

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Факультет прикладной математики и информатики

Кафедра биомедицинской информатики

Аннотация к дипломной работе

«Разработка генеративной состязательной нейронной сети с частичным привлечением учителя и её применение для генерации потенциальных ингибиторов белков-мишеней»

Титенок Станислав Михайлович

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

Минск, 2022

РЕФЕРАТ

Дипломная работа, 48 страниц, 25 иллюстраций, 1 таблица, 23 источника.

Ключевые слова: АВТОКОДИРОВЩИКИ, БИОИНФОРМАТИКА, ГЕНЕРАТИВНЫЕ СОСТЯЗАТЕЛЬНЫЕ НЕЙРОННЫЕ СЕТИ, ГЕНЕРАЦИЯ ИНГИБИТОРОВ, МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ, НЕЙРОННЫЕ СЕТИ, ОБУЧЕНИЕ С ЧАСТИЧНЫМ ПРИВЛЕЧЕНИЕМ УЧИТЕЛЯ, РАЗРАБОТКА ЛЕКАРСТВ.

Объект исследования: генеративные состязательные нейронные сети с частичным привлечением учителя, задача генерации потенциальных ингибиторов белка-мишени.

Цель работы: разработать и обучить генеративную состязательную нейронную сеть с частичным привлечением учителя, способную генерировать потенциальные ингибиторы для определённого белка-мишени.

Результат: было спроектировано и обучено несколько различных видов генеративных состязательных нейронных сетей, способных генерировать как сжатые представления об ингибиторах, так и их формулы, готовые к использованию. Сгенерированные вещества демонстрируют хорошие результаты при проведении молекулярного докинга с фрагментом S-белка коронавируса SARS-CoV-2.

Область применения: биоинформатика, разработка лекарств.

ABSTRACT

Diploma thesis, 48 pages, 25 illustrations, 1 table, 23 sources.

Keywords: AUTOENCODERS, BIOINFORMATICS, GENERATIVE ADVERSARIAL NEURAL NETWORKS INHIBITOR GENERATION, MACHINE LEARNING, MOLECULAR DOCKING, NEURAL NETWORKS, SEMI-SUPERVISED LEARNING, DRUG DESIGN.

Object of research: semi-supervised generative adversarial neural networks, generating potential inhibitors of the target protein.

Objective: develop and train a semi-supervised generative adversarial neural network that is capable of generating potential inhibitors for a specific target protein.

Results: several different types of generative adversarial neural networks have been designed and trained for generating either compressed representations of inhibitors or their formulas in ready-to-use form. Generated substances demonstrate good results in molecular docking with a fragment of SARS-CoV-2 spike protein.

Scope: bioinformatics, drug design.