

УДК 544.473

DiZUME: ПЛАТФОРМА ДЛЯ РАЦИОНАЛЬНОГО ДИЗАЙНА НАНОЗИМОВ

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

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

Аннотация

Рациональный дизайн наноматериалов позволяет сократить время и ресурсы, используемые для создания нового наноматериала. Платформа DiZume позволяет осуществлять генеративный дизайн нанозимов, алгоритмы машинного обучения, встроенные в веб-платформу, количественно предсказывают каталитическую активность наноматериалов.

Введение

Нанозимы – наноматериалы, имитирующие каталитической активностью природных ферментов. Нанозимы привлекли значительный интерес в диагностике, иммуноанализе и биосенсорах благодаря высокой и регулируемой каталитической активности, низкой стоимости и высокой стабильности. Более того, уникальные физико-химические свойства наноматериалов предоставляют больше возможностей для рационального дизайна и будущего применения. Сегодня разработка новых нанозимов проводится с помощью долгих и трудозатратных теоретических расчетов для априорного дизайна нанозимов, плохо учитывающие сложность системы и экспериментальных условий. В области нанозимов есть работы по проведению расчетов на основании различных алгоритмов, однако предиктивный алгоритм, и тем более многофункциональный ресурс для предсказания каталитической активности наноматериалов сделан нами впервые.

Основная часть

DiZume – веб-ресурс с открытым доступом для количественного предсказания пероксидазной активности наноматериалов. Ресурс содержит расширяемую базу данных наноматериалов с каталитической активностью, интерактивный визуализатор данных и алгоритмы машинного обучения для предсказания каталитической активности нанозимов различных уровней запросов пользователей. На данный момент ресурс предсказывает пероксидазную активность наноматериалов, выраженную как константу Михаэлис-Ментен (K_m) с $R^2 = 0.63$ и константу каталитической реакции (K_{cat}) с $R^2 = 0.80$. Для построения платформы нами была собрана и обработана база данных из более 100 опубликованных работ по нанозимам с металлическим и металл-оксидным основаниями. Были разработаны новые параметры, позволяющие более точно описать состав и физико-химические свойства наноматериалов. Были отобраны и оптимизированы алгоритмы машинного обучения, которые на основании характеристик материала и условий анализа позволяют предсказывать параметры каталитической реакции.

Выводы.

Ресурс облегчает разработку и оптимизацию наноматериалов с требуемой каталитической активностью и откроет новые границы для разработки нанозимов. Ресурс DiZume позволит осуществлять генеративный дизайн наноматериалов под каталитическую реакцию, используемую в медицине или промышленности, а также осуществит подбор синтетического пути создания нужного нанозима, исходя из технических требований к его физико-химическим свойствам. Кроме того, благодаря своему дизайну и структуре, платформа может быть легко расширена, чтобы охватить больше наноматериалов, больше каталитической активности и реализовать новые функциональные возможности.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке программы «Приоритет 2030»

Разливина Ю.С.

Виноградов В. В.