



Nagore Barrena Oruechebarria

Donostiako Informatika Fakultateko irakasle eta ikerlaria, UPV/EHU

Proteinak eta beraien egitura

Teknologia atala irakurtzen ari zara, bai. Nahiz eta izenburuaren arabera, biologiaren atalean zaudela pentsatuko duzun. BBVA

Fundazioako “Fronteras del conocimiento” sariak ikusita ere, oraingoan adimen artifizialaren inguruko saria topatu dugu, baina ez Informazioaren eta Komunikazioaren Teknologia arloan, Biologia eta Biomedikuntzan baizik.

Lehenengo eta behin utz iezadazue sari horien inguruko sarrera txiki bat egiten. BBVA Fundazioak Ikerketa Zientifikoen Kontseilu Gorenarekin lankidetzan emandako nazioarteko sari-multzoa dira, eta ikerketa zientifikoaren eta kultura-sorkuntzaren arloan egindako funtsezko ekarpenak aitortzen dituzte. Sari gazteak izan arren, 15 urte egin berri dituzte eta munduko sari entzutetsuen artean tartea egitea lortu dute. Esate baterako, geroago Nobel sariren bat jaso dute BBVA Fundazioaren “Fronteras del conocimiento”ko 21 saridunek.

2022. urteko edizioan, eta aurten egindako sari-banaketan, Biologia eta Biomedikuntza atalean David Baker, Damis Hassabis eta John Micheal Jumper izan dira sarituak, adimen artifiziala erabiliz proteinen hiru dimentsioko egitura zehazki iragartzeko egindako ekarpenagatik.

Baina zergatik da garrantzitsua proteinen hiru dimentsioko egitura ezagutzea? Eta nola ematen da prozesu hori? Proteina baten egiturak bere funtzio biologikoa zehazten du. Proteinak okertolestuz gero, degradatu egiten dira. Hortaz, proteina baten egitura ulertzea funtsezkoa da gaixotasunak ulertzeko, botikak diseinatzeko edo terapia gida-tuak garatzeko. Proteinak azken konformazio hori (hiru dimentsioko egitura) da, oraindik ere, biologiako arazo garrantzitsuenetako bat.

Aminoazidoen sekuentziak zehazten du toleste-bidea; aminoazidoz sortutako kate batetik abiatzen gara, eta horiek beraien arteko elkarrekintza sortzen dute, hiru dimentsioko egitura bilakatzeko. Lerro hauen azpian ageri den irudiak, hain zuzen ere, modu argian erakusten du aipatutako prozesua.

Saridunek adimen artifizialeko sistemak (RoseTTAFold eta AlphaFold) sortu dituzte, aminoazido sekuentzia lineal batetik, proteinaren egitura aurreikusteko. Horretarako, neurona-sare sakonen ahalmen bete-beteaz probestu dira. Esperimentalki, laborategian urteak behar izaten dira proteina bakar baten egitura aurreikusteko. Baina ekarpen honi esker, aurreikuspena denbora la-

burrean (minututan) izateko gaitasuna lortu da.

Proteinen egitura denbora laburrean aurreikusteko gaitasunaz gain, iragarpenak zehatza ere izan behar du. CASP141-en (ikerketa-taldeek beren iragarpenen zehaztasun maila probatzeko erronka) antolatzaileek AlphaFold onartu zuten proteina-egituraren iragarpen-problemaren irtenbide gisa lortutako zehaztasun maila altuagatik. AlphaFold sistema erabiliz aurreikusten zen egitura esperimentalki lortutako egituren iragarpenaren berdina zen.

Ekarpen honi esker, zientzialariek proteinen arteko interakzioak aurreikusi, proteina guztiz berriak diseinatu eta diana farmakologiko berriak aurkitzeko gai dira. •

