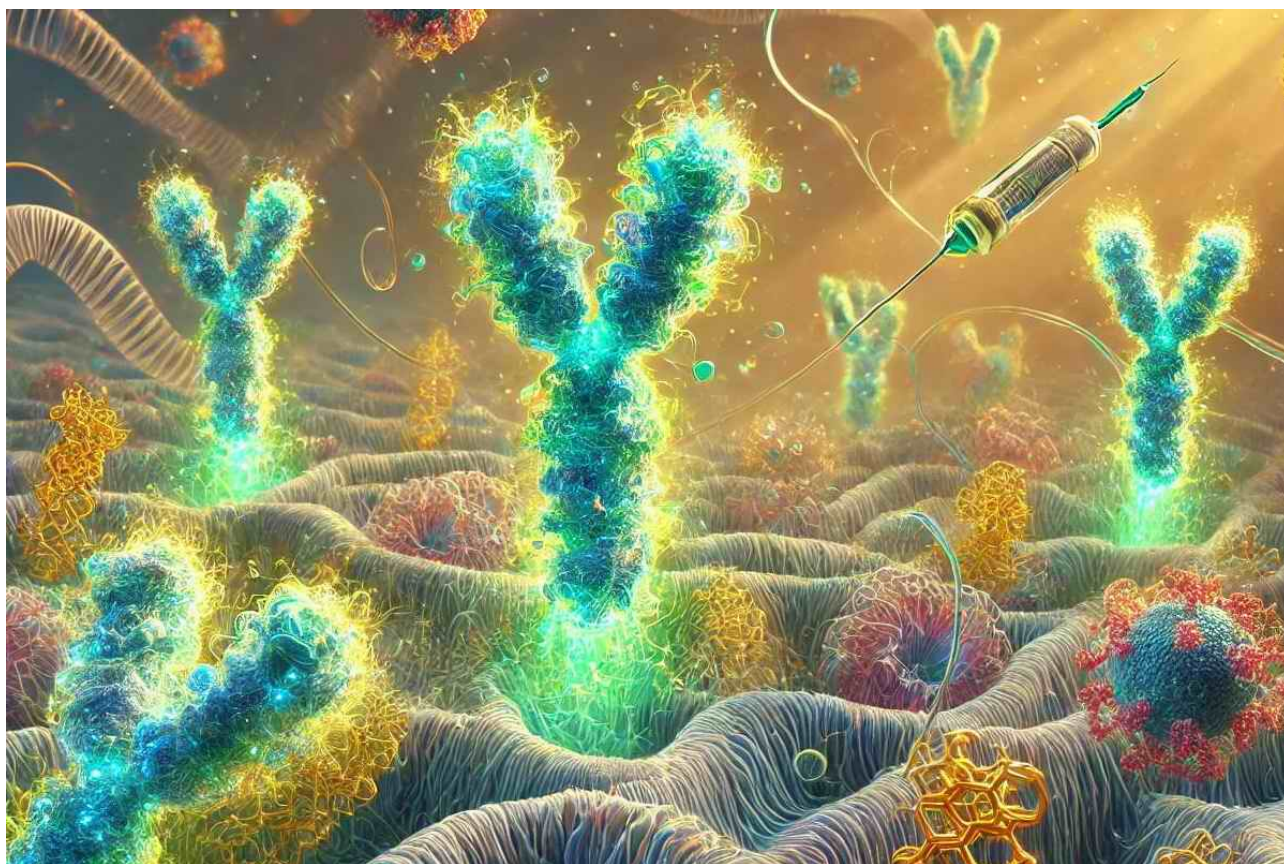


Искусственный интеллект в исследовании антител: новый шаг к эффективным лекарствам



Дата публикации: 11.01.2025

Учёные Массачусетского технологического института совершили значительный прорыв в области биоинформатики, разработав искусственный интеллект, способный с высокой точностью предсказывать структуры антител. Эта технология открывает новые возможности для медицины, позволяя ускорить разработку препаратов, минимизировать расходы и повысить эффективность лечения инфекционных заболеваний.

Одной из главных задач в изучении антител является их уникальная изменчивость. Гипервариабельные области — ключевые участки антител, которые взаимодействуют с антигенами, — имеют чрезвычайно разнообразные последовательности, что затрудняет прогнозирование их структур. Антитела содержат Y-образную структуру, где гипервариабельные области находятся на концах "ветвей". Именно эти области обеспечивают способность иммунной системы реагировать на широкий спектр патогенов, но их сложность ставит вызов традиционным методам анализа.

Команда MIT разработала модель AbMap, которая использует большие языковые модели, изначально созданные для анализа текстов, чтобы расшифровывать последовательности аминокислот антител и прогнозировать их структуры. AbMap состоит из двух модулей: первый обучается на данных Protein Data Bank, где представлены структурные данные более 3000 антител, а второй анализирует данные о взаимодействии антител с антигенами, что позволяет оценить их эффективность.

Как ИИ меняет подход к изучению антител

AbMap применяет комбинацию моделей и алгоритмов, чтобы находить наиболее перспективные структуры антител. Это позволяет просеивать миллионы вариантов гипервариабельных областей, чтобы выбрать те, которые наиболее эффективно связываются с патогенами. В ходе экспериментов, проведённых на антителах, предназначенных для нейтрализации SARS-CoV-2, модель показала невероятные результаты. После генерации миллионов вариантов антител и их кластеризации для выявления схожих структур, AbMap предложила варианты, 82% из которых продемонстрировали улучшенную силу связывания с антигенами.

Эта технология значительно сокращает затраты на начальные этапы разработки лекарств. Используя AbMap, [фармацевтические](#) компании могут избегать испытаний неэффективных вариантов антител, концентрируясь на тех, которые имеют наибольший потенциал. Например, вместо одного-двух кандидатов теперь можно тестировать несколько групп антител, что значительно повышает шансы на успех клинических испытаний.

Кроме того, модель имеет потенциал для изучения иммунных реакций на индивидуальном уровне. Репертуар антител каждого человека уникален, и анализ их структур может объяснить, почему некоторые люди более устойчивы к определённым инфекциям, например, ВИЧ или COVID-19. AbMap позволяет не просто сравнивать последовательности антител, но и учитывать их трёхмерные структуры, что даёт более глубокое понимание механизмов иммунного ответа.

Применение AbMap выходит за рамки изучения инфекционных заболеваний. Эта модель может использоваться для анализа аутоиммунных состояний, онкологических заболеваний и даже для создания персонализированных терапий, основанных на уникальных антителах каждого пациента.

Сравнение структур антител показало, что, учитывая их пространственные характеристики, совпадения между людьми составляют значительно больше, чем предполагалось ранее. Это открытие может изменить подходы к изучению иммунитета, позволяя не только понимать механизмы защиты, но и

проектировать вакцины нового поколения.

Прорывная работа MIT — это не только важный шаг для науки, но и мост к новым стандартам в биомедицине. Использование искусственного интеллекта для изучения гипервариабельных областей антител позволяет ускорить разработку лекарств и приблизить нас к персонализированной медицине будущего. Технологии, лежащие в основе AbMap, могут изменить правила игры в лечении инфекционных заболеваний и существенно повысить качество здравоохранения по всему миру.

Ссылка: «Изучение языка гипервариабельности антител» DOI: [10.1073/pnas.2418918121](https://doi.org/10.1073/pnas.2418918121).