Enzymy są niezbędne do prawidłowego funkcjonowania komórek, pomagając w skutecznym przeprowadzaniu reakcji chemicznych. Reakcje te zachodzą w specjalnych miejscach wewnątrz enzymów, z których niektóre znajdują się głęboko w rdzeniu białka. To sprawia, że tunele umożliwiające cząsteczkom dostęp do tych miejsc są ważne dla funkcji enzymów. Biologiczne znaczenie tuneli enzymatycznych jest dodatkowo podkreślane przez fakt, że wiele enzymów, o których wiadomo, że zawierają tunele molekularne, zostało powiązanych z rozwojem różnych chorób, a inhibitory wiążące się z tymi tunelami mogą stać się istotnymi kandydatami na leki.

Pomimo ich znaczenia, szlaki te są często pomijane w badaniach ze względu na wyzwania w ich identyfikacji wynikające z ich często ulotnej natury. Aby zmniejszyć tę lukę w wiedzy, planujemy wykorzystać uczenie maszynowe do opracowania modeli szybkiego przewidywania tych tuneli. Aby nauczyć model komputerowy, wykorzystamy obszerny zbiór obliczonych danych opisujących sposób otwierania tuneli w wielu różnych enzymach. W ramach projektu modele zostaną następnie zweryfikowane przy użyciu znanych danych eksperymentalnych dla kilku dobrze zbadanych enzymów. Ostatecznie zastosujemy najlepsze modele do znalezienia tuneli w enzymach wykorzystywanych w różnych biotechnologiach i tych obecnych w ludzkim ciele, co może pomóc nam zaprojektować lepsze enzymy, ulepszyć projektowanie leków i pogłębić nasze zrozumienie chorób wywoływanych przez mutacje tunelowe.