

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Факультет прикладной математики и информатики

Кафедра дискретной математики и алгоритмики

Аннотация к дипломной работе

**«Разработка модели глубокой нейронной сети для генерации
потенциальных лекарств на основе пептидов»**

Прохоров Михаил Андреевич

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор,
профессор кафедры биомедицинской информатики ФПМИ Тузиков А. В.

Минск, 2024

Реферат

Дипломная работа состоит из 47 страниц, 28 рисунков, 3 таблиц, 4 приложений, 15 источников.

Ключевые слова: АМИНОКИСЛОТЫ, ПЕПТИДЫ, БЕЛКИ, СВРАЧИВАНИЕ БЕЛКОВ, БЕЛОК-ПЕПТИДНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ, НЕЙРОННЫЕ СЕТИ, ALPHAFOLD, ДОКИНГ, ГЕНЕРАЦИЯ ПЕПТИДОВ.

Объектом исследования дипломной работы является генерация потенциальных лекарств на основе пептидов.

Целью работы является разработка модели глубокой нейронной сети, позволяющей генерировать новые пептиды, являющиеся потенциальными ингибиторами основной протеазы коронавируса SARS-CoV-2, вызывающего инфекционное заболевание COVID-19.

Методы проведения работы включают в себя: изучение теоретического материала, связанного с темой дипломной работы, обзор существующих инструментов и программных пакетов, предназначенных для решения задач, поставленных в рамках дипломной работы, а также непосредственную разработку модели нейронной сети с помощью языка программирования Python и библиотеки Keras.

Результатом дипломной работы являются: набор из пептидов, взаимодействующих с основной протеазой коронавируса SARS-CoV-2, а также модель глубокой нейронной сети, позволяющей генерировать пептиды, являющиеся потенциальными ингибиторами основной протеазы коронавируса SARS-CoV-2.

Использованные в ходе дипломной работы материалы, а также её результаты являются достоверными. Дипломная работа выполнена автором самостоятельно.

Abstract

The thesis consists of 47 pages, 28 figures, 3 tables, 4 appendices, 15 sources.

Keywords: AMINO ACIDS, PEPTIDES, PROTEINS, PROTEIN FOLDING, PROTEIN-PEPTIDE INTERACTIONS, NEURAL NETWORKS, ALPHAFOLD, DOCKING, PEPTIDE GENERATION.

The object of research of this thesis is the generation of potential drugs based on peptides.

The objective of this thesis is to develop a deep neural network model that allows the generation of new peptides that are potential inhibitors of the main protease of the SARS-CoV-2 coronavirus, which causes the infectious disease COVID-19.

Methods of work include: the study of theoretical material related to the topic of the thesis, an overview of existing tools and software packages designed to solve the tasks set within the framework of the thesis, as well as the direct development of a neural network model using the Python programming language and the Keras library.

The results of this thesis are: a set of peptides interacting with the main protease of SARS-CoV-2 coronavirus, as well as a model of a deep neural network that allows generating peptides that are potential inhibitors of the main protease of the SARS-CoV-2 coronavirus.

The materials used in the course of the thesis, as well as its results, are reliable. The thesis was completed by the author independently.