

Trí tuệ nhân tạo phát hiện ra loại kháng sinh mới

Các nhà khoa học tại Viện Công nghệ Massachusetts (Mỹ) đã phát hiện ra loại kháng sinh mới điều trị tụ cầu vàng kháng methicillin (MRSA) bằng cách sử dụng các mô hình trí tuệ nhân tạo (AI) học sâu.



Mô hình học sâu được sử dụng để dự đoán hoạt động và độc tính của hợp chất mới. Học sâu liên quan đến việc sử dụng mạng lưới thần kinh nhân tạo để tự động tìm hiểu và thu thập các đặc trưng từ dữ liệu mà không cần lập trình rõ ràng. Công cụ trí tuệ nhân tạo AI này ngày càng được dùng nhiều trong khám phá thuốc để thúc đẩy việc xác định các loại thuốc tiềm năng, dự đoán tính chất của chúng và tối ưu hóa quy trình phát triển thuốc. Trong trường hợp này, các nhà nghiên cứu tập trung vào tụ cầu vàng kháng methicillin (MRSA).

Nhiễm trùng MRSA có thể chỉ là nhiễm trùng da nhẹ đến các tình trạng nghiêm trọng hơn và có khả năng đe dọa đến tính mạng như viêm phổi và nhiễm trùng máu. Theo Trung tâm Phòng ngừa và Kiểm soát dịch bệnh châu Âu, trong Liên minh châu Âu (EU) có gần 150.000 ca nhiễm MRSA mỗi năm. Trong EU, gần 35.000 người tử vong hàng năm do nhiễm trùng kháng thuốc.

Trong nghiên cứu, các nhà khoa học đã đào tạo một mô hình học sâu mở rộng bằng cách sử dụng các bộ dữ liệu lớn. Khoảng 39.000 hợp chất đã được đánh giá về hoạt tính kháng sinh chống lại MRSA. Sau đó, cả dữ liệu thu được và thông tin chi tiết về cấu trúc hóa học của các hợp chất được đưa vào mô hình.

Để điều chỉnh việc lựa chọn các loại thuốc tiềm năng, nhóm nghiên cứu đã sử dụng thêm ba mô hình học sâu. Các mô hình này được đào tạo để đánh giá độc tính của các hợp chất trên ba loại tế bào riêng biệt của con người. Thông qua kết hợp những dự đoán độc tính này với hoạt tính kháng khuẩn đã được xác định trước đó, các nhà nghiên cứu đã xác định chính xác các hợp chất có khả năng chống lại vi khuẩn một cách hiệu quả và giảm thiểu tác dụng phụ.

Thông qua sử dụng bộ mô hình này, khoảng 12 triệu hợp chất thương mại đã được sàng lọc. Bộ mô hình đã xác định các hợp chất được dự đoán có khả năng chống lại MRSA từ năm loại khác nhau, được phân loại dựa trên các cấu trúc hóa học cụ thể bên trong các phân tử. Kết quả là các nhà nghiên cứu đã thu được khoảng 280 hợp chất và tiến hành thử nghiệm khả năng chống MRSA trong môi trường phòng thí nghiệm. Phương pháp này giúp xác định được hai hợp chất triển vọng cùng loại.

Trong các thí nghiệm trên hai mô hình chuột lần lượt bị nhiễm trùng da do MRSA và bị nhiễm trùng toàn thân do MRSA, nhóm nghiên cứu đã phát hiện ra cả hai hợp chất triển vọng đã làm giảm 10 lần quần thể MRSA.

Việc phát hiện ra hợp chất mới có thể tiêu diệt vi khuẩn kháng thuốc cướp đi sinh mạng hàng nghìn người trên toàn thế giới mỗi năm, là bước ngoặt trong cuộc chiến chống lại tình trạng kháng kháng sinh. Kết quả nghiên cứu đã được công bố trên tạp chí *Nature*.

N.P.D (NASATI), theo <https://www.euronews.com/>, 1/2024

Nguồn: Cục Thông tin Khoa học và Công nghệ Quốc gia.