

Maschinelles Lernen macht Stoffwechselprozesse verständlich

Bioinformatik: Veröffentlichung in Nature Communications

Bioinformatiker von der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf (HHU) und der University of California in San Diego (UCSD) setzen Methoden des maschinellen Lernens ein, um die Kinetik von Enzymen und damit auch komplexe Stoffwechselvorgänge besser zu verstehen. Ihre Ergebnisse beschreibt das Team um Erstautor Dr. David Heckmann in der aktuellen Ausgabe des Magazins Nature Communications.

Die synthetischen Lebenswissenschaften sind auf ein detailliertes und quantitatives Verständnis der komplexen Systeme in biologischen Zellen angewiesen. Nur wer ein solches System versteht, kann es auch gezielt manipulieren. Gut bekannt ist der biologische Stoffwechsel, an dem viele hundert Enzyme beteiligt sind. Allerdings ist ein zentrales Element darin, nämlich die individuelle Aktivität der einzelnen Enzyme, quantitativ nur unzureichend verstanden.

Dr. David Heckmann, jetzt in San Diego und ehemaliger Doktorand von Prof. Dr. Martin Lercher am Institut für computergestützte Zellbiologie der HHU, hat zusammen mit kalifornischen und Düsseldorfer Kollegen einen bioinformatischen Ansatz gewählt, um der Funktionsweise und den Eigenschaften der Enzyme auf den Grund zu gehen. Die Wissenschaftler nutzen dazu das „Maschinelle Lernen“ (ein Bereich der „Künstlichen Intelligenz“, kurz KI), welches in anderen Gebieten erfolgreich eingesetzt wird, zum Beispiel für die Verkehrsführung oder für automatische Übersetzungen. Algorithmen des maschinellen Lernens waren es auch, die in den vergangenen Jahren ihre menschlichen Gegner im Schach, Go und sogar im Poker bezwangen.

Mit ihrem Ansatz identifizierten die Forscher wichtige Eigenschaften von Enzymen, die für deren Aktivitäten entscheidend sind. Mit ihren Ergebnissen können sie die Kinetik sehr vieler Enzyme deutlich besser beschreiben, als dies mit bisherigen Methoden möglich war. „Unser Modell gibt spannende Einblicke darin, welche Eigenschaften von Enzymen ihre Aktivität am stärksten beeinflussen“, so Prof. Lercher. „Wir können damit Stoffwechselvorgänge präziser modellieren und das Zusammenspiel verschiedener Komponenten in zellulären Netzwerken analysieren“, ergänzt Dr. Heckmann.

Originalpublikation

David Heckmann, Colton J. Lloyd, Nathan Mih, Yuanchi Ha, Daniel C. Zielinski, Zachary B. Haiman, Abdelmoneim A. Desouki, Martin J. Lercher, Bernhard O. Palsson, Machine learning applied to enzyme turnover numbers reveals protein structural correlates and improves metabolic models, Nature Communications (2018).

[DOI 10.1038/s41467-018-07652-6](https://doi.org/10.1038/s41467-018-07652-6)