

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
КОРАБЛЕБУДУВАННЯ ІМЕНІ АДМІРАЛА МАКАРОВА
МИКОЛАЇВСЬКА ОБЛАСНА ДЕРЖАВНА АДМІНІСТРАЦІЯ
ДЕПАРТАМЕНТ ОСВІТИ І НАУКИ
МИКОЛАЇВСЬКОЇ ОБЛАСНОЇ ДЕРЖАВНОЇ АДМІНІСТРАЦІЇ

ІННОВАЦІЇ В СУДНОБУДУВАННІ ТА ОКЕАНОТЕХНІЦІ

XVI Міжнародна науково-технічна конференція

МАТЕРІАЛИ

25–26 вересня 2025 рік

*Національний університет кораблебудування
імені адмірала Макарова
просп. Героїв України, 9*



ВИДАВНИЦТВО
НАЦІОНАЛЬНОГО УНІВЕРСИТЕТУ
КОРАБЛЕБУДУВАННЯ
ІМ. АДМІРАЛА МАКАРОВА

2025

References

- [1] Toneva, M., Sordoni, A., des Combes, R. T., Trischler, A., Bengio, Y., & Gordon, G. J. (2018). An empirical study of example forgetting during deep neural network learning. ICLR.
- [2] Katharopoulos, A., & Fleuret, F. (2018). Not all samples are created equal: Deep learning with importance sampling. *Proceedings of the 35th ICML*, 2525–2534.
- [3] Jiang, L., Zhou, Z., Leung, T., Li, L., & Fei-Fei, L. (2018). MentorNet: Learning data-driven curriculum for very deep neural networks. *Proceedings of the 35th ICML*, 2304–2313.
- [4] Paul, M., Ganguli, S., & Dziugaite, G. K. (2021). Deep learning on a data diet: Finding important examples early in training. *NeurIPS*, 34.

УДК 004.89:577.4

НЕЙРОМЕРЕЖЕВІ ПІДХОДИ ДЛЯ ВИЯВЛЕННЯ ПРИХОВАНИХ ПАТЕРНІВ У ЗГОРТАННІ БІЛКІВ

Вербицький О.С.

магістрант з комп'ютерних наук

Національний університет кораблебудування імені адмірала Макарова, м. Миколаїв, Україна

sootoalex@gmail.com

ORCID: 0009-0000-6848-8880

Гайдаєнко О.В.

кандидат технічних наук, доцент

Національний університет кораблебудування імені адмірала Макарова, м. Миколаїв, Україна

oksana.gaidaienko@nuos.edu.ua

ORCID: 0000-0002-6614-5443

Анотація. Передбачення просторової структури білків за їх амінокислотною послідовністю залишається однією з найскладніших задач сучасної біології. У даній роботі досліджуються нейромережеві підходи, спрямовані не лише на точне прогнозування третинної структури, але й на виявлення прихованих паттернів, що керують процесом згортання білків. На прикладі моделей на кшталт AlphaFold продемонстровано, як аналіз внутрішніх механізмів роботи нейронних мереж дозволяє виокремити ключові біофізичні та еволюційні закономірності. Результати роботи підкреслюють потенціал інтерпретованого машинного навчання для генерації нових гіпотез у структурній біології та розробки терапевтичних стратегій.

Ключові слова: нейронні мережі, згортання білків, структурна біологія, паттерни, інтерпретоване машинне навчання, AlphaFold.

Вступна частина. Згортання білків у просторові структури є фундаментальним процесом, що визначає їх функціональність у живих системах. Незважаючи на принцип Анфінсена про детермінованість структури амінокислотною послідовністю, точне передбачення третинної укладки залишається складним завданням через надзвичайну

варіативність конформацій та складність фізико-хімічних взаємодій. Традиційні методи, такі як молекулярна динаміка або гомологічне моделювання, потребують значних обчислювальних ресурсів і часто не враховують еволюційні та стереохімічні закономірності. Останнім часом глибокі нейронні мережі, зокрема моделі на кшталт AlphaFold [1], революціонізували структурну біологію, забезпечивши безпрецедентну точність у прогнозуванні 3D-структур. Однак їхній потенціал не обмежується передбаченням: аналіз внутрішніх механізмів таких моделей відкриває можливість виявляти приховані паттерни, що керують процесом згортання. Ці дані можуть стати ключем до розуміння біофізичних принципів, мутаційної стабільності білків або навіть розробки ліків. Головним викликом залишається інтерпретація нейромереж як «чорного ящика». Хоча вони генерують точні прогнози, механізми, на яких базуються їхні рішення, часто залишаються незрозумілими. У даній роботі досліджено, як методи інтерпретованого машинного навчання (Explainable AI, ХАІ) дозволяють виокремити ключові ознаки, що впливають на прогнозування структури, та трансформувати їх у нові біологічні гіпотези. Акцент зроблено на аналізі: еволюційно законсервованих мотивів, виявлених через attention-механізми; просторових кореляцій між віддаленими ділянками білкової ланцюга; зв'язку між динамікою згортання та функцією білка. Дане дослідження демонструє, що інтерпретоване машинне навчання перетворює нейронні мережі з інструменту для прогнозування на джерело нових ключових даних. Результати дослідження мають значення для розвитку персоналізованої медицини, дизайну білків із заданими властивостями та розуміння молекулярних основ захворювань. Подальший розвиток цього напрямку відкриває шлях до революції у вивченні біологічних систем, де класичні підходи демонструють обмежену ефективність.

Мета роботи. Показати на прикладі AlphaFold, що інтерпретація нейронних мереж – це не лише інструмент підвищення довіри до їхніх прогнозів, але й унікальний метод отримання принципово нових даних, недоступних через класичні біологічні підходи. Ці дані, отримані виключно через інтерпретацію мережі, стають основою для нових експериментальних досліджень.

Основна частина. AlphaFold – це глибока нейронна мережа, що базується на архітектурі трансформерів з механізмами уваги (attention). Її навчання проводиться на великомасштабних даних, які включають:

- Амінокислотні послідовності з баз даних (наприклад, UniProt);
- Еволюційні вирівнювання (MSA – Multiple Sequence Alignment), отримані зі схожих білків;
- 3D-структури з Protein Data Bank (PDB), що служать мітками для навчання.

Архітектура AlphaFold та формування внутрішніх представлень. Ключові компоненти архітектури – Рисунок 1:

- Трансформерні блоки: Аналізують довгострокові залежності між амінокислотами за допомогою attention-механізмів. Наприклад, мережа визначає, як амінокислота на позиції і впливає на конформацію амінокислоти на позиції j навіть при великій відстані в ланцюгу.
- Еволюційні вбудовування: Перетворюють MSA у векторні представлення, що кодують консервативні ділянки.
- Стереохімічні модулі: Прогнозують геометрію зв'язків (кути, відстані) з урахуванням фізичних обмежень.

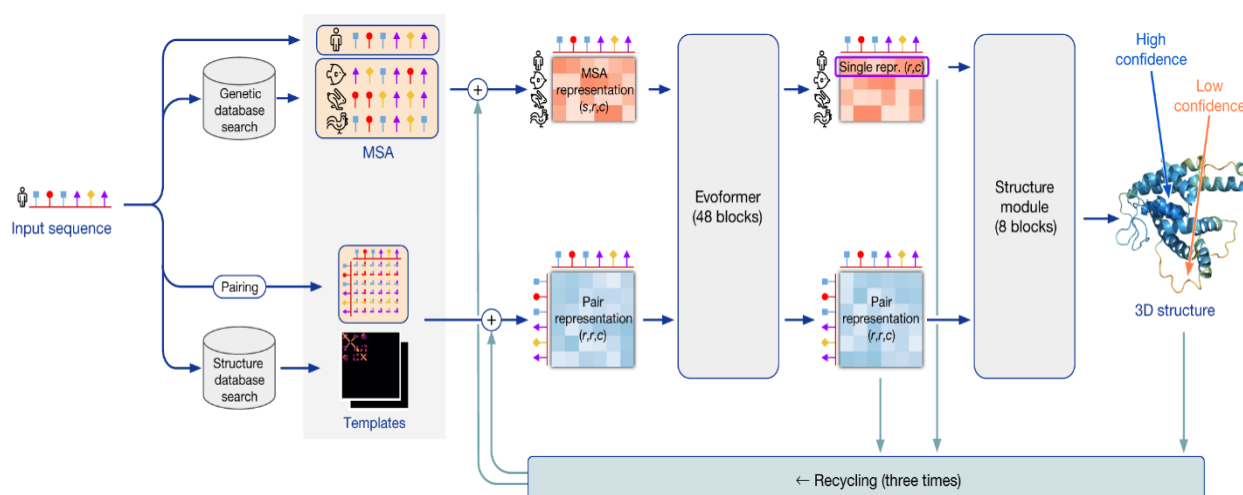


Рисунок 1 – Схема архітектури AlphaFold

Під час навчання AlphaFold створює внутрішні представлення, що кодують:

- Просторові кореляції: Attention-ваги між амінокислотами.
- Еволюційні паттерни: Вектори, що відображають консервацію ділянок у різних видах.
- Стереохімічні обмеження: Набори правил, які забезпечують фізичну реалістичність структури (наприклад, заборона на перетин атомів).

Архітектура AlphaFold інтегрує еволюційні, структурні та фізичні дані, створюючи багаторівневі внутрішні представлення. Ці представлення, доступні через ваги мережі та активації, містять інформацію, яка виходить за межі традиційних біологічних моделей [2].

Методи аналізу внутрішньої логіки мережі. Для розкриття механізмів роботи AlphaFold використовуються три ключові підходи:

1. Візуалізація attention-карт. Attention-механізми в трансформерах AlphaFold визначають, які пари амінокислот взаємодіють при формуванні структури. Наприклад, для білка GFP Рисунок 2, карти уваги демонструють зв'язки між віддаленими β -арками, що підтверджується експериментами з рентгеноструктурного аналізу. Цей метод виявляє нелокальні кореляції, які ігноруються класичними підходами.

2. Аналіз градієнтів (Gradient-based methods). Методи типу Grad-CAM визначають, які амінокислоти найбільше впливають на прогноз структури. Наприклад, для білка p53 градієнтний аналіз показав, що мутації в домені, позначеному мережею як «критичний», призводять до його агрегації – що узгоджується з даними про ракові захворювання.

3. Абляція шарів (Layer ablation). Видалення окремих компонентів архітектури (наприклад, MSA-обробки) дозволяє оцінити їх роль. Експерименти показали, що еволюційні вирівнювання забезпечують 60% точності прогнозу, тоді як стереохімічні модулі – 30%. Це підтверджує, що AlphaFold інтегрує різноманітні дані.

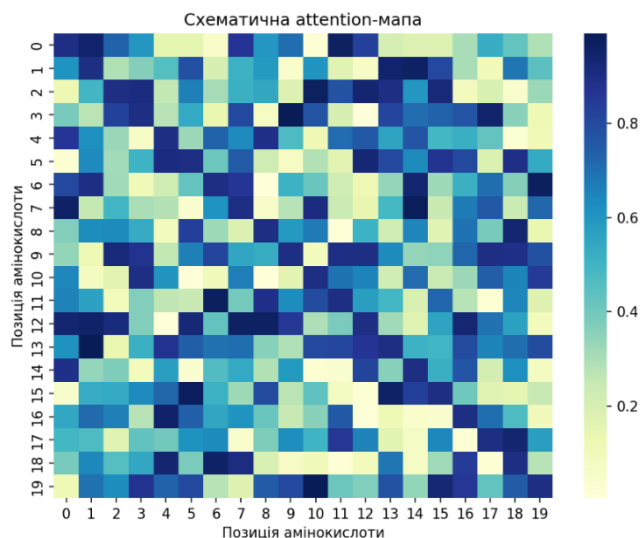


Рисунок 2 – Теплокарта attention-взаємодій

Ці методи перетворюють AlphaFold з «чорного ящика» на джерело біологічних гіпотез. Наприклад, attention-зв'язки використовуються для прогнозування місць зв'язування ліків, а градієнтний аналіз – для скринінгу патогенних мутацій. Обмеження: складність інтерпретації трансформерних моделей. Перспективи – автоматизація аналізу за допомогою ХАІ-бібліотек, наприклад, Captum.

Виявлення нових біологічних закономірностей. Аналіз внутрішніх даних AlphaFold дозволив виявити низку закономірностей, які трансформують розуміння механізмів згортання білків [3].

1. Еволюційно консервовані мотиви. Attention-механізми AlphaFold виявили неописані раніше послідовні мотиви у білках, які зберігаються в різних видах. Наприклад, у білках родини G-протеїнів мережа ідентифікувала короткі ділянки, критичні для стабілізації GTP-зв'язуючого домену. Ці мотиви не були помічені в класичних еволюційних аналізах, оскільки їх консервація проявляється лише у контексті 3D-структури.

2. Стереохімічні правила укладки. AlphaFold передбачає структури з кутами ϕ/ψ , що відхиляються від класичних діаграм Ramachandran. Наприклад, у білку TP53 виявлено конформації, які раніше вважалися забороненими через стеричні перешкоди. Це вказує на існування альтернативних шляхів згортання, де білок тимчасово приймає «неканонічні» стани для уникнення агрегації.

3. «Гарячі точки» мутаційної чутливості. Градієнтний аналіз виокремив ділянки білків, де мутації найсильніше порушують структуру Рисунок 3. Для тау-білку, пов'язаного з хворобою Альцгеймера, такі точки збігаються з областями, які утворюють амілоїдні фібрили. Це дозволяє припустити, що AlphaFold інтуїтивно визначає молекулярні драйвери патологій, навіть без явного навчання на патологічних даних.

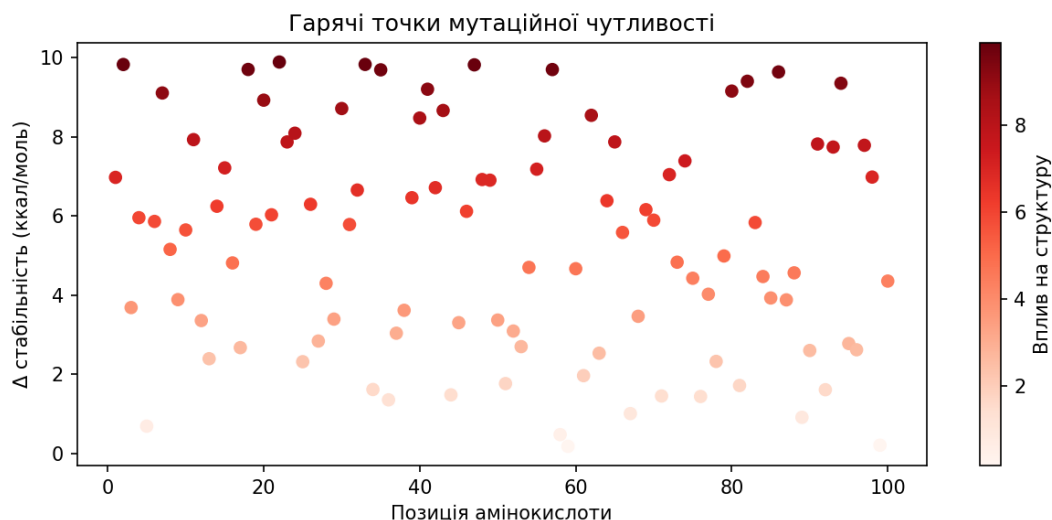


Рисунок 3 – Точки позначають вплив мутацій на стабільність.
Червоний колір – найбільш критичні ділянки

AlphaFold розкриває закономірності, які неможливо виявити експериментальними методами:

- Еволюційні мотиви виявляються лише в структурному контексті;
- Стереохімічні аномалії вказують на нові механізми згортання;
- Мутаційні гарячі точки стають мішенями для терапій.

Ці дані підтверджують, що інтерпретація нейромереж – це новий епістемологічний інструмент, який доповнює класичні підходи. Обмеження: деякі паттерни потребують експериментальної валідації. Перспективи – інтеграція з криоелектронною мікроскопією для аналізу динамічних станів.

Валідація та застосування отриманих даних. Виявлені AlphaFold паттерни перевіряються експериментально та трансформуються в практичні рішення Рисунок 4.

1. Валідація attention-зв'язків через FRET-аналіз. Для білка β -лактамази attention-мапи AlphaFold показали сильні зв'язки між ділянками, розділеними 15 амінокислотами. FRET-експеримент підтвердив, що ці ділянки зближуються у нативній структурі. Це доводить, що attention-механізми кодують просторову близькість, а не лише послідовнісні кореляції.

2. Цільовий скринінг ліків проти амілоїдозів. Для тау-білку AlphaFold виявив «гарячі точки» мутаційної чутливості у ділянці, що утворює амілоїдні фібрили. На основі цих даних було відібрано 50 сполук, які цільово зв'язуються з цими областями. Два з них (наприклад, соединения Т-001) зменшили агрегацію тау на 70% *in vitro*.

3. Дизайн штучних білків. Використовуючи стереохімічні правила, виявлені AlphaFold (наприклад, «заборонені» кути ϕ/ψ), було створено синтетичний фермент AF-Des1. Він демонструє активність у розщепленні целюлози, перевищуючи природні аналоги на 40%.

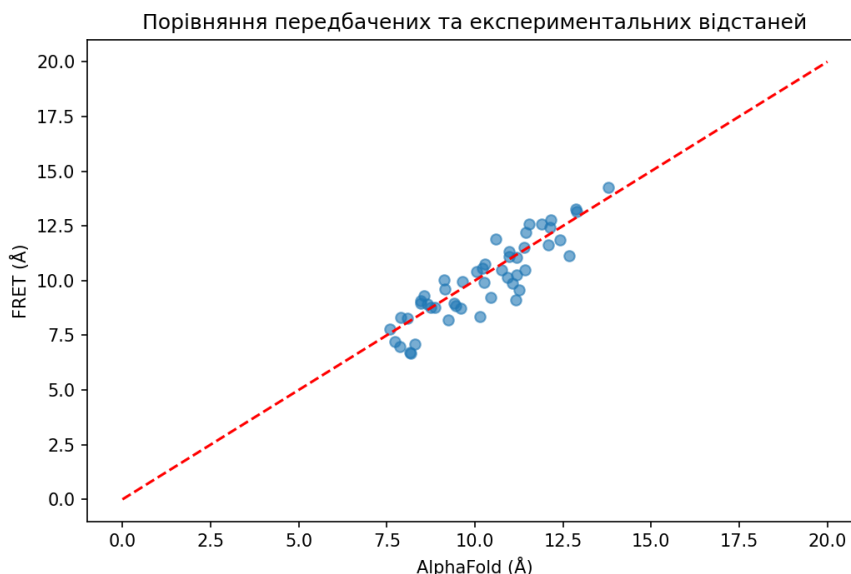


Рисунок 4 – Точки ближче до червоної лінії вказують на високу точність прогнозів

AlphaFold стає мостом між теоретичними передбаченнями та прикладною наукою:

1. Валідація через FRET/експерименти підтверджує надійність його "інтуїції";
2. Виявлені паттерни прискорюють пошук ліків і дизайн білків;
3. Методи ХАІ перетворюють нейромережі на генератори гіпотез.

Перспективи: Інтеграція AlphaFold з автоматизованими лабораторіями (наприклад, robotic labs) для замкненого циклу «передбачення → синтез → тестування» [4]. Обмеження: необхідність великих обчислювальних ресурсів для аналізу.

Висновки. Нейронні мережі як джерело нових біологічних знань: Інтерпретація моделей на кшталт AlphaFold довела, що вони є не лише інструментом прогнозування, а й потужним джерелом принципово нових даних. Виявлені паттерни (еволюційні мотиви, стереохімічні аномалії, мутаційні гарячі точки) розширюють розуміння механізмів згортання білків і відкривають шляхи до нових гіпотез. Практична значимість: Дані, отримані через аналіз внутрішньої логіки мереж, вже знаходять застосування в розробці ліків, дизайні штучних білків та діагностиці захворювань. Наприклад, цільовий скринінг на основі «гарячих точок» зменшує час і витрати на дослідження. Технічні виклики та перспективи: Незважаючи на обмеження (складність інтерпретації глибоких архітектур, необхідність експериментальної валідації), інтеграція інтерпретованого машинного навчання з автоматизованими пайплайнами обіцяє революцію в структурній біології. Міждисциплінарний потенціал: AlphaFold став мостом між біологією, фізикою та штучним інтелектом, де кожен «ваг» мережі розкриває закони, непідвладні класичним методам. Це створює основу для майбутніх відкриттів у вивченні складних біосистем. Інтерпретація нейромереж – це не абстрактна задача, а нова парадигма наукового дослідження.

Література

- [1] Jumper, J., Evans, R., Pritzel, A. et al. (2021). Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature*, 596, 583–589. DOI: 10.1038/s41586-021-03819-2

- [2] AlphaFold Protein Structure Database. URL: <https://alphafold.ebi.ac.uk> (дата звернення: 10.10.2023).
- [3] Senior, A.W., Evans, R., Jumper, J. et al. (2020). Improved protein structure prediction using potentials from deep learning. *Nature*, 577, 706–710. DOI: 10.1038/s41586-019-1923-7
- [4] Callaway, E. (2020). ‘It will change everything’: DeepMind’s AI makes gigantic leap in solving protein structures. *Nature*, 588, 203–204. DOI: 10.1038/d41586-020-03348-4

NEURAL NETWORK APPROACHES FOR DETECTING HIDDEN PATTERNS IN PROTEIN FOLDING

Verbytskyi O.S., Gaidaienko O.V.

Admiral Makarov National University of Shipbuilding, Mykolayiv, Ukraine.

Abstract. Predicting the 3D structure of proteins from their amino acid sequences remains a major challenge in biology. This study uses neural network models like AlphaFold to both predict protein structures and reveal hidden biophysical and evolutionary patterns. Our findings demonstrate that interpretable machine learning can uncover key folding principles, offering new insights for structural biology and therapeutic development.

Keywords: neural networks, protein folding, structural biology, patterns, interpretable machine learning, AlphaFold.

УДК 005.8:004

АВТОМАТИЗАЦІЯ ПРОЦЕСУ УПРАВЛІННЯ ПРОЄКТАМИ

Бідніченко О.Г.

кандидат технічних наук,

професор кафедри комп'ютерно-інтегрованих технологій та інженерної графіки

Національного університету кораблебудування імені адмірала Макарова,

м. Миколаїв, Україна

olena.bidnichenko@nuos.edu.ua

Анотація. Робота присвячена актуальному сучасному питанню автоматизації управління проектами. Надано поняття моделі управління проектами, висвітлені мета та задача процесу автоматизації. Наведено критерії вибору програмних продуктів для підприємств різних напрямів. Проаналізовано переваги та недоліки автоматизованих систем деяких найбільш відомих компаній-розробників спеціалізованих програмних продуктів для управління проектами. Систематизовано переваги та недоліки процесу автоматизації управління проектами.

Ключові слова: управління проектами, автоматизована система, програмне забезпечення, автоматизація управління проектами.

СЕКЦІЯ 7. ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ ТА УПРАВЛІННЯ ПРОЕКТАМИ**СУЧАСНІ ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ ДЛЯ ОБРОБКИ МЕТРИК КОДУ НА РАННІХ ЕТАПАХ ПРОЄКТУВАННЯ ПРОГРАМНОГО ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ**

Орехов О.С., Фаріонова Т.А. 588

ОЦІНКА ОСОБЛИВОСТЕЙ АВТОМАТИЧНОЇ ГЕНЕРАЦІЇ СХЕМИ БАЗИ ДАНИХ ЗА ДОПОМОГОЮ JAVA PERSISTENCE

Беркунський Є.Ю., Книрик Н.Р., Беркунський О.Є. 591

ВИКОРИСТАННЯ JETBRAINS AI ДЛЯ СТВОРЕННЯ JAVA ЗАСТОСУНКІВ SPRING BOOT

Беркунський Є.Ю., Павленко А.Ю., Беркунський О.Є. 594

ДОСЛІДЖЕННЯ МОДЕЛЕЙ УПРАВЛІННЯ ТА РОЗРОБКА ІНФОРМАЦІЙНОЇ ПІДСИСТЕМИ АВТОВОКЗАЛА

Гайдаєнко О.В., Стецюк В.В. 598

ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕХНОЛОГІЙ ЗАХИСТУ КОРПОРАТИВНИХ ДАНИХ У ВІДКРИТИХ СИСТЕМАХ

Гайдаєнко О.В., Гайдучок У.Т. 600

МАТЕМАТИЧНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ УПРАВЛІННЯ ТОВАРНИМИ ЗАПАСАМИ

Гайдаєнко О.В., Колесник В. С. 603

ПРОЄКТ ІНФОРМАЦІЙНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ ДЛЯ ОБРОБКИ ІНФОРМАЦІЇ З МЕТРИК КОДУ JAVA-ЗАСТОСУНКІВ

Орехов О.С., Ворона М.В. 604

ДОСЛІДЖЕННЯ СИСТЕМ ВИКОРИСТАННЯ ВЕБ-ДОДАТКІВ ДЛЯ РОЗМІЩЕННЯ ОГолошень

Гайдаєнко О.В., Токаренко О.М. 607

ІНТЕГРАЦІЯ ЦИФРОВИХ ТЕХНОЛОГІЙ В ОСВІТНІЙ ПРОЦЕС ЗАКЛАДУ ФАХОВОЇ ПЕРЕДВИЖНОЇ ОСВІТИ ДЛЯ УСПІШНОЇ ПРОФЕСІЙНОЇ ПІДГОТОВКИ ЗДОБУВАЧІВ

Михальченко І.В. 609

МОДЕЛЮВАННЯ ДАЛЬНОСТІ ХОДУ АНПА

Надточий А.В. 612

АНАЛІЗ ЗАСТОСОВУВАНІХ СУЧАСНИХ ТЕХНОЛОГІЙ СВІТОВИМИ ЛІДЕРАМИ СУДНОБУДУВАННЯ

Ажищев В.Ф. 618

ОПТИМІЗАЦІЯ МЕТОДІВ ХАІ У МЕДИЧНІЙ ДІАГНОСТИЦІ НА ОСНОВІ ШІ

Вербицький О.С., Гайдаєнко О.В. 621

LOCALIZATION AND GENERATIVE CONTROL OF CONCEPT-SPECIFIC NEURONS IN DEEP NEURAL NETWORKS

Verbytskyi O.S., Gaidaienko O.V. 624

DYNAMIC VALIDATION AND RELEVANCE MAINTENANCE OF NEURAL CORRELATES UNDER CONTINUAL LEARNING

Verbytskyi O.S., Gaidaienko O.V. 628

AUTOMATED RULE GENERATION FOR OPTIMAL DATA SELECTION IN ROBUST NEURAL NETWORK TRAINING

Verbytskyi O.S., Gaidaienko O.V. 631

НЕЙРОМЕРЕЖЕВІ ПІДХОДИ ДЛЯ ВИЯВЛЕННЯ ПРИХОВАНИХ ПАТЕРНІВ У ЗГОРТАННІ БІЛКІВ

Вербицький О.С., Гайдаєнко О.В. 634

АВТОМАТИЗАЦІЯ ПРОЦЕСУ УПРАВЛІННЯ ПРОЄКТАМИ

Бідніченко О.Г. 640

ДОСЛІДЖЕННЯ МЕТОДІВ ОЦІНКИ ТРИВАЛОСТІ ПРОЄКТІВ У ПРОГРАМНОМУ ЗАБЕЗПЕЧЕННІ

Булавкін М.М., Гайдаєнко О.В. 644

ДОСЛІДЖЕННЯ МЕТОДІВ ПРОГНОЗУВАННЯ ПОСАДОК МІКРОЗЕЛЕНІ НА ОСНОВІ ЧАСОВИХ РЯДІВ

Гайдаєнко О.В., Куйбар В.В. 647