

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Факультет прикладной математики и информатики

Кафедра биомедицинской информатики

Аннотация к дипломной работе

**«Разработка модели глубокого обучения с подкреплением
с применением молекулярного докинга на этапе обучения»**

Воробьев Данила Александрович

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

Минск, 2024

Реферат

Дипломная работа, 42 страницы, 24 рисунка, 4 таблицы, 2 формулы, 22 источника

Ключевые слова: ВИЧ-1, БЕЛОК GP120, ПРОТИВОВИРУСНЫЕ ПРЕПАРАТЫ, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ, МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ, ОБУЧЕНИЕ С ПОДКРЕПЛЕНИЕМ, РАЗРАБОТКА НОВЫХ ЛЕКАРСТВ, DE NOVO ДИЗАЙН.

Объектом исследования является *de novo* генерация потенциальных низкомолекулярных ингибиторов.

Предметом исследования являются модели сетей глубокого обучения с подкреплением для генерации низкомолекулярных ингибиторов.

Целью работы является разработка новых, более гибких по отношению к выбору мишени, моделей *de novo* генерации низкомолекулярных ингибиторов на основе обучения с подкреплением.

В ходе работы была выбрана белковая мишень, ингибирование которой может предотвратить проникновение ВИЧ-1 в иммунную клетку хозяина. Были проанализированы уже известные архитектуры нейронных сетей, применяемых в области генерации малых молекул, а также рассмотрены принципы их работы. С применением молекулярного докинга на этапе обучения были разработаны две модели машинного обучения с подкреплением для *de novo* генерации потенциальных ингибиторов, позволившие без специфической обучающей выборки сгенерировать ряд потенциальных ингибиторов проникновения ВИЧ-1.

Полученную в результате работы модель можно использовать для генерации малых молекул при поиске новых потенциальных ингибиторов других белковых мишеней.

Abstract

Diploma thesis, 42 pages, 24 figures, 4 tables, 2 formulas, 22 sources.

Keywords: HIV-1, GP120 PROTEIN, ANTIVIRAL DRUGS, MOLECULAR DOCKING, MACHINE LEARNING, REINFORCEMENT LEARNING, NEW DRUG DEVELOPMENT, DE NOVO DESIGN.

The object of research is de novo design of potential low molecular weight inhibitors.

The subject of study is models of deep reinforcement learning networks for the generation of low molecular weight inhibitors.

The aim of this work is to develop new, more flexible target selection models based on reinforcement learning for the generation of low molecular weight inhibitors.

In the course of the work, a protein target was selected, the inhibition of which can prevent the penetration of HIV-1 into the host immune cell. The well-known architectures of neural networks used in the field of small molecule generation were analyzed, as well as the principles of their operation were considered. Using molecular docking at the training stage, two reinforcement learning models for de novo generation of potential inhibitors were developed, which made it possible to generate a number of potential HIV-1 penetration inhibitors without a specific training sample..

The resulting model can be used to generate small molecules in the search for new potential inhibitors of other target proteins.