

## ГИБРИДНЫЙ ИИ/МД ПОДХОД ДЛЯ ДИЗАЙНА АНТИБИОТИКО-СВЯЗЫВАЮЩИХ ЦИКЛИЧЕСКИХ ПЕПТИДОВ

Буданов М. Я.<sup>1</sup>, Тальдаев А. Х.<sup>2</sup>

Научный руководитель – канд. хим. наук, доцент Серов Н. С.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Университет ИТМО

<sup>2</sup>Университет МФТИ

mikhailbudanov.2003@gmail.com

Работа выполнена в рамках темы НИРСИИ №640100 «Мультимодальное моделирование с использованием графов знаний для прогнозирования свойств и условной генерации сенсорных биополимеров».

### Введение

Рост антимикробной резистентности напрямую связан с присутствием остаточных количеств антибиотиков в пищевых продуктах, что обуславливает высокую потребность в разработке быстрых и доступных методов их контроля. Лабораторные подходы на основе высокоэффективной жидкостной хроматографии с тандемной масс-спектрометрией (ВЭЖХ–МС/МС) остаются эталонными, однако их высокая стоимость и длительность анализа ограничивают применение для экспресс-скрининга. В этой связи перспективным направлением является разработка циклических пептидных рецепторов, которые благодаря повышенной стабильности и высокой специфичности к различным мишеням рассматриваются как удобные инструменты идентификации различных мишеней [1, 2].

### Основная часть

Разработка циклических пептидных биосенсоров для выявления остаточных количеств антибиотиков открывает путь к созданию портативных электрохимических сенсоров, которые сочетают высокую чувствительность, оперативность анализа и доступную себестоимость [3, 4]. В рамках данной работы предлагается гибридный подход, объединяющий методы молекулярной динамики (МД) и алгоритмы искусственного интеллекта (ИИ). Молекулярная динамика выступает в роли инструмента для верификации стабильности образуемых комплексов пептид-антибиотик и детального анализа структурных особенностей связывания на атомном уровне. Параллельно с этим, генеративные нейросети, большие языковые модели и предсказательные модели машинного обучения используются для целенаправленного подбора и идентификации наиболее перспективных циклических последовательностей для связывания целевой молекулы. Такая синергия методов позволяет существенно снизить временные и финансовые затраты на ранних этапах дизайна рецепторов и закладывает фундамент для их последующего встраивания в компактные аналитические системы.

### Выводы

Предложенный подход, сочетающий молекулярную динамику и искусственный интеллект, позволяет целенаправленно проектировать циклические пептидные рецепторы для обнаружения антибиотиков. Это создает основу для разработки высокочувствительных и экспрессных методов контроля пищевой продукции.

### Литература

1. White C.J., Yudin A.K. Cyclic peptides for drug development // Nat. Chem. – 2011. – Vol. 3. – P. 509–524.
2. Zhang H., Chen S. Cyclic peptide scaffolds for biomolecular recognition // RSC Chem. Biol. – 2022. – Vol. 3. – P. 18–31.

3. Gaudin V. Advances in biosensor development for food safety // Biosens. Bioelectron. – 2017. – Vol. 90. – P. 363–377.
4. Yang K.K., Wu Z., Arnold F.H. Machine learning for protein engineering // Nat. Methods. – 2019. – Vol. 16. – P. 687–694.