

**БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

**Факультет прикладной математики и информатики**

**Кафедра биомедицинской информатики**

Аннотация к дипломной работе

**«Разработка веб-приложения для задачи de novo дизайна потенциальных ингибиторов ВИЧ-1»**

Реут Ксения Владимировна

Научный руководитель – старший преподаватель кафедры биомедицинской информатики ФПМИ Карпенко А. Д.

Минск, 2024

## Реферат

*Дипломная работа, 47 страниц, 10 рисунков, 22 источника*

*Ключевые слова:* WEB-ПРИЛОЖЕНИЕ, DJANGO, PYTHON, HTML, CSS, JAVASCRIPT, ФРЕЙМВОРК, КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛЕКАРСТВ, ВИРУС ИММУНОДЕФИЦИТА ЧЕЛОВЕКА.

*Объектом исследования* является *de novo* дизайн потенциальных лекарств с использованием нейронных сетей и технологий веб-приложений.

*Предметом исследования* являются технологии веб-приложений, а также вирус иммунодефицита человека и другие химические соединения, их ингибиторы.

*Целью работы* исследования является реализация веб-приложения для задачи *de novo* дизайна потенциальных ингибиторов ВИЧ-1.

*В ходе работы* были использованы методы системного анализа, обобщения практических и теоретических материалов, сравнительного анализа существующих решений. Был проведен анализ предметной области, рассмотрены фреймворки популярных языков программирования для создания веб-приложений, разработано веб-приложение для генерации потенциальных лекарств *de novo* без применения специальных наборов обучающих данных с использованием фреймворка Django и сопутствующих веб-технологий.

*Полученную в результате работы модель* можно использовать для исследований в области компьютерного моделирования биомолекул, в частности для поиска лекарственных соединений.

## Abstract

*Diploma thesis, 47 pages, 10 figures, 22 sources.*

**Keywords:** WEB APPLICATION, DJANGO, PYTHON, HTML, CSS, JAVASCRIPT, FRAMEWORK, COMPUTER MODELING OF DRUGS, HUMAN IMMUNODEFICIENCY VIRUS.

*The object of research* is de novo design of potential drugs using neural networks and web application technologies.

*The subject of study* is web application technologies, as well as human immunodeficiency virus and other chemical compounds and their inhibitors.

*The aim of this work* is to implement a web application for the de novo design task of potential HIV-1 inhibitors.

*In the course of the work*, the methods of system analysis, generalization of practical and theoretical materials, comparative analysis of existing solutions were used. The subject area was analyzed, frameworks of popular programming languages for creating web applications were considered, and a web application was developed for de novo generation of potential drugs without special training data sets using Django framework and related web technologies.

*The resulting model* can be used for research in the field of computer modeling of biomolecules, in particular for the search for medicinal compounds.