

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Факультет прикладной математики и информатики

Кафедра биомедицинской информатики

Аннотация к дипломной работе

**«Разработка веб-приложения для генерации потенциальных ингибиторов
BCR-ABL тирозинкиназы с заданными свойствами»**

Добрынина Полина Витальевна

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

Минск, 2024

Реферат

Дипломная работа, 40 страниц, 12 рисунков, 17 источников.

Ключевые слова: ГЕНЕРАЦИЯ ИНГИБИТОРА ТИРОЗИНКИНАЗЫ, BCR-ABL, ХРОНИЧЕСКИЙ МИЕЛОИДНЫЙ ЛЕЙКОЗ, РАЗРАБОТКА ВЕБ-ПРИЛОЖЕНИЯ.

Объектом исследования является de novo дизайн лекарственных препаратов и применение методов машинного обучения в данной сфере.

Предметом исследования являются веб-технологии используемые для разработки веб-приложения.

Целью работы разработка веб-приложения для генерации потенциальных ингибиторов BCR-ABL тирозинкиназы с заданными свойствами.

В ходе работы были определены специфические требования и стандарты для разрабатываемого веб-приложения. Реализован дизайн-макет будущего веб-приложения, освоены актуальные на текущий момент технологии и методики веб-разработки. Выполнена разработка интерфейса пользователя и серверной логики проекта. Реализован функционал, позволяющий по заданным значениям массы, липофильности и TPSA генерировать соединения, которые потенциально являются ингибиторами BCR-ABL тирозинкиназы.

Полученное в ходе работы веб-приложение может применяться в вычислительная биологии, биоинформатике, медицинской химии для генераций молекул, которые бы обладали заданными свойствами.

Abstract

Diploma thesis, 40 pages, 12 figures, 17 sources.

Keywords: TYROSINE KINASE INHIBITOR GENERATION, BCR-ABL, CHRONIC MYELOID LEUKEMIA, DEVELOPMENT OF A WEB APPLICATION.

The object of research is de novo drug design and application of machine learning methods in this area.

The subject of study is web technologies used for the development of web applications.

The aim of this work is to develop a web application for the generation of potential BCR-ABL tyrosine kinase inhibitors with specified properties.

In the course of the work specific requirements and standards for the web application to be developed were defined. The design layout of the future web application was realized, current technologies and methods of web development were mastered. The development of the user interface and server logic of the project was performed. The functionality allowing to generate compounds that are potential BCR-ABL tyrosine kinase inhibitors according to the given values of mass, lipophilicity and TPSA was realized.

The resulting web application can be used in computational biology, bioinformatics, and medicinal chemistry to generate molecules that would have specified properties.