

УДК 544.04

**РАЦИОНАЛЬНЫЙ ПОИСК ФЕРМЕНТ-МИМИКРИРУЮЩИХ НАНОМАТЕРИАЛОВ
ДЛЯ ВЫСОКОЭФФЕКТИВНОГО КАТАЛИЗА ПРИ ПОМОЩИ АЛГОРИТМОВ
МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ**

Разливина Ю.С. (Университет ИТМО), **Серов Н.С.** (Университет ИТМО)

Научный руководитель – доктор химических наук, Виноградов В. В.
(Университет ИТМО)

В рамках данной работы, на основании всех существующих на настоящий момент статей, посвященных разработке нанозимов с высокой каталитической активностью, была создана предиктивная модель машинного обучения, способная количественно предполагать каталитическую активность нанозимов на основании фундаментальных характеристик элементов, составляющих эти соединения, а также их физико-химических свойств и условий измерения ферментативной активности.

Введение. Нанозимы представляют из себя зачастую неорганические наноматериалы с ферменто-подобными характеристиками, способные проявлять активности, подобные таковым у белковых ферментов. Помимо фундаментального интереса в проявлении неорганическими материалами свойств сложных белковых молекул, данные объекты зарекомендовали себя как более дешевые, простые в производстве и в обращении аналоги ферментов. Более того, в отличие от белковых молекул, свойства нанозимов намного проще контролировать через методы их получения и последующие модификации. Они проявляют широкий ряд свойств и находят широкое применение в биосенсорах, тераностике рака, защите окружающей среды и других отраслях. Несмотря на то что ферментативная активность нанозимов явно зависит от фундаментальных характеристик элементов их составляющих, пористости, поверхностного заряда, химических групп и других физико-химических свойств, а также от условий, в которых осуществляется катализ, теоретические методы не позволяют рассчитывать каталитическую активность нанозимов с достаточной точностью в силу массы принимаемых допущений. Будучи статистическим методом, машинное обучение способно установить связь между всеми перечисленными параметрами и ферментативной активностью нанозимов.

Основная часть. В данной работе мы сосредоточились на металлооксидных и биметаллооксидных нанозимах, поскольку два этих класса являются наиболее распространенными и охватывают большую часть всех существующих нанозимов. Нами была собрана, а также оптимизирована база данных по всем нанозимам данных классов и их ферментативным активностям. Более того, на основании этой базы данных был проведен анализ зависимости ферментативной активности от вышеперечисленных параметров системы, а также построена модель машинного обучения, основанная на алгоритме случайного леса, показавшая значительную эффективность, более того, было показано почему ряд моделей машинного обучения принципиально не подходит для решения задач предсказания ферментативной активности нанозимов.

Выводы. Данная предиктивная модель может быть использована для рационального дизайна и разработки новых нанозимов с неизвестной каталитической активностью. Более того, модель может быть расширена на другие классы нанозимов.