

مهندسی آنزیم با کمک یادگیری ماشین

Machine learning-assisted enzyme engineering

تکامل هدفمند و طراحی منطقی استراتژی های قدرتمند در مهندسی پروتئین جهت تنظیم خواص آنزیم به منظور پاسخگویی به نیازهای دانشگاه ها و صنعت هستند. رویکردهای سنتی برای مهندسی آنزیم و تکامل هدفمند اغلب به صورت تجربی هدایت می شوند، به ویژه زمانی که رابطه ساختار-عملکرد پروتئین در دسترس نیست. اگر چه این روشها با موفقیت برای مهندسی بسیاری از آنزیم ها مورد استفاده قرار گرفته اند، این روش ها هنوز با چالش های قابل توجهی به دلیل اندازه فوق العاده فضای توالی پروتئین و مشکل ترکیبی مواجه هستند. می توان اطمینان حاصل کرد که تکنیک های تجربی فعلی و تکنیک های محاسباتی ممکن است هرگز قادر به نمونه برداری از کل فضای توالی پروتئین نباشند و نتوانند از پتانسیل کامل طبیعت برای تولید آنزیم های بهتر بهره مند شوند.

با پیشرفت در توالی نسل بعدی، روش های غربالگری با توان بالا، رشد پایگاه داده های پروتئینی و هوش مصنوعی، به ویژه یادگیری ماشین، مهندسی آنزیم مبتنی بر داده ها به عنوان یک راه حل امیدوار کننده برای این چالش ها در حال ظهور است. تا به امروز، رویکردهای یادگیری ماشین به طور مؤثر و دقیق رابطه ساختار-ویژگی را برای پیش بینی خصوصیات متنوع آنزیم تعیین کرده اند. علاوه بر این، مهندسی آنزیم را میتوان از طریق ترکیب تولید کتابخانه تجربی و پیش بینی مبتنی بر یادگیری ماشین بسیار سریعتر از همیشه تسریع کرد. در استراتژی های جدید مهندسی آنزیم، رویکردهای تصادفی یا (نیمه) منطقی را با روش های یادگیری ماشین ترکیب می کنند و مهندسی مجدد آنزیم ها برای بهبود خواص هدفمند را فراهم می کنند.

<https://doi.org/10.1016/bs.mie.2020.05.005>

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0076687920302275>