

Sztuczna inteligencja pokierowała robotami, aby nauczyć je produkować leki

12 listopada 2022

Nacisnąć guzik, aby w kilka chwil z łatwo dostępnych składników wyprodukować któryś z tysięcy organicznych związków chemicznych, np. leków? Dlaczego nie? Kolejny krok w tym kierunku umożliwiła właśnie osobliwa współpraca sztucznej inteligencji (program Polaków) z robotami przeprowadzającymi reakcje chemiczne.

Zespoły prof. Marty'ego Burke'a i prof. Bartosza Grzybowskiego opisują w „Science”, jak jeszcze bardziej zautomatyzować syntezę ważnej grupy reakcji chemicznych. Konkretnie chodzi o reakcje Suzukiego. W reakcjach takich (Nagroda Nobla 2010) dochodzi do powstania wiązań typu węgiel-węgiel; stosowane są one do rozbudowy łańcucha węglowego, tworzącego oś cząsteczek w związkach organicznych. „Ten typ reakcji pozwala na łączenie bloczków ze związków chemicznych tak łatwo, jak łączenie klocków lego. To teraz podstawa chemii medycznej. Z obecnie znanych bloczków jesteśmy w stanie złożyć większość znanych leków przeciwnowotworowych” – tłumaczy prof. Grzybowski.

Zespoły zidentyfikowały ogólne warunki, w których przeprowadzić można takie reakcje Suzukiego.

„Praca ta jest ekscytującym krokiem w kierunku świata, w którym każdy może tworzyć cząsteczki” – komentuje dla Nauki w Polsce prof. Marty Burke z Uniwersytetu Illinois.

Już jakiś czas temu prof. Marty Burke z zespołem opracował roboty, które z dostępnych chemicznych bloczków budują z góry zadane związki. Przeprowadzają one reakcje chemiczne i tworzą nawet skomplikowane związki organiczne (których podstawą są łańcuchy czy pierścienie węglowe). Roboty te były jednak wciąż

dopiero na drodze do „samodzielności”. Przed przeprowadzeniem każdej nowej reakcji to człowiek musiał bowiem wskazać, w jakich warunkach reakcja powinna zachodzić – czyli np. jaka jest potrzebna temperatura, jakich dostarczyć katalizatorów i w jakim rozpuszczalniku powinna przebiegać reakcja. Następnie właśnie takie warunki trzeba było robotom w maszynie zapewnić. Szukanie warunków reakcji za każdym razem, kiedy potrzeba kolejnego związku, nie było jednak wymarzoną sytuacją.

Dlatego naukowcy postanowili poszukać jednego uniwersalnego zestawu warunków, w których można przeprowadzać jak największą gamę reakcji Suzukiego. Chodziło o to, by jednakowych, jak najlepiej dobranych warunkach, można było produkować bardzo różne związki chemiczne – albo przeprowadzać wielostopniowe reakcje, nie zmieniając warunków reakcji.

„Ogólne warunki reakcji są kluczowe dla automatyzacji chemii. A to z kolei jest ważne w demokratyzowaniu innowacji molekularnych” – komentuje prof. Burke.

Znalezienie ogólnych warunków do prowadzenia dużej grupy reakcji to trudne zadanie. Prof. Bartosz Grzybowski (z Allchemy Inc. ale i z Instytutu Chemii Organicznej PAN oraz Uniwersytetu UNIST w Korei Płd.) w rozmowie z Nauką w Polsce przypomina, że ogólne warunki reakcji na razie są znane dla trzech klas reakcji: syntezy peptydów, kwasów nukleinowych oraz polisacharydów. Dzięki tym odkryciu tych ogólnych warunków chemicy mogą zaprojektować całe fragmenty DNA czy białek – nawet takie, które nie istnieją w przyrodzie, a maszyny sprawnie wyprodukują te związki – nie „pytając” nawet, jak mają to zrobić (to pomysły, za które przyznano dwa Noble).

Teraz analogiczna sytuacja powstaje dla reakcji Suzukiego. „Na Uniwersytecie Illinois powstało już laboratorium, gdzie studenci wymyślają, jaki chcą związek organiczny chcą uzyskać, naciskają guzik, a następnego dnia dostają fiolkę z substancją, którą chcieli uzyskać – bo robot pospinał dostępne »chemiczne bloczki« w pożądaną przez nich związki” – opisuje

prof. Grzybowski. I dodaje, że dzięki temu rozwiązaniu praca nad syntezą chemiczną nowych związków skraca się z tygodni czy miesięcy – do godzin.

Niezwykle nowatorski był sposób, w jaki zespół poszukiwał uniwersalnych warunków reakcji: do współpracy zaprzęgnięto bowiem roboty oraz sztuczną inteligencję.

„Użyliśmy do tego modułu zaprojektowanej przez mój zespół sztucznej inteligencji – Allchemy, która przewiduje warunki reakcji – tzn. proponuje, jak dobrać katalizatory czy rozpuszczalnik, aby wyprodukować z danych substratów jakiś produkt” – tłumaczy prof. Bartosz Grzybowski.

W ramach pracy trzeba było przetestować bardzo różne układy warunków reakcji i znaleźć te najlepsze. Sztuczna inteligencja wskazywała więc robotom, jakie reakcje mają przeprowadzać – i w jakich warunkach trzeba to robić. Roboty wykonywały jej zalecenia i dawały informację zwrotną, jak reakcja przebiegła. Na podstawie tego procesu w tzw. pętli zamkniętej sztuczna inteligencja budowała sobie bazę wiedzy niezbędną do tego, by w kolejnych krokach wskazywać robotom drogę do jak najlepszego układu warunków.

Roboty wykonały powyżej 500 takich reakcji. Dzięki temu sztuczna inteligencja wyrobiła sobie niezłe pojęcie o tym, które warunki reakcji są korzystne dla bardzo różnych układów.

O ile wydajność reakcji chemicznych wymyślona tradycyjnie przez najlepszych specjalistów – wynosiła 25 proc., o tyle sztuczna inteligencja do spółki z robotami doszły do wydajności ponad 50 proc. To duża różnica – informuje prof. Grzybowski.

Pytany, czy dzięki temu rozwiązaniu będą mogły powstać roboty produkujące na żądanie różne związki, np. leki przeciwnowotworowe, prof. Grzybowski opowiada, że to jeden z zamysłów projektu, który prowadzi – a który ma finansowanie DARPA – agendy amerykańskiej armii.

„Sterowany przez sztuczną inteligencję proces pętli zamkniętej, za pomocą którego dokonano tego odkrycia, można teraz zastosować do rozwiązywania wielu innych trudnych problemów. Połączenie tego podejścia z podejściem zautomatyzowanej syntezy modułowej może w znacznym stopniu umożliwić odkrywanie nowych funkcji cząsteczek – i to zarówno przez specjalistów, jak i niespecjalistów” – podsumowuje prof. Burke.

Autorstwo: Ludwika Tomala

Źródło: NaukawPolsce.pl