

УДК: 327(427)

DOI:10.5281/zenodo.11864115

В.В. Дзюба, здоб. ступ. PhD (ДУИКТ, Київ)

В.В. Жебка, д-р техн. наук, проф. (ДУИКТ, Київ)

ВИКОРИСТАННЯ МАШИННОГО НАВЧАННЯ ДЛЯ ПЕРЕДБАЧЕННЯ СТРУКТУРИ БІЛКІВ У МЕДИЧНИХ ДОСЛІДЖЕННЯХ: АДАПТАЦІЯ ЄВРОПЕЙСЬКИХ СТАНДАРТІВ

Медичні дослідження у Європейському Союзі висувають високі вимоги до якості та точності даних.

Впровадження методів машинного навчання у цій сфері може значно підвищити ефективність досліджень та відповідати стандартам ЄС.

Зокрема, прогнозування тривимірної структури білків за допомогою машинного навчання є перспективним напрямком, що може мати значний вплив на розробку нових ліків та терапій.

Метою даної роботи є розробка моделі машинного навчання для передбачення структури білків, яка відповідає європейським стандартам у сфері медичних досліджень.

Для досягнення мети були використані такі методи:

1. Глибинні нейронні мережі (ГНМ) для обробки великих обсягів даних про білки.
2. Конволюційні нейронні мережі (КНМ) для виявлення просторових залежностей між амінокислотами.
3. Рекурентні нейронні мережі (РНМ) для обробки послідовностей амінокислот.

Використані методи машинного навчання були адаптовані до вимог європейських стандартів у медичних дослідженнях, зокрема:

1. Забезпечення якості даних: дані з бази PDB (Protein Data Bank) були ретельно відфільтровані та перевірені на точність.
2. Відповідність стандартам безпеки: всі алгоритми були протестовані на відповідність європейським стандартам безпеки.
3. Дотримання етичних норм: забезпечено етичне використання даних та дотримання конфіденційності.

Модель машинного навчання, що була розроблена, показала високу точність у передбаченні тривимірної структури білків.

Це може сприяти розробці нових ліків та терапій, що відповідають європейським стандартам якості та безпеки.

Результати показують, що методи машинного навчання, зокрема ГНМ, є перспективними для передбачення структури білків.

Модель враховує квантово-механічні аспекти процесу згортання, що дозволяє більш точно моделювати тривимірну структуру білків.

Однак, для подальшого покращення точності прогнозів необхідно збільшити обсяг навчальних даних та удосконалити алгоритми.

Застосування машинного навчання для моделювання згортання білків відкриває нові можливості для біоінформатики та біофізики. Використання штучних нейронних мереж та інших методів машинного навчання дозволяє значно покращити точність передбачення тривимірної структури білків.

У майбутньому планується розробка більш складних моделей, які зможуть враховувати більшу кількість факторів, що впливають на згортання білків.

Інформаційні джерела

1. Jumper, J., et al. (2021). "Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold." *Nature*, 596(7873), 583-589.

2. Wechsler, S. D. (2021). "The quantum mechanics needs the principle of wave function collapse but this principle should not be misunderstood." arXiv preprint arXiv:2102.10000.

3. Chakraborti, S., et al. (2019). "Three-dimensional protein cage array capable of active enzyme capture and artificial chaperone activity." *Nano Letters*, 19(6), 3918-3924.

4. Singh, R., et al. (2023). "Protein misfolding, ER stress, and chaperones: An approach to develop chaperone-based therapeutics for Alzheimer's disease." *International Journal of Neuroscience*, 133(7), 714-734.