

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФАКУЛЬТЕТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ
Кафедра биомедицинской информатики

Аннотация к дипломной работе

«Применение технологий машинного обучения и молекулярного моделирования для идентификации потенциальных ингибиторов проникновения ВИЧ-1»

Мордань Евгений Игоревич

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор кафедры БМИ
Андрианов А. М.

Минск, 2021

РЕФЕРАТ

Дипломная работа, 51 страница, 26 рисунков, 9 таблиц, 11 формул, 8 источников.

МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ, НЕЙРОННЫЕ СЕТИ, АВТОЭНКОДЕРЫ, РЕКУРРЕНТНЫЕ НЕЙРОННЫЕ СЕТИ, LSTM ЯЧЕЙКИ, ИНГИБИТОРЫ ПРОНИКНОВЕНИЯ, МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ.

Объект исследования – набор веществ-потенциальных ингибиторов белка grp120.

Цель работы – изучение работы автоэнкодеров с LSTM слоями, создание алгоритма идентификации новых потенциальных ингибиторов белка grp120.

Методы исследования: методы машинного обучения, методы молекулярного моделирования.

Результатом работы является исследование организации LSTM слоев и автоэнкодеров, разработка двух алгоритма идентификации новых потенциальных ингибиторов, разработка варианта генерации соединений из шума. В последующем с помощью указанных выше алгоритмов были генерированы новые потенциальные ингибиторы белка grp120. Проведен анализ полученных ингибиторов, в том числе молекулярный докинг.

Области применения: разработка лекарственных препаратов, современная фармакология.

ABSTRACT

Diploma thesis, 51 pages, 26 pictures, 9 tables, 11 formulas, 8 sources.

MACHINE LEARNING, NEURAL NETWORKS, AUTOENCODERS, RECURRENT NEURAL NETWORKS, LSTM CELLS, ENTRY INHIBITORS, MOLECULAR MODELLING.

The object of research is a set of compounds-potential gp120 protein inhibitors.

Purpose of the work is LSTM autoencoders work research, potential gp120 protein inhibitors identification algorithm development.

Research methods: machine learning methods, molecular docking methods.

The result of the work is research of LSTM autoencoders, two algorithms of potential gp120 protein inhibitors identification development, and a development of algorithms generation mode with compounds generation from noise. Further, using the algorithms stated above new potential inhibitors were generated. Then they were analyzed, in particular with molecular docking.

The scopes are: drug design, modern pharmacology.