

# Сгенерированные языковой моделью белков последовательности ферментов демонстрируют высокую стабильность в симуляциях молекулярной динамики

**Источник:** Frontiers in AI — Medicine

**Оригинал:** <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/frai.2026.1844189>

белковая инженерия

молекулярная динамика

структурная стабильность

ферменты

языковые модели

## Введение

Большие языковые модели (LLM) преобразовали белковую инженерию, улавливая сложные закономерности последовательностей из больших наборов данных, что позволяет решать такие задачи, как предсказание структуры и функциональная аннотация. Finenzyme применяет условное трансферное обучение для генерации биологически правдоподобных последовательностей ферментов, обусловленных номерами Комиссии по ферментам (EC).

## Методы

В данной работе мы расширили Finenzyme с помощью конвейера отбора *in silico*, который сначала идентифицирует сгенерированные последовательности, наиболее вероятно сохраняющие или улучшающие функциональные характеристики конкретных категорий EC, а затем оценивает их с помощью молекулярно-динамических (МД) симуляций для оценки их структурной стабильности и конформационной динамики.

## Результаты

МД-симуляции 236 ферментов, сгенерированных Finenzyme, в рамках четырех классов ЕС (общее время симуляции 59 мкс) подтвердили высокую структурную стабильность. Во всех классах ферментов 74–95% моделей сохраняли стабильные третичные структуры и корректную укладку на протяжении всех траекторий, при этом 195 из 236 структур (82,6%) демонстрировали устойчивую стабильность.

## Обсуждение

Сочетая тонкую настройку условной предварительно обученной языковой модели с динамической структурной оценкой, наш подход выходит за рамки статических предсказаний на основе последовательностей, чтобы охватить структурные и функциональные аспекты поведения ферментов — ключевые факторы как для биомедицинских, так и для промышленных применений.

---

Перевод выполнен: 04.09.2026 | ai4med.ru

Машинный перевод. Рекомендуем сверять с оригиналом при клиническом использовании.