

**БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

**Факультет прикладной математики и информатики**

**Кафедра дискретной математики и алгоритмики**

Аннотация к магистерской диссертации

**«Разработка протокола докинга белковых молекул»**

Ильин Андрей Викторович

Научный руководитель – доктор физ.-мат. наук, профессор Тузиков А. В.

Научный консультант – магистр физ.-мат. наук Хадарович А. Ю.

Минск, 2020

## Реферат

Магистерская диссертация, 41 страница, 16 рисунков, 1 таблица, 9 формул, 31 источник.

БЕЛОК-БЕЛКОВЫЕ КОМПЛЕКСЫ, БЕЛОК-БЕЛКОВЫЕ  
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ, ПРОТОКОЛ ДОКИНГА.

*Объект исследования* – белок-белковые комплексы, принципы взаимодействия белковых молекул.

*Цель работы* – разработка протокола докинга белковых молекул.

*Результаты* – разработан легко масштабируемый протокол докинга белковых молекул, использующий на этапе оптимизации алгоритм роевого интеллекта и выполнена его программная реализация на языке C++. Тестирование протокола показало перспективные результаты, в связи с чем планируется проведение дальнейших экспериментов в данном направлении.

*Область применения* – моделирование структуры белок-белковых комплексов и взаимодействия белковых молекул.

## Abstract

Master's thesis, 41 pages, 16 figures, 1 table, 9 formulas, 31 sources.

PROTEIN-PROTEIN COMPLEXES, PROTEIN-PROTEIN INTERACTIONS,  
DOCKING PROTOCOL.

*Object of research* – protein-protein complexes, principles of interaction of protein molecules.

*Objective* – to develop a protocol for docking protein molecules.

*Results* – an easily scalable protocol for docking protein molecules was developed using the swarm intelligence algorithm at the optimization stage and its software implementation in C++ was performed. Testing the protocol showed promising results, in connection with which it is planned to conduct further experiments in this direction.

*Application area* – modeling the structure of protein-protein complexes and the interaction of protein molecules.