

Przewidywanie struktury białek

Czy sztuczna inteligencja rozwiązała problem ?

Irena Roterman-Konieczna, Leszek Konieczny

Uniwersytet Jagielloński – Collegium Medicum

„Życie jest formą istnienia białka” – tak śpiewali Starsi Panowie i mieli rację. Bez aktywności białek nie ma życia. Ale aby wszystkie warunki dla jej pełnienia były zaspokojone, białka muszą spełniać bardzo wiele warunków. Ich specyficzna, bardzo skomplikowana struktura ma zakodowaną informację o aktywności, o jej zmianach oraz formach dezaktywacji.

Wszystkie te informacje niesie sekwencja aminokwasów, z których białka są zbudowane. Sekwencja – jak się zakłada – ma zakodowane wszystkie te cechy. Dlatego od lat poszukiwane są techniki numeryczne umożliwiające przewidzenie struktury białka. Udało się to uzyskać z różnym skutkiem.

Ostatni postęp wniesiony przez sztuczną inteligencję w postaci programu o nazwie AlphaFold wydawało się, że rozwiązuje problem dostarczając rzeczywiście wysoko poprawne struktury 3D dla zadanej sekwencji aminokwasów. Uzyskano więc odpowiedź na pytanie – Jak wygląda struktura przestrzenna określonego białka zakodowana przez daną sekwencję aminokwasów ?

Nie uzyskaliśmy jednak rozwiązania problemu dotyczącego mechanizmu uzyskiwania określonej struktury. Pytanie bez odpowiedzi brzmi: Dlaczego dane białko ufałdowało się właśnie tak, jak się ufałdowało ?