

УДК 57.081.23

***ИССЛЕДОВАНИЯ НА ОСНОВЕ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА КАК
НОВЫЙ СПОСОБ БИОЛОГИЧЕСКИХ НАБЛЮДЕНИЙ******Семкин Г. Г.****студент,**Белгородский государственный национальный исследовательский университет
Белгород, Россия¹***Аннотация.**

Человечество с давних времён пыталась «приоткрыть завесу тайны» нашего молекулярного устройства и внутреннего мира, однако такая возможность появилась сравнительно недавно. Её закономерным развитием стало использование искусственного интеллекта. В статье рассматривается прорывная разработка в области вычислительной биологии – модель искусственного интеллекта PPLM, созданная для предсказания межбелковых взаимодействий. В отличие от традиционных подходов, анализирующих отдельные белковые последовательности, PPLM обучена на более чем трёх миллионах белковых пар и применяет метод совместного кодирования, что позволяет улавливать как индивидуальные особенности, так и контекст взаимодействия. На базе этой модели созданы три специализированных инструмента: для прогнозирования самого взаимодействия, оценки прочности соединений и определения границ контакта. Приводятся данные о повышении точности прогнозов примерно на 17% по сравнению с ведущими аналогами, а также о преимуществе в сложных сценариях, таких как реакции «антиген–антитело». Подчёркивается высокий потенциал технологии для ускоренной разработки лекарств, углубленного изучения трудноизлечимых заболеваний (включая рак и генетические

¹Научный руководитель: **Яценко Ю.Н.**, к.филол.н., доцент, Белгородский государственный национальный исследовательский университет, Белгород, Россия.
Дневник науки | www.dnevniknauki.ru | СМИ Эл № ФС 77-68405 ISSN 2541-8327

патологии), а также для масштабного анализа генетических данных и становления персонализированной медицины.

Ключевые слова: Искусственный интеллект, вычислительная биология, медицина, клинические исследования, белковые соединения.

ARTIFICIAL INTELLIGENCE-BASED RESEARCH AS A NEW WAY OF BIOLOGICAL OBSERVATIONS

Semkin G. G.

student,

Belgorod State National Research University

Belgorod, Russia²

Abstract.

Since ancient times, mankind has been trying to "lift the veil of mystery" of our molecular structure and inner world, but this opportunity has appeared relatively recently. Its natural development was the use of artificial intelligence. The article discusses a breakthrough development in the field of computational biology – the PPLM artificial intelligence model, created to predict protein-protein interactions. Unlike traditional approaches that analyze individual protein sequences, PPLM is trained on more than three million protein pairs and uses a co-coding method, which allows it to capture both individual characteristics and the context of interaction. Based on this model, three specialized tools have been created: to predict the interaction itself, assess the strength of the joints, and determine the boundaries of contact. The data shows an increase in the accuracy of forecasts by about 17% compared to leading analogues, as well as an advantage in complex scenarios such as antigen–antibody reactions. The high potential of technology for accelerated drug development, in-depth

² *Scientific supervisor: Yatsenko Yu.N., PhD, Associate Professor, Belgorod State National Research University, Belgorod, Russia.*

study of intractable diseases (including cancer and genetic pathologies), as well as for large-scale analysis of genetic data and the development of personalized medicine is emphasized.

Keywords: Artificial intelligence, computational biology, medicine, clinical research, protein compounds.

Искусственный интеллект, который по скорости своего развития смог превзойти все возможные ожидания, стал по настоящему незаменимым инструментом в многочисленном арсенале человечества. Пройдя путь от простого поискового помощника, до полноразмерного консультанта в самых различных сферах деятельности. Исключением не будет являться медицина и биология, где возможности «умного ассистента» нашли применения в самых перспективных областях вышеупомянутых дисциплин, встав в авангарде научных разработок. Всего пару лет назад ИИ едва ли мог найти необходимую информацию в сети интернет, однако совсем недавно исследователям стало под силу разработать новую модель искусственного интеллекта, которая может с непревзойдённой точностью предсказывать взаимодействие белков друг с другом внутри организма. Подобное достижение может кратно ускорить разработку перспективных лекарств и углубить понимание таких трудноизлечимых заболеваний, как рак.

Межбелковые взаимодействия по своей сути взаимосвязаны, однако большинство современных моделей искусственного интеллекта обучаются на отдельных белковых последовательностях. Это ограничивает их способность в полной мере понять связь между белками и их связь друг с другом.

Чтобы решить эту проблему, исследовательская группа разработала PPLM – модель, специально разработанную для изучения межбелковых взаимосвязей во время обучения. Благодаря совместному кодированию парных белковых последовательностей, PPLM фиксирует как индивидуальные особенности

Дневник науки | www.dnevnika.ru | СМИ Эл № ФС 77-68405 ISSN 2541-8327

белков, так и зависящие от партнёра последовательности взаимодействия в рамках единой структуры. Модель была обучена на более чем трёх миллионах белковых пар, что позволило ИИ масштабнo изучать закономерности взаимодействия.

Построив себе прочный «фундамент» для дальнейших научных исследований, команда разработала три специализированных инструмента: **PPLM-PPI** для прогнозирования взаимодействия белков, **PPLM-Affinity** для оценки прочности соединений и **PPLM-Contact** для определения границ взаимодействия. В сравнении с эталонными наборами данных модель повысила точность прогнозирования взаимодействия примерно на 17% по сравнению с ведущими методами, обеспечив стабильное преимущество для нескольких видов. Стоит отметить, что модель превзошла как методы, основанные на последовательности, так и те, которые основаны на структуре сложных сценариев, таких как реакция антител с антигеном. Кроме того, модели удалось выявить закономерности, связанные со взаимодействием белков в условиях реальной жизни. В свою очередь это указывает на то, что нейросеть способна фиксировать едва уловимые биологически значимые взаимосвязи между подобными химическими веществами.

По мнению профессора: «Эта работа подчеркивает растущую роль ИИ в преобразовании наук о жизни. Переходя от анализа отдельных белков к моделированию с учетом взаимодействия, исследование закладывает основу для будущих достижений в области прогнозирования комплексов, состоящих из большого количества белковых соединений». Весьма интересным является и факт более активной вовлечённости нейросетей в биологию и медицину, что свидетельствует о растущей тенденции к использованию подобных технологий.

Повышая точность и масштабируемость моделирования взаимодействия белков PPLM может поддерживать широкий спектр приложений, включая обнаружение взаимодействия в масштабе протеома, идентификацию лекарственных мишеней и разработку терапевтических препаратов.

Дневник науки | www.dnevnika.ru | СМИ Эл № ФС 77-68405 ISSN 2541-8327

Искусственный интеллект действительно имеет большой потенциал, поскольку имеет возможность действовать там, где возможности человека достигают предела возможного:

- Разработка препаратов для трудноизлечимых болезней, таких как рак, ВИЧ, СПИД, и многих врождённых генетических заболеваний наподобие ДЦП и аутизма. Также велик потенциал в изучении психических заболеваний вроде шизофрении и различных менее тяжёлых недугов, например обсессивно-компульсивного расстройства. Ключевое преимущество заключается в возможности отслеживания различных закономерностей внутри организма человека и, как следствие, быстром обнаружении и даже предотвращении опасных болезней.
- Модели искусственного интеллекта также могут быть весьма полезны при использовании их в генетических исследованиях. В пример можно привести исследования по установлению родства между разными людьми, а также углубление понимания эволюционного пути человека в сравнении с другими представителями фауны планеты Земля.

Развитие генетических технологий и секвенирования ДНК открывает новые горизонты для персонализированной медицины. Сегодня генетическое тестирование становится неотъемлемой частью профилактики и диагностики, позволяя выявлять наследственную предрасположенность к заболеваниям, включая онкологические и кардиологические патологии, задолго до появления первых симптомов. Становится очевидным, что человечество ждёт стремительное расширение применения высоких технологий в медицинской диагностике и генетической практике. Важно отметить, что успешное внедрение инноваций требует решения правовых, этических и организационных вопросов, что становится приоритетной задачей для государственных и частных структур здравоохранения.

Библиографический список

1. Gong J., Zhao Z., Niu X., Ji Y., Sun H., Shen Y., Chen B., Wu B. AI reshaping life sciences: intelligent transformation, application challenges, and future convergence in neuroscience, biology, and medicine // *Frontiers in Digital Health*. – 2025. – Vol. 7. – doi: <https://doi.org/10.3389/fdgth.2025.1666415>.
2. Hein Z.M., Guruparan D., Okunsai B., Che Mohd Nassir C.M.N., Ramli M.D.C., Kumar S. AI and Machine Learning in Biology: From Genes to Proteins// *Biology*. – 2025. – Vol. 14, №10 – doi: <https://doi.org/10.3390/biology14101453>.
3. Trasca D.-M., Dorin P.I., Carmen S., Varut R.-M., Singer C.E., Radivojevic K., Stoica G.A. Artificial Intelligence in Biomedicine: A Systematic Review from Nanomedicine to Neurology and Hepatology // *Pharmaceutics*. – 2025. – Vol. 17, №12. – doi: <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics17121564>.
4. Балунув И.О., Михалищина А.С., Венерин А.А., Глазачев О.С. Технологии искусственного интеллекта в медико-биологических исследованиях адаптации и дезадаптации человека к различным факторам среды/ Балунув И.О., Михалищина А.С., Венерин А.А., Глазачев О.С. // *Экология человека*. - 2025. - Т. 32. - №1. - С. 7-19.