

**Компьютерная реконструкция генных сетей заболеваний:
образование и онлайн-инструменты биоинформатики**

Туркина В.А., Савина Е.А., Вишнякова Е.В., Орлова Н.Г., Орлов Ю.Л.*

Первый Московский государственный медицинский университет им. И.М. Сеченова
Министерства здравоохранения Российской Федерации (Сеченовский университет),
Москва, Россия

Финансовый университет при Правительстве Российской Федерации,
Москва, Россия

* orlov@d-health.institute

Современное образование в биологии и медицине требует использования студентами открытых компьютерных средств для моделирования (онлайн-инструментов). Использование онлайн-инструментов биоинформатики позволяет реконструировать белок-белковые и генные сети, отрабатывать навыки системно-биологического моделирования для студентов. При этом вместе с биологическими и медицинскими данными необходимо знание математики, компьютерных методов. Мы рассматривали вопросы компьютерной реконструкции генных сетей – комплексов взаимодействующих макромолекул – по списку генов, ассоциированных с тем или иным заболеванием или комплексным расстройством на основе общедоступных онлайн-инструментов биоинформатики – STRING-DB, GeneMANIA, приложений Metascape, Cytoscape. Опубликованы примеры компьютерного построения и визуализации генных сетей онкологических заболеваний – глиомы, рака молочной железы, а также сложных ментальных расстройств, таких как болезнь Паркинсона, шизофрения, в российских и международных журналах [1, 2].

Использование только онлайн-инструментов биоинформатики имеет учебный характер, ориентировано на студентов как математического профиля, так и естественно-научных и медицинских дисциплин, у которых недостаточно навыков в информатике, программировании, написании собственного кода. Автоматическое построение списков генов, ассоциированных с заболеванием, с использованием открытых баз данных (OMIM, GeneCards.org, MalaCard.org), компьютерная реконструкция генных сетей, расчеты статистики обогащенности категорий генных онтологий использовались в методике преподавания биоинформатики и информационных технологий, представлены в серии дипломных работ и научных публикаций. Рассмотрены проблемы освоения студентами учебных материалов на основе преподавания в НГУ, ДВФУ, РУДН, Финансовом университете при Правительстве РФ, Сеченовском университете.

Задачи цифровизации медицины, освоения ИТ-технологий являются приоритетными в России. Существовавшая последние годы эпидемическая ситуация и вынужденный переход на дистанционное обучение ускорили принятие мер по изменению форматов образования, появлению новых учебных платформ. Отдельный интерес представляет компьютеризация и автоматизация преподавания собственно дисциплин, связанных с информатикой, в том числе в медицине – в областях телемедицины, электронного здравоохранения. Отметим ряд качественно новых задач образования в области цифрового здравоохранения, таких как использование блокчейн-технологий, использование методов искусственного интеллекта (ИИ) в поддержке принятия врачебных решений [3].

Литература

1. Дохоян А.Ю., Глущенко М.В., Орлов Ю.Л. Реконструкция генной сети шизофрении для поиска генов-мишеней. Ульяновский медико-биологический журнал, 2022, Т. 3, С. 6–22.
2. Gubanova N.V., Orlova N.G., Dergilev A.I., et al. Glioblastoma gene network reconstruction and ontology analysis by online bioinformatics tools, Journal of Integrative Bioinformatics, 2021, vol.18, P. 20210031.
3. Koshechkin K.A., Lebedev G.S., Fartushnyi E.N., Orlov Y.L., Holistic Approach for Artificial Intelligence Implementation in Pharmaceutical Products Lifecycle: A Meta-Analysis. Applied Sciences, 2022, vol.12, no.16, P.8373.

Computer reconstruction of disease gene networks: bioinformatics education and online tools

Turkina V.A., Savina E.A., Vishnyakova E.V., Orlova N.G., Orlov Yu.L.*

I.M. Sechenov First Moscow State Medical University of the Ministry of Health
of the Russian Federation (Sechenov University), Moscow, Russia

Financial University under the Government of the Russian Federation, Moscow, Russia

* orlov@d-health.institute

Modern education in biology and medicine challenges students to use free online computer modeling tools. The usage of online bioinformatics tools allows reconstruct protein-protein and gene networks, to practice the skills of system-biological modeling for students. At the same time, knowledge of mathematics, computer methods, along with biological and medical data is necessary. We considered the issues of computer reconstruction of gene networks – complexes of interacting macromolecules – according to the list of genes associated with a particular disease or complex disorder based on publicly available online bioinformatics tools – STRING-DB.org, GeneMANIA.org, Metascape.org, Cytoscape.org applications. Examples of computer construction and visualization of gene networks of oncological diseases – glioma, breast cancer, as well as complex mental disorders such as Parkinson's disease, schizophrenia, have been published in Russian and international journals [1, 2].

The use of only online bioinformatics tools is educational in nature, it is aimed at students of both mathematical profile and natural science and medical disciplines who do not have enough skills in computer science, programming, writing their own code. Automatic generation of disease-associated gene lists using open databases (OMIM, GeneCards.org, MalaCard.org), computer reconstruction of gene networks, calculations of statistics on the enrichment of categories of gene ontologies were used in the methodology of teaching bioinformatics and information technology, presented in a series of theses and scientific publications. The problems of mastering educational materials by students on the basis of teaching at NSU, FEFU, RUDN, Financial University under the Government of the Russian Federation, Sechenov University are considered.

The tasks of digitalization of medicine and the development of IT technologies are priorities in Russia. The epidemic situation that has existed in recent years and the forced transition to distance learning has accelerated the adoption of measures to change the formats of education, the emergence of new educational platforms. Of particular interest is the computerization and automation of teaching disciplines related to computer science, including in medicine – in the fields of telemedicine, e-health. We note a number of qualitatively new tasks of education in the field of digital healthcare, such as the use of blockchain technologies, the use of Artificial Intelligence (AI) methods in supporting medical decision-making [3].

References

1. Dokhoyan A.Yu., Glushchenko M.V., Orlov Yu.L. Reconstruction of the schizophrenia gene network to search for target genes. Ulyanovsk biomedical journal. 2022; 3:6–22. (in Russian)
2. Gubanova N.V., Orlova N.G., Dergilev A.I., et al. Glioblastoma gene network reconstruction and ontology analysis by online bioinformatics tools, Journal of Integrative Bioinformatics, 2021, vol.18, P. 20210031.
3. Koshechkin K.A., Lebedev G.S., Fartushnyi E.N., Orlov Y.L., Holistic Approach for Artificial Intelligence Implementation in Pharmaceutical Products Lifecycle: A Meta-Analysis. Applied Sciences, 2022, vol.12, no.16, P.8373.

疾病基因網絡的計算機重建：教育和在線生物信息學工具

Turkina V.A., Savina E.A., Vishnyakova E.V., Orlova N.G., Orlov Yu.L.*

I. M.

俄羅斯聯邦衛生部謝切諾夫第一莫斯科國立醫科大學（謝切諾夫大學），莫斯科，俄羅斯
俄羅斯聯邦政府金融大學，莫斯科，俄羅斯

* orlov@d-health.institute

現代生物學和醫學教育要求學生使用開放的計算機建模工具（在線工具）。使用在線生物信息學工具可以重建蛋白質-蛋白質和基因網絡，培養學生系統生物建模的技能。這需要數學知識、計算機方法以及生物和醫學數據。我們根據與特定疾病相關的基因列表，或基於公共在線生物信息學工具（STRING-DB、GeneMANIA、Metascape、Cytoscape 應用程序）的複雜疾病，考慮了基因網絡的計算機重建問題 - 相互作用的大分子復合物。計算機構建和腫瘤疾病基因網絡可視化的例子——神經膠質瘤、乳腺癌，以及復雜的精神障礙，如帕金森病、精神分裂症——已經在俄羅斯和國際期刊上發表 [1, 2]。

僅使用在線生物信息學工具在本質上是教育性的，主要針對數學、自然科學和醫學學科的學生，他們在計算機科學、編程和編寫自己的代碼方面沒有足夠的技能。使用開放數據庫（OMIM、GeneCards.org、MalaCard.org）自動構建與疾病相關的基因列表、基因網絡的計算機重建、基因本體類別的富集統計計算被用於生物信息學和信息技術教學方法中，發表在一系列論文和科學出版物中。考慮了學生在NSU、FEFU、PFUR、俄羅斯聯邦政府金融大學、謝切諾夫大學教學的基礎上掌握教材的問題。

醫學數字化的任務，信息技術的發展是俄羅斯的優先事項。近年來存在的流行病和向遠程學習的強製過渡加速了改變教育形式的措施的採用，新的學習平台的出現。特別令人感興趣的是與信息學相關的學科本身的計算機化和自動化教學，包括醫學 - 在遠程醫療、電子健康領域。讓我們注意到數字醫療領域的一些定性的新教育任務，例如使用區塊鏈技術、使用人工智能（AI）方法來支持醫療決策 [3]。

文學

1. Dokhoyan A.Yu., Glushchenko M.V., Orlov Yu.L. Reconstruction of the schizophrenia gene network to search for target genes. Ulyanovsk biomedical journal. 2022; 3:6–22. (in Russian)
2. Gubanova N.V., Orlova N.G., Dergilev A.I., et al. Glioblastoma gene network reconstruction and ontology analysis by online bioinformatics tools, Journal of Integrative Bioinformatics, 2021, vol.18, P. 20210031.
3. Koshechkin K.A., Lebedev G.S., Fartushnyi E.N., Orlov Y.L., Holistic Approach for Artificial Intelligence Implementation in Pharmaceutical Products Lifecycle: A Meta-Analysis. Applied Sciences, 2022, vol.12, no.16, P.8373.

DOI 10.18699/sblai2023-26

Использование нейронной сети AlphaFold2 для улучшения результатов белок-белкового докинга

Филиппов С.С.*, Казеннов А.М.

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет),
Москва, Россия

* stanislav.filippov@phystech.edu

Белок-белковые взаимодействия являются основой многих биологических процессов. Большинство таких взаимодействий определяются трехмерной структурой и динамикой объектов. При этом взаимодействия между белками могут быть как постоянными, так и временными.

Для определения того, как происходят белок-белковые взаимодействия, используются алгоритмы молекулярного докинга. Однако во многих алгоритмах используется rigid-body