

Использование машинного обучения для прогнозирования характеристик аминокислот на основе заданной структуры

АВТОРЫ:

Кульшаева (Реснина) Татьяна

Реснин Александр

2024

Вступление

Наша модель способна прогнозировать значение изоэлектрической точки и константы диссоциации карбоксильных групп аминокислот в зависимости от строения молекулы.

Команда DeepMind, подразделение Google, создали нейросеть, которая по последовательностям аминокислот, показывает трехмерную структуру белка.

Ученые Массачусетского технологического института создали модель машинного обучения для прогнозирования комплекса, образуемого из двух белков.

Наша команда создала модель машинного обучения, способную прогнозировать значение изоэлектрической точки (pI) с высокой точностью. Как известно, для нахождения изоэлектрической точки, необходимо знать константы диссоциации кислотных и основных групп. **НО НЕ ВСЕГДА ЭТО ВОЗМОЖНО СДЕЛАТЬ БЫСТРО!**

Наш метод позволит управлять белками, так как при $pH < pI$ – молекула имеет положительный заряд, а $pH > pI$ – молекула имеет отрицательный заряд.

Уникальность нашей разработки в том, что на вход подается только структура молекулы. На выходе:
На выходе:

- Значение изоэлектрической точки;
- значение константы диссоциации карбоксильных групп аминокислот

**ПРОГНОЗИРОВАНИЕ
ЗНАЧЕНИЯ
ИЗОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ
ТОЧКИ БЕЛКА**

Точность,%	97
$(\text{mean_squared_error})^{(1/2)}$	24.65
mean_absolute_percentage_error	0.04
mean_absolute_error	21.29
mean_squared_error	607.58
max_error	33.72
d2_absolute_error_score	0.86

**ПРОГНОЗИРОВАНИЕ
КОНСТАНТЫ ДИССОЦИАЦИИ
КАРБОКСИЛЬНЫХ ГРУПП
АМИНОКИСЛОТ**

Точность,%	99
$(\text{mean_squared_error})^{(1/2)}$	0.88
mean_absolute_percentage_error	0.00
mean_absolute_error	0.87
mean_squared_error	0.77
max_error	0.92
d2_absolute_error_score	0.88

Команда проекта

Кульшаева (Реснина) Татьяна Вячеславовна - 2
высших (второе: инженер-Саратовский
государственный университет им. Н.Г.
Чернышевского, средний балл по диплому -
4.82).

Участник платформы Leader ID (Россия).

Участник проектно-образовательного интенсива
"Архипелаг-2021" (Россия).

Сертификат (доп. образование) «Самосборка и
самоорганизация в наносистемах (МГУ им. М. В.
Ломоносова)

Участник и призер Олимпиад по
нанотехнологиям (МГУ им. М. В. Ломоносова) –
Nanometer.ru

Участник Startup Tour/2022 (Сколково).

Знание английского языка (сертификат TOEFL-
США).

Знание программирования (сертификаты kaggle-
США-2021) – 14 штук.

Стажировка по программированию (Changellenge
- партнер Сколково-2022) – 17 штук.

Участник Всемирного Конгресса математиков
2022

Тел: 8(963)114-14-07

Nauka76@mail.ru

Реснин Александр Григорьевич - инженер
(Саратовский политехнический институт).

Участник платформы Leader ID (Россия).

Участник Startup Tour/2022 (Сколково).