

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
Факультет прикладной математики и информатики
Кафедра биомедицинской информатики

Аннотация к дипломной работе

Разработка моделей машинного обучения на основе различных типов молекулярных дескрипторов для предсказания свойств молекул

Дашкевич Матвей Викторович

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

Минск, 2022

РЕФЕРАТ

Дипломная работа, 35 страниц, 24 рисунка, 1 таблица, 9 источников

Ключевые слова: МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДЕСКРИПТОР, ПРЕДСКАЗАНИЕ СВОЙСТВ МОЛЕКУЛ, ЭНЕРГИЯ СВЯЗЫВАНИЯ, ВИРУС ИММУНОДЕФИЦИТА ЧЕЛОВЕКА, GP120, SMILES, RDKit, MACCS, MORGAN.

Объект исследования: лиганды белка gp120.

Цель работы: разработка алгоритма предсказания энергии связывания лигандов с белком gp120.

Методы исследования: изучение теоретических источников, применение методов машинного обучения к доступным данным.

Результат: Лучшая из обученных с помощью молекулярного дескриптора Morgan моделей способна достаточно уверенно предсказывать энергию связывания лигандов с белком gp120.

Область применения: хемоинформатика, разработка лекарств.

ABSTRACT

Diploma thesis, 35 pages, 24 figures, 1 table, 9 sources.

Keywords: MACHINE LEARNING, MOLECULAR DESCRIPTOR, PREDICTION OF MOLECULAR PROPERTIES, HUMAN IMMUNODEFICIENCY VIRUS, GP120, SMILES, RDKIT, MACCS, MORGAN.

Object of research: gp120 protein ligands.

Objective: developing an algorithm for predicting the free energy of ligands and gp120 protein.

Methods of research: studying theoretical sources, applying machine learning methods to available data.

The result: The best of the models trained using the Morgan molecular descriptor is able to predict the free energy of ligands and the gp120 protein with sufficient confidence.

The scope: cheminformatics, drug development.