发表于《自然-机器智能》。

蛋白质口袋是蛋白质上适合与特定分子结合的空腔, 每个蛋白质口袋都是一个特定的结合点位。当小分子与之紧密结合后, 会引起蛋白质的构象变化, 进而激活或者调节蛋白质功能。要想设计蛋白质口袋, 传统方法是能量优化和模板匹配, 但该方法计算效率慢、成功率低。现有的基于深度学习的模型又并非专为研究蛋白质-小分子相互作用而设计, 可能无法充分描述蛋白质与小分子结合口袋区域之间的特征。

PocketGen则为上述问题的解决提供了新方案。该算法由双层图Transformer编码器和蛋白质预训练语言模型两部分组成。两者分别对应蛋白质的结构信息和序列信息。通过两个部分同时进行信息处理和不断迭代, 该算法最终生成所需要的蛋白质口袋。

不仅如此, PocketGen在计算效率和蛋白质口袋设计的成功率方面表现亮眼, 是目前全球最高效、具有最高成功率的蛋白质口袋设计算法之一。在实验中, PocketGen模型不仅在亲和力和结构合理性等指标上超过传统方法, 计算效率方面也大幅提高——相比传统方法提高10倍以上。

据悉, PocketGen推进了深度生成模型用于功能蛋白质设计, 为进一步理解蛋白质设计规律并开展生物实验验证奠定了基础, 未来将在药物开发、生物传感器、酶催化等领域具有广阔的应用前景。

相关论文信息:

<https://doi.org/10.1038/s42256-024-00920-9>

《中国科学报》(2024-11-20 第1版 要闻)

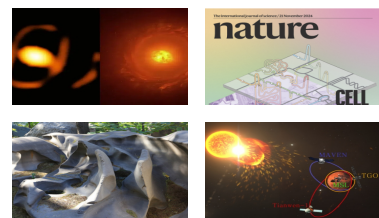
打印 发E-mail给:

相关新闻

相关论文

- 1 上海交大发布《企业可持续发展评价标准报告》
- 2 科学家提出嗅神经母细胞瘤“三分型系统”及分类标准
- 3 助力药物候选物开发, 科学家构建新型小分子预测模型
- 4 《学科教育学通论》新书发布会在上海师大举行
- 5 《中国都市现代农业发展报告(2024)》发布
- 6 走进“风洞实验室” 揭开“纹风不动”奥秘
- 7 “电”亮科技梦想 重大科技设施开放活动举办
- 8 现代科技馆体系联合行动举办“健康中国”科普活动

图片新闻



>>更多

一周新闻排行

- 1 24年! 国科大导师化身“沙地医生”
- 2 孟飞龙研究员获第十八届中国青年科技奖
- 3 45088棵树苗背后的沙漠情缘
- 4 单细胞基因造出多能干细胞
- 5 “糖刹车”基因破除番茄产量与品质悖论
- 6 成年黑猩猩也会在游戏中促进社会关系
- 7 四川公示2025年第一批省级科技计划项目
- 8 湿疹或与空气污染有关
- 9 研究发现低剂量低温等离子体仍可有效抑制肿瘤
- 10 世界知名数学家汪徐家全职加盟西湖大学

编辑部推荐博文

- 问答之间 | idea被别人做过, 要转变方向吗?
- 上海交大郭益平课题组: 用于结构健康监测和机器人感知的超高灵敏度各向...
- 给课堂以想象的空间
- 愈合心灵的科学之旅: JCR Q1期刊European Journal of Psychotraumatolo...
- 关于基金申请再说几句多余的废话
- 中南大学文青波/王雅雷/熊翔教授团队: 多元超高温纳米复相陶瓷无氧先驱...

更多>>