

OxyLipids: Modelización y Optimización Virtual de Peroxigenasas

Description

El objetivo de OxyLipids es producir compuestos bio-basados, para sustituir compuestos derivados del petróleo a partir de la oxigenación selectiva de lípidos vegetales utilizando peroxigenasas diseñadas computacionalmente. OxyLipids pretende así contribuir tanto a los objetivos de la transición verde como de la transición digital, y a la sinergia entre ambas.

Nuestro proyecto, el Subproyecto 3, a desarrollar en el Barcelona Supercomputing Center (BSC), tiene como objetivo dos tareas ambiciosas.

Primero, introducir técnicas de modelado molecular y aprendizaje automático de última generación para desarrollar una base de datos completa y un modelo de simulación para peroxigenasas inespecíficas (UPO). Por lo tanto, nuestro objetivo es utilizar el aumento masivo de datos in silico para generar descriptores estructurales y dinámicos de varios miles de UPO, lo que facilitará en gran medida la selección de enzimas (minería) y la ingeniería (incluida la generación de UPOS de novo a partir de métodos generativos de redes antagonicas). Tal objetivo ahora es posible gracias al reciente desarrollo de modelos precisos de homología de aprendizaje profundo, el software Alpha Fold, que representa un avance sin precedentes en la ciencia de las proteínas.

En segundo lugar, desarrollaremos una plataforma de nube digital para la ingeniería de enzimas utilizando visualización de vanguardia y nuestras tecnologías de modelado. Esta plataforma tiene el objetivo de crear entornos colaborativos humanos donde la intuición y la experiencia humanas sean utilizadas por la plataforma de modelado a través del aprendizaje de inteligencia artificial. Las predicciones computacionales serán transferidas al Centro de Investigaciones Biológicas "Margarita Salas" del CSIC (CIB, subproyecto 1) para su conversión en enzimas activas y posterior caracterización (en términos de actividad y estabilidad) antes de ser transferidas para su evaluación experimental en reacciones de oxigenación selectiva. Estos últimos estudios, por el Instituto de Recursos Naturales y Agrobiología de Sevilla del CSIC (IRNAS, subproyecto 2), se centrarán en la epoxidación enzimática de ácidos grasos insaturados procedentes de aceites vegetales para producir epóxidos reactivos, aunque también se analizarán derivados hidroxilados y dicarboxílicos.

Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación

Source URL (retrieved on 17 ago 2024 - 20:08): <https://www.bsc.es/ca/research-and-development/projects/oxylipids-modelizacion-y-optimizacion-virtual-de-peroxigenasas>