**ИИ-платформа для прозрачного предсказания   
мультикаталитической активности нанозимов**

***Разливина Ю.С.1***

*Аспирант, 2 курс*

*1Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия*

*E-mail:* [razlivina@scamt-itmo.ru](mailto:razlivina@scamt-itmo.ru)

Нанозимы, имитирующие каталитическую активность ферментов, обладают значительным потенциалом в медицине и промышленности. Их высокая и настраиваемая каталитическая активность делает их идеальными для использования в диагностике и иммуноанализе. Особенно интерес представляет исследование множественной каталитической активности нанозимов, что открывает новые возможности для их применения.

Однако поиск новых нанозимов обычно представляет собой сложную задачу. В данной работе мы разработали подход машинного обучения для поиска новых нанозимов и развернули веб-платформу DiZyme, включающую уникальную базу данных нанозимов, прогнозирование каталитической активности, визуализацию данных и интерфейс DiZyme Assistant, работающий на основе большой языковой модели. Созданная в рамках исследования веб-платформа DiZyme [1] представляет собой мощный инструмент, включающий базу данных с более чем 1210 экспериментальными образцами, инструменты визуализации данных и интерфейс на основе большой языковой модели. Использование алгоритмов ансамблевого обучения позволило достичь высокой точности в предсказаниях каталитической активности, с коэффициентами детерминации R2 = 0.75 для константы Михаэлиса-Ментен и R2 = 0.77 для максимальной скорости реакции. Кроме того, мы расширили пространство характеристик, включив в него дескрипторы органических покрытий нанозимов, играющих решающую роль в настройке каталитического поведения и стабильности нанозимов. В целом эти дополнения позволили нам впервые разработать модели машинного обучения для прогнозирования нескольких каталитических активностей нанозимов и улучшить прогноз пероксидазной активности для поверхностно-модифицированных неорганических нанозимов. Мы систематически проверяли модели, оценивая их производительность на ранее не изученных данных, анализируя значимость признаков и способность моделей воспроизводить фундаментальные взаимосвязи в данных. DiZyme Assistant, основанный на модели ChatGPT, предоставляет пользователям вспомогательную информацию об экспериментальных образцах, такую как процедуры синтеза, протоколы измерений и т. д. Это исследование подчеркивает важность интеграции искусственного интеллекта в разработку нанозимов, открывая новые горизонты для их применения в биотехнологии и медицине.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда № 21-73-10150. Авторы также благодарят Федеральную программу академического лидерства "Приоритет 2030"*

**Литература**

1. Razlivina, J., Serov, N., Shapovalova, O., & Vinogradov, V. DiZyme: Open‐Access Expandable Resource for Quantitative Prediction of Nanozyme Catalytic Activity // Small. 2022, 2105673.