

М.З. ЗГУРОВСЬКИЙ

Навчально-науковий комплекс «Інститут прикладного системного аналізу»
Національного технічного університету України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», Київ, Україна,
e-mail: *mzz@kpi.ua*.

П.О. КАСЬЯНОВ

Навчально-науковий комплекс «Інститут прикладного системного аналізу»
Національного технічного університету України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», Київ, Україна,
e-mail: *kasyanov@i.ua*.

Л.Б. ЛЕВЕНЧУК

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», Київ, Україна,
e-mail: *levenchuk.liudmyla@i.kpi.ua*.

В.Р. НОВИКОВ

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», Київ, Україна,
e-mail: *vlad.novykov@gmail.com*.

ІІІ-МЕТОДОЛОГІЯ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ БІЛКОВИХ ВЗАЄМОДІЙ У БІОЛОГІЧНИХ СИСТЕМАХ¹

Анотація. Запропоновано методологію розроблення інтелектуальної системи штучного інтелекту для моделювання білкових взаємодій у біологічних системах, що ґрунтується на рівняннях реакції-дифузії з багатозначними функціями взаємодії. Основною метою дослідження є апроксимація розв'язків цих рівнянь за допомогою високоефективних обчислювальних методів, зокрема фізично-інформаційних нейронних мереж (PINN) та методу Гальоркіна глибокого навчання (DLGM). Запропонована система використовує машинне навчання для моделювання складних біологічних процесів з урахуванням реальних клітинних умов. Автори розробили та обґрунтували обчислювальний алгоритм, який на сучасному рівні математичної строгості забезпечує апроксимацію розв'язків нескінченновимірних стохастичних задач оптимізації та демонструє більш високу ефективність порівняно з традиційними методами. Висока точність та швидкість отриманих результатів дають змогу розширити застосування цієї методології на інші типи диференціальних рівнянь з частинними похідними, зокрема для біологічних і медичних досліджень.

Ключові слова: рівняння реакції-дифузії, багатозначні функції взаємодії, машинне навчання, фізично-інформаційна нейронна мережа, апроксимаційний розв'язок.

ВСТУП

Моделювання білкових взаємодій у біологічних системах має вирішальне значення для глибокого розуміння життєвих процесів на молекулярному рівні. Структури білкових комплексів відіграють ключову роль у поясненні генетичних мутацій та їхнього впливу на функціонування організмів. Сучасні методи моделювання макромолекулярних взаємодій включають докінг та біомолекулярне моделювання. Хоча симуляції можуть забезпечити детальне уявлення про динаміку та кінетику взаємодій, вони часто обмежені у швидкості на атомарному рівні або надмірно спрощені у грубозернистих моделях.

¹ Робота частково підтримана грантом УНТЦ 7131 «Моделювання взаємодій білків для прогнозування фенотипічних ефектів генетичних мутацій», а також грантом «New Foundations and Algorithms for Risk-Aware Sequential Decision Processes with Defense Applications» («Нові засади та алгоритми для процесів послідовного прийняття рішень в умовах ризику для застосування в секторі безпеки») N00014-24-1-2646 – Long Range Broad Agency Announcement (BAA) for Navy and Marine Corps Science & Technology Управління штабу військово-морських досліджень США (м. Арлінгтон, штат Вірджинія, США). Дослідження Л.Б. Левенчук частково підтримані проектом НФДУ №2023.03/0074 «Нескінченновимірні еволюційні рівняння з багатозначною та стохастичною динамікою».