

Nový algoritmus pomáhá vědcům omezit agregaci proteinů

27.5.2026 - | Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava

Vědci z národního superpočítačového centra IT4Innovations se podíleli na vývoji unikátního nástroje, který umožňuje identifikovat oblasti proteinů náchylné k agregaci a otevírá nové možnosti jejich využití v reálných aplikacích. Ve spolupráci s Masarykovou univerzitou a Mezinárodním centrem klinického výzkumu vznikl prediktor AggreProt založený na hlubokých neuronových sítích, jehož přesnost byla úspěšně ověřena a výsledky výzkumu byly publikovány v prestižním vědeckém časopise Communications Chemistry.

Proteiny jsou tichými motory moderního života. Pomáhají vyrábět život zachraňující léky, rozkládat látky znečišťující životní prostředí, zlepšovat naše potraviny a pohánět průmyslové procesy. Má to však háček: mnoho proteinů má tendenci slepovat se dohromady a vytvářet nefunkční shluky, které jsou neaktivní. Toto chování proteinů dosud brzdilo vědecký pokrok.

K překonání této výzvy vyvinuli vědci z Mezinárodního centra klinického výzkumu a Masarykovy univerzity ve spolupráci s IT4Innovations národním superpočítačovým centrem, které je součástí VŠB – Technické univerzity Ostrava, algoritmus založený na strojovém učení pro rychlou a spolehlivou detekci „lepivých“ oblastí, které způsobují agregaci proteinů. Jejich identifikace umožňuje vědcům navrhnout změny v těchto oblastech tak, aby zabránili slepování proteinů a umožnili jejich efektivnější využití v reálných aplikacích. K demonstraci tohoto přístupu vědci z Loschmidtových laboratoří výrazně zlepšili kvalitu produkce a výtěžnost enzymu, který rozkládá nebezpečné chemikálie znečišťující životní prostředí. Tato metoda byla popsána v nedávném článku publikovaném v předním vědeckém časopise *Communications Chemistry* s názvem [*Experimentally validated deep learning control of protein aggregation*](#).

Vědci navíc pomocí svého softwaru identifikovali a experimentálně ověřili chyby v často používaných databázích, které slouží k trénování podobných algoritmů. „Počítačové algoritmy stále více urychlují výzkum. Jejich efektivita však závisí na kvalitě dat použitých k jejich trénování. Naše studie významně přispívá ke zlepšení spolehlivosti těchto datových sad a tím i přesnosti budoucích prediktivních nástrojů,“ říká Antonín Kunka, jeden z autorů, který se věnoval experimentální validaci softwaru.

„Jsme rádi, že jsme součástí týmu, který vyvinul a experimentálně ověřil prediktor AggreProt založený na hlubokých neuronových sítích, jenž může výzkumníkům pomoci identifikovat oblasti v proteinech náchylné k agregaci a navrhnout mutace potlačující agregaci proteinů,“ uvedl Jan Martinovič z IT4Innovations. „Studie prokázala, že tento přístup může výrazně zlepšit rozpustnost proteinů a významně zvýšit výtěžnost produkce, čímž otevírá nové možnosti pro biotechnologie, environmentální aplikace a medicínu. Projekt rovněž odhalil nepřesnosti ve stávajících databázích agregace, což přispělo k vývoji spolehlivějších prediktivních metod založených na umělé inteligenci v oblasti proteinové vědy.“

„Experimentální validace ukazuje vysokou přesnost našeho nástroje AggreProt při identifikaci oblastí proteinů náchylných k agregaci,“ dodává Joan Planas-Iglesias z Loschmidtových laboratoří MU a ICRC-FNUSA, který vedl vývoj softwarového algoritmu a koordinoval spolupráci mezi biology a informatiky. „AggreProt je nyní dostupný širší vědecké komunitě a umožňuje výzkumníkům zlepšit produkci proteinů důležitých pro biotechnologie, environmentální aplikace a medicínu.“

Spolupráce výpočetních a experimentálních biologů z výše uvedených institucí zdůrazňuje význam meziinstitucionálního a mezioborového partnerství pro uskutečnění špičkového světového výzkumu.

Přístupy:

- Publikace:

<https://www.nature.com/articles/s42004-026-02007-5>

<https://academic.oup.com/nar/article/52/W1/W159/7683054>

- AggreProt web server: <https://loschmidt.chemi.muni.cz/aggreprot/>

Tato práce byla podpořena projektem CLARA - program Evropské Unie Horizont Evropa, číslo grantu 101136607. Tento projekt je spolufinancován Evropskou unií v rámci projektu Centrum pro umělou inteligenci a kvantové výpočty v systémovém výzkumu mozku (CZ.02.01.01/00/23_029/0008437) v rámci OP JAK.

<https://www.it4i.cz/o-it4i/infoservis/tiskove-zpravy/novy-algoritmus-pomaha-vedcum-omezit-agregaci-proteinu>