

Исследование нанозимов с помощью искусственного интеллекта

Разливина Юлия Сергеевна

Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург

E-mail: razlivina@scamt-itmo.ru

Соавторы: Дмитренко А., Виноградов В.

Нанозимы - новый перспективный класс наноматериалов, обладающих ферментоподобной катализитической активностью.[1] Нанозимы открывают широкие возможности для создания высокочувствительных биосенсоров, эффективных систем доставки лекарств, а также катализаторов для биотехнологии.

Однако процесс разработки и оптимизации нанозимов с заданными свойствами является крайне трудоемким и длительным при использовании традиционных экспериментальных подходов. Для решения этой проблемы мы предлагаем использовать возможности искусственного интеллекта, в частности методы машинного обучения. С помощью алгоритмов ИИ становится возможным предсказание их катализитической активности путем и в будущем даже генерировать новые структуры с использованием генеративных методов ИИ.[2] Более того использование алгоритмов машинного обучения позволяет детально исследовать активные центры и механизмы реакций на нанозимах. Полученные данные применяются для построения моделей прогнозирования и оптимизации катализитической активности.[3]

Мы разработали DiZyme - это сервис на основе алгоритмов ИИ для предсказания ферментоподобной активности нанозимов. Он включает уникальную базу данных, алгоритмы машинного обучения для количественного предсказания катализитической активности.[4]
Использование DiZyme позволяет существенно ускорить разработку нанозимов с заданными свойствами. DiZyme открыта для международного научного сообщества. Она открывает новые возможности применения широкого круга нанозимов в передовых технологиях на стыке искусственного интеллекта, материаловедения и биомедицины.

Источники и литература

- 1) Zandieh, M.; Liu, J. Nanozymes: Definition, Activity, and Mechanisms. *Advanced Materials* 2023, 2211041.
- 2) Zhuang, J., Midgley, A. C., Wei, Y., Liu, Q., Kong, D., Huang, X. (2023). Machine [U+2010] Learning [U+2010] Assisted Nanozyme Design: Lessons from Materials and Engineered Enzymes. *Advanced Materials*.
- 3) Shen, X., Wang, Z., Gao, X. J., Gao, X. (2023). Reaction Mechanisms and Kinetics of Nanozymes: Insights from Theory and Computation. *Advanced Materials*.
- 4) Razlivina, J.; Serov, N.; Shapovalova, O.; Vinogradov, V. DiZyme: Open [U+2010] Access Expandable Resource for Quantitative Prediction of Nanozyme Catalytic Activity. *Small* 2022, 18 (12), 2105673.