

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФАКУЛЬТЕТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ
Кафедра биомедицинской информатики

Аннотация к дипломной работе

«Разработка веб-сервера для генерации фингерпринтов MACCS молекул с заданным порогом энергии связывания с молекулярной мишенью и оценка их потенциальной ингибирующей активности против основной протеазы коронавируса SARS-COV2 (Covid-19)»

Куриленко Юлия Денисовна

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

Минск, 2021

РЕФЕРАТ

Дипломная работа, 38 страниц, 25 рисунков, 24 источника

ГЕНЕРАЦИЯ ФИНГЕРПРИНТОВ, ПРЕДСКАЗАНИЕ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ СВЯЗЫВАНИЯ. РАЗРАБОТКА ВЕБ-ПРИЛОЖЕНИЯ, ПОИСК ЛЕКАРСТВ

Объектом исследования является сфера разработки лекарств и применение методов машинного обучения в данной сфере.

Целью работы является разработка веб-приложения для генерации фингерпринтов MACCS молекул с заданным порогом энергии связывания с молекулярной мишенью и оценка их потенциальной ингибирующей активности против основной протеазы коронавируса SARS-COV2 (covid-19)

Методы исследования: изучение соответствующей литературы и публикаций, разработка приложения.

В результате работы был спроектирован прототип веб-приложения, создан дизайн сайта, реализована клиентская и серверная часть. Приложение было размещено в облачном сервисе и широко доступно по ссылке.

Области применения: разработка лекарств, изучения свойств химических веществ.

ABSTRACT

Graduate work, 38 pages, pictures, 24 sources

FINGERPRINT GENERATION, PREDICTION OF FREE BINDING ENERGY. WEB APPLICATION DEVELOPMENT, SEARCH FOR DRUGS

The object of the research is the field of drug development and the application of machine learning methods in this area.

The aim of the work is to develop a web application for generating fingerprints of MACCS molecules with a given threshold of binding energy to a molecular target and assessing their potential inhibitory activity against the main protease of the coronavirus SARS-COV2 (covid-19)

Research methods: study of relevant literature and publications, application development.

As a result of the work, a prototype of a web application was designed, a website design was created, the client and server parts were implemented. The application was hosted in a cloud service and is widely available here.

The scopes: drug development, studying the properties of chemicals.